



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

*Excitons* em Sistemas Quânticos 0-2D

---

**Claudio Lucas Nunes de Oliveira**

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciências

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

*Excitons em Sistemas Quânticos 0-2D*

---

Claudio Lucas Nunes de Oliveira

Dissertação apresentada ao Departamento de Física  
da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos  
para a obtenção do título de Mestre em Ciências

**BANCA EXAMINADORA:**

---

Dr. José Alexander de King Freire (Orientador, UFC)

---

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias (Co-orientador, UFC)

---

Prof. Dr. Eudenilson Lins de Albuquerque (UFRN)

*"Fé inabalável só o é a que pode encarar frente a frente a razão, em todas as épocas da humanidade".*

Allan Kardec

Aos meus pais, a quem eu devo tudo que sou.

À Mariana e ao Matheus, que serão responsáveis por quem eu serei.

## Agradecimentos

À Deus por redigir todas as leis da natureza e deixar que nós tentemos decifrá-las.

Ao Prof. José Alexander King Freire pela disponibilidade desta orientação e pela ajuda prestada durante este trabalho.

Ao Prof. Gil de Aquino Farias pelas discussões esclarecedoras e pelo empenho que mostra em relação aos alunos.

À coordenação desse curso de Pós-graduação, na pessoa do Prof. José Soares de Andrade Júnior, pelo apoio necessário à realização deste trabalho.

Ao Prof. Josué pelo imensurável empenho de melhoria e qualificação desse curso.

Ao Prof. Valder por está sempre buscando novos recursos, dando melhores condições de trabalho ao grupo.

Aos Profs. da UFC que contribuíram para minha formação e serviram-me como exemplo de professores, pesquisadores e/ou de pessoas, dentre eles Eloneid, Evangelista, Murilo, Newton Theófilo, Raimundo, Ramos, Renan e Siqueira.

Ao Prof. Degani que durante esse último ano, suas idéias, trabalho e as dúvidas que me tirou foram marcantes nesta dissertação. Ao Jeanlex pela ajuda e dúvidas tiradas e pelo entusiasmo tão grande pelo trabalho que sempre nos contagia. Ao Wagner pela ajuda dada a mim em momentos de necessidade.

A toda minha família, pois sem sua ajuda seria bem mais difícil para mim seguir essa carreira que eu escolhi. Em especial, à minha mãe Nadir, ao pai Claudeíde e aos meus irmãos Tati, Marcus (a quem eu devo minha vinda para a Física), Carol, Larissa e Dylan.

Aos meus queridos sobrinhos Taís e Gabriel, e ao meu cunhado Emmanuel que mostrou-se ser como um irmão durante esses anos.

À Mariana pelo grande amor, enorme dedicação e indispensável ajuda prestada nesta dissertação (sem a qual eu não teria conseguido terminar no tempo em que terminei), e a seus pais, Batista e Valéria, pelo apoio e ajuda.

Aos meus amigos Dudu, Felipe, Franciné e Talita pela amizade inestimável. Aos meus amigos Alan, Aristeu, Bruno Abagaro, David, Francisco Wagner, Kátia, Leandro, Luciana Magal e Victor que, de certa forma, me ajudaram a enfrentar o curso desde o início da graduação até agora.

Aos meus amigos da Estação de Trabalho Andrey, Erlârnica, Florêncio, Juciane, Marilza, Pedro, Rivelino, Teldo e Welberth pelo companheirismo.

As funcionárias da UFC, D. Silva, Creusa, Regina, Rejane e Ana cleide pela disponibilidade, sempre procurando ajudar.

À Capes pelo apoio financeiro.

## Resumo

A física de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade tem evoluído bastante nas últimas décadas. Em parte, porque essas estruturas oferecem a oportunidade de testarmos vários modelos teóricos, mas também porque existe um grande potencial de aplicação tecnológica derivada das propriedades de tais estruturas e dos materiais que a formam. Como exemplo, temos as heteroestruturas semicondutoras formadas com os materiais InGaAs e InGaAsP que são de grande utilidade em dispositivos optoeletrônico emitindo na região do infravermelho. Nesses sistemas podemos fazer um confinamento dos portadores de carga, como elétrons e buracos, em uma, duas ou em três direções, aos quais são chamados de poço (2D), fio (1D) e ponto quântico (0D), respectivamente.

As propriedades óticas dos semicondutores são determinadas pelos autovalores e autovetores do movimento dos elétrons e buracos. Os *excitons* que é o par elétron-buraco interagindo entre si são os maiores responsáveis pela emissão (pico da fotoluminescência) em sistemas de confinamento em semicondutores. A interação colombiana e o tipo de confinamento imposto pela construção dessas estruturas junto com suas interfaces graduais afeta o movimento desses portadores. O nosso objetivo neste trabalho é calcular a energia de emissão dos *excitons* elétron-buraco leve e elétron-buraco pesado em poços, fios cilíndricos e em pontos quânticos piramidais em função de seus parâmetros de dimensionalidade. Os resultados obtidos mostram as energias do *exciton* no poço e no fio quântico In<sub>0.4</sub>Ga<sub>0.6</sub>As/GaAs na mesma ordem de grandeza, estando na faixa de 0.9 à 1.3 eV. Para o ponto piramidal, as energias de recombinação do par *e-hh* (*e-lh*) estão na faixa de 1.3-1.4 (1.18-1.28) eV.

## Abstract

In the last few decades the physics of low dimensional semiconductor systems have attracted much attention due to the potential applications that arise from their due to electronic and optical properties. For example, InGaAs and InGaAsP heterostructures are currently used in optoelectronic applications that operate in the infrared spectrum. In such systems, the confinement of charges can be realized in one, two or in three dimensions.

The optical properties of quantum confinement systems are basically determined by electronic transitions. Excitons, formed by an electron-hole pair bounded by coulombic interaction, are the responsible for the emission wavelength. The aim of this work is to computer the ground state exciton energies in quantum wells, cylindrical quantum wires and pyramidal quantum dots as a function of the their size and shape. The results show that the exciton energies of  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum wells and wires are in the range from 0.9 to 1.3 eV. The results of  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  pyramidal quantum dots show that the  $e$ - $lh$  ( $e$ - $hh$ ) recombination energies are approximately 1.3-1.4 (1.18-1.28) eV.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Sistemas Quânticos Confinados . . . . .	2
1.2	Bandas de Energia . . . . .	4
1.3	Massa Efetiva . . . . .	7
1.4	Potencial de Confinamento . . . . .	9
1.5	Interfaces . . . . .	11
1.6	<i>Excitons</i> . . . . .	13
1.7	<i>Strain</i> . . . . .	15
1.8	Importância e Aplicações . . . . .	17
<b>2</b>	<b>Poços Quânticos</b>	<b>21</b>
2.1	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ . . . . .	22
2.1.1	Fração Molar . . . . .	23
2.1.2	Massa . . . . .	24
2.1.3	Potencial . . . . .	25
2.2	<i>Strain</i> em Poços Quânticos . . . . .	26
2.3	$(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})_v(\text{InP})_{1-v}/\text{InP}$ . . . . .	28
2.3.1	Fração molar . . . . .	28
2.3.2	Massa . . . . .	29
2.3.3	Potencial . . . . .	30
2.4	Energia de Ligação . . . . .	31
2.4.1	Método do Potencial Efetivo . . . . .	34
2.4.2	Método Variacional com um Parâmetro . . . . .	36
2.4.3	Método Variacional com dois Parâmetros . . . . .	38
2.5	Resultados . . . . .	41
<b>3</b>	<b>Fios Quânticos</b>	<b>51</b>
3.1	Fração Molar . . . . .	52
3.2	Massa . . . . .	53
3.3	Potencial . . . . .	54
3.4	Energia de Ligação . . . . .	55
3.5	Resultados . . . . .	60

---

<b>4 Pontos Quânticos</b>	<b>64</b>
4.1 Método Numérico . . . . .	65
4.2 Propagação no tempo imaginário . . . . .	67
4.3 Projeção da função de onda . . . . .	68
4.4 Resultados . . . . .	70
<b>5 Conclusões e Perspectivas</b>	<b>79</b>
<b>Apêndice A</b>	<b>83</b>
<b>Apêndice B</b>	<b>87</b>
<b>Apêndice C</b>	<b>92</b>
<b>Referências</b>	<b>94</b>

# Lista de Figuras

1.1	Conforme os átomos se aproximam, a degenerescência dos níveis atômicos é quebrada e as energias são distribuídas em um número de níveis igual ao número de átomos do sistema. Note que as bandas de energia assim formadas podem se misturar, e se estes níveis estiverem ocupados, teremos um sólido com comportamento metálico. . . . .	3
1.2	Bandas de energia: (a) em função de uma direção qualquer do cristal; (b) em função de $\vec{k}$ . . . . .	5
1.3	Na figura vemos, em quatro instantes diferentes, $t_1$ , $t_2$ , $t_3$ e $t_4$ , o elétron ocupando um buraco e, ao fazer isso, deixa outro buraco para ser ocupado pelo elétron seguinte. . . . .	6
1.4	Bandas de energia do GaAs [16]. . . . .	8
1.5	(a) Potencial de confinamento de poço quântico em função do eixo de confinamento; (b) Potencial em função do raio de um fio (ponto) quântico. . . . .	9
1.6	À esquerda: gráfico ilustrativo mostrando as interfaces normal e invertida de um poço assimétrico; à direita: imagem de dois poços quânticos obtida por resolução atômica de um XSTM mostrando a concentração de átomos de Índio (pontos claros) em GaAs [22]. . . . .	11

1.7	Três poços quânticos com interfaces $w_1$ e $w_2$ e com $\alpha$ diferente para cada poço. As linhas vermelhas indicam a largura do poço enquanto as pretas indicam as barreiras. Perceba que a largura do poço é igual para os três poços, mas a largura efetiva do poço é maior quando $\alpha = 0$ . . . . .	12
1.8	<i>Exciton</i> em um poço quântico. . . . .	15
1.9	Deformação devido ao <i>strain</i> de uma rede cristalina. . . . .	16
1.10	À esquerda ilustração das bandas de energia sem <i>strain</i> . À direita as bandas de energia com <i>strain</i> . Perceba que o <i>strain</i> separa o <i>gap</i> das bandas <i>hh</i> e <i>lh</i> em relação a banda de condução. . . . .	17
1.11	Da esquerda para direita: alguns transistores; um <i>laser</i> emitindo luz verde e outro emitindo luz vermelha; diodos à base de pontos quânticos emitindo luz azul e branca. Esse foi o primeiro LED (diodo emissor de luz) construído com ponto quântico emitindo luz branca [33]. . . . .	18
1.12	À esquerda temos uma imagem STEM de dois fios quânticos [34], e à direita temos uma figura ilustrativa de um ponto quântico piramidal. . . . .	19
2.1	(a) Potencial de confinamento, $L$ é a largura do poço; (b) Fração molar dependente da posição. . . . .	22
2.2	À esquerda <i>band-off-set</i> de condução em função do parâmetro de rede [35]. À direita <i>band-off-set</i> de valência em função do parâmetro de rede [35]. Perceba nos gráficos a diferença nos parâmetros de rede dos binários InAs e GaAs. Por outro lado o binário InP pode ter seu parâmetro de rede igual ao InGaAs . . . . .	23

- 2.3 Energia de ligação do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* (à esquerda) e com *strain* (à direita), para uma interface abrupta (linhas sólidas) e de  $10 \text{ \AA}$  (linhas tracejadas), usando os métodos potencial efetivo (linhas pretas), variacional com um parâmetro (linhas vermelhas) e com dois parâmetros (linhas azuis), com  $\alpha = 1$ . . . . . 42
- 2.4 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* (à esquerda) e com *strain* (à direita) com interface abrupta (linhas pretas) e de  $10 \text{ \AA}$  (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ . No *inset*, a subtração da energia do *exciton* no poço com  $w=10 \text{ \AA}$  pela energia de um poço abrupto. . . . . 43
- 2.5 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da espessura das interfaces do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* (à esquerda) e com *strain* (à direita) com largura de  $50 \text{ \AA}$  (linhas pretas) e de  $100 \text{ \AA}$  (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ . No *inset*, a variação da energia de um poço com espessura  $w$  em relação ao caso abrupto. . . . . 44
- 2.6 Diagrama interface-alfa ( $w-\alpha$ ) da energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental de um poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  de  $50 \text{ \AA}$  com *strain*. Os números nas linhas isoenergéticas (em meV) indicam a energia do *exciton* relativa ao poço abrupto. . . . . 45
- 2.7 Energia de ligação do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, para uma interface abrupta (linhas sólidas) e de  $10 \text{ \AA}$  (linhas tracejadas), usando os métodos potencial efetivo (linhas pretas), variacional com um parâmetro (linhas vermelhas) e com dois parâmetros (linhas azuis), com  $\alpha = 1$ . . . . . 46

- 2.8 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, com interface abrupta (linhas pretas) e de 10 Å (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a subtração da energia do *exciton* em um poço com interface de 10 Å, pela energia de um poço abrupto. . . . . 47
- 2.9 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da espessura das interfaces do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, com largura de 50 Å (linhas pretas) e de 100 Å (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a variação da energia de um poço com espessura  $w$  em relação ao caso abrupto. . . . . 48
- 2.10 Diagrama interface-alfa ( $w-\alpha$ ) da energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental de um poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  de 50 Å sem *strain*. Os números nas linhas isoenergética (em meV) indicam a energia do exciton relativa ao poço abrupto. . . . . 49
- 2.11 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da divisão das interfaces,  $w_2/w_1$ , do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com *strain* (à esquerda) e do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain* (à direita) com largura de 50 Å (linhas pretas) e de 100 Å (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ .  $w_1$  é mantido à 5 Å e  $w_2$  varia de 5 à 15 Å. . . . . 50
- 3.1 (a) Potencial de confinamento em um fio quântico dependente do eixo  $\rho$ , onde  $R$  é o raio do fio; (b) fração molar dependente de  $\rho$ . . . . . 52
- 3.2 Ilustração tridimensional do sistema estudado mostrando  $L$  e  $R$ . . . . . 54
- 3.3 Energia de ligação do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função do raio do fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, para uma interface abrupta (linhas pretas), 5 Å (linhas vermelhas), 10 Å (linhas verdes) e 15 Å (linhas azuis) usando o método variacional, com  $\alpha = 1$ . . . . . 60

- 
- 3.4 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função do raio do fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, com interface abrupta (linhas pretas) e de  $10 \text{ \AA}$  (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a subtração da energia do *exciton* em um fio com interface de  $10 \text{ \AA}$ , pela energia de um fio abrupto. . . . . 61
- 3.5 Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da espessura das interfaces do fio  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, com raio de  $50 \text{ \AA}$  (linhas pretas) e de  $100 \text{ \AA}$  (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a variação da energia de um fio com espessura  $w$  em relação ao caso abrupto. . . . . 62
- 4.1 À esquerda: imagem de um plano de pontos quânticos  $\text{InGaAs}$ , crescido em uma camada de  $\text{GaAs}$  por MBE, obtida por SEM [52]; à direita: imagem de um ponto mostrando seu formato e sua dimensão obtida por um XSTM [53]. . . . . 65
- 4.2 Ilustração tridimensional do sistema estudado mostrando a altura da pirâmide  $H$ , e os lados da base  $L_x$  e  $L_y$ . Na figura, a pirâmide está em cima de uma camada de material diferente da que forma a pirâmide, mas nós consideramos neste trabalho que a pirâmide está toda coberta pelo mesmo material que é formada essa camada. . . . . 66
- 4.3 Projeção no eixo  $z$  da função de onda do elétron no tempo inicial (linha pontilhada preta) e num certo tempo  $t$  (linha pontilhada vermelha) em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ , e  $L_x = L_y = 100 \text{ \AA}$  . . . . . 68
- 4.4 Projeção nos eixos  $x$  e  $z$  da função de onda do elétron em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ , e  $L_x = L_y = 100 \text{ \AA}$  . . . 69

- 4.5 Energia do elétron no estado fundamental em um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  em função de  $L_y$ . A pirâmide tem a base quadrada ( $L_x = L_y$ ). A linha preta é uma pirâmide com altura de  $60 \text{ \AA}$ , enquanto a linha vermelha é uma de  $70 \text{ \AA}$  e a linha verde é de  $80 \text{ \AA}$ . A variação da energia do elétron é quase linear em relação a  $L_x$ . A energia é menor para pontos de alturas maiores, e que essa diferença pode chegar a  $25 \text{ meV}$  para pontos com  $H=60 \text{ \AA}$  e  $H=80 \text{ \AA}$ , com  $L_x=80 \text{ \AA}$ . . . . . 70
- 4.6 Energia do elétron no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). No gráfico à direita, temos o mesmo gráfico da esquerda, mas, agora, traçamos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais, portanto, isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é da ordem de  $2\%$ . . . . . 71
- 4.7 Energia do elétron no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $70 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . O que fazemos, aqui, foi basicamente o mesmo que na Fig. 4.4, mas com a altura da pirâmide diferente. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro, assim como na figura anterior, é bem pequeno sendo da ordem de  $3\%$ . . . . . 73

4.8	Energia do elétron no estado fundamental de um ponto quântico piramidal $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$ de altura $80 \text{ \AA}$ em função de $L_y$ . O que fazemos, aqui, foi basicamente o mesmo que na Fig. 4.6, mas com altura da pirâmide diferente. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro, assim como na figura anterior, é bem pequeno sendo menor do que 3%. . . . .	74
4.9	Energia do buraco pesado no estado fundamental de um ponto quântico piramidal $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$ de altura $60 \text{ \AA}$ em função de $L_y$ . Com $L_x$ constante para cada linha colorida, onde $L_x = 60 \text{ \AA}$ (linha preta), $L_x = 70 \text{ \AA}$ (linha vermelha), $L_x = 80 \text{ \AA}$ (linha verde), $L_x = 90 \text{ \AA}$ (linha azul escuro) e $L_x = 100 \text{ \AA}$ (linha azul claro). No gráfico à direita, temos o mesmo gráfico da esquerda, mas, agora, traçamos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de $L_x$ constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é da ordem de 5%. . . . .	75
4.10	Energia de recombinação do par elétron-buraco pesado no estado fundamental de um ponto quântico piramidal $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$ de altura $60 \text{ \AA}$ em função de $L_y$ . Com $L_x$ constante para cada linha colorida, onde $L_x = 60 \text{ \AA}$ (linha preta), $L_x = 70 \text{ \AA}$ (linha vermelha), $L_x = 80 \text{ \AA}$ (linha verde), $L_x = 90 \text{ \AA}$ (linha azul escuro) e $L_x = 100 \text{ \AA}$ (linha azul claro). . . . .	76

- 4.11 Energia do buraco leve no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). No gráfico à direita, temos o mesmo gráfico da esquerda, mas, agora, traçamos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é menor do que 3%. . . . . 77
- 4.12 Energia de recombinação do par elétron-buraco leve no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x=60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). 78
- A.1 Pontos de discretização. . . . . 84

# Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros do InAs e do GaAs [36]. . . . .	24
2.2	Parâmetros da liga InGaAs [36, 40]. . . . .	26
2.3	Parâmetros do InGaAs para o cálculo do strain [40]. . . . .	27
2.4	Parâmetros do InP e do GaP [36]. . . . .	30
2.5	Band-off-set da liga InGaAsP [36]. . . . .	31
2.6	Constantes dieléticas do InAs, GaAs, InP e GaP [36, 40]. . . . .	33

# 1

---

## Introdução

No começo do século XX, a maior companhia de telefone do mundo, *American Telephone and Telegraph* (AT&T), estava para perder a patente de telefone de Alexander Graham Bell [1], da qual a empresa deixaria de lucrar muito dinheiro. O então presidente da AT&T, Theodore Vail, buscou outra forma para cobrir os lucros perdidos. Sua solução seria construir um serviço de telefonia transcontinental, ou seja, que os sinais de telefone percorressem longas distâncias, revolucionando o sistema de telecomunicação.

Na mesma época, o inventor americano Lee De Forest desenvolveu um triodo em um tubo a vácuo. Esse aparelho poderia amplificar sinais, incluindo os de telefone, satisfazendo o desejo de Vail, que comprou logo a patente de De Forest. Assim, uma conversação por telefone poderia cruzar longas distâncias à medida que ia sendo amplificada [1, 2]. Mas os tubos a vácuo eram poucos seguros e aqueciam muito, além de consumir muita energia e queimarem com facilidade. Então, na década de 30, o laboratório Bell (o laboratório de pesquisa da AT&T) reconheceu que se precisava de um melhor dispositivo para a empresa de telefone continuar a crescer. A Bell resolveu, então, investir numa classe de materiais chamados semicondutores [1, 2] para criar um novo dispositivos que substituísse o triodo.

No final da Segunda Guerra Mundial, um grupo de cientistas foi recrutado na Bell para desenvolver um dispositivo semicondutor a estado sólido que substituísse o tubo a vácuo. O grupo usaria algumas das vantagens em pesquisa feitas em semicondutores durante a Segunda Guerra destinadas ao radar. Depois de várias tentativas o

grupo construiu, em 1947-48, um transistor de junção (sanduíche). O transistor fez sucesso porque era mais confiável, barato, durável, e menor do que as válvulas (além de consumir pouquíssima energia e dissipar bem menos calor). O transistor também era mais fácil de ser manufaturado, e funcionava tanto para amplificar como também para chaveamento dos sinais. Apartir daí, começou uma nova era na eletrônica mundial e a pesquisa em semicondutores foi uma das áreas da Física que mais se desenvolveu [1, 2, 3].

Com o avanço das técnicas de fabricação do transistor e com a mecânica quântica, que nessa época já estava bem fundamentada, sugeriram novas possibilidades de pesquisas e a criação de novos dispositivos [4], onde não apenas se tinha interesse na aplicação tecnológica mas também se podia testar as teorias quânticas de tais sistemas.

## 1.1 Sistemas Quânticos Confinados

Em 1969-70 [5, 6], Tsu e Esaki propuseram a fabricação de heteroestruturas (união de materiais diferentes) que deu outro grande impulso à Física de um modo geral, e não somente à área de semicondutores [3]. Essas heteroestruturas são responsáveis pelo confinamento de portadores de carga. Existem dois tipos básicos de heteroestruturas semicondutoras [7]: àquelas obtidas variando o grau de dopagem em um semicondutor, nas quais o fenômeno de encurvamento das bandas se destaca; e as originadas da variação do material semicondutor nas camadas, em que a diferença dos *gaps* desses materiais e as massas dos portadores de carga têm relevância. Esse último será usado no presente trabalho.

A escala de comprimento desses dispositivos é da ordem do comprimento de onda de de Broglie do portador [8]. O portador, então, assume um comportamento ondulatório, por isso usamos a equação de Schrödinger para descrevê-lo. Quando o potencial da equação de Schrödinger obedece a condição de contorno do tipo  $E_n < \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \infty} V(\mathbf{x})$  [9], as energias,  $E_n$ , de um dado nível  $n$  do portador são confinadas e quantizadas.  $V(\mathbf{x})$

é o potencial de confinamento e pode estar em uma, duas ou três dimensões sendo o sistema correspondente chamando de poços, fios ou pontos quânticos, respectivamente. A quantização da energia é acompanhada pelo confinamento do movimento do portador nesta direção. Por isso, os portadores são confinados a se mover em um plano em um poço quântico, em uma linha em fios ou em 'ilhas' em pontos.

Apesar de Tsu e Esaki terem proposto esses sistemas no começo da década de 70, somente quatro anos depois foram observados, experimentalmente, os primeiros fenômenos quânticos em heteroestruturas: Tsu e Esaki, com a ajuda de Chang, observaram o tunelamento ressonante em barreiras duplas [10, 11], Esaki e Chang mediram as propriedades quânticas de transporte [12], e Dingle, Wiegman e Henry obtiveram o espectro de absorção de poços quânticos [13].

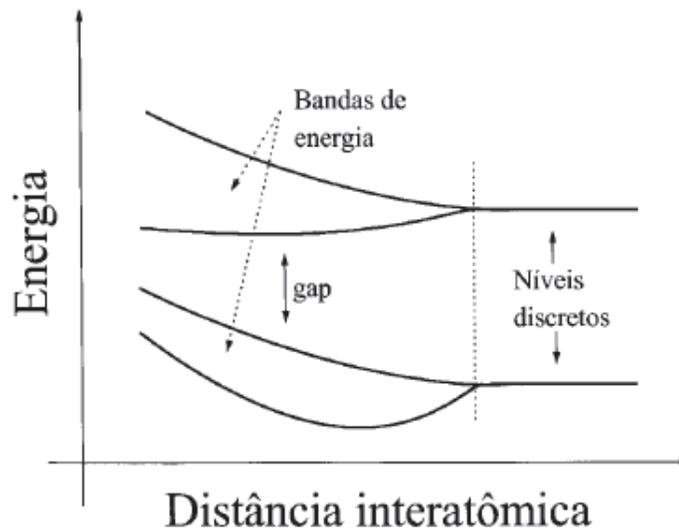


Figura 1.1: Conforme os átomos se aproximam, a degenerescência dos níveis atômicos é quebrada e as energias são distribuídas em um número de níveis igual ao número de átomos do sistema. Note que as bandas de energia assim formadas podem se misturar, e se estes níveis estiverem ocupados, teremos um sólido com comportamento metálico.

## 1.2 Bandas de Energia

Considere um sistema de dois átomos, os quais estão separados por uma distância muito maior que o raio de cada um deles [3]. Todos os níveis eletrônicos deste sistema são duplamente degenerados com relação à troca de partículas. Por exemplo, um elétron que está no nível  $1s$  de um desses átomos também pode ocupar o nível  $1s$  do outro átomo: há duas funções de onda distintas com a mesma energia, ou degenerescência dupla. Em seguida, ao se aproximar os átomos progressivamente, não é mais possível desprezar a interação entre eles: a degenerescência é quebrada e assim aparece dois níveis com autofunções e energias distintas.

A extensão desse raciocínio é imediata: num sistema de três átomos todos os níveis são triplamente degenerados, com quatro átomos os níveis apresentam degenerescência de ordem quatro, e assim por diante. Se considerarmos  $N$  átomos próximos, cada nível atômico será expandido em  $N$  níveis distintos. Como consequência do grande número de átomos presentes em um cristal ( $N$  é da ordem de  $10^{23}$ ) e do arranjo periódico destes átomos formando a rede cristalina, os estados energéticos que descrevem o cristal se organizam de forma peculiar através do surgimento de faixas contínuas destes estados, porém limitadas e separadas umas das outras por faixas de energias proibidas. As faixas de energias permitidas são as chamadas bandas de energia.

Na Fig. 1.1, temos a representação esquemática da discussão acima, mostrando as bandas de condução e de valência em função da distância entre os átomos. Note que entre essas duas faixas de estados permitidos existe um intervalo sem estados eletrônicos, chamado *gap* (que significa intervalo, em inglês) de energia. Dessa forma podemos caracterizar, a grosso modo, os diferentes materiais em condutores (se não há *gap* ou se é muito pequeno) e isolantes (se o *gap* é grande). Os semicondutores apresentam *gaps* com energias da ordem de alguns eV, apresentando tanto características de condutores como de isolantes, em função de parâmetros externos (temperatura, campo elétrico, etc). Em trabalhos que enfocam materiais semicondutores, geralmente se con-

considera apenas as bandas de condução e a de valência, tendo as demais pouca influência para as suas propriedades. A Fig. 1.2(a) mostra um perfil simplificado das bandas de condução e valência.

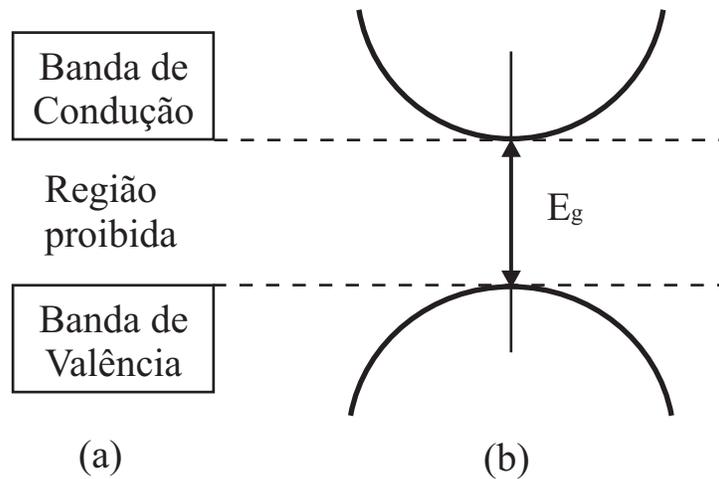


Figura 1.2: Bandas de energia: (a) em função de uma direção qualquer do cristal; (b) em função de  $\vec{k}$ .

Em um cristal isolante, somente na temperatura  $T=0K$  a banda de valência está completamente cheia. Quando a temperatura é maior que zero, elétrons da banda de valência podem ganhar energia térmica suficiente para atingirem a banda de condução, que estava vazia a  $T=0K$ . A passagem de elétrons para a banda de condução deixa na banda de valência estados que se comportam como portadores de carga positiva, chamados buracos. Os elétrons na banda de condução e os buracos na banda de valência produzem corrente elétrica sob a ação de um campo externo. A condutividade do material depende do número de elétrons que passa para a banda de condução. Esse número é tanto maior quanto maior for a temperatura e quanto menor for a energia do *gap* que separa as duas bandas. Os materiais que são isolantes a  $T=0K$  mas que têm o *gap* relativamente pequeno, da ordem de alguns eV, à temperatura ambiente, têm condutividade significante e por isso são chamados semicondutores [14].

Ao sair da banda de valência para a de condução, o elétron deixa um buraco na banda de valência. Esse buraco tem carga, massa e interação com o elétron via atração Coulombiana. Podemos usar um exemplo simples para entender o porquê do buraco ter carga, e desta ser positiva. Considere uma cadeia linear de elétrons, representados por um círculo com um sinal menos dentro, e um buraco, representado por um círculo com um sinal mais. Ao aplicarmos um campo elétrico  $\vec{E}$ , os elétrons serão atraídos pelo campo (ver Fig. 1.3). À medida que o elétron ocupa um buraco, este deixa outro buraco que será ocupado pelo elétron seguinte, de tal forma que o buraco movimenta-se como se estivesse sendo repelido pelo campo, comportando-se como uma partícula de carga positiva .

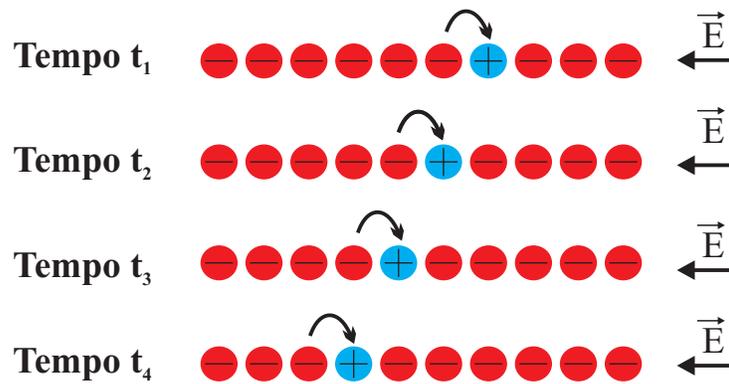


Figura 1.3: Na figura vemos, em quatro instantes diferentes,  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$  e  $t_4$ , o elétron ocupando um buraco e, ao fazer isso, deixa outro buraco para ser ocupado pelo elétron seguinte.

A banda de condução, entretanto, é instável. Qualquer perturbação causada pela temperatura, por exemplo, faz com que o elétron retorne para a banda de valência. Por conservação de energia, o elétron deve emitir a mesma quantidade de energia que recebeu ao fazer o caminho de volta. A energia liberada pelo elétron é denominada energia do *exciton* (como veremos mais adiante), que será o foco do nosso trabalho.

## 1.3 Massa Efetiva

Em estruturas cristalinas, nas quais o potencial é periódico, o vetor de onda,  $\vec{k}$ , não obedece mais a relação  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  [15]. Em razão disso o elétron responde a forças externas comportando-se como se tivesse a massa diferente.

Uma outra forma de ilustrar as bandas de energia é fazer o gráfico da energia versus o vetor de onda  $\vec{k}$ , como está ilustrado na Fig. 1.2(b). Isso é facilmente verificado, em primeira aproximação, se utilizarmos como exemplo a energia de um elétron livre, a qual é dada por:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} k^2, \quad (1.1)$$

onde  $m_0$  é a massa do elétron livre.

Neste caso foi considerado uma relação isotrópica do vetor de onda com a energia. Pela diferenciação da Eq. (1.1), temos:

$$\frac{1}{m_0} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}, \quad (1.2)$$

ou seja, podemos calcular a massa livre do elétron pela curvatura da banda.

Expandindo esse pensamento a uma estrutura de banda em um material, podemos definir a massa de um dado portador como uma função da curvatura da banda<sup>1</sup>. Quanto mais côncava for a banda, menor a massa associada a ela. Por outro lado, essas bandas de energia em semicondutores frequentemente exibem uma relação anisotrópica entre a energia e o vetor de onda, tal que a energia não é apenas uma função da magnitude de  $\vec{k}$ , mas depende separadamente de  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$  [16, 17, 18], ou seja, temos uma massa para cada direção. Chamamos essa massa de massa efetiva.

A massa efetiva, portanto, será diferente de um material a outro, já que a curvatura da banda é diferente para cada material [16]. Na Fig. 1.4 temos a estrutura de bandas do GaAs. Esse é um material de *gap* direto porque a energia mais baixa da banda

<sup>1</sup>Essa idéia de calcular a massa através de uma derivada não é algo tão novo. Da física clássica, sabemos que se aplicarmos a um corpo uma força  $\mathbf{F}$  podemos associar a esse corpo uma massa dada por:  $\frac{1}{m} = \frac{1}{|\mathbf{F}|} \left| \frac{\partial \mathbf{r}^2}{\partial x} \right|$ .

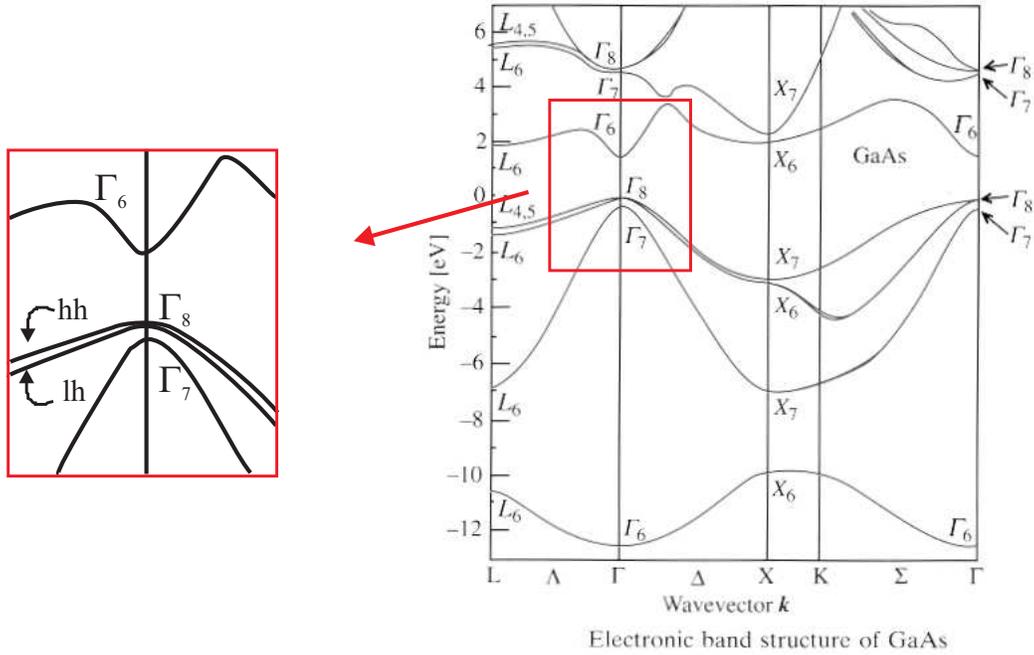


Figura 1.4: Bandas de energia do GaAs [16].

de condução e a energia mais alta da banda de valência estão no mesmo eixo vertical (ponto  $\Gamma$ ). Outros materiais, como o InAs e o InP, também apresentam estrutura de banda semelhante ao do GaAs [16].

Podemos, também, perceber (Fig. 1.4) que a banda de valência pode ser dividida em duas bandas, buraco leve e pesado. A banda do buraco leve *light hole* (*lh*) é a banda mais curva entre as duas e a ela está associada uma massa. A banda do buraco pesado *heavy hole* (*hh*) é a banda menos curva das duas e portanto tem uma massa associada maior do que a do buraco leve, daí os nomes leve e pesado.

Define-se, então, o tensor do inverso da massa efetiva cujos elementos para um dado portador  $\beta$  ( $\beta=e, lh, hh$  - elétron, buraco leve, buraco pesado, respectivamente) é dado por [17]:

$$\left(\frac{1}{m_\beta}\right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{\beta k}}{\partial k_\mu \partial k_\nu}, \quad (1.3)$$

onde  $\mu, \nu=x, y, z$ .

## 1.4 Potencial de Confinamento

O confinamento de elétrons, ou de buracos, pode ser feito em uma, duas ou três dimensões. Quando ocorre em uma, dizemos que o confinamento é 2D (poço quântico), pois refere-se ao número de dimensões livres dos elétrons. Ao confinarmos os elétrons em duas direções chamamos 1D (fio quântico), e em três 0D (ponto quântico). Fios quânticos também são chamados de nanofios; e pontos quânticos, às vezes, são chamados de átomos artificiais, pois, tais como em átomos, as energias dos elétrons são quantizadas e a carga total é restrita a um pequeno número inteiro de elétrons [8].

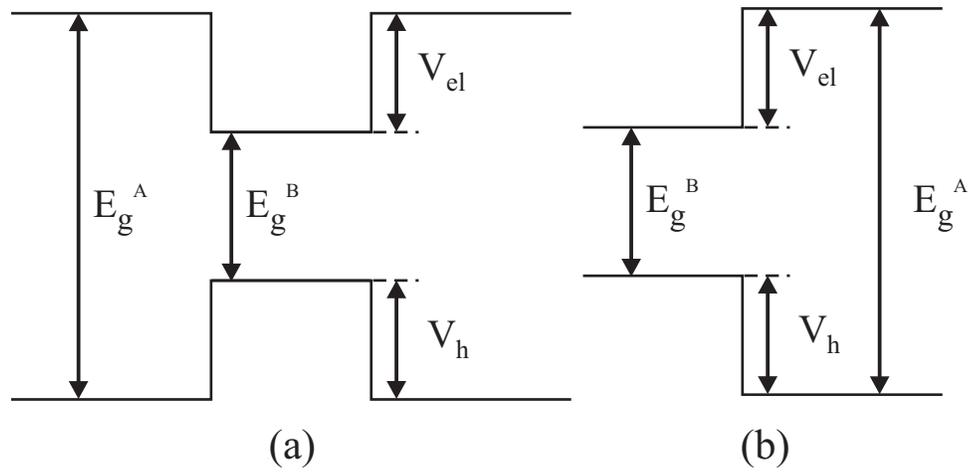


Figura 1.5: (a) Potencial de confinamento de poço quântico em função do eixo de confinamento; (b) Potencial em função do raio de um fio (ponto) quântico.

Para se construir um desses sistemas é preciso que se cresça um material com *gap* menor entre outro material com *gap* maior. O avanço das técnicas de crescimento, como, por exemplo, MOCVD (*Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*) e MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) [19], tornou possível a construção dessas heteroestruturas em nanômetros [4].

Na Fig. 1.5 temos um perfil de um poço quântico (Fig. 1.5(a)) e o confinamento de um fio (ou ponto) (Fig. 1.5(b)). A diferença entre o *gap* maior e o *gap* menor é a

soma dos potenciais  $V_e$  e  $V_h$

$$E_g^A - E_g^B = V_e + V_h, \quad (1.4)$$

onde  $V_e$  é a diferença das bandas de condução (potencial de confinamento para os elétrons que estão na banda de condução) e  $V_h$  é a diferença das bandas de valência (potencial de confinamento para os buracos).

A equação anterior não nos dá o valor de  $V_e$  e  $V_h$  separadamente. Vamos, então, definir o *band-off-set* de condução e de valência, que indica a porcentagem de quanto da diferença dos *gaps* vai para o potencial do elétron e quanto vai para o potencial do buraco. Usando a relação

$$\frac{V_e + V_h}{V_e + V_h} = \frac{V_e}{V_e + V_h} + \frac{V_h}{V_e + V_h} = 1, \quad (1.5)$$

e chamando

$$Q_c = \frac{V_e}{V_e + V_h}, \quad (1.6)$$

$$Q_v = \frac{V_h}{V_e + V_h}, \quad (1.7)$$

onde  $Q_c$  é o *band-off-set* de condução e  $Q_v$ <sup>2</sup> o de valência, com  $Q_c + Q_v = 1$ . Como  $V_e + V_h = E_g^A - E_g^B$ , então

$$Q_c = \frac{V_e}{E_g^A - E_g^B}, \quad (1.8)$$

$$Q_v = \frac{V_h}{E_g^A - E_g^B}. \quad (1.9)$$

Portanto, podemos calcular os potenciais  $V_e$  e  $V_h$  separadamente em termos da diferença dos *gaps* e do respectivo *band-off-set* [20, 21]

$$V_e = Q_c(E_g^A - E_g^B), \quad (1.10)$$

$$V_h = Q_v(E_g^A - E_g^B). \quad (1.11)$$

---

<sup>2</sup> $Q_c$  e  $Q_v$  são características do material obtidos experimentalmente.

## 1.5 Interfaces

Apesar dos processos de crescimento de junções de materiais tornarem-se cada vez mais sofisticados, não há, nas fronteiras dos materiais, uma mudança brusca de um material para outro, ou seja, nas junções entre os materiais temos tanto átomos do material da barreira quanto átomos do poço. Isso está ilustrado à esquerda da Fig. 1.6, mas pode ser facilmente observado olhando a imagem (à direita da Fig. 1.6) obtida com resolução atômica de um XSTM (*Cross-Sectional Scanning Tunneling Microscopy*) [22], que mostra dois poços de InGaAs,  $QW1$  e  $QW2$ , com diferente concentração de Índio (indicado pelo gráfico verde, enquanto a reta azul representa a concentração média). No gráfico à esquerda da Fig. 1.6, temos um poço com interfaces assimétrica  $W_1$  e  $W_2$  que são chamadas de interface normal e interface invertida, respectivamente. Geralmente, devido ao processo de crescimento, as interfaces são assimétricas, com a interface invertida maior que a normal ( $w_2 > w_1$ ).

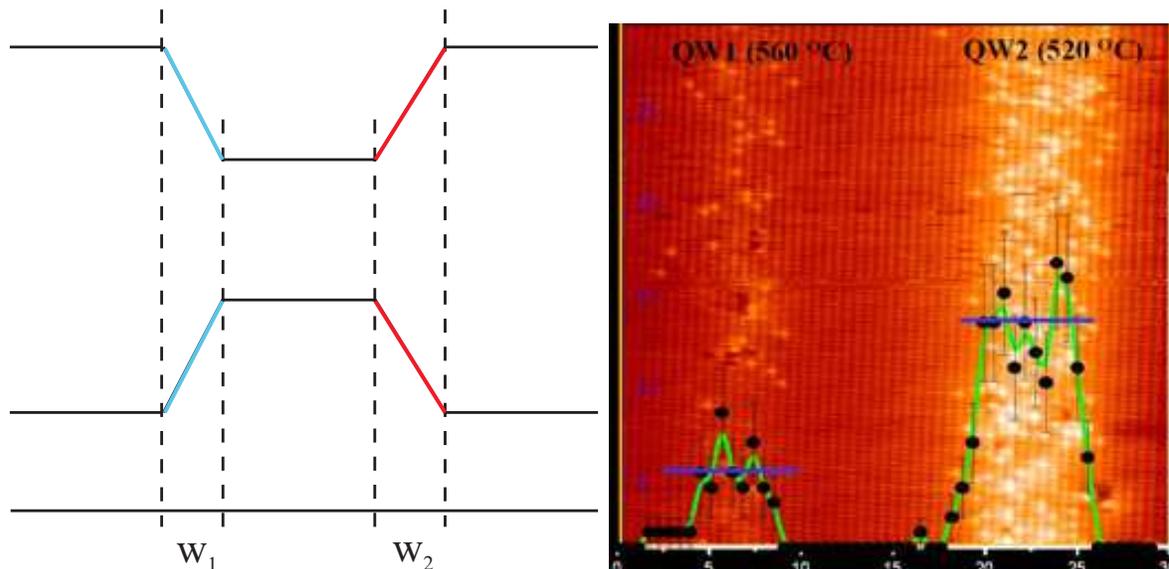


Figura 1.6: À esquerda: gráfico ilustrativo mostrando as interfaces normal e invertida de um poço assimétrico; à direita: imagem de dois poços quânticos obtida por resolução atômica de um XSTM mostrando a concentração de átomos de Índio (pontos claros) em GaAs [22].

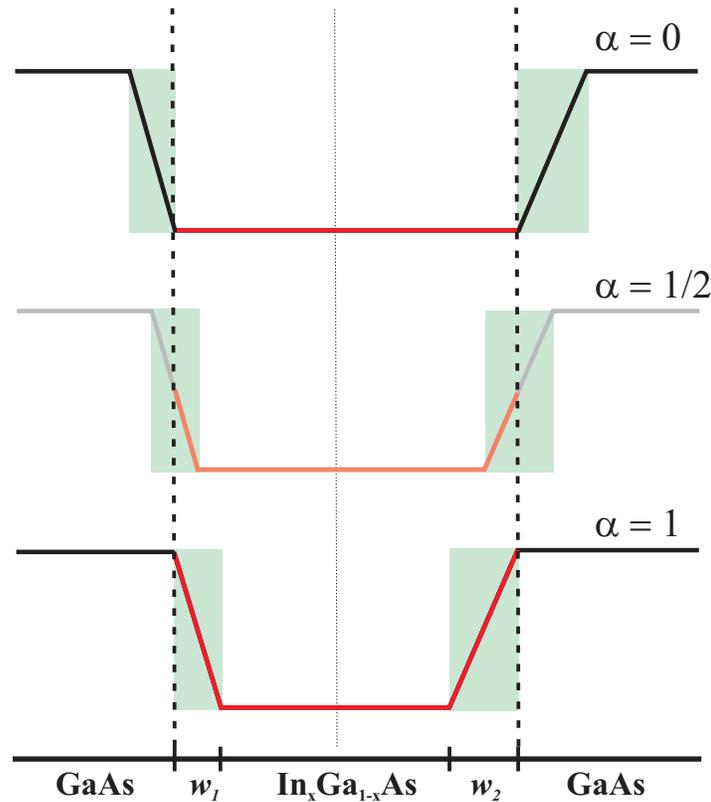


Figura 1.7: Três poços quânticos com interfaces  $w_1$  e  $w_2$  e com  $\alpha$  diferente para cada poço. As linhas vermelhas indicam a largura do poço enquanto as pretas indicam as barreiras. Perceba que a largura do poço é igual para os três poços, mas a largura efetiva do poço é maior quando  $\alpha = 0$ .

A região em que o potencial passa de A para B chama-se interface e sua espessura (à esquerda da Fig. 1.6) pode variar dependendo dos materiais envolvidos ou do modo de crescimento. Elas são largamente estudadas desde que foram detectadas por raio-x e microscopia eletrônica [4, 23]. As interfaces podem ser melhor entendidas como uma região de transição onde os parâmetros de um material A passam continuamente para os parâmetros do material B [23]. A forma com que a composição de uma material varia na interface modifica tanto o potencial de confinamento quanto a massas dos portadores [24]. A espessura dessas interfaces também tem forte influência no confinamento dos portadores pois muda a largura efetiva do poço quântico.

Para a heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As foi mostrado que a variação da fração molar do Alumínio influencia na transmissão de um portador através dela [25]. A variação da fração molar,  $\chi(z)$ , na interface<sup>3</sup> é uma função linear com a direção de confinamento,  $z$ , e o potencial nessa região tem uma função quadrática com  $\chi(z)$ , enquanto as massas efetivas têm uma função linear [24, 25].

Outro parâmetro muito importante é o posicionamento da interface em relação ao poço de potencial, que chamamos de  $\alpha$ . Observando a imagem da Fig. 1.6, é difícil dizer onde começa e onde termina o poço. Para isso vamos supor que se o potencial fosse abrupto estaria em cima da linha pontilhada esquerda e direita da Fig. 1.7. Ou seja, fizemos uma linha de referência do potencial com interfaces graduais em relação ao seu perfil abrupto. Quando considerarmos as interfaces fora dessas linhas pontilhadas (linhas de referência) dizemos que  $\alpha = 0$  (neste caso a interface está fora do poço de potencial); se considerarmos que as linhas pontilhadas estão na metade das interfaces dizemos que  $\alpha = 1/2$  (metade da interface esta dentro do poço de potencial); e quando as interfaces estão dentro dessas linhas, então,  $\alpha = 1$  (as interfaces estão dentro do poço).

## 1.6 *Excitons*

Chamamos de *exciton* o par elétron-buraco (elétron na banda de condução e buraco na banda de valência) ligados pela interação coulombiana. A condição chefe para a formação do *exciton* é que a velocidade de grupo do elétron e do buraco sejam iguais [26]. Dessa maneira elétrons e buracos podem atravessar o cristal juntos quando estão ligados. Todo cristal semiconductor, ou isolante, pode apresenta a formação de *excitons* [26]. Os *excitons* foram propostos, primeiramente, por Frenkel [27] que fez uma analogia entre excitação atômica ou molecular e excitação em estado sólido. Mas neste trabalho,

---

<sup>3</sup>onde  $z$  é o eixo de confinamento de um poço quântico. No fio quântico cilíndrico  $\chi$  será função de  $\rho$ , e no caso de um ponto esférico  $\chi$  será função de  $r$ .

vamos usar o modelo Wannier-Mott [28, 29] para o cálculo do *exciton*, onde a ligação elétron-buraco é fraca, pois descreve melhor *excitons* em semicondutores, isso porque os elétrons de valência blindam a interação colombiana.

Iremos trabalhar com dois tipos de *exciton*: o *exciton* de buraco pesado, formado pelo par elétron-buraco pesado ( $e-hh$ ), ou *exciton* de buraco leve, formado pelo par elétron-buraco leve ( $e-lh$ ). O *exciton* só irá existir enquanto o elétron permanecer na banda de condução, pois quando este retorna para a banda de valência ocupa o buraco, não havendo mais o par. Ao passar da banda de condução para a banda de valência, o elétron libera energia, e a essa dá-se o nome de energia de emissão do *exciton*. Para calculá-la é preciso, também, calcular a energia de ligação do *exciton* ( $E_b$ ), que é a energia que o par gasta para permanecer ligado.

Em um material *bulk* (onde não há potencial de confinamento), os buracos na banda de valência migram até o topo da banda, em busca do seu estado de mais baixa energia. O elétron se comporta de forma semelhante, tendo energia igual ao da borda da banda de condução [30]. Portanto, para calcular o *exciton* em um *bulk*, basta subtrair o *gap* do módulo da energia de ligação

$$E_{exc} = E_g - |E_b| \quad (bulk), \quad (1.12)$$

o módulo de  $E_b$  é necessário pois o par perde essa energia ao sistema.

Em uma heteroestrutura, o elétron e o buraco não encostam na banda devido à presença do confinamento, pois tanto o elétron como o buraco têm uma energia mínima,  $E_e$  e  $E_h$ , respectivamente, como mostrado na Fig. 1.8, para o poço quântico.

Para calcular o *exciton* em uma heteroestrutura (tanto em poços quânticos como em fio ou em pontos), basta fazer

$$E_{exc} = E_g + E_e + E_h - |E_b| \quad (heteroestrutura). \quad (1.13)$$

A energia do elétron e do buraco são obtidas pela solução da equação de Schrödinger no respectivo confinamento estudado (2, 1 ou 0D). Da mesma forma a energia de ligação

irá depender do confinamento. Nos Capítulos que seguem apresentaremos os métodos que foram utilizados no cálculo da energia de ligação dos portadores em cada tipo de confinamento.

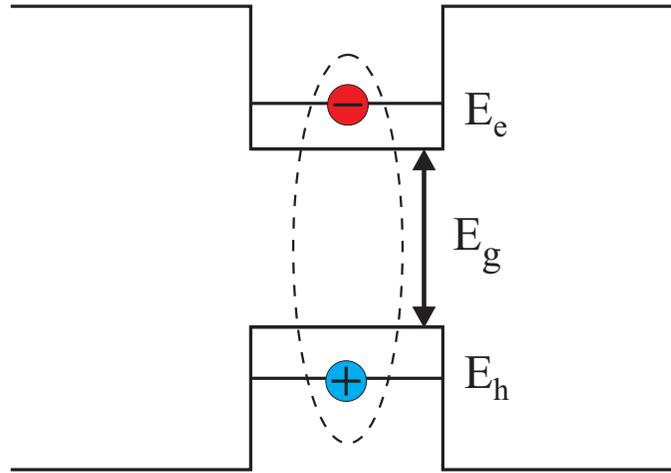


Figura 1.8: *Exciton* em um poço quântico.

## 1.7 *Strain*

Grande parte dos materiais usados na fabricação de dispositivos eletrônicos tem a estrutura de sólidos cristalinos. Um sólido cristalino é aquele no qual os átomos estão ligados entre si em uma unidade periódica denominada células unitárias. Isso significa que os átomos estão situados em um arranjo que se repete ao longo de grandes distâncias atômicas, onde todas as posições dos átomos no cristal podem ser geradas mediante translações proporcionais às distâncias inteiras da célula unitária ao longo de cada uma de suas arestas. O ordenamento regular dos átomos é o arranjo que minimiza a energia eletrostática total do conjunto. Por esta razão, quando um material é fundido, e depois resfriado lentamente, os átomos procuram as posições de menor energia e tendem a formar cristais. Para materiais não cristalinos, chamados amorfos, essa ordem atômica de longo alcance está ausente.

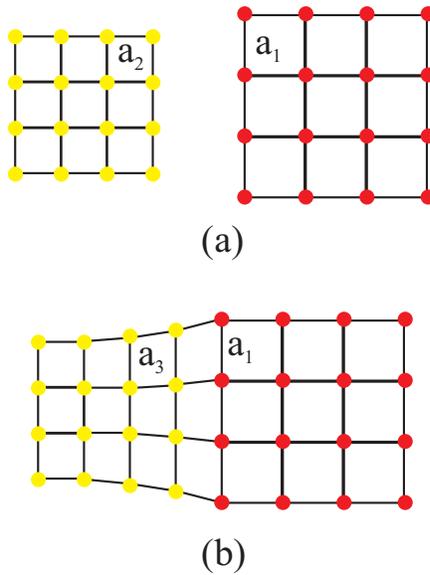


Figura 1.9: Deformação devido ao *strain* de uma rede cristalina.

A forma com que esses átomos estão arranjados espacialmente define várias propriedades do material, inclusive o *gap*. A geometria da célula unitária é completamente definida em termos de seis parâmetros: o comprimento das três arestas  $a$ ,  $b$  e  $c$ , chamados de parâmetros de rede, e os ângulos entre os eixos  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  [31]. Essa geometria é característica do material, podendo materiais diferentes ter células de mesmo formato. Quando juntamos dois materiais de parâmetro de rede diferente ocorre uma deformação nas células. Isso porque os átomos de cada célula tendem a se ajustar aos átomos da outra. Na Fig. 1.9 mostramos um esquema bidimensional representando uma rede cristalina; na Fig. 1.9(a) temos as redes de cada material separadamente, com parâmetro de rede  $a_1$  e  $a_2$ ; na Fig. 1.9(b) os dois materiais aparecem juntos e as células unitárias estão se ajustando uma a outra,  $a_3$  é o antigo parâmetro de rede  $a_2$  que agora se ajustou ao  $a_1$ . A esse tipo de deformação, no qual um material se ajusta ao outro, e esse segundo não sofre alteração relevante é chamada pseudomórfica [22, 32]. Essa deformação altera o *gap* do material e separa as bandas de energia do buraco leve e pesado [22], como está ilustrado na Fig. 1.10. Neste trabalho, quando considerarmos *strain*, vamos supor, que as células unitárias do poço se ajustam as da

barreira, e desprezaremos a deformação da barreira.

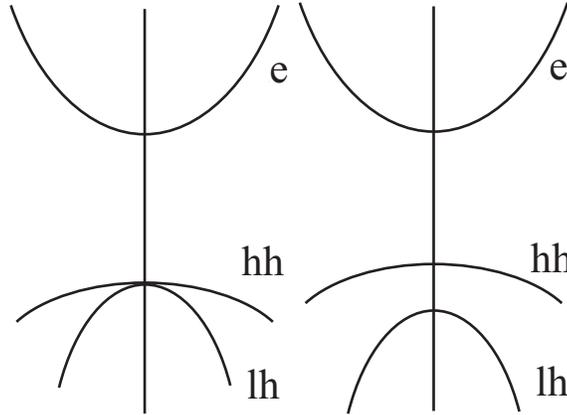


Figura 1.10: À esquerda ilustração das bandas de energia sem *strain*. À direita as bandas de energia com *strain*. Perceba que o *strain* separa o *gap* das bandas *hh* e *lh* em relação a banda de condução.

## 1.8 Importância e Aplicações

A possibilidade de manipular a natureza para a obtenção de um resultado previsto é uma idéia antiga para cientistas e engenheiros. Nas últimas décadas, com o desenvolvimento das técnicas de crescimento e fabricação de novos materiais essa possibilidade tomou novo impulso e tem atraído muita atenção tanto para ciência pura quanto para aplicada.

A maioria dos materiais semicondutores usados hoje em dia não são, em geral, encontrados na natureza. São produzidos artificialmente a partir de compostos químicos com alto grau de pureza, através de diversos processos, como por exemplo, os materiais binários formados a partir dos grupos III e V da tabela periódica: GaAs, InAs, AlAs, GaP, etc. A física desses novos semicondutores artificiais é derivada das propriedades do material *bulk*, mas a existência de dispositivos de baixa dimensionalidade conduz a novas propriedades. O aperfeiçoamento de crescimento desses compostos abre oportunidades para dispositivos com novos potenciais de aplicação.

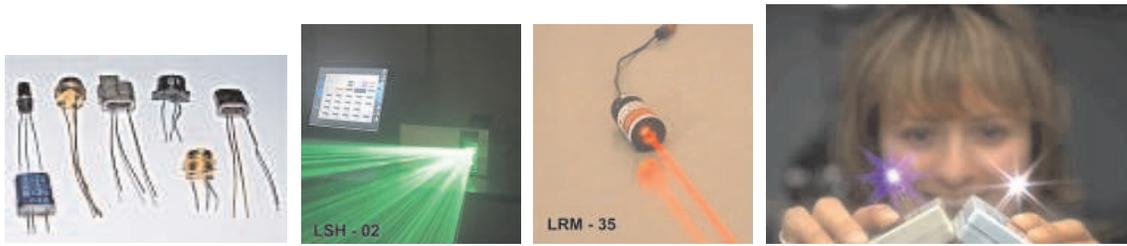


Figura 1.11: Da esquerda para direita: alguns transistores; um *laser* emitindo luz verde e outro emitindo luz vermelha; diodos à base de pontos quânticos emitindo luz azul e branca. Esse foi o primeiro LED (diodo emissor de luz) construído com ponto quântico emitindo luz branca [33].

Muitos materiais empregados em dispositivos semicondutores são fabricados com o crescimento de camadas graduais de átomos ou moléculas do material desejado, com espessuras que variam desde alguns angstroms ( $1\text{\AA}=10^{-10}$  m) até dezenas de microns ( $1\mu\text{m}=10^{-6}$  m). Em alguns dispositivos, usam-se não apenas camadas de semicondutores, mas também de condutores ou isolantes. Existem várias técnicas de crescimento, dependendo do sistema que se deseje obter, como por exemplo as técnicas [4, 14, 19, 34] MBE, MOCVD e VLS (Vapor-Liquid-Solid), muito usadas para a fabricação de poços, fios e/ou pontos quânticos. Outros exemplos de aplicação de tais estruturas são: resistores, capacitores, camadas magnéticas em dispositivos de gravação, *lasers*, etc. Na Fig. 1.11, mostramos alguns dispositivos usados em aplicação tecnológica nos dias de hoje. À esquerda da Fig. 1.12 temos uma imagem STEM (*Scanning Transmission Electron Microscopy*) [34] de dois fios quânticos em que os materiais são alternados ao longo do seu eixo de simetria, formando uma super-rede (essa estrutura também é freqüentemente chamada de pontos quânticos empilhados). À direita da Fig. 1.12 temos uma figura ilustrativa de um ponto quântico piramidal.

Neste trabalho, vamos nos concentrar principalmente nos compostos InAs, GaAs, InP e GaP. Os dois primeiros formam a liga ternária InGaAs, que é muito usada em dispositivos eletrônicos de alta velocidade e lasers infra-vermelho. Outras ligas com

as quais trabalhamos são: GaAsP, usada na fabricação de LED vermelho; e InGaAsP, uma liga quaternária, usada em dispositivos optoeletrônicos e em transistores de alta mobilidade eletrônica [35, 36].

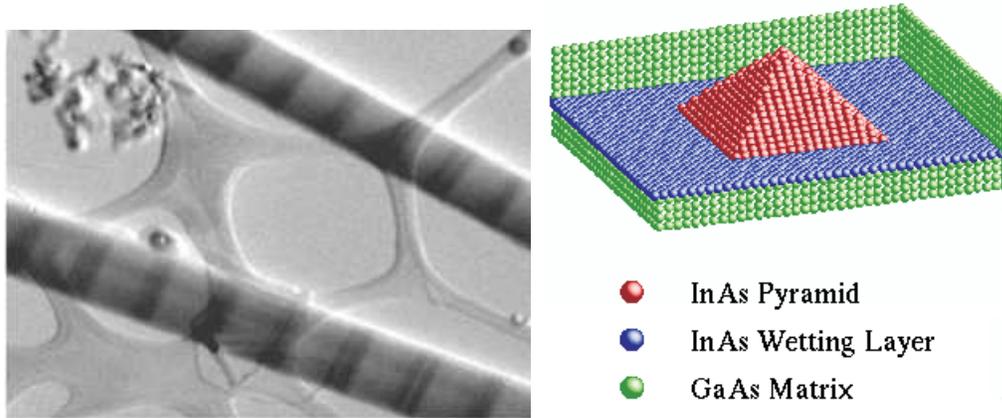


Figura 1.12: À esquerda temos uma imagem STEM de dois fios quânticos [34], e à direita temos uma figura ilustrativa de um ponto quântico piramidal.

No Capítulo 2 estudamos a influência na energia dos *excitons*  $e$ - $lh$  e  $e$ - $hh$  em razão do comprimento e das interfaces em poços quânticos  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  com e sem *strain* e em poços  $(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})_v(\text{InP})_{1-v}/\text{InP}$  sem *strain*. Para isso usamos três tipos diferente de cálculo para a energia de ligação que são: o método do potencial efetivo e os métodos variacionais com um e dois parâmetros.

O estudo de fios foi feito no Capítulo 3, onde supomos um fio cilíndrico infinitamente longo, tal que no eixo de simetria um portador de carga está livre de confinamento. Calcularemos a energia de emissão do *exciton* em função da interface e do raio em um fio  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*. A energia de ligação é calculada usando o método variacional com um parâmetro.

No Capítulo 4, calculamos as energias dos portadores em um ponto quântico piramidal  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  abrupto e sem *strain*. Analisamos a dependência dessas energias com a área da base da pirâmide. Somando as energias do elétron com a do buraco e com o *gap* temos a energia de recombinação do par elétron-buraco, que é

---

aproximadamente a energia do *exciton*, em função da altura da pirâmide e dos lados da base.

As conclusões desses três sistemas estão no Capítulo 5. Em seguida temos o Apêndice A, onde apresentamos a resolução da equação de Schrödinger independente do tempo pelo método de discretização. A resolução da equação de Schrödinger dependente do tempo está no Apêndice B. Depois, no Apêndice C, temos os trabalhos apresentados em congressos e publicações feitas com os resultados desta dissertação. Por fim, mostramos as referências usadas para a realização deste trabalho.

# 2

---

## Poços Quânticos

Poços Quânticos são camadas finas de materiais semicondutores paralelas entre si. Essas camadas são postas umas sobre a outras alternando de material de tal forma que na direção perpendicular ao plano dessas camadas um portador de carga ficará confinado devido à diferença dos *gaps* desses materiais. Na direção paralela ao plano os portadores estão livre de confinamento. A esse tipo de confinamento chamamos de 2D, pois se refere ao número de dimensões não confinadas. O potencial de confinamento,  $V(z)$ , de um poço quântico, portanto, é unidimensional (ver Fig. 2.1(a)) e consideraremos, neste trabalho, essa direção como sendo o eixo  $z$ .

Neste Capítulo trabalharemos com o poço  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , onde  $x$  é a fração molar do Índio. Nessa liga não se pode desprezar os efeitos de tensão, que chamamos de *strain*, por causa da diferença entre os parâmetros de rede do InAs e GaAs que é relevante (ver Fig. 1.9), mas vamos fazer uma análise dos resultados com e sem *strain* para efeito de comparação com outros trabalhos. Também usaremos uma liga quaternária  $(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})_v(\text{InP})_{1-v}/\text{InP}$  onde podemos escolher uma relação entre  $w$  e  $v$  para desprezar o *strain*, onde  $w$  e  $v$  são as frações molares do Índio e da liga ternária InGaAs, respectivamente (ver Fig. 2.2).

Para ambos materiais, seguiremos o modelo proposto por Adachi [37, 38], no qual, estimamos um dado parâmetro físico de um material ternário (quaternário) pela interpolação dos parâmetros dos materiais binários (ternário) e da fração molar. Adicionalmente, consideraremos que a fração molar, segundo proposta feita por Farias *et al.*

[24, 25], depende da direção de confinamento do poço quântico,  $z$ . Depois, incluiremos o *strain* na liga  $\text{InGaAs}$ . Em seguida, mostraremos os métodos usados para o cálculo da energia de ligação entre o elétron e o buraco, para podermos calcular a energia do exciton. Por fim, mostraremos e comentaremos os resultados obtidos.

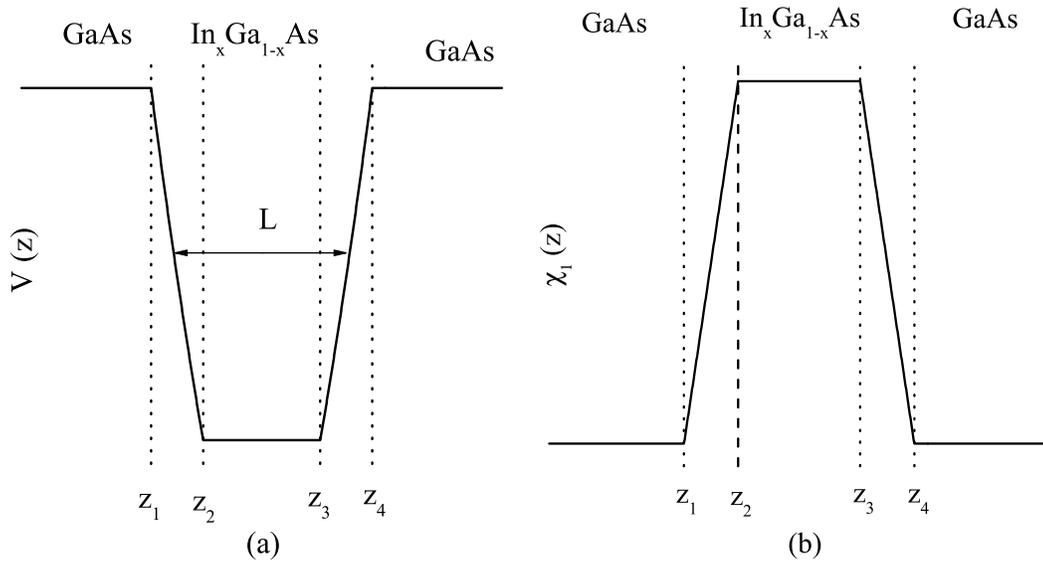


Figura 2.1: (a) Potencial de confinamento,  $L$  é a largura do poço; (b) Fração molar dependente da posição.

## 2.1 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

A liga  $\text{InGaAs}$  é formada pelos compostos binários  $\text{InAs}$  e  $\text{GaAs}$  que possuem uma diferença de parâmetro de rede (ver Tabela 2.1) de aproximadamente 7%. Essa diferença é grande o suficiente para tornar o *strain* não desprezível, independente da quantidade de Índio ( $x$ ), na liga ternária [39] (ver Fig. 2.2). Portanto, para uma boa aproximação, não se pode deixar de considerar o *strain* nesse material. Mas, para efeito de comparação com outros trabalhos e para sabermos quanta influência o *strain* exerce na energia dos portadores, preferimos fazer um estudo com esses dois casos: considerando e não considerando o *strain*.

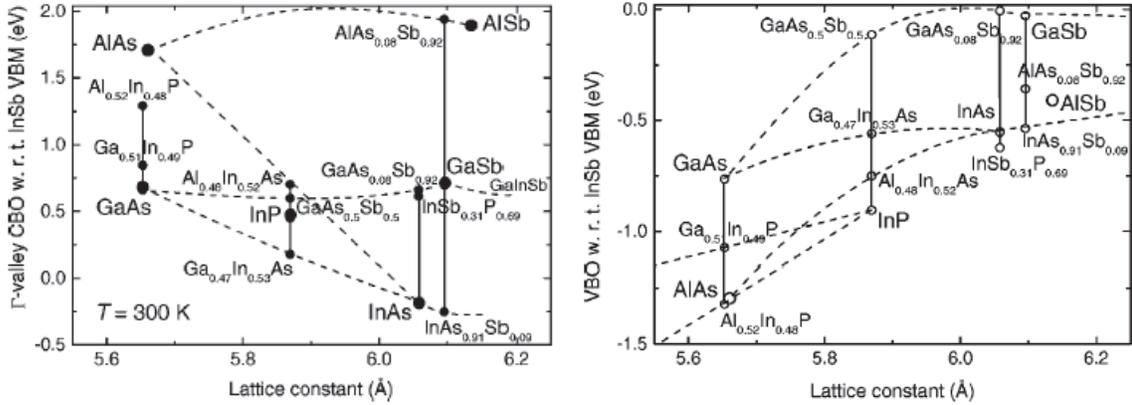


Figura 2.2: À esquerda *band-off-set* de condução em função do parâmetro de rede [35]. À direita *band-off-set* de valência em função do parâmetro de rede [35]. Perceba nos gráficos a diferença nos parâmetros de rede dos binários InAs e GaAs. Por outro lado o binário InP pode ter seu parâmetro de rede igual ao InGaAs

### 2.1.1 Fração Molar

Vamos propor um modelo no qual a fração molar do Índio é dependente do eixo de confinamento  $z$ ,  $\chi_1(z)$ , onde o índice 1 é apenas para indicar a liga ternária. Sabemos que essa variação deve assumir um valor máximo  $x$  dentro do poço e zero nas barreiras, pois a barreira desse sistema é formada pelo GaAs. Baseado nos dados experimentais (ver imagem da Fig. 1.6) vamos supomos uma variação linear de  $\chi_1(z)$  nas interfaces. Portanto, para o poço  $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  utilizaremos um perfil da fração molar da seguinte forma:

$$\chi_1(z) = \begin{cases} 0, & \text{para } z < z_1 \\ \frac{x}{w_1}(z - z_1), & \text{para } z_1 < z < z_2 \\ x, & \text{para } z_2 < z < z_3 \\ x - \frac{x}{w_2}(z - z_3), & \text{para } z_3 < z < z_4 \\ 0, & \text{para } z > z_4 \end{cases} \quad (2.1)$$

onde  $w_1$  e  $w_2$  são as espessuras das interfaces normal e invertida, respectivamente. A função acima está representada na Fig. 2.1(b). Os pontos  $z_1$ ,  $z_2$ ,  $z_3$  e  $z_4$  são os pontos

que indicam os limites das interfaces. Eles são definidos por:

$$\begin{aligned} z_1 &= -\frac{L}{2} - (1 - \alpha)w_1, \\ z_2 &= -\frac{L}{2} + (\alpha)w_1, \\ z_3 &= \frac{L}{2} - (\alpha)w_2, \\ z_4 &= \frac{L}{2} + (1 - \alpha)w_2, \end{aligned} \quad (2.2)$$

sendo  $\alpha$ , como explicado no Capítulo 1, o parâmetro que diz o quanto da interface está dentro do poço e  $L$  é a largura do poço quântico (ver Fig. 2.1(a))

### 2.1.2 Massa

Como dissemos no começo desse Capítulo, usaremos uma relação para as massas dos portadores que dependem de  $\chi_1(z)$  que, por sua vez, depende de  $z$ . Para isto, expandiremos o modelo de Adachi [37], onde  $m = m_1 + m_2x$ , e, de acordo com a proposta feita por Farias *et al.* [24, 25], usaremos  $\chi_1(z)$  no lugar de  $x$  de tal forma que

$$m_\beta^\perp(z) = m_\beta^\perp(\text{InAs})\chi_1(z) + [1 - \chi_1(z)]m_\beta^\perp(\text{GaAs}), \quad (2.3)$$

onde  $m_\beta^\perp(\text{InAs})$  e  $m_\beta^\perp(\text{GaAs})$  são as massas do InAs e GaAs, respectivamente, na direção  $z$ , do portador  $\beta$  ( $\beta=e, lh, hh$ ).

Tabela 2.1: Parâmetros do InAs e do GaAs [36].

	$E_g$ (eV)	$a_0$ (Å)	$m_e$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
InAs	0.354	6.0583	0.027	18.9	8.37
GaAs	1.424	5.6533	0.068	6.68	2.34

Essas massas são as massas perpendiculares aos planos de crescimento, ou seja, na direção  $z$ . Sabemos que essa função deve assumir na barreira um valor igual à massa do GaAs. A massa efetiva do elétron de cada material binário é obtida experimentalmente

[36] e está na Tabela 2.1, as massas efetivas dos buracos, na direção de confinamento, são calculadas pelas seguintes equações [18, 36]:

$$m_{lh}^{\perp} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}, \quad (2.4)$$

$$m_{hh}^{\perp} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \quad (2.5)$$

onde  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  são os parâmetros de Luttinger dos binários InAs e GaAs e seus valores estão na Tabela 2.1.

Para calcular as massas dos buracos no plano perpendicular ao eixo  $z$  usamos equações parecidas com as anteriores [18, 36]:

$$m_{lh}^{\parallel} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad e \quad m_{hh}^{\parallel} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (2.6)$$

### 2.1.3 Potencial

O potencial de confinamento é dado pela diferença dos *gaps* dos materiais que formam o poço. Uma fração dessa diferença é o potencial de confinamento dos elétrons. Essa fração, como foi dito no Capítulo 1, é conhecido como *band-off-set* de condução ( $Q_c$ ) do InGaAs. O restante da diferença dos *gaps* é o potencial dos buracos. O *gap* da barreira (GaAs) é conhecido e é dado na Tabela 2.1. Conhecemos também o *gap* do InAs, mas não sabemos quanto vale o da liga ternária In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Para isso, faremos uma interpolação quadrática [40] com a fração molar  $\chi_1(z)$

$$E_g(\chi_1(z)) = E_g(0) + e_1\chi_1(z) + e_2\chi_1(z)^2, \quad (2.7)$$

onde  $E_g(0)$  é o *gap* do GaAs, sendo  $e_1$  e  $e_2$ <sup>1</sup> constantes.

Como já foi comentado no Capítulo 1, os potenciais de confinamento desses portadores podem ser calculados por  $V_e = Q_c(E_g(0) - E_g(x))$  e  $V_h = Q_v(E_g(0) - E_g(x))$ . Agora vamos substituir  $E(x)$  por  $E(\chi_1(z))$  nessas equações, e usando a Eq. (2.7),

<sup>1</sup> $e_2$  é chamada de *bowing parameter* e é dado na Tabela 2.2.

temos

$$V_e = Q_c(E_g(0) - E_g(\chi_1(z))) = -Q_c(e_1\chi_1(z) + e_2\chi_1(z)^2), \quad (2.8)$$

$$V_h = Q_v(E_g(0) - E_g(\chi_1(z))) = -Q_v(e_1\chi_1(z) + e_2\chi_1(z)^2). \quad (2.9)$$

Os valores de  $Q_c$  e  $Q_v$  são dados na Tabela 2.2.

Tabela 2.2: Parâmetros da liga InGaAs [36, 40].

	$Q_c$	$Q_v$	$e_2$
InGaAs	0.55	$1 - Q_c = 0.45$	0.475

## 2.2 *Strain* em Poços Quânticos

O *strain* é a deformação das células unitárias de um material quando se ajustam aos átomos das células unitárias de outro material. Essa deformação pode aumentar ou diminuir os parâmetros de rede das células. Em alguns casos os parâmetros de rede de um material se deforma muito mais do que os do outro material. Nesse caso dizemos que o *strain* é do tipo pseudomórfico, e é esse caso que usaremos neste trabalho. Vamos supor que as células unitárias do material da barreira têm uma deformação desprezível em relação ao poço. Como foi dito no começo desse Capítulo, vamos calcular o *strain* somente para a liga InGaAs.

Antes de tudo, devemos calcular o parâmetro de rede do  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Para isso vamos usar uma relação linear do tipo que usamos para a massa que depende da fração molar  $x$  [40, 41]

$$a_0(x) = xa_0(x=1) + (1-x)a_0(x=0), \quad (2.10)$$

onde  $a_0(x=0)$  é o parâmetro de rede da barreira, GaAs, e  $a_0(x=1)$  é o parâmetro de rede do InAs dados na Tabela 2.1, e  $a_0(x)$  é o parâmetro de rede do  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Uns dos principais efeitos que o *strain* causa, e o que vai nos interessar aqui, é a separação entre as bandas do *lh* e *hh*. Segundo modelo proposto por Atanasov *et al.* [40] os *gaps* serão, agora, definidos por

$$E_g^{hh} = E_g(x) + \delta E_H - \delta E_S, \quad (2.11)$$

$$E_g^{lh} = E_g^{hh} + 2\delta E_S + \frac{1}{2} \left\{ \Delta_0(x) - \delta E_S + \sqrt{[\Delta_0(x) - \delta E_S]^2 + 8\delta E_S^2} \right\}, \quad (2.12)$$

sendo  $E_g(x)$  o *gap* do poço quando não consideramos o *strain* dado na Eq. (2.7), e

$$\Delta_0(x) = \Delta_0(0) - 0.07x + 0.14x^2, \quad (2.13)$$

$$\delta E_H = 2a \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \delta_L, \quad (2.14)$$

$$\delta E_S = b \left( 1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \delta_L, \quad (2.15)$$

onde  $\delta E_H$  e  $\delta E_S$  são os potenciais Hidrostático e de Deformação, respectivamente.  $\Delta_0(0)$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $C_{11}$  e  $C_{12}$  são parâmetros dos materiais dados na Tabela 2.3.  $\delta_L$  é a deformação das células unitárias e é dada por [40]

$$\delta_L = \frac{a_0(0)}{a_0(x)} - 1. \quad (2.16)$$

Tabela 2.3: Parâmetros do InGaAs para o cálculo do strain [40].

	$C_{11}$ (dina/cm <sup>2</sup> )	$C_{12}$ (dina/cm <sup>2</sup> )	a (eV)	b (eV)	$\Delta_0$ (eV)
InAs	8.33	4.30	-5.8	-1.8	0.391
GaAs	11.88	5.38	-9.8	-1.7	0.341

Como o *strain* separa as bandas definindo um novo *gap* para cada uma delas, por conseguinte, teremos novos potenciais de confinamento para o elétron e para os buracos. Esses potenciais podem ainda ser calculados pelas Eqs. (2.8) e (2.9), que usamos anteriormente, no caso sem *strain*, sendo que agora cada banda de valência, *lh* e *hh*,

terá o seu próprio *gap* definido nas Eqs. (2.11) e (2.12). Os novos potenciais, portanto, são dados por

$$V_e = Q_c(E_g(0) - E'_g(x)), \quad (2.17)$$

$$V_{lh} = Q_v(E_g(0) - E_g^{lh}(x)), \quad (2.18)$$

$$V_{hh} = Q_v(E_g(0) - E_g^{hh}(x)), \quad (2.19)$$

onde  $E'_g(x)$  é o menor dos *gaps* entre  $E_g^{lh}(x)$  e  $E_g^{hh}(x)$ .  $Q_c$  e  $Q_v$  são os mesmos que usamos antes e que foram dados na Tabela 2.2.

## 2.3 $(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})_v(\text{InP})_{1-v}/\text{InP}$

A liga InGaAsP é formada por quatros compostos binários: InAs, GaAs, InP e GaP. Nesse material, temos duas frações molares  $w$  e  $v$  e, ao contrário do InGaAs, podemos desprezar o efeito do *strain*. Para isso, devemos usar uma relação entre  $w$  e  $v$ , onde  $w=0,47v$  [35, 36] (ver Fig. 2.2). Portanto, usaremos essa relação neste trabalho e não vamos nos preocupar com o *strain* nessa liga.

### 2.3.1 Fração molar

Diferentemente do material anterior, agora temos duas frações molares  $w$  e  $v$ . A primeira, assim como na Seção anterior, se refere a quantidade de Índio e a segunda se refere a quantidade da liga ternária InGaAs. Usaremos o mesmo modelo que usamos antes [24, 25] para descrever a fração molar como uma função de  $z$ , e chamaremos essa função de  $\chi_2(z)$ , e da mesma forma que escrevemos a Eq. (2.1), temos

$$\chi_2(z) = \begin{cases} 0, & \text{para } z < z_1 \\ \frac{v}{w_1}(z - z_1), & \text{para } z_1 < z < z_2 \\ v, & \text{para } z_2 < z < z_3 \\ v - \frac{v}{w_2}(z - z_3), & \text{para } z_3 < z < z_4 \\ 0. & \text{para } z > z_4 \end{cases} \quad (2.20)$$

O gráfico dessa função é igual ao da Fig. 2.1(b), mas agora o material da barreira é o InP e o do poço é o  $\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As}$ ,  $w_1$  e  $w_2$  são as interfaces normal e invertida, respectivamente, do poço quântico. Novamente, os pontos  $z_1$ ,  $z_2$ ,  $z_3$  e  $z_4$  representam os limites das interfaces  $w_1$  e  $w_2$ , assim como nas Eqs. (2.2).

### 2.3.2 Massa

Vamos assumir, como na Seção anterior, uma relação na qual as massas dos portadores dependem de  $\chi_2(z)$ . Essas massas são as massas perpendiculares ao plano de crescimento. Sabemos que essa função na barreira deve ser igual a massa do InP. Então, usando uma relação idêntica a Eq. (2.3), mas utilizando como parâmetros as massas do InP e do  $\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As}$ , temos

$$m_{\beta}^{\perp}(z) = m_{\beta}^{\perp}(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})\chi_2(z) + [1 - \chi_2(z)]m_{\beta}^{\perp}(\text{InP}), \quad (2.21)$$

onde, novamente,  $\beta=e, lh, hh$ , sendo  $m_{\beta}^{\perp}(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})$  a mesma massa calculada na Seção anterior (Eq. (2.3)).

A massa do elétron é calculada em termos de  $w$  e  $v$  e das massas dos binários InAs, GaAs, InP e GaP, sendo dada por [36]:

$$m_e^{\perp} = w(1-v)m_e^{\perp}(\text{InP}) + wvm_e^{\perp}(\text{InAs}) + (1-w)(1-v)m_e^{\perp}(\text{GaP}) + (1-w)vm_e^{\perp}(\text{GaAs}); \quad (2.22)$$

onde  $m_e^{\perp}(\text{InP})$ ,  $m_e^{\perp}(\text{GaP})$ ,  $m_e^{\perp}(\text{InAs})$  e  $m_e^{\perp}(\text{GaAs})$  são as massas dos elétrons na direção perpendicular ao plano de confinamento dos materiais InP, GaP, InAs e GaAs, respectivamente, dadas nas Tabelas 2.1 e 2.4.

Para calcular  $m_{\beta}^{\perp}(\text{InP})$  e  $m_{\beta}^{\parallel}(\text{InP})$  usaremos as Eqs. (2.4), (2.5) e (2.6), onde os parâmetros de Luttinger  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$ , agora, dependem das frações molares  $w$  e  $v$  e também de  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  dos compostos binários InAs, GaAs, InP e GaP [36],

$$\gamma_1 = w(1-v)\gamma_1(\text{InP}) + (1-w)(1-v)\gamma_1(\text{GaP}) +$$

$$wv\gamma_1(\text{InAs}) + (1-w)v\gamma_1(\text{GaAs}), \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \gamma_2 = w(1-v)\gamma_2(\text{InP}) + (1-w)(1-v)\gamma_2(\text{GaP}) + \\ wv\gamma_2(\text{InAs}) + (1-w)v\gamma_2(\text{GaAs}), \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde  $\gamma_1(\text{InP})$ ,  $\gamma_2(\text{InP})$ ,  $\gamma_1(\text{GaP})$ ,  $\gamma_2(\text{GaP})$ ,  $\gamma_1(\text{InAs})$ ,  $\gamma_2(\text{InAs})$ ,  $\gamma_1(\text{GaAs})$  e  $\gamma_2(\text{GaAs})$  são os parâmetros de Luttinger associados aos materiais InP, GaP, InAs e GaAs, respectivamente, dados nas Tabelas 2.1 e 2.4.

Tabela 2.4: Parâmetros do InP e do GaP [36].

	$E_g$ (eV)	$a_0$ (Å)	$m_e$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
InP	1.34	5.8687	0.077	5.06	1.637
GaP	2.78	5.4505	0.33	4.05	1.10

### 2.3.3 Potencial

O potencial de confinamento nesse poço é calculado da mesma forma que na Seção anterior, onde os *band-off-set* de condução e de valência do InGaAsP são dados na Tabela 2.5. Então, usando as Eqs. (2.8) e (2.9), mas agora considerando que o *gap* do poço depende de  $\chi_1(z)$  e  $\chi_2(z)$ , temos

$$V_e = Q_c(E_g(0) - E_g(\chi_1(z), \chi_2(z))), \quad (2.25)$$

$$V_h = Q_v(E_g(0) - E_g(\chi_1(z), \chi_2(z))), \quad (2.26)$$

onde novamente,  $E_g(0)$  é o *gap* do material da barreira, InP neste caso, dado na Tabela 2.4 e  $E_g(\chi_1(z), \chi_2(z))$  é o *gap* do material do poço e é dado por [36]

$$\begin{aligned} E_g(\chi_1(z), \chi_2(z)) = \\ \frac{\chi_1(1-\chi_1)[(1-\chi_2)E1g + \chi_2(E2g)] + \chi_2(1-\chi_2)[(1-\chi_1)E3g + \chi_1(E4g)]}{\chi_1(1-\chi_1) + \chi_2(1-\chi_2)}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde  $E_{1g}$ ,  $E_{2g}$ ,  $E_{3g}$  e  $E_{4g}$  são funções dos *gaps* dos materiais InP, GaP, InAs e GaAs e das frações molares  $\chi_1(z)$  e  $\chi_2(z)$ , dadas por [36]

$$\begin{aligned}
 E_{1g} &= E_g(\text{InP}) + 0.654(1 - \chi_1(z)) + 0.786(1 - \chi_1(z))^2, \\
 E_{2g} &= E_g(\text{InAs}) + 0.514(1 - \chi_1(z)) + 0.555(1 - \chi_1(z))^2, \\
 E_{3g} &= E_g(\text{GaP}) - 1.503\chi_2(z) + 0.146(\chi_2(z))^2, \\
 E_{4g} &= E_g(\text{InP}) - 1.077\chi_2(z) + 0.091(\chi_2(z))^2,
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

sendo que  $E_g(\text{InP})$ ,  $E_g(\text{InAs})$ ,  $E_g(\text{GaP})$  e  $E_g(\text{GaAs})$  são os *gaps* dos materiais InP, InAs, GaP e GaAs, respectivamente, dados nas Tabelas 2.1 e 2.4.

Tabela 2.5: Band-off-set da liga InGaAsP [36].

	$Q_c$	$Q_v$
InGaAsP	0.62	$1 - Q_c = 0.38$

## 2.4 Energia de Ligação

Quando um elétron na banda de condução interage com um buraco na banda de valência chamamos esse par de *exciton*. Quando o elétron volta para a banda de valência, ocupando um buraco, o *exciton* deixa de existir. Ao fazer isso, o sistema, elétron-buraco, emite uma energia, chamada de energia do *exciton*. Essa energia, como veremos, é a soma das energias dos portadores com o *gap* menos a energia que o par gastou para permanecer ligado, chamada de energia de ligação.

Podemos usar a equação de Schrödinger para descrever o par elétron-buraco

$$H_{exc}\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_{exc}\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \tag{2.29}$$

onde  $H_{exc}$  é o Hamiltoniano do exciton e  $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$  é a função de onda do par, que depende das coordenadas do elétron e do buraco.

Para o poço quântico, o Hamiltoniano pode ser separado na direção  $z$ , de confinamento, e no plano  $xy$  e a Eq. (2.29) pode ser escrita como

$$\left[ E_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^{\parallel}} \nabla_{e,2D}^2 - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz_e} \left( \frac{1}{m_e^{\perp}} \frac{d}{dz_e} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_h^{\parallel}} \nabla_{h,2D}^2 - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz_h} \left( \frac{1}{m_h^{\perp}} \frac{d}{dz_h} \right) + V_e(z_e) + V_h(z_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{(\rho_e - \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} \right]_{exc} \Psi = E_{exc} \Psi. \quad (2.30)$$

O primeiro termo do lado esquerdo dessa equação é o *gap* do poço quântico; os termos de derivadas são as energias cinéticas do elétron e dos buracos;  $V_e$  e  $V_h$  são os potenciais de confinamento; o último termo do lado esquerdo dessa equação é a interação coulombiana entre o elétron e o buraco;  $m_i^{\perp}$  é a massa efetiva do portador  $i$ , onde  $i=e, h$  ( $h=lh, hh$ ), que depende da direção  $z$ ;  $m_i^{\parallel}$  é a massa efetiva no plano  $xy$ ;  $\nabla_{i,2D}^2$  é o Laplaciano em coordenadas polares aplicado nas coordenadas do portador  $i$ , dado por:

$$\nabla_{i,2D}^2 = \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left( \rho_i \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) + \frac{1}{\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2}. \quad (2.31)$$

Usando os termos que dependem de  $z_i$ , podemos definir o Hamiltoniano de confinamento do portador  $i$  como

$$H_i(z_i) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz_i} \left( \frac{1}{m_i^{\perp}} \frac{d}{dz_i} \right) + V_i(z_i). \quad (2.32)$$

Então, podemos reecreer a Eq. (2.30) como

$$\left[ E_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^{\parallel}} \nabla_{e,2D}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^{\parallel}} \nabla_{h,2D}^2 + H_e(z_e) + H_h(z_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{(\rho_e - \rho_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} \right]_{exc} \Psi = E_{exc} \Psi. \quad (2.33)$$

Os termos com Laplaciano representam o elétron e o buraco se movimentando em um plano. Podemos usar coordenadas relativas e do centro de massa do sistema para diminuir o número de coordenadas, ficando com

$$\left[ E_g - \frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \nabla_{\parallel}^2 + H_e(z_e) + H_h(z_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right]_{exc} \Psi = E_{exc} \Psi, \quad (2.34)$$

onde

$$\nabla_{\parallel}^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \quad (2.35)$$

e

$$\mu_{e-h} = \frac{m_e^{\parallel} m_h^{\parallel}}{m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}}, \quad (2.36)$$

é a massa reduzida.

Definimos, agora, o Hamiltoniano da energia de ligação como sendo a soma do termo do Laplaciano com o termo coulombiano

$$H_B = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \nabla_{\parallel}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}. \quad (2.37)$$

Podemos, então, escrever o Hamiltoniano do *exciton* como sendo a soma dos Hamiltonianos do elétron, do buraco e da energia de ligação

$$H_{exc}(z_e, z_h, \rho, \theta) = H_e(z_e) + H_h(z_h) + H_B(z_e, z_h, \rho, \theta), \quad (2.38)$$

onde ocultamos  $E_g$ , por enquanto, pois é uma constante.

$\epsilon_0$ , no termo coulombiano, é a permissividade do vácuo, e  $\epsilon$  é a constante dielétrica do poço. Da mesma maneira que fizemos para a massa, vamos supor que a constante dielétrica do poço depende da fração molar  $x$ , dado por

$$\epsilon(x) = x\epsilon_p + (1-x)\epsilon_b, \quad (2.39)$$

onde  $\epsilon_p$  e  $\epsilon_b$  são as constantes dielétricas do poço e da barreira, respectivamente. Os valores das constantes dielétricas dos materiais binários estão na Tabela 2.6, em termos de  $\epsilon_0$ .

Tabela 2.6: Constantes dielétricas do InAs, GaAs, InP e GaP [36, 40].

	InAs	GaAs	InP	GaP
$\epsilon (\epsilon_0)$	14.55	12.91	12.35	11.1

Agora, para a solução da equação de Schrödinger (Eq. (2.29)), supomos a função de onda do *exciton*, para o estado fundamental, na seguinte forma [42]

$$\Psi(z_e, z_h, \rho) = \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) \phi(\rho, z_e - z_h). \quad (2.40)$$

Para a solução da Eq. (2.29) e obtenção da energia do *exciton*,  $E_{exc}$ , vamos usar, para o poço quântico, três métodos diferente de cálculo. São eles:

**2.4.1** Método do potencial efetivo,

**2.4.2** Método variacional com um parâmetro,

**2.4.3** Método variacional com dois parâmetros.

### 2.4.1 Método do Potencial Efetivo

Neste método, proposto por Ji-Wei Wu [42], a função de onda  $\phi$  é uma função somente de  $\rho$ . O método tem como objetivo encontrar a energia de ligação sem precisar conhecer  $\phi(\rho)$ . O desenrolar dos cálculos leva-nos a uma equação do tipo Schrödinger, na coordenada  $\rho$ .

Usando a notação de Dirac<sup>2</sup>, podemos reescrever a equação de Schrödinger na forma

$$H_{exc}|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = E_{exc}|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle. \quad (2.41)$$

Aplicando o operador  $\langle\varphi_e, \varphi_h|$  pelo lado esquerdo dessa equação, temos

$$\begin{aligned} \langle\varphi_e, \varphi_h|H_{exc}|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle &= \langle\varphi_e, \varphi_h|(H_e + H_h + H_B)|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle \\ &= \langle\varphi_e, \varphi_h|H_e|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle + \langle\varphi_e, \varphi_h|H_h|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle \\ &+ \langle\varphi_e, \varphi_h|H_B|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = \langle\varphi_e, \varphi_h|E_{exc}|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Como  $H_e$  opera somente em  $|\varphi_e\rangle$  e  $H_h$  opera somente em  $|\varphi_h\rangle$ , então

$$\langle\varphi_e, \varphi_h|H_e|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = \langle\varphi_h||\varphi_h\rangle\langle\varphi_e|H_e|\varphi_e, \phi\rangle = \langle\varphi_e|H_e|\varphi_e\rangle|\phi\rangle = E_e|\phi\rangle, \quad (2.43)$$

<sup>2</sup>Uma consulta detalhada dessa notação pode ser feita na referência [9].

$$\langle \varphi_e, \varphi_h | H_h | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \langle \varphi_e | | \varphi_e \rangle \langle \varphi_h | H_h | \varphi_h, \phi \rangle = \langle \varphi_h | H_h | \varphi_h \rangle | \phi \rangle = E_h | \phi \rangle, \quad (2.44)$$

pois  $|\varphi_e\rangle$  e  $|\varphi_h\rangle$  são normalizados, ou seja,  $\langle \varphi_e | | \varphi_e \rangle = \langle \varphi_h | | \varphi_h \rangle = 1$ , e estamos considerando que  $|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = |\varphi_e\rangle |\varphi_h\rangle | \phi \rangle$ .

As equações  $\langle \varphi_e | H_e | \varphi_e \rangle = E_e$  e  $\langle \varphi_h | H_h | \varphi_h \rangle = E_h$  são resolvidas numericamente pela discretização da equação de Schrödinger (ver Apêndice A).

Temos agora que calcular  $\langle \varphi_e, \varphi_h | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle$ , onde  $H_B$  é dado por (ver Eq. (2.37))

$$H_B = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (2.45)$$

onde omitimos o termo da derivada em  $\theta$  pois  $|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle$  não depende de  $\theta$ .

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right] | \phi \rangle \\ &\quad - \langle \varphi_e, \varphi_h | \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right) | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.46)$$

O último termo do lado direito dessa equação pode ser calculada como

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h | \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right) | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_h (\varphi_e \varphi_h)^* \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right) \varphi_e \varphi_h | \phi \rangle &= \\ \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_e|^2 dz_e \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_h|^2 dz_h \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (2.47)$$

onde  $(\varphi_e \varphi_h)^*$  é o complexo conjugado de  $\varphi_e \varphi_h$ .

Finalmente chegamos ao seguinte resultado

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right] | \phi \rangle \\ &\quad - \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_e|^2 dz_e \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_h|^2 dz_h \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}}_{\text{potencial efetivo}} | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Essa é uma equação do tipo Schrödinger, portanto  $\langle \varphi_e, \varphi_h | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = -|E_B| | \phi \rangle$ .

O sinal negativo do módulo de  $E_B$  é apenas para garantir que essa energia seja perdida

pelo sistema elétron-buraco. Usando as Eqs. (2.43), (2.44), e (2.48), podemos calcular a energia do *exciton*

$$E_{exc}|\phi\rangle = (E_g + E_e + E_h - |E_B|)|\phi\rangle, \quad (2.49)$$

onde colocamos de volta a constante  $E_g$ .

Para resolver a integral da Eq. (2.48) usamos uma técnica de discretização semelhante à usada anteriormente com o elétron e o buraco no eixo  $z$ , com a diferença de que a derivada está em coordenadas polares [43], e o último termo da última equação é chamado de potencial efetivo, que dá o nome a esse método.

### 2.4.2 Método Variacional com um Parâmetro

Este método consiste em usar uma função tentativa para descrever  $\phi$ . Para isso, vamos usar uma função análoga ao estado fundamental do átomo de hidrogênio, mas com a diferença que usamos aqui uma coordenada no plano  $\rho$

$$\phi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi\lambda^2}} \exp\left(-\frac{\rho}{\lambda}\right). \quad (2.50)$$

Essa é uma função de onda semelhante a do átomo de hidrogênio no estado fundamental. Como nosso sistema está confinado, esperamos que  $\lambda$ , que é equivalente ao raio de Bohr, tenha um valor diferente. Portanto, esse será o parâmetro que usaremos para minimizar a energia do exciton.

Conhecendo  $\varphi_e(z_e)$ ,  $\varphi_h(z_h)$  e  $\phi(\rho)$  podemos multiplicar a equação de Schrödinger (Eq. (2.31)) pelo operador  $\langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|$ , e usando a Eq. (2.38), temos

$$\begin{aligned} \langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_{exc}|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle &= \langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_e|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle + \\ \langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_h|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle &+ \langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_B|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = E_{exc}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde

$$\langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_e|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = \langle\varphi_h, \phi|\varphi_h, \phi\rangle\langle\varphi_e|H_e|\varphi_e\rangle = E_e, \quad (2.52)$$

$$\langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_h|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = \langle\varphi_e, \phi|\varphi_e, \phi\rangle\langle\varphi_h|H_h|\varphi_h\rangle = E_h, \quad (2.53)$$

$$\langle\varphi_e, \varphi_h, \phi|H_B|\varphi_e, \varphi_h, \phi\rangle = -|E_B|, \quad (2.54)$$

pois estamos considerando  $\varphi_e(z_e)$ ,  $\varphi_h(z_h)$  e  $\phi(\rho)$  normalizados. Novamente, o sinal negativo do módulo de  $E_B$  é apenas para indicar que a energia de ligação é perdida pelo sistema elétron-buraco.

Para calcular a Eq. (2.54) vamos substituir  $H_B$ , dada na Eq. (2.37). Teremos então a equação

$$\begin{aligned}
-|E_B| &= \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \\
&\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \\
&\langle \phi | \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right] | \phi \rangle \\
&- \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | \left[ \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle. \tag{2.55}
\end{aligned}$$

Substituindo  $\phi(\rho)$  da Eq. (2.50), podemos calcular analiticamente essa equação, onde o primeiro termo do lado direito dessa equação dá  $-\hbar^2/2\lambda^2$ , e com o segundo termo chegamos a uma integral tripla

$$\begin{aligned}
-|E_B| &= \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\lambda^2} \\
&- \frac{e^2}{\pi\epsilon\epsilon_0\lambda^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_e|^2 dz_e \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_h|^2 dz_h \int_0^{+\infty} \frac{\exp(-2\rho/\lambda)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \rho d\rho, \tag{2.56}
\end{aligned}$$

Podemos reescrever essa última integral, em  $\rho$ , em termos de funções analíticas, portanto

$$\begin{aligned}
-|E_B| &= \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\lambda^2} \\
&- \frac{e^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_e|^2 dz_e \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_h|^2 dz_h G(z_e - z_h), \tag{2.57}
\end{aligned}$$

onde  $G(z_e - z_h)$  é dado por [44]

$$\begin{aligned}
G(z_e - z_h) &= \frac{2}{\lambda} \int_0^{+\infty} \frac{\exp(-2\rho\lambda)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \rho d\rho = \\
&\frac{2|z_e - z_h|}{\lambda} \left\{ \frac{2}{\pi} \left[ \mathbf{H}_1 \left( \frac{2|z_e - z_h|}{\lambda} \right) - \mathbf{N}_1 \left( \frac{2|z_e - z_h|}{\lambda} \right) \right] - 1 \right\}, \tag{2.58}
\end{aligned}$$

onde  $\lambda$  será o parâmetro de minimização da energia do exciton.  $\mathbf{H}_1$  é a função de primeira ordem de Struve e  $\mathbf{N}_1$  é a função de primeira ordem da função de Neumann

ou função de Bessel do segundo tipo. A energia de ligação é calculada variacionalmente através da solução numérica da Eq. (2.57).

### 2.4.3 Método Variacional com dois Parâmetros

Retornando à Eq. (2.40), onde a função de onda do *exciton* é separada em três outras funções [45].

$$\Psi(z_e, z_h, r) = \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) \phi(\rho, z_e - z_h), \quad (2.59)$$

onde

$$r = [\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}. \quad (2.60)$$

O que faremos é, basicamente, o mesmo procedimento da Subseção anterior. Usaremos uma função para representar  $\phi$  que, como antes, depende de parâmetros para minimizar a energia do *exciton*

$$\phi(r) = N \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right), \quad (2.61)$$

onde  $N$  é o fator de normalização e  $\lambda$  é um parâmetro variacional. Mas aqui, vamos usar uma interpolação no limite de 2D e 3D [45], multiplicando  $(z_e - z_h)^2$  por uma constante adimensional  $\xi^2$

$$r' = (\rho^2 + \xi^2 a^2)^{1/2}, \quad (2.62)$$

que agora chamaremos de  $r'$ , onde  $\xi^2$  pode assumir valores entre 0 à 1, e

$$a = |z_e - z_h|, \quad (2.63)$$

ou seja, colocamos um peso na coordenada  $z$ , que será o segundo parâmetro variacional.

A função  $\phi$ , portanto, ficará dependente de dois parâmetros,  $\rho$  e  $\xi$

$$\phi(r') = N \exp\left(-\frac{r'}{\lambda}\right) = N \exp\left[-\frac{(\rho^2 + \xi^2 a^2)^{1/2}}{\lambda}\right]. \quad (2.64)$$

A energia do exciton é dada por

$$E_{exc} = \frac{\langle \Psi | H_{exc} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (2.65)$$

Chamaremos de  $D$  o produto escalar de  $\Psi$ , portanto

$$D = \langle \Psi | \Psi \rangle = 2\pi \int |\varphi_e(z_e)|^2 |\varphi_h(z_h)|^2 |\phi|^2 \rho d\rho dz_e dz_h, \quad (2.66)$$

e a integral no plano vamos chamar de uma função  $F(a)$

$$2\pi \int_0^\infty |\phi|^2 \rho d\rho = F(a), \quad (2.67)$$

onde com um pouco de reflexão pode ser mostrado que

$$D = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty |\varphi_e(z_e)|^2 |\varphi_h(z_h)|^2 F(a) [\delta(z_e - z_h - a) - \delta(z_h - z_e - a)] dz_e dz_h da, \quad (2.68)$$

sendo a integral de 0 à  $\infty$  integrada em  $a$ , pois  $a$  é o valor absoluto da diferença entre  $z_e$  e  $z_h$ . Portanto,  $a$  só poderá assumir dois valores:  $a = z_e - z_h$  ou  $a = z_h - z_e$ , daí os deltas que aparecem na equação anterior.

Excutando primeiro a integral em  $z_h$ , o primeiro termo só tem valor diferente de zero quando  $z_h = z_e - a$ , e o segundo termo quando  $z_h = z_e + a$ , então

$$\begin{aligned} D &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty |\varphi_e(z_e)|^2 |\varphi_h(z_e - a)|^2 F(a) dz_e da \\ &+ \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty |\varphi_e(z_e)|^2 |\varphi_h(z_e + a)|^2 F(a) dz_e da. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Fazendo  $z = z_e - a$  no primeiro termo, ficamos com

$$D = \int_0^\infty p(a) f(a) da, \quad (2.70)$$

onde

$$p(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} [|\varphi_e(z+a)|^2 |\varphi_h(z)|^2 + |\varphi_h(z+a)|^2 |\varphi_e(z)|^2] dz, \quad (2.71)$$

onde  $p(a)$  é a probabilidade de encontrar o elétron e o buraco a uma distância  $a$ .

Agora, temos que calcular  $\langle \Psi | H_{exc} | \Psi \rangle$ , da Eq. (2.41) temos

$$\langle \Psi | H_{exc} | \Psi \rangle = \langle \Psi | H_e | \Psi \rangle + \langle \Psi | H_h | \Psi \rangle + \langle \Psi | H_B | \Psi \rangle = A + B + C, \quad (2.72)$$

onde podemos escrever  $A$  como [45, 46]

$$A = E_e D + \frac{\hbar^2}{2m_e} \int_0^\infty p(a) G(a) da, \quad (2.73)$$

com

$$G(a) = 2\pi \int_0^{+\infty} \left| \frac{\partial \phi}{\partial z_e} \right|^2 \rho d\rho. \quad (2.74)$$

Encontramos uma expressão analoga para  $B$ , simplesmente trocando o índice  $e$  por  $h$ . O valor de  $C$  é dado por [45, 46]

$$C = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty p(a) J(a) da - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_0^\infty p(a) K(a) da, \quad (2.75)$$

onde

$$J(a) = 2\pi \int_0^{+\infty} \phi \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] \phi \rho d\rho, \quad (2.76)$$

$$K(a) = 2\pi \int_0^{+\infty} \frac{1}{r} \phi^2 \rho d\rho. \quad (2.77)$$

A energia do *exciton*, usando as Eqs. (2.67), (2.68) e (2.74), portanto, será

$$E_{exc} = \frac{A + B + C}{D}. \quad (2.78)$$

## 2.5 Resultados

Calculamos a energia do estado fundamental do *exciton*, *e-lh* e *e-hh*, em poços  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  e  $(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})_v(\text{InP})_{1-v}/\text{InP}$ , onde usamos as frações molares  $x=0.4$  na liga ternária,  $w=0.4$  e  $v=0.85$  (satisfazendo  $w=0.47v$ ) na liga quartenária. Observamos a influência da largura do poço,  $L$ , e da espessura de sua interface,  $w$ . A partir daí, mostraremos os resultados obtidos na liga  $\text{InGaAs}$  com e sem *strain*, e em seguida na liga  $\text{InGaAsP}$  sem *strain*. Usaremos em ambas as ligas  $\alpha=1$ , que indica o posicionamento da interface em relação ao poço abrupto, como dito no Capítulo 1. No final dos resultados de cada liga, mostraremos a diferença de energia, em relação ao caso abrupto, em função da interface, e do parâmetro,  $\alpha$ .

Na Fig. 2.3, mostramos o valor absoluto da energia de ligação dos pares de *excitons*, *e-lh* e *e-hh*, como função da largura do poço quântico com *strain* (à direita) e sem *strain* (à esquerda), com  $\alpha=1$  e  $w=0, 10 \text{ \AA}$ , usando os métodos potencial efetivo e variacional com um e dois parâmetros. Primeiro, note que o comportamento da energia de ligação em todos os métodos é o mesmo e, como esperado, a energia de ligação aumenta para poços estreitos e diminui para poços largos. Também observamos que o potencial efetivo superestima a energia de ligação quando comparado com os métodos variacionais. Nos resultados seguintes do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  usaremos o método variacional com dois parâmetros, porque supomos que este descreve melhor os resultados devido a tridimensionalidade da função  $\phi$ . O efeito das interfaces graduais é mais significativo na região abaixo de  $30 \text{ \AA}$ . De fato, não esperamos influência das interface para poços largos. A energia de ligação do poço quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ , mesmo considerando os três métodos usados, é na faixa de 3 a 7 meV, e a influência do *strain* é desprezível.

A Fig. 2.4 apresenta a energia dos *excitons* *e-lh* e *e-hh* em função da largura do poço quântico com *strain* (à direita) e sem *strain* (à esquerda), com duas espessuras de interfaces  $w=0, 10 \text{ \AA}$ , sendo  $\alpha=1$ . No resultado sem *strain*, percebemos um leve aumento da energia do *exciton* *e-lh* em comparação com *e-hh*. No resultado com *strain*

essa diferença se torna bem maior. O strain afeta mais o exciton  $e-h$ , aumentando sua energia. Os resultados aparecem todos na faixa do infravermelho, como é esperado para esse material. No *inset* mostramos a influência da interface de  $10 \text{ \AA}$  na energia do exciton em comparação com o poço abrupto em função da largura do poço (diferença da linha vermelha pela preta). A diferença é maior para poços estreitos, como esperado, e pode chegar a 100 (70) meV para um poço de  $30 \text{ \AA}$  sem (com) *strain*.

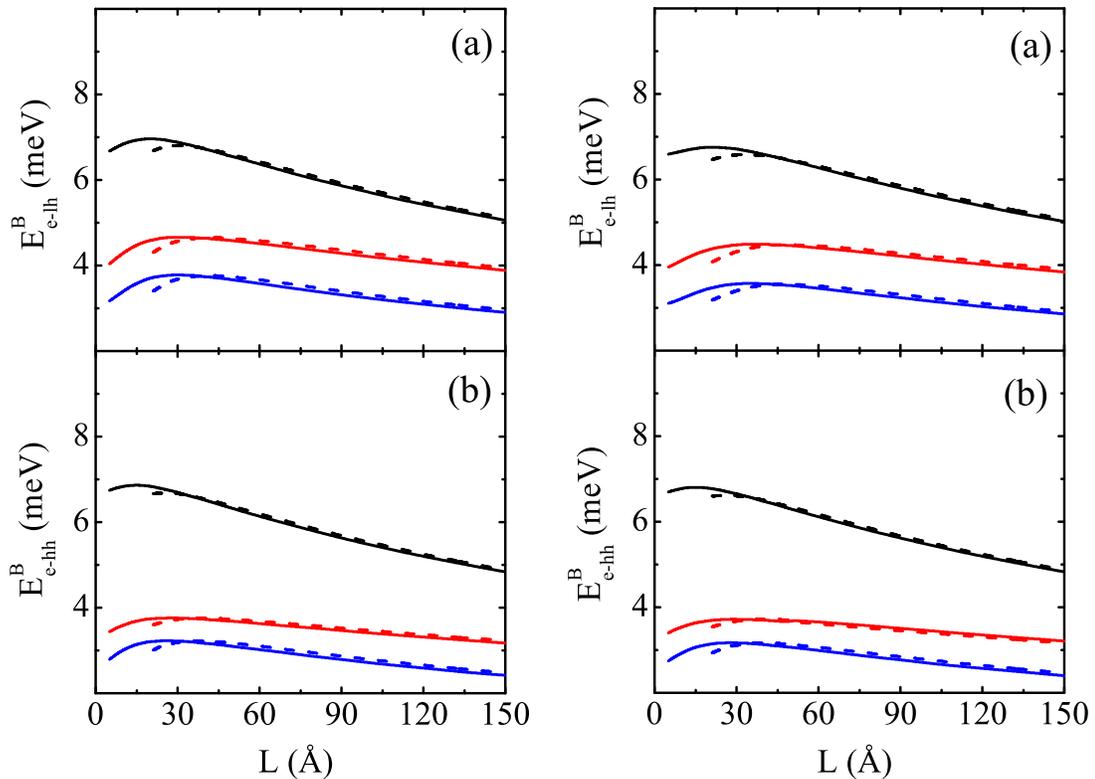


Figura 2.3: Energia de ligação do *exciton*  $e-h$  (a) e  $e-hh$  (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* (à esquerda) e com *strain* (à direita), para uma interface abrupta (linhas sólidas) e de  $10 \text{ \AA}$  (linhas tracejadas), usando os métodos potencial efetivo (linhas pretas), variacional com um parâmetro (linhas vermelhas) e com dois parâmetros (linhas azuis), com  $\alpha = 1$ .

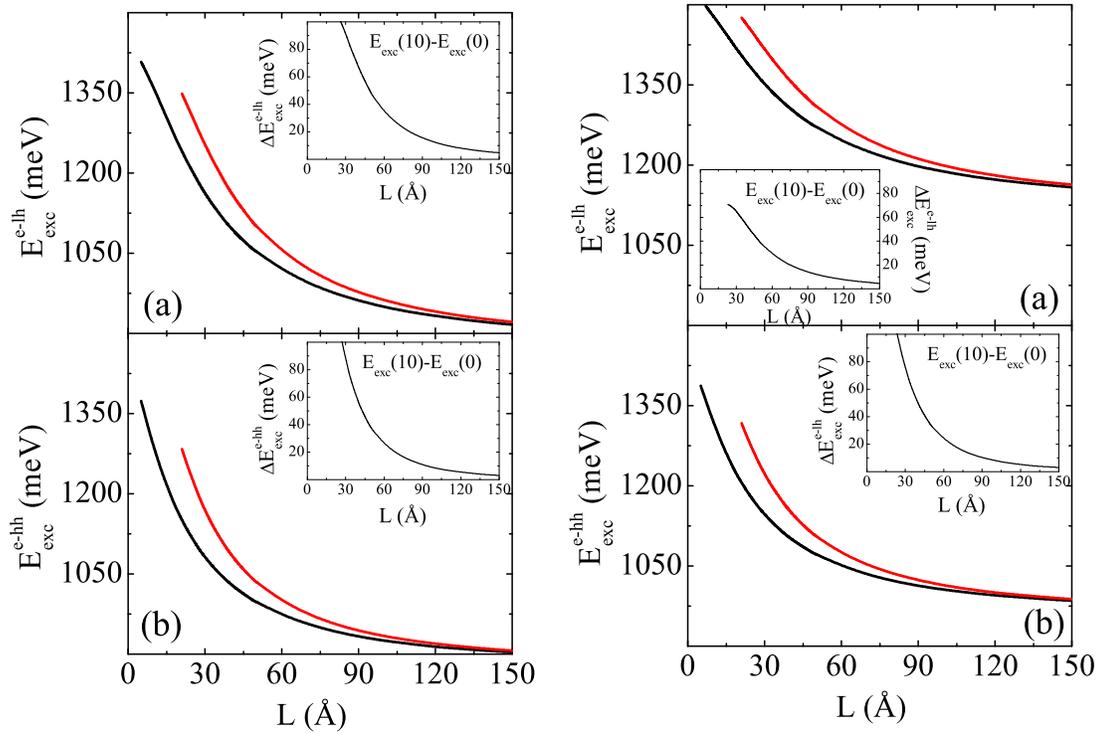


Figura 2.4: Energia do *exciton*  $e-lh$  (a) e  $e-hh$  (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* (à esquerda) e com *strain* (à direita) com interface abrupta (linhas pretas) e de  $10 \text{ \AA}$  (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ . No *inset*, a subtração da energia do *exciton* no poço com  $w=10 \text{ \AA}$  pela energia de um poço abrupto.

Na Fig. 2.5, apresentamos a energia do *exciton*  $e-lh$  e  $e-hh$  em função da espessura da interface do poço quântico com *strain* (à direita) e sem *strain* (à esquerda), com  $\alpha=1$ , para dois poços de tamanho distintos ( $L=50, 100 \text{ \AA}$ ). Em ambos os casos a energia aumenta com o alargamento da interface, e isto é mais significativo para poços estreitos. Novamente, percebemos que, no resultado sem *strain*, a energia do  $e-lh$  é um pouco maior que a do  $e-hh$ , e que essa diferença é maior ao consideramos o *strain*. Também nessa figura o *strain* afeta mais o *exciton*  $e-lh$ , aumentando sua energia, do que o  $e-hh$ . No *inset* mostramos a influência da interface  $w$  na energia do *exciton*, tanto para um poço de  $50 \text{ \AA}$  (linhas pretas) quanto para um de  $100 \text{ \AA}$  (linhas vermelhas),

em comparação com o poço abrupto. Como é esperado, quanto maior  $w$  maior será sua influência sobre a energia, que pode chegar a 80 (60) meV em um poço de 50 Å sem (com) *strain* e interface de 16 Å.

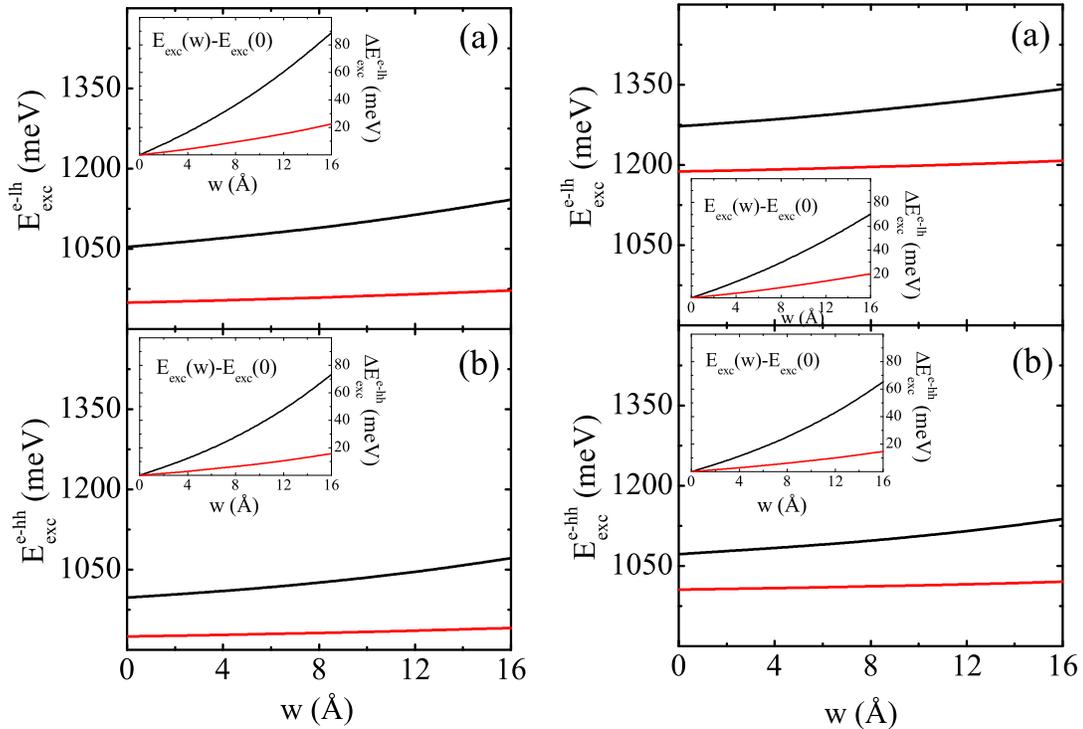


Figura 2.5: Energia do *exciton*  $e-lh$  (a) e  $e-hh$  (b) no estado fundamental em função da espessura das interfaces do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* (à esquerda) e com *strain* (à direita) com largura de 50 Å (linhas pretas) e de 100 Å (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ . No *inset*, a variação da energia de um poço com espessura  $w$  em relação ao caso abrupto.

A Fig. 2.6 mostra as linhas isoenergéticas ao variarmos a interface ( $w$ ) e o alfa ( $\alpha$ ) para o estado fundamental de energia do *exciton*  $e-lh$  e  $e-hh$  de um poço quântico de 50 Å. Cada número representa uma linha isoenergética e é relacionado com a diferença de energia (em meV) em relação ao perfil abrupto do poço. A posição da interface com respeito ao poço abrupto muda drasticamente a energia do *exciton*. É observado que o posicionamento da interface produz um deslocamento, relacionado ao pico da

energia de fotoluminescência, para o azul (valores positivos) e para o vermelho (valores negativos). A variação da energia do *exciton* pode chegar a 74 meV para *e-lh* e 63 meV para *e-hh*.

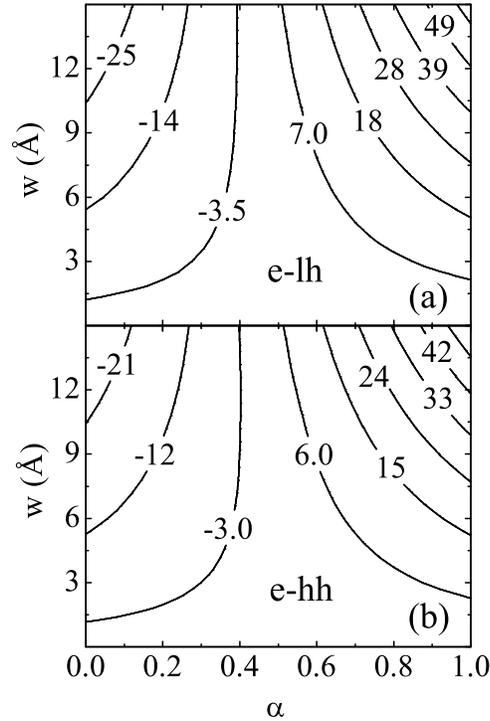


Figura 2.6: Diagrama interface-alfa ( $w$ - $\alpha$ ) da energia do *exciton* *e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental de um poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  de  $50 \text{ \AA}$  com *strain*. Os números nas linhas isoenergéticas (em meV) indicam a energia do *exciton* relativa ao poço abrupto.

Nas Figs. 2.7, 2.8, 2.9 e 2.10 mostramos os resultados obtidos com a liga quaternária  $\text{InGaAsP}$ . Na Fig. 2.7, temos o valor absoluto da energia de ligação dos *excitons* *e-lh* e *e-hh*, em função da largura do poço quântico  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$ , onde usamos a relação  $w=0,47v$  para desprezar o *strain*, com  $\alpha=1$  e  $w=0, 10 \text{ \AA}$ , usando os métodos potencial efetivo e variacional com um e dois parâmetros. O comportamento é semelhante ao encontrado com a liga ternária e, como esperado, essa aumenta para poços estreitos e diminui para poços largos. O efeito das interfaces graduais continua significativo mesmo para poços largos, mas, como é de esperar, diminui com o aumento da

largura do poço. A energia de ligação do poço quântico  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$ , mesmo considerando os três métodos usados, varia de 4 a 9 meV, portanto um pouco maior que a do  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ . Nos resultados seguintes usaremos o método variacional com dois parâmetros

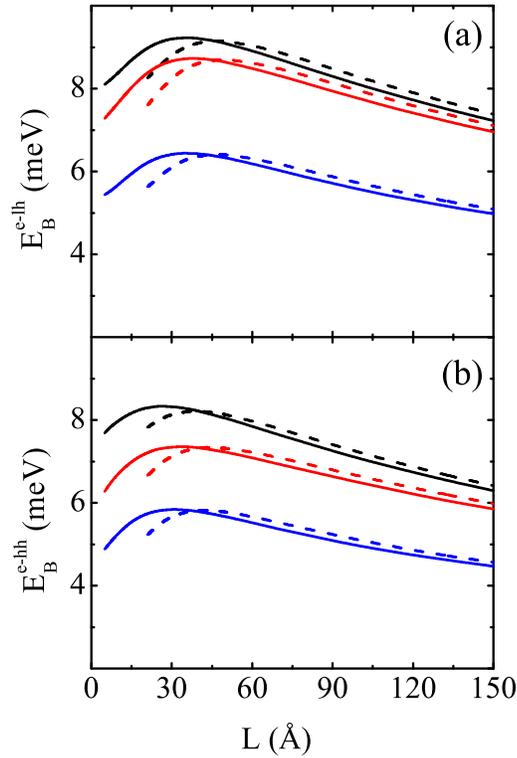


Figura 2.7: Energia de ligação do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, para uma interface abrupta (linhas sólidas) e de 10 Å (linhas tracejadas), usando os métodos potencial efetivo (linhas pretas), variacional com um parâmetro (linhas vermelhas) e com dois parâmetros (linhas azuis), com  $\alpha = 1$ .

A Fig. 2.8 apresenta a energia do *exciton e-lh* e *e-hh* em função da largura do poço quântico  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, com duas espessuras de interfaces ( $w=0, 10$  Å), sendo  $\alpha=1$ . Os resultados mostram-se todos na faixa do infravermelho, como no caso do  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ . No *inset* mostramos a influência da interface de 10 Å na energia do *exciton* em comparação com o poço abrupto como função da

largura do poço. Percebemos que esse material sofre menor influência da interface que o  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ . A diferença é maior para poços estreitos, como esperado, e pode chegar a 50 meV para um poço de 30 Å.

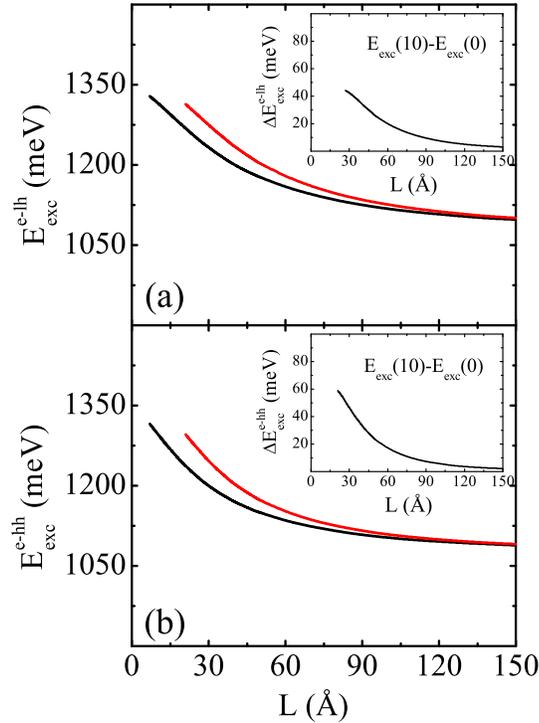


Figura 2.8: Energia do *exciton* *e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da largura do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, com interface abrupta (linhas pretas) e de 10 Å (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a subtração da energia do *exciton* em um poço com interface de 10 Å, pela energia de um poço abrupto.

Na Fig. 2.9, apresentamos a energia do *exciton* *e-lh* e *e-hh* em função da espessura da interface do poço quântico  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain* e com  $\alpha=1$ , para dois poços de larguras diferentes ( $L=50, 100$  Å). Em ambos os casos a energia aumenta com o alargamento da interface, sendo mais significativo para poços estreitos. Novamente, percebemos que a energia do *e-lh* é um pouco maior que a do *e-hh*. No *inset*, mostramos a influência da interface  $w$  na energia do *exciton*, em poços de 50

$\text{\AA}$  (linhas pretas) e  $100 \text{\AA}$  (linhas vermelhas), em comparação com o poço abrupto. Como é esperado, quanto maior  $w$  maior é a influência, que passa de  $40 \text{ meV}$  em um poço de  $50 \text{\AA}$  com interface de  $16 \text{\AA}$ .

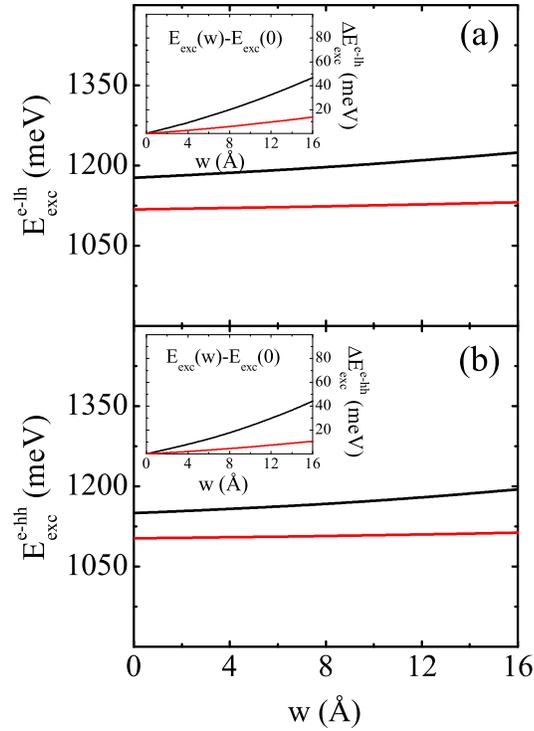


Figura 2.9: Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da espessura das interfaces do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain*, com largura de  $50 \text{\AA}$  (linhas pretas) e de  $100 \text{\AA}$  (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a variação da energia de um poço com espessura  $w$  em relação ao caso abrupto.

A Fig. 2.10 mostra as linhas isoenergéticas quando variamos a interface ( $w$ ) e o alfa ( $\alpha$ ) para o estado fundamental de energia do *exciton e-lh* e *e-hh* de um poço quântico  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  de largura igual a  $50 \text{\AA}$ , sem *strain*. Cada número representando uma linha isoenergética é relacionado com a diferença de energia (em meV) em relação ao seu perfil abrupto. A posição da interface com respeito ao poço abrupto muda drasticamente a energia do *exciton*. Da mesma forma que no caso do  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ , é observado que o posicionamento da interface produz um deslocamento

relacionado ao pico da energia de fotoluminescência para o azul (valores positivos) e para o vermelho (valores negativos). A variação da energia pode chegar a 46 meV para o *exciton e-lh* e 40 meV para o *e-hh*.

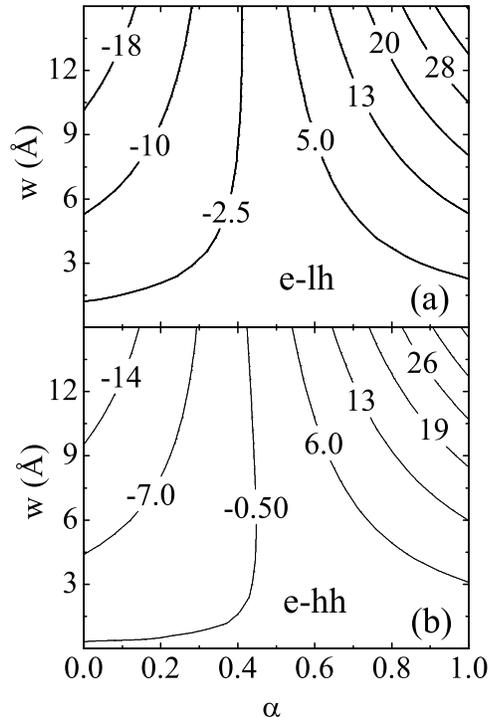


Figura 2.10: Diagrama interface-alfa ( $w$ - $\alpha$ ) da energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental de um poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  de 50 Å sem *strain*. Os números nas linhas isoenergética (em meV) indicam a energia do exciton relativa ao poço abrupto.

Na Fig. 2.11, apresentamos a energia do *exciton e-lh* e *e-hh* no estado fundamental em função da divisão das interfaces,  $w_2/w_1$ , do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com *strain* (à esquerda) e do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain* (à direita) com largura de 50 Å (linhas pretas) e de 100 Å (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ .  $w_1$  é mantido constante e igual a 5 Å, enquanto  $w_2$  varia de 5 à 15 Å. Em ambos os casos a energia aumenta com o alargamento de  $w_2$ , e isto é mais significativo para poços de 50 Å.

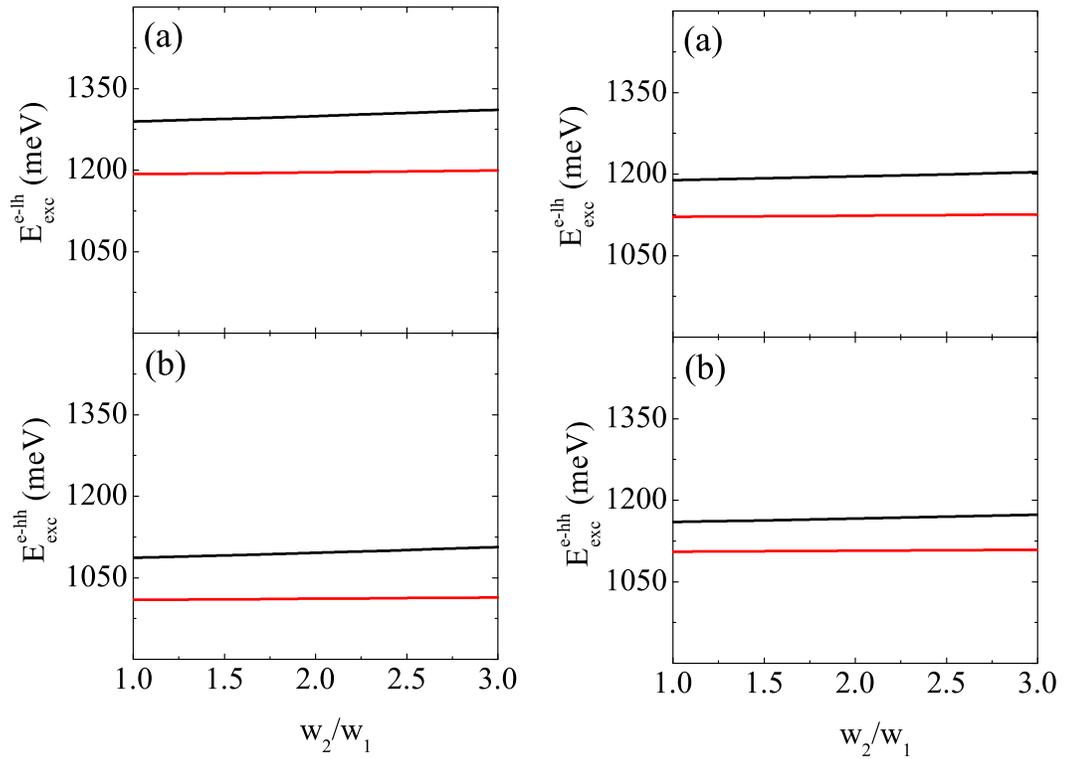


Figura 2.11: Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da divisão das interfaces,  $w_2/w_1$ , do poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com *strain* (à esquerda) e do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  sem *strain* (à direita) com largura de 50 Å (linhas pretas) e de 100 Å (linhas vermelhas), com  $\alpha = 1$ .  $w_1$  é mantido à 5 Å e  $w_2$  varia de 5 à 15 Å.

# 3

---

## Fios Quânticos

Fios Quânticos são estruturas nas quais um certo material é envolto por outro material com *gap* maior, mas que possui uma direção livre, formando assim um fio, ou tubo, para um portador de carga. A esse tipo de confinamento chamamos de 1D. O potencial de confinamento,  $V$ , de um fio quântico, portanto, é bidimensional (ver Fig. 3.1(a)) e nós consideraremos, neste trabalho, que esse potencial só depende de  $\rho$ . Ou seja, estamos considerando que o fio foi crescido de maneira simétrica ao seu eixo sem confinamento.

Neste Capítulo trabalharemos com o fio  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , onde  $x$  é a fração molar do Índio. Sabemos do Capítulo anterior, que essa liga não pode ser crescida sem a presença de *strain*, mas neste trabalho sobre fio vamos fazer um estudo aproximado e não consideraremos o *strain*.

Assim como no poço quântico, seguiremos um modelo proposto por Adachi [37, 38], no qual, estimamos um dado parâmetro físico de um material ternário pela interpolação dos parâmetros dos materiais binários e da fração molar. Novamente, vamos autoligar a proposta feita por Farias *et al.* [24, 25], para considerar que a fração molar depende da direção de confinamento do sistema,  $\rho$ , neste caso.

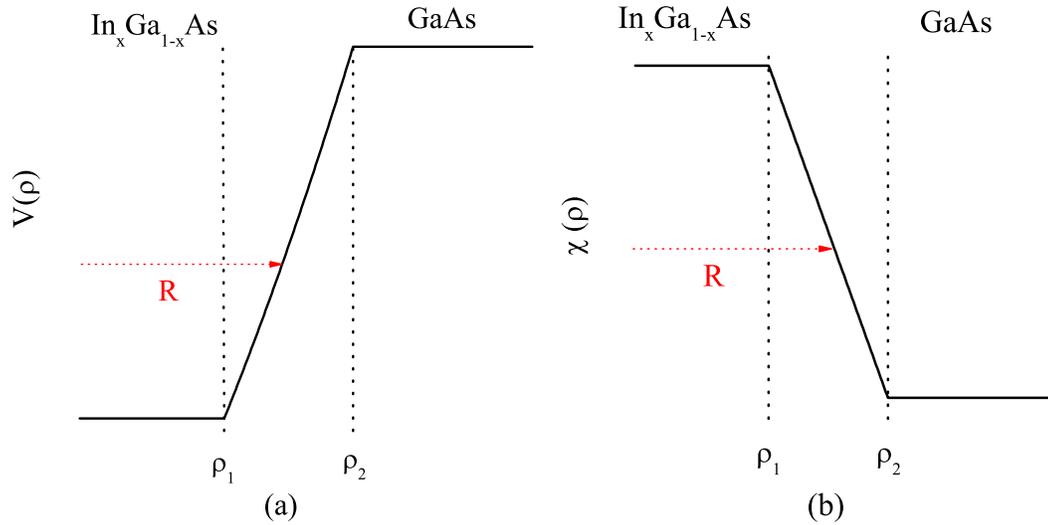


Figura 3.1: (a) Potencial de confinamento em um fio quântico dependente do eixo  $\rho$ , onde  $R$  é o raio do fio; (b) fração molar dependente de  $\rho$ .

### 3.1 Fração Molar

Da mesma forma que no poço quântico, vamos usar um modelo no qual a fração molar do Índio é dependente do eixo de confinamento,  $\rho$ . Sabemos que essa variação deve assumir um valor máximo  $x$  dentro do poço de confinamento e zero na barreira. Vamos supomos uma variação linear nas interfaces, e chamaremos essa função de  $\chi(\rho)$ . Portanto, para o fio quântico  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  utilizaremos um perfil da fração molar da mesma forma que na Eq. (2.1), ou seja

$$\chi(\rho) = \begin{cases} x, & \text{para } \rho < \rho_1 \\ x - \frac{x}{w}(\rho - \rho_1), & \text{para } \rho_1 < \rho < \rho_2 \\ 0, & \text{para } \rho > \rho_2 \end{cases}, \quad (3.1)$$

onde  $w$  é a espessura da interface. A função acima está representada na Fig. 3.1(b). Os pontos  $\rho_1$  e  $\rho_2$  são os pontos que indicam os limites da interface, dados por:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= R - (\alpha)w, \\ \rho_2 &= R + (1 - \alpha)w, \end{aligned} \quad (3.2)$$

sendo  $\alpha$ , como explicado no Capítulo 1, o parâmetro que diz o quanto da interface está dentro do poço de potencial, e  $R$  é o raio efetivo do fio quântico (ver Fig. 3.2).

## 3.2 Massa

A massa também será descrita por uma equação de interpolação entre as massas dos dois materiais, e também da fração molar,  $\chi(\rho)$ . Portanto, expandiremos o modelo de Adachi [37], e, de acordo com a proposta feita por Farias *et al.* [24, 25], usaremos  $\chi(\rho)$  de tal forma que

$$m_{\beta}^{\rho}(\rho) = m_{\beta}^{\rho}(InAs)\chi(\rho) + [1 - \chi(\rho)] m_{\beta}^{\rho}(GaAs), \quad (3.3)$$

onde  $m_{\beta}^{\rho}(InAs)$  e  $m_{\beta}^{\rho}(GaAs)$  são as massas do InAs e GaAs, respectivamente, na direção de confinamento  $\rho$ .  $\beta$  indica o portador, onde  $\beta = e, lh, hh$ .

A massa efetiva do elétron de cada material binário, na direção de confinamento, é obtida experimentalmente [36] e está na Tabela 2.1, as massas efetivas dos buracos, na direção de confinamento, são calculadas pelas seguintes equações [18, 36, 47]:

$$m_{lh}^{\rho} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}, \quad (3.4)$$

$$m_{hh}^{\rho} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}; \quad (3.5)$$

$\gamma_1$  e  $\gamma_2$  são os parâmetros de Luttinger dos binários InAs e GaAs e seus valores estão na Tabela 2.1.

Para calcular as massas dos buracos no eixo  $z$  usamos equações parecidas com as anteriores [18, 36, 47]:

$$m_{lh}^z = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad e \quad m_{hh}^z = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (3.6)$$

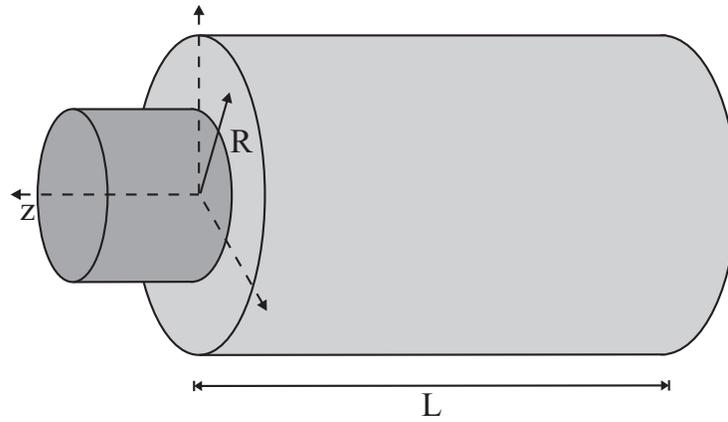


Figura 3.2: Ilustração tridimensional do sistema estudado mostrando  $L$  e  $R$ .

### 3.3 Potencial

O potencial de confinamento do fio quântico cilíndrico está ilustrado na Fig 3.2 e é dado pela diferença dos *gaps* dos materiais que formam o poço. Uma fração dessa diferença é o potencial de confinamento dos elétrons. Essa fração, como foi dito no Capítulo 1, é conhecido como *band-off-set* de condução ( $Q_c$ ) do InGaAs. O restante da diferença dos *gaps* é o potencial dos buracos. O *gap* da barreira (GaAs) é conhecido e é dado na Tabela 2.1. Conhecemos também o *gap* do InAs, mas não sabemos quanto vale o da liga ternária  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Para isso, faremos uma interpolação quadrática [40] com a função que descreve a fração molar,  $\chi(z)$ , onde

$$E_g(\chi(z)) = E_g(0) + e_1\chi(z) + e_2\chi(z)^2, \quad (3.7)$$

onde  $E_g(0)$  é o *gap* do GaAs, sendo  $e_1$  e  $e_2$  constantes. Sendo  $e_2$  dado na Tabela 2.2.

Os potenciais de confinamento desses portadores podem ser calculados por  $V_e = Q_c(E_g(0) - E_g(\rho))$  e  $V_h = Q_v(E_g(0) - E_g(\rho))$ . Substituindo  $E_g(\chi)$  da Eq. (3.7), temos

$$V_e = Q_c(E_g(0) - E_g(\chi)) = -Q_c(e_1\chi + e_2\chi^2), \quad (3.8)$$

$$V_h = Q_v(E_g(0) - E_g(\chi)) = -Q_v(e_1\chi + e_2\chi^2). \quad (3.9)$$

Os valores de  $Q_c$  e  $Q_v$  são dados na Tabela 2.2.

### 3.4 Energia de Ligação

Usamos a mesma equação de Schrödinger que foi usada no poço para descrever o par elétron-buraco em um fio quântico

$$H_{exc}\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_{exc}\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \quad (3.10)$$

onde novamente,  $H_{exc}$  é o Hamiltoniano do exciton e  $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$  é a função de onda que depende das coordenadas do elétron e do buraco.

No fio quântico, os portadores têm confinamento bidimensional, na direção  $\rho$ , perpendicular ao eixo de simetria, por isso separamos o Hamiltoniano em coordenadas cilíndricas, na forma [47, 48, 49, 50]

$$\left[ E_g - \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} \frac{\rho_e}{m_e^\rho} \frac{\partial}{\partial \rho_e} - \frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_e(\rho_e) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} \frac{\rho_h}{m_h^\rho} \frac{\partial}{\partial \rho_h} - \frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_h(\rho_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta_e - \theta_h) + (z_e - z_h)^2}} \right]_{exc} \Psi = E_{exc}\Psi, \quad (3.11)$$

onde  $\rho_e$ ,  $\theta_e$  e  $z_e$  são as coordenadas cilíndricas do elétron e  $\rho_h$ ,  $\theta_h$  e  $z_h$  as do buraco. Excluimos o termo com derivada em  $\theta_e$  e  $\theta_h$  pois a função de onda é considerada no estado fundamental. Supomos também que o potencial de confinamento é independente de  $\theta_e$  e  $\theta_h$ ,  $m^\rho$  é a massa efetiva que depende do eixo de confinamento  $\rho$  e  $m^z$  a massa efetiva na direção livre  $z$ .

O primeiro termo do lado direito da equação acima é o *gap* do material, e o último é a interação coulombiana entre o elétron e o buraco, onde usamos as seguintes relações de coordenadas

$$x_e = \rho_e \cos(\theta_e), \quad y_e = \rho_e \sin(\theta_e), \quad x_h = \rho_h \cos(\theta_h) \quad e \quad y_h = \rho_h \sin(\theta_h), \quad (3.12)$$

do qual temos que

$$(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 = \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta_e - \theta_h). \quad (3.13)$$

Vamos escrever o Hamiltoniano no eixo de confinamento como

$$H_i(\rho_i) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \frac{\rho_i}{m_i^\rho} \frac{\partial}{\partial \rho_i} + V_i(\rho_i), \quad (3.14)$$

onde  $i = e, h$ ; e reescrevendo a equação de Schrödinger, temos

$$\left[ E_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^z} \frac{d^2}{dz_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^z} \frac{d^2}{dz_h^2} + H_e(\rho_e) + H_h(\rho_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta_e - \theta_h) + (z_e - z_h)^2}} \right]_{exc} \Psi = E_{exc} \Psi. \quad (3.15)$$

Usando coordenadas relativas e do centro de massa na direção  $z$ , temos

$$\left[ E_g + H_e(\rho_e) + H_h(\rho_h) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta_e - \theta_h) + z^2}} \right]_{exc} \Psi = E_{exc} \Psi, \quad (3.16)$$

onde

$$\mu_{e-h} = \frac{m_e^z m_h^z}{m_e^z + m_h^z} \quad e \quad z = z_e - z_h, \quad (3.17)$$

é a massa reduzida e a coordenada relativa em  $z$ , respectivamente. Vamos escrever  $H_B$  como sendo

$$H_B = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \frac{d^2}{dz^2} - V_{coul}, \quad (3.18)$$

onde

$$V_{coul} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta_e - \theta_h) + z^2}}, \quad (3.19)$$

portanto, podemos separar o Hamiltoniano do *exciton* na soma dos Hamiltonianos do elétron, do buraco e da energia de ligação

$$H_{exc}(\rho_e, \rho_h, \theta_e, \theta_h, z) = H_e(\rho_e) + H_h(\rho_h) + H_B(\rho_e, \rho_h, \theta_e, \theta_h, z), \quad (3.20)$$

no qual ocultamos  $E_g$  por ser uma constante.

Semelhante ao que foi feito no poço, vamos fazer uma separação de variável na função de onda, da seguinte maneira

$$\Psi(\rho_e, \rho_h, z) = \varphi_e(\rho_e) \varphi_h(\rho_h) \phi(z). \quad (3.21)$$

Para descrever  $\phi(z)$ , usaremos uma função de onda tentativa da mesma forma que fizemos no método variacional com um parâmetro. Não usaremos o método do potencial

efetivo para o cálculo do fio visto que o mesmo tem um alto custo computacional e, comparado aos métodos variacionais, não possui uma boa aproximação. Portanto, usaremos uma função exponencial da coordenada não confinada, ou seja, de  $z^1$ , onde [47, 49, 50]

$$\phi(z) = \frac{1}{\lambda^{1/2}} \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{\lambda^2}\right), \quad (3.22)$$

onde  $\lambda$  é o parâmetro variacional que será usado para minimizar a energia do exciton.

Conhecendo  $\varphi_e$ ,  $\varphi_h$  e  $\phi$  podemos substituí-las na equação de Schrödinger e multiplicar pelo lado esquerdo por  $\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi |$ , então

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_{exc} | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_e | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle + \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_h | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle + \\ &\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = E_{exc}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde

$$\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_e | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \langle \varphi_h, \phi | \varphi_h, \phi \rangle \langle \varphi_e | H_e | \varphi_e \rangle = E_e, \quad (3.24)$$

$$\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_h | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \langle \varphi_e, \phi | \varphi_e, \phi \rangle \langle \varphi_h | H_h | \varphi_h \rangle = E_h, \quad (3.25)$$

$$\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = -|E_B|. \quad (3.26)$$

Novamente, a energia do exciton é dada pela seguinte soma:  $E_{exc} = E_g + E_e + E_h - |E_B|$ , onde  $E_e$ ,  $E_h$  e  $E_B$  são as energias do elétron, do buraco e de ligação, respectivamente. O sinal negativo do módulo de  $E_B$  é para garantir que a energia de ligação seja perdida pelo par elétron-buraco. A equação de autovalor do elétron e do buraco são resolvidos numericamente pela discretização da equação de Schrödinger em duas dimensões [43], a mesma utilizada para o cálculo do potencial efetivo em um poço quântico.

Para calcular a energia do exciton resta-nos, então, resolver a equação de autovalor da energia de ligação, substituindo  $H_B$  da Eq. (3.18)

$$\langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \langle \phi | \frac{d^2}{dz^2} | \phi \rangle - \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | V_{coul} | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle, \quad (3.27)$$

<sup>1</sup>precisamos usar o quadrado de  $z$  para que a integral da função não seja divergente

onde ao substituir  $\phi(z)$  na primeira parte dessa equação, temos

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \langle \phi | \frac{d^2}{dz^2} | \phi \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2/\lambda^2) \frac{d^2}{dz^2} \exp(-z^2/\lambda^2) dz \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2/\lambda^2) \left( -\frac{2}{\lambda^2} + \frac{4z^2}{\lambda^4} \right) \exp(-z^2/\lambda^2) dz, \end{aligned} \quad (3.28)$$

e resolvendo essa integral encontramos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}} \langle \phi | \frac{d^2}{dz^2} | \phi \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}\lambda^2}. \quad (3.29)$$

A segunda parte da equação será

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | V_{coul} | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho_e d\rho_e d\theta_e \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \rho_h d\rho_h d\theta_h \times \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\varphi_e|^2 |\varphi_h|^2 \exp(-2z^2/\lambda^2) dz}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta_e - \theta_h) + z^2}}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Substituindo  $\theta_e$  e  $\theta_h$  por sua coordenada relativa:  $\theta = \theta_e - \theta_h$ , onde  $\theta$  assume valores de 0 à  $2\pi$ , teremos

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | V_{coul} | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \times \\ &\quad \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-2z^2/\lambda^2)}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos\theta + z^2}} dz d\theta. \end{aligned} \quad (3.31)$$

A integral em  $z$  é par, então vamos trocar os limites de integração de  $-\infty$  à  $+\infty$  por 0 à  $+\infty$  multiplicando a integral por 2. Ficamos com

$$\begin{aligned} \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | V_{coul} | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle &= -\frac{e^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \times \\ &\quad \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\exp(-2z^2/\lambda^2)}{\sqrt{\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos\theta + z^2}} dz d\theta. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Usando um resultado da tabela de integral (I. S. Gradshteyn, pág. 362, Eq. 3.364(3))

$$\int_0^{+\infty} \frac{\exp(-u)}{\sqrt{u(a+u)}} du = \exp(a/2) K_0(a/2), \quad (3.33)$$

onde  $a$  é uma constante positiva e  $K_0$  é a função de Bessel modificada, e chamando  $u = 2z^2/\lambda^2$ , podemos resolver a integral em  $z$ , ficando com

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | V_{coul} | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \\ & -\frac{e^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} \exp(-a/2) K_0(a/2) d\theta. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Essas integrais são resolvidas numericamente, onde

$$a = \frac{2}{\lambda}(\rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h\cos\theta), \quad (3.35)$$

que será sempre positivo pois quando  $\cos\theta = 1$ , teremos  $a = \frac{2}{\lambda}(\rho_e - \rho_h)^2$ , e quando  $\cos\theta = -1$  teremos  $a = \frac{2}{\lambda}(\rho_e + \rho_h)^2$ . Finalmente, a energia de ligação é dada por

$$\begin{aligned} -|E_B| &= \langle \varphi_e, \varphi_h, \phi | H_B | \varphi_e, \varphi_h, \phi \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu_{e-h}\lambda^2} \\ & -\frac{e^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\varphi_e|^2 \rho_e d\rho_e \int_0^{+\infty} |\varphi_h|^2 \rho_h d\rho_h \int_0^{2\pi} \exp(-a/2) K_0(a/2) d\theta. \end{aligned} \quad (3.36)$$

A energia de ligação é resolvida numericamente através desta equação.

### 3.5 Resultados

Calculamos a energia do estado fundamental dos *excitons*  $e$ - $lh$  e  $e$ - $hh$ , em fio quântico  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , onde usamos as fração molar  $x=0.4$ , observando a influência do raio do fio,  $R$ , e da espessura de sua interface,  $w$ .

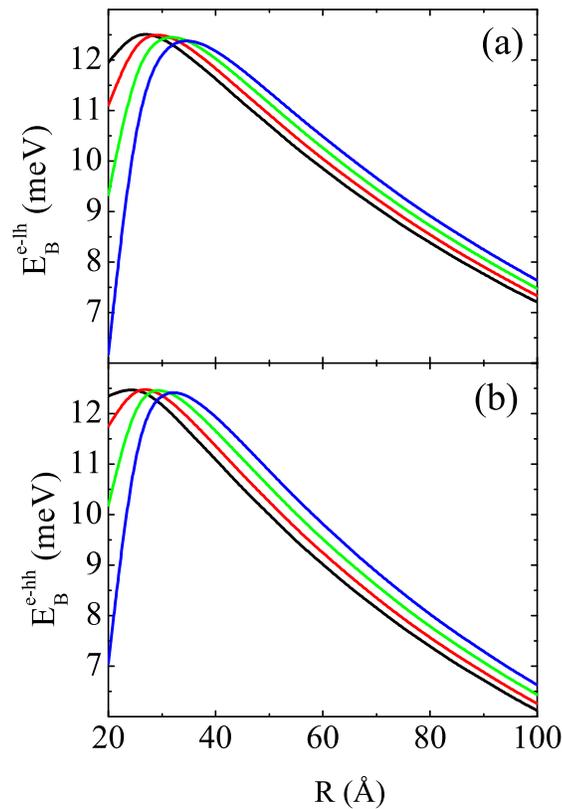


Figura 3.3: Energia de ligação do *exciton*  $e$ - $lh$  (a) e  $e$ - $hh$  (b) no estado fundamental em função do raio do fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, para uma interface abrupta (linhas pretas), 5 Å (linhas vermelhas), 10 Å (linhas verdes) e 15 Å (linhas azuis) usando o método variacional, com  $\alpha = 1$ .

Na Fig. 3.3, temos o valor absoluto da energia de ligação dos *excitons*  $e$ - $lh$  e  $e$ - $hh$ , em função do raio do fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com quatro diferentes valores da interface, interface abrupta (linhas pretas), 5 Å (linhas vermelhas), 10 Å (linhas verdes) e 15 Å (linhas azuis), onde desprezamos o *strain*, com  $\alpha=1$ , usando o método

variacional. Da Fig. 3.3 vemos que a energia de ligação aumenta para fios de raio pequeno e diminui para raios grandes. Também observamos que a interface faz com que os níveis de energias aumentem, como foi visto, também, no poço quântico. Mas, diferentemente do poço, a influência da interface se estende para raios grandes, mantendo uma diferença de aproximadamente 1 meV, para raios maiores do que 20 Å e menor do que 100 Å.

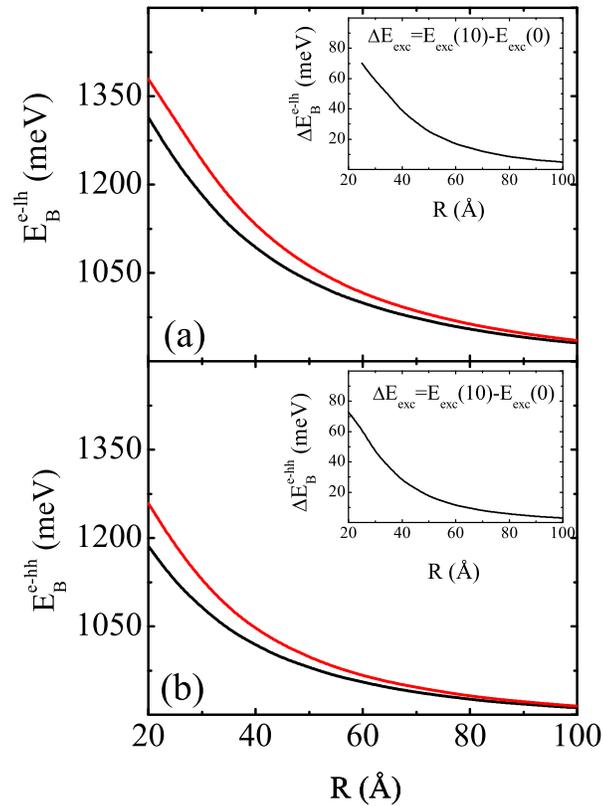


Figura 3.4: Energia do *exciton*  $e-lh$  (a) e  $e-hh$  (b) no estado fundamental em função do raio do fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, com interface abrupta (linhas pretas) e de 10 Å (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a subtração da energia do *exciton* em um fio com interface de 10 Å, pela energia de um fio abrupto.

A Fig. 3.4 apresenta a energia dos *excitons*  $e-lh$  e  $e-hh$  em função do raio do fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, com duas espessuras de interfaces  $w=0$  (linhas pretas) e  $w=10$  Å (linhas vermelhas), sendo  $\alpha=1$ . Percebemos um leve aumento da

energia do *exciton e-lh* em comparação com *e-hh*. Os resultados aparecem todos na faixa do infravermelho, como é esperado para esse material. No *inset* mostramos a influência da interface de 10 Å na energia do exciton em comparação com o perfil do fio abrupto em função do raio do fio (diferença da linha vermelha pela preta). A diferença é maior para raios pequenos, e é da ordem de 60 meV para o *exciton e-lh* e de 45 meV para o *exciton e-hh*, com o raio de 30 Å.

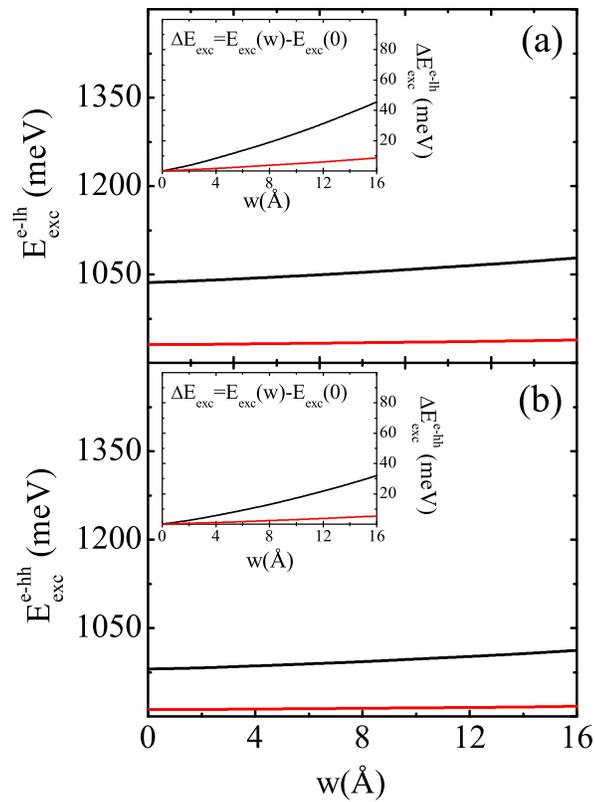


Figura 3.5: Energia do *exciton e-lh* (a) e *e-hh* (b) no estado fundamental em função da espessura das interfaces do fio  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain*, com raio de 50 Å (linhas pretas) e de 100 Å (linhas vermelhas), sendo  $\alpha = 1$ . No *inset*, a variação da energia de um fio com espessura  $w$  em relação ao caso abrupto.

Na Fig. 3.5, apresentamos a energia do *exciton e-lh* e *e-hh* em função da espessura da interface do fio quântico sem *strain*, com  $\alpha=1$ , para dois raios distintos,  $R=50$  Å (linhas pretas) e 100 Å (linhas vermelhas). Em ambos os casos a energia aumenta com

---

o alargamento da interface, e isto é mais significativo para raios pequenos. No *inset* mostramos a influência da interface  $w$  na energia do *exciton*, tanto para um raio de 50 Å (linhas pretas) quanto para um de 100 Å (linhas vermelhas), em comparação com o perfil abrupto do fio. Como é esperado, quanto maior  $w$  maior será sua influência sobre a energia, que pode chegar a 45 meV em um raio de 50 Å com interface de 16 Å.

# 4

---

## Pontos Quânticos

Pontos Quânticos são estruturas de baixa dimensionalidade que confinam os elétrons em seu interior. São, também, chamados de átomos artificiais pois o confinamento desses elétrons lembram os elétrons em um átomo [8]. Os pontos, geralmente, são crescidos em planos [51, 52] como podemos ver à esquerda da Fig. 4.1, onde cada ponto branco na figura é um ponto quântico obtida por SEM (Scanning Electron Micrograph). Os pontos quânticos apresentam tanto formato quanto dimensões diferentes uns dos outros. O formato dos ponto, geralmente, é aproximado por elipsóides ou pirâmides [53, 54, 55, 56]. À direita da Fig. 4.1 temos um XSTM (*cross-sectional scanning-tunneling microscopy*) de um ponto quântico mostrando um formato de uma pirâmide truncada e seu tamanho [53].

Neste Capítulo trabalharemos com pontos quânticos  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , onde  $x$  é a fração molar do Índio. Neste capítulo não estamos considerando a presença de *strain*. Também estamos considerando um perfil abrupto para o potencial, que aproximaremos por uma pirâmide ver Fig 4.2.

Para a resolução dos pontos quânticos, seguiremos um método diferente do qual usamos para o poço e fio quântico. Aqui, nós iremos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo para encontrar os auto-valores e auto-funções.

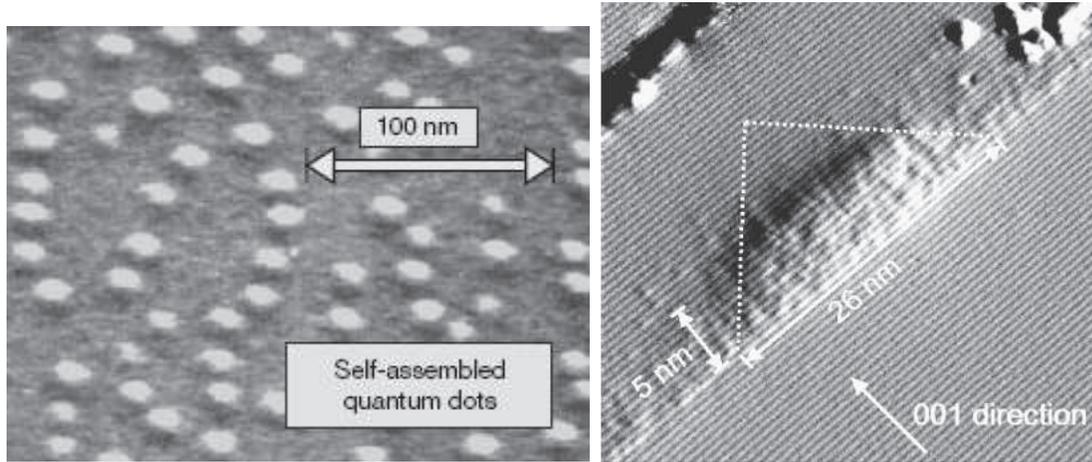


Figura 4.1: À esquerda: imagem de um plano de pontos quânticos InGaAs, crescido em uma camada de GaAs por MBE, obtida por SEM [52]; à direita: imagem de um ponto mostrando seu formato e sua dimensão obtida por um XSTM [53].

## 4.1 Método Numérico

O método utilizado é baseado na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, proposta por Degani [57, 58, 59] e tem sido usado em diversos sistemas [60, 61, 62], dentro da aproximação da massa efetiva. Ou seja, esse método propõe resolver numericamente a seguinte equação

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.1)$$

onde o Hamiltoniano  $H$  é formado pelos termos cinéticos e do potencial

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{P} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \mathbf{P} + V(\mathbf{r}). \quad (4.2)$$

A solução formal da equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por [9]

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H dt\right) \Psi(\mathbf{r}, 0), \quad (4.3)$$

onde o Hamiltoniano é independente do tempo, então podemos tirá-lo dessa integral.

Para um tempo inicial  $t$  e um tempo final  $t + \Delta t$ , temos

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \int_t^{t+\Delta t} dt\right) \Psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.4)$$

Substituindo  $H$  da Eq. (4.2), temos

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp \left[ -i \frac{\Delta t}{\hbar} \left( \frac{1}{2} \mathbf{P} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \mathbf{P} + V(\mathbf{r}) \right) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.5)$$

Até aqui não fizemos nada novo. Mas, o que esse método propõem é usar uma solução inicial  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , e pela equação acima encontrar essa função de onda no tempo posterior, para um dado potencial  $V(\mathbf{r})$ <sup>1</sup>. O que temos que fazer, então, é encontrar uma forma de resolver essa última equação, para isso veja o Apêndice B.

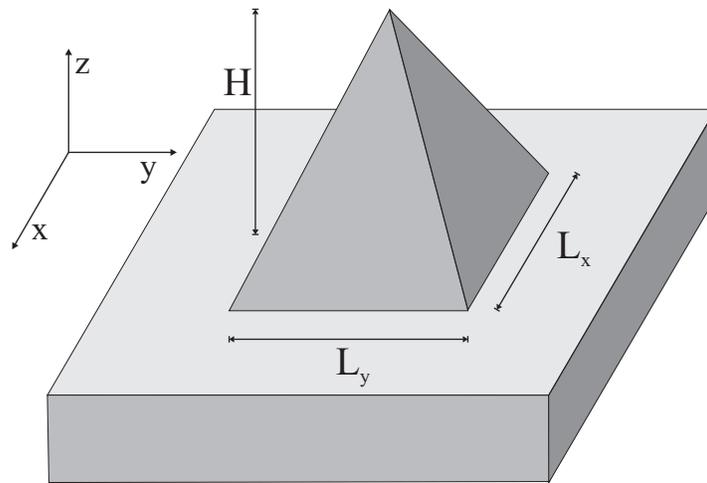


Figura 4.2: Ilustração tridimensional do sistema estudado mostrando a altura da pirâmide  $H$ , e os lados da base  $L_x$  e  $L_y$ . Na figura, a pirâmide está em cima de uma camada de material diferente da que forma a pirâmide, mas nós consideramos neste trabalho que a pirâmide está toda coberta pelo mesmo material que é formada essa camada.

<sup>1</sup>O potencial, a princípio, pode ser um qualquer, influenciando apenas no tempo de convergência. Mas, como veremos, ele terá condições de contorno devido ao método de cálculo. Neste trabalho usaremos  $V(\mathbf{r})$  no formato piramidal (ver Fig 4.2)

## 4.2 Propagação no tempo imaginário

O estado fundamental é obtido através da propagação de um pacote de onda inicial. A função de onda pode ser escrita como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n \exp\left(-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right) |\phi_n\rangle, \quad (4.6)$$

onde  $\varepsilon_n$  indica os níveis de energias permitidos no sistema e  $\phi_n$  as suas autofunções.

Agora, nós iremos escrever essa função de onda no domínio do tempo imaginário, ou seja, faremos  $t = -i\tau$ . Então

$$|\Psi(\tau)\rangle = \sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) |\phi_n\rangle. \quad (4.7)$$

A função de onda normalizada, portanto, será

$$|\Psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{\sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)}} |\phi_n\rangle. \quad (4.8)$$

O estado fundamental será obtido tendendo à  $\infty$ , ou seja

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\Psi(\tau)\rangle = |\phi_0\rangle. \quad (4.9)$$

Este esquema é muito estável e a energia converge rapidamente como pode ser visto à direita da Fig. 4.3 para o caso de potencial em forma de pirâmide.

### 4.3 Projeção da função de onda

Aqui, mostraremos alguns resultados obtidos para a função de onda usando o método descrito acima. À esquerda da Fig. 4.3, temos a curva gaussiana que foi usada para representar a projeção da função de onda inicial (linha pontilhada preta) e a função de onda depois de um certo tempo (linha pontilhada vermelha) em termo do eixo  $z$ . O potencial mostrado nessa figura é o corte no potencial piramidal desde a ponta da pirâmide até embaixo no centro da base. Portanto, a largura do poço de potencial que aparece na figura é a altura da pirâmide, que neste caso é  $60 \text{ \AA}$  e lados  $L_x = L_y = 100 \text{ \AA}$ . Percebemos que a função de onda (linha pontilhada vermelha) é deslocada em relação ao centro do poço de confinamento, isto se deve ao fato que a maior probabilidade de encontrar o elétron dentro da pirâmide de potencial não é na metade da altura da pirâmide, e sim mais embaixo, onde os lados dela são mais afastados. À direita dessa figura, a energia do estado fundamental do elétron convergindo com o tempo.

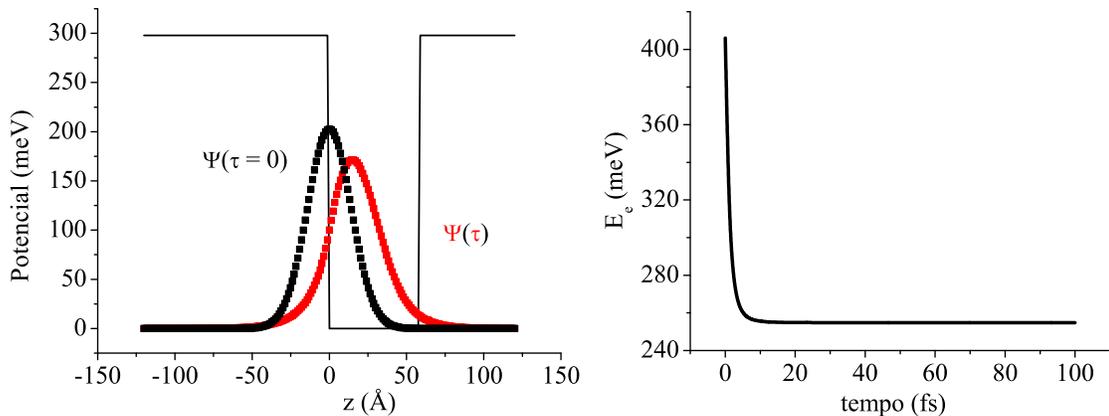


Figura 4.3: Projeção no eixo  $z$  da função de onda do elétron no tempo inicial (linha pontilhada preta) e num certo tempo  $t$  (linha pontilhada vermelha) em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ , e  $L_x = L_y = 100 \text{ \AA}$

Na Fig 4.4, temos uma projeção bidimensional da função de onda do elétron em termos dos eixos  $x$  e  $z$ . A projeção é formada por curvas de níveis da função de onda. Perceba que a maior probabilidade de encontrar o elétron é, aproximadamente, a um terço da altura da pirâmide. Perceba, também, que nas pontas da pirâmide a função de onda é desprezível.

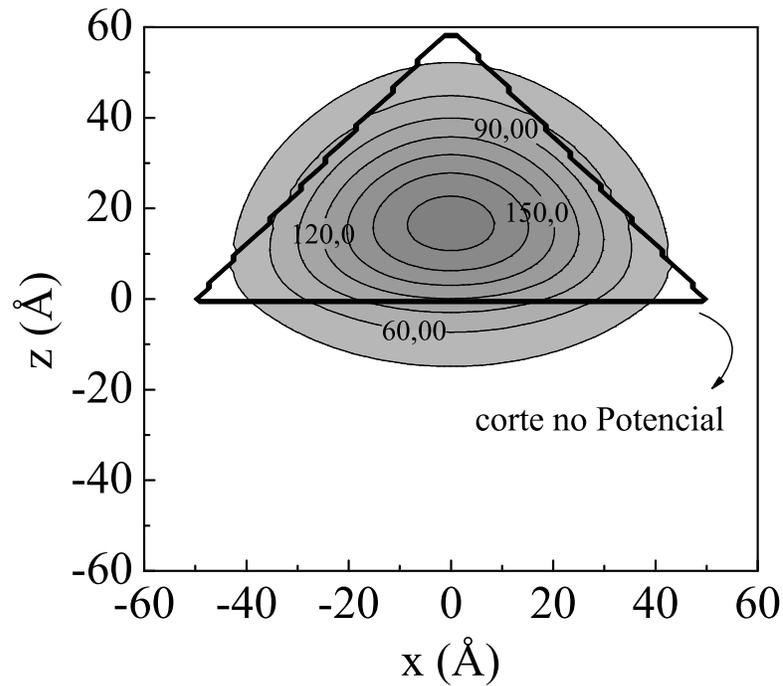


Figura 4.4: Projeção nos eixos  $x$  e  $z$  da função de onda do elétron em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ , e  $L_x = L_y = 100 \text{ \AA}$

## 4.4 Resultados

Calculamos a energia do estado fundamental do elétron em pontos quânticos piramidais  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , onde usamos a fração molar  $x=0.4$ . Observamos a influência na energia do elétron em relação as dimensões do ponto. O ponto tem altura  $H$  e base com lados  $L_x$  e  $L_y$ . Faremos, também, um estudo da dependência da energia em relação a área da base do ponto.

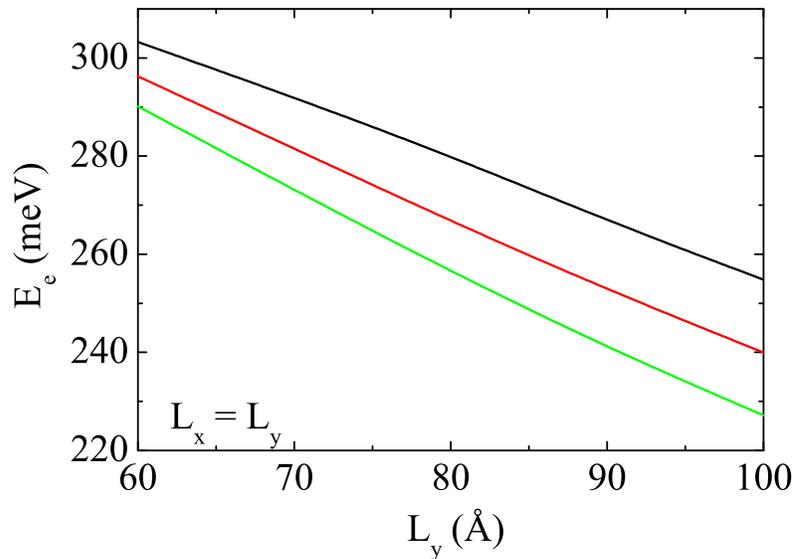


Figura 4.5: Energia do elétron no estado fundamental em um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  em função de  $L_y$ . A pirâmide tem a base quadrada ( $L_x = L_y$ ). A linha preta é uma pirâmide com altura de 60 Å, enquanto a linha vermelha é uma de 70 Å e a linha verde é de 80 Å. A variação da energia do elétron é quase linear em relação a  $L_x$ . A energia é menor para pontos de alturas maiores, e que essa diferença pode chegar a 25 meV para pontos com  $H=60$  Å e  $H=80$  Å, com  $L_x=80$  Å.

Na Fig. 4.5, temos a energia do elétron no estado fundamental em um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  em função do comprimento de um dos lados da base,  $L_x$ . Nesse gráfico, o ponto tem base quadrada ( $L_x = L_y$ ) e altura  $H$ . Calculamos a energia do elétron para três alturas diferentes da pirâmide:  $H=60$  Å (linha preta); 70

Å (linha vermelha) e 80 Å (linha verde). Percebemos uma variação da energia quase linear em relação a  $L_x$ . Vemos, também, que a energia é menor para pontos de alturas maiores, e que essa diferença pode chegar a 25 meV para pontos com  $H=60$  Å e  $H=80$  Å, com  $L_x = 80$  Å.

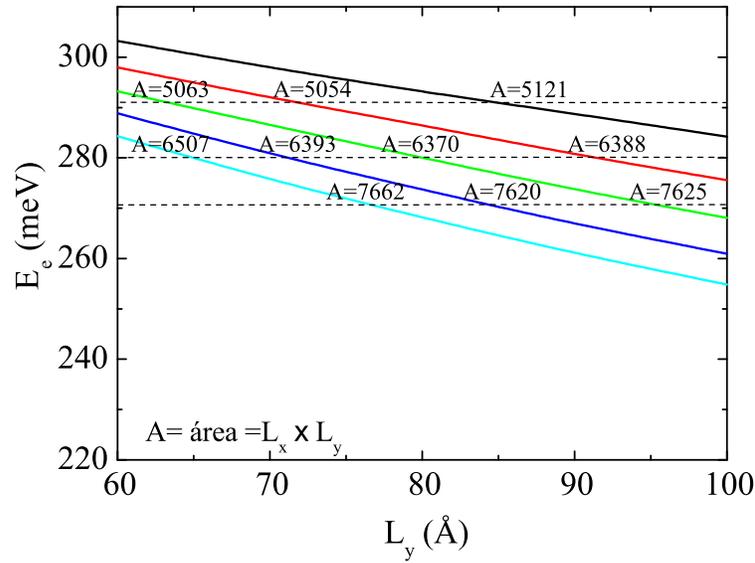


Figura 4.6: Energia do elétron no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura 60 Å em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60$  Å (linha preta),  $L_x = 70$  Å (linha vermelha),  $L_x = 80$  Å (linha verde),  $L_x = 90$  Å (linha azul escuro) e  $L_x = 100$  Å (linha azul claro). No gráfico à direita, temos o mesmo gráfico da esquerda, mas, agora, traçamos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais, portanto, isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é da ordem de 2%.

Nas Figs. 4.6, 4.7 e 4.8, calculamos a energia do elétron no estado fundamental em um ponto piramidal, para três alturas diferentes da pirâmide:  $H=60$  Å,  $H=70$  Å, e  $H=80$  Å, respectivamente. Percebemos que a energia do elétron diminui quando aumentamos a altura da pirâmide e que essa diferença pode ser maior que 30 meV para

uma pirâmide de altura 80 Å, com base  $L_y (L_x) = 80 (60)$  Å e  $L_y (L_x) = 80 (100)$  Å. A energia, também, diminui quando aumentamos os lados da base. Vemos que, para qualquer altura, a dependência da energia em relação a  $L_y$  é basicamente a mesma. Nesses três gráficos, fazemos, também, uma estudo na dependência da energia com a área da base.

Na primeira dessas figuras, Fig. 4.6, portanto, a altura da pirâmide é 60 Å. A energia é calculada em termos de  $L_y$  que, agora, não é necessariamente igual à  $L_x$ .  $L_x$  é mantido constante para cada linha com os seguintes valores:  $L_x = 60$  Å (linha preta),  $L_x = 70$  Å (linha vermelha),  $L_x = 80$  Å (linha verde),  $L_x = 90$  Å (linha azul escuro) e  $L_x = 100$  Å (linha azul claro). No gráfico, temos a energia do elétron em termos dos parâmetros que acabamos de descrever. Percebemos que a energia tem um comportamento quase linear, assim como foi feito para a pirâmide de base quadrada (Fig. 4.5). O gráfico também mostra três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais, portanto, isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é da ordem de 2%. Isso mostra uma dependência da energia do elétron com a área da base da pirâmide, e não, necessariamente, com o formato da base.

Na Fig. 4.7, calculamos a energia do elétron no estado fundamental em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura 70 Å. A energia do elétron é calculada em termos de  $L_y$ , com  $L_x$  constante, onde  $L_x = 60$  Å (linha preta),  $L_x = 70$  Å (linha vermelha),  $L_x = 80$  Å (linha verde),  $L_x = 90$  Å (linha azul escuro) e  $L_x = 100$  Å (linha azul claro). No gráfico, temos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais, portanto, isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos um erro da ordem de 3%.

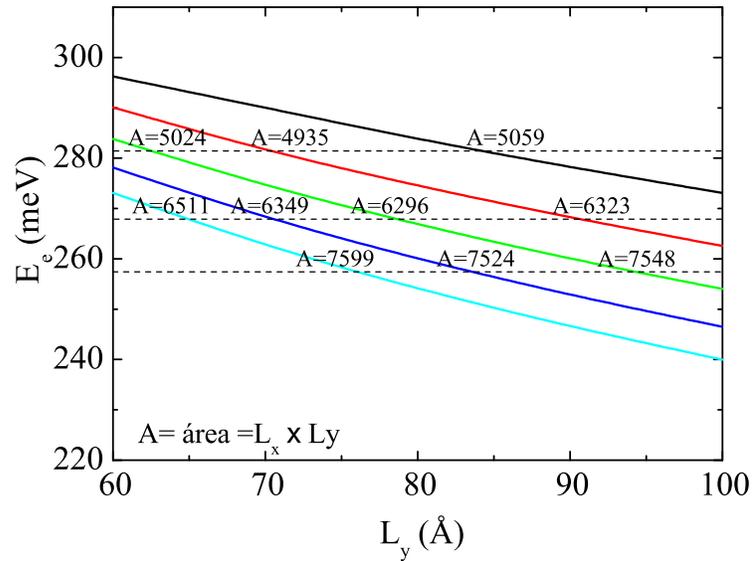


Figura 4.7: Energia do elétron no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $70 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . O que fazemos, aqui, foi basicamente o mesmo que na Fig. 4.4, mas com a altura da pirâmide diferente. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro, assim como na figura anterior, é bem pequeno sendo da ordem de 3%.

Na Fig. 4.8, calculamos a energia do elétron no estado fundamental em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $80 \text{ \AA}$ . Da mesma forma que nas duas figuras anteriores, a energia do elétron é calculada em termos de  $L_y$ , com  $L_x$  constante, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). Calculamos o erro do cálculo das áreas para energias constantes e percebemos que este é menor do que 3%.

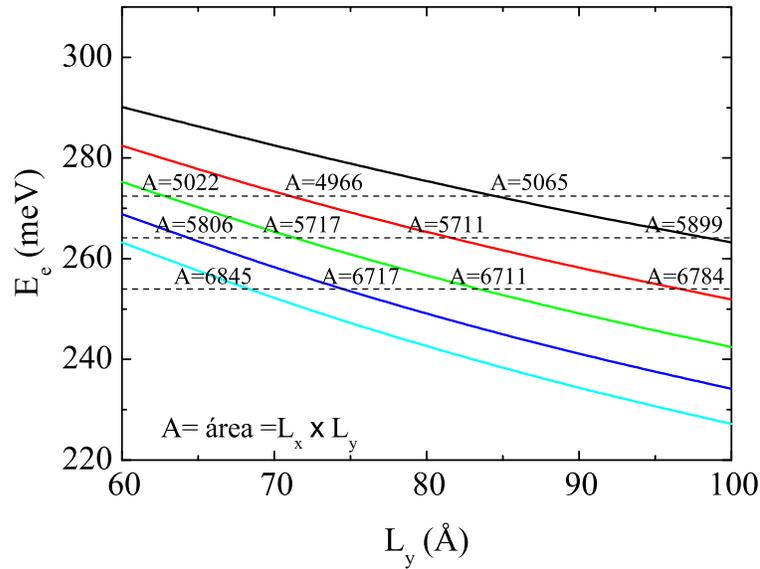


Figura 4.8: Energia do elétron no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $80 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . O que fazemos, aqui, foi basicamente o mesmo que na Fig. 4.6, mas com a altura da pirâmide diferente. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro, assim como na figura anterior, é bem pequeno sendo menor do que 3%.

Na Fig. 4.9, calculamos a energia do buraco pesado no estado fundamental em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ . A energia do buraco pesado é calculada em termos de  $L_y$ , com  $L_x$  constante, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). Calculamos o erro do cálculo das áreas para energias constantes e percebemos que este é da ordem de 5%.

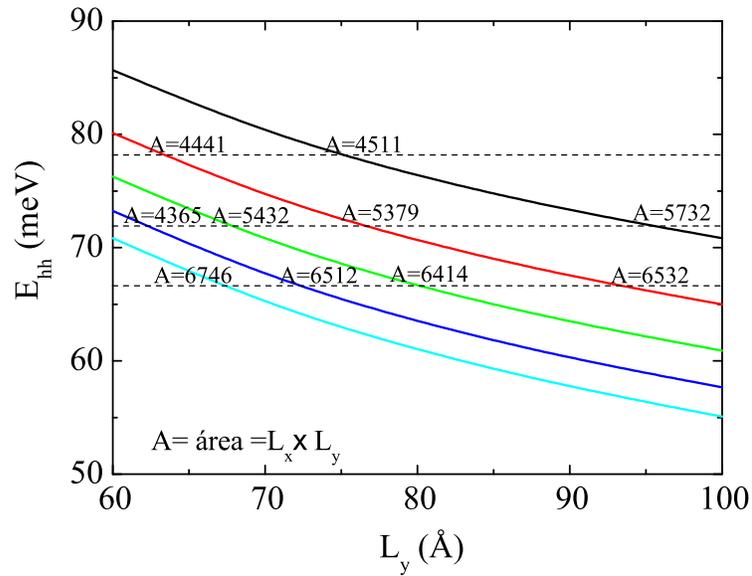


Figura 4.9: Energia do buraco pesado no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). No gráfico à direita, temos o mesmo gráfico da esquerda, mas, agora, traçamos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é da ordem de 5%.

Na Fig. 4.10, calculamos a energia de recombinação do par elétron-buraco pesado no estado fundamental em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ . Essas energia são calculadas em termos de  $L_y$ , com  $L_x$  constante, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). Percebemos uma variação quadrática em relação à  $L_y$ . A energia de recombinação é aproximada da energia do *exciton*, pois é calculada por:  $E_{Rec} = E_g + E_e + E_{hh}$ . Portanto, a diferença entre essas duas energias é a energia de ligação que, como vimos nos Capítulo de poço e fio, é muito pequena

comparada à energia do *exciton*. E para ponto quânticos esféricos foi mostrado que a energia de ligação não é superior a 20 meV, enquanto sua energia do *exciton* é da ordem de 1200 meV [21]. Então, a energia que vemos na Fig. 4.10, é, aproximadamente, a energia de emissão do *exciton*.

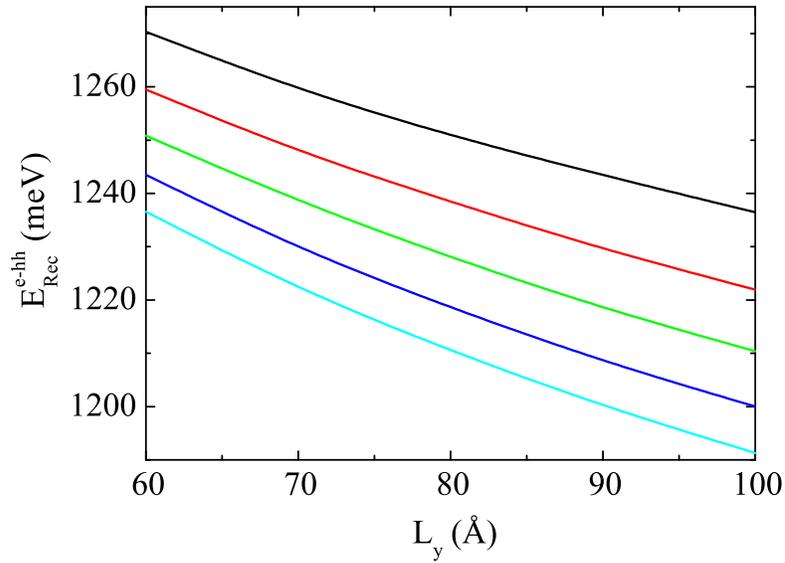


Figura 4.10: Energia de recombinação do par elétron-buraco pesado no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura 60 Å em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60$  Å (linha preta),  $L_x = 70$  Å (linha vermelha),  $L_x = 80$  Å (linha verde),  $L_x = 90$  Å (linha azul escuro) e  $L_x = 100$  Å (linha azul claro).

Na Fig. 4.11, calculamos a energia do buraco leve no estado fundamental em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura 60 Å. A energia do buraco leve é calculada em termos de  $L_y$ , com  $L_x$  constante, onde  $L_x = 60$  Å (linha preta),  $L_x = 70$  Å (linha vermelha),  $L_x = 80$  Å (linha verde),  $L_x = 90$  Å (linha azul escuro) e  $L_x = 100$  Å (linha azul claro). Calculamos o erro das áreas para energias constantes e percebemos que este é menor do que 3%.

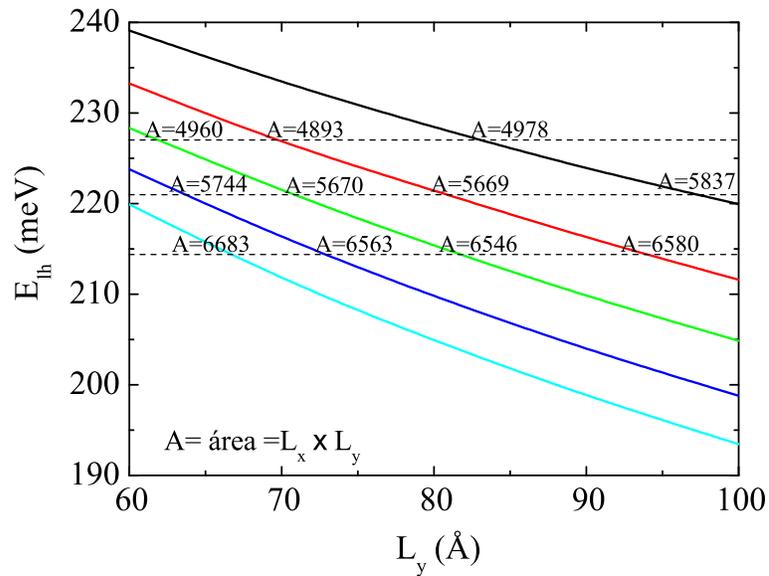


Figura 4.11: Energia do buraco leve no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). No gráfico à direita, temos o mesmo gráfico da esquerda, mas, agora, traçamos três linhas retas (linhas pontilhadas) horizontais isoenergéticas e calculamos a área da base quando essas linhas pontilhadas passam pelas linhas coloridas de  $L_x$  constante. Comparamos as áreas com a mesma energia e percebemos que o erro é menor do que 3%.

Nas Fig. 4.12, calculamos a energia de recombinação do par elétron-buraco leve no estado fundamental em um ponto piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$ . Essas energia são calculadas em termos de  $L_y$ , com  $L_x$  constante, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro). Percebemos uma variação quase linear em relação à  $L_y$ .

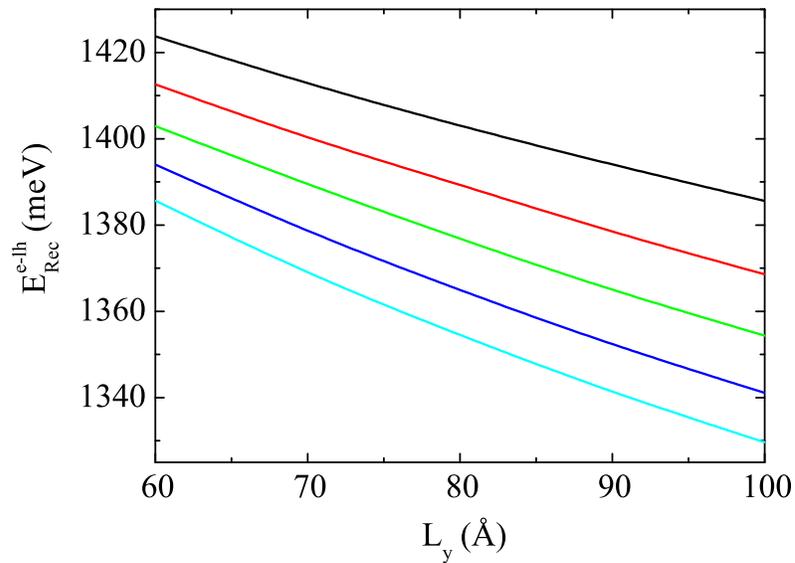


Figura 4.12: Energia de recombinação do par elétron-buraco leve no estado fundamental de um ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}/\text{GaAs}$  de altura  $60 \text{ \AA}$  em função de  $L_y$ . Com  $L_x$  constante para cada linha colorida, onde  $L_x = 60 \text{ \AA}$  (linha preta),  $L_x = 70 \text{ \AA}$  (linha vermelha),  $L_x = 80 \text{ \AA}$  (linha verde),  $L_x = 90 \text{ \AA}$  (linha azul escuro) e  $L_x = 100 \text{ \AA}$  (linha azul claro).

# 5

---

## Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho realizamos um estudo das propriedades óticas em heteroestruturas com confinamento 0-2D: poço, fio cilíndrico e ponto piramidal. No poço quântico, calculamos a energia dos *excitons*, *e-lh* e *e-hh*, no estado fundamental em dois materiais diferente  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , no qual calculamos os resultados com e sem considerar o *strain*, e  $(\text{In}_w\text{Ga}_{1-w}\text{As})_v(\text{InP})_{1-v}/\text{InP}$  que não consideramos o *strain*. Calculamos a energia de ligação do *exciton* por três métodos diferentes. Consideramos a existência de interfaces graduais e fizemos um estudo de quanto a energia muda com o posicionamento dessas interfaces. Calculamos, também, a energia dos *excitons*, *e-lh* e *e-hh*, no estado fundamental do fio quântico cilíndrico  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  sem *strain* com interface gradual que depende somente de  $\rho$ . Calculamos a energia de ligação do *exciton* usando o método variacional com um parâmetro. No ponto quântico piramidal, calculamos a energia de recombinação no estado fundamental dos pares *e-lh* e *e-hh*, e fizemos um estudo da dependência da energia dos portadores em relação a área da base da pirâmide.

Dentre os principais resultados de poço podemos destacar:

O efeito das interfaces na energia de ligação no poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  é mais significativo para poços com largura abaixo de 30 Å. No poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  essa relevância se estende para poços largos, mas diminui com a largura.

O método do potencial efetivo superestima a energia de ligação comparado com os métodos variacionais. A energia de ligação do poço quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ , mesmo considerando os três métodos, é na faixa de 3 a 7 meV, e a influência do *strain* na energia de ligação é desprezível. A energia de ligação no poço quântico  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$ , considerando os três métodos, é na faixa de 4 a 9 meV.

As energias dos *excitons* no estado fundamental no poço quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  aparecem na faixa do infravermelho. A energia do *exciton e-hh* mostra-se maior do que a energia do *exciton e-lh* em poços sem *strain*. Essa diferença é maior em poços com *strain*. Portanto, o *strain* atua aumentando a energia do *exciton e-hh* e diminuindo a do *e-lh*. As energia do poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  também estão no infravermelho.

A energia do *exciton e-lh* e *e-hh* em poços quânticos  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  é praticamente a mesma, diferenciando-se apenas alguns meV. Essa diferença é bem mais visível em poços quânticos  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$

A diferença da energia do *exciton* de um poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com largura 30 Å e interface 10 Å com um poço abrupto pode chegar 100 (70) meV para um poço sem (com) *strain*, e esse valor diminui com a largura do poço. Para o poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  essa diferença é da ordem de 50 meV.

O aumento na interface em um poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com largura 50 Å gera um significativo aumento na energia *exciton* podendo chegar a 80(60) meV em um poço sem (com) *strain* numa variação de 0 à 16 Å na interface. No poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  com largura 50 Å o aumento nessa energia pode chegar a 40 meV.

O parâmetro  $\alpha$ , que mede o quanto da interface está dentro do poço, pode gerar um deslocamento da energia do *exciton e-lh* de 74 meV e para o *e-hh* de 63 meV no poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com largura 50 Å. No poço  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  esse deslocamento na energia pode chegar a 46 meV para o *exciton e-lh* e 40 meV para *e-hh*.

Dentre os principais resultados de fio podemos destacar:

A energia dos *excitons*  $e-lh$  e  $e-hh$  no fio quântico cilíndrico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  apresentam-se na mesma faixa de energia que observamos no poço  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ , ambos sem *strain*.

No fio  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  o efeito da interface diminui lentamente com o aumento do raio, sendo esse efeito visível para raios grandes.

A diferença de energia de um fio  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  com interface de 10 Å com um fio abrupto diminui com o raio mas pode chegar a 60 meV para o *exciton*  $e-lh$  e a 45 meV para o *exciton*  $e-hh$  com o raio igual a 30 Å.

O aumento da interface pode gerar uma diferença de energia em relação ao perfil abrupto de 45 meV no *exciton*  $e-lh$  e 30 meV no *exciton*  $e-hh$  no fio  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  de raio 50 Å com interface de 16 Å.

Dentre os principais resultados do ponto podemos destacar:

A energia de recombinação do par  $e-lh$  no ponto quântico piramidal  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  apresentou faixa de energia maior do que a energia do *exciton*  $e-lh$  no poço e fio quântico. Mas a energia de recombinação do  $e-hh$  apresentou faixa de energia menor em relação ao *exciton*  $e-hh$  no poço e fio.

A energia do elétron e do buraco leve no ponto apresenta uma dependência quase linear quando variamos os lados da base da pirâmide. A energia do buraco pesado apresenta energia bem menor do que do elétron e do buraco leve tendo um comportamento mais quadrática quando mudamos os lados da base.

Comparamos a energia dos portadores no ponto piramidal em relação a área da base da pirâmide. Vimos que essas energias apresentam uma dependência com a área e não com o formato da base.

Como perspectivas deste trabalho podemos citar:

Calcular a fotoluminescência dos poços quânticos  $(\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As})_{0.85}(\text{InP})_{0.15}/\text{InP}$  e  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$  para comparações com trabalhos experimentais.

No fio quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ , considerar o *strain* para torná-lo mais real, e calcular sua fotoluminescência.

Considerar o *strain* no ponto quântico  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ . Usar um potencial de uma pirâmide truncada para descever melhor o experimento, e calcular os efeitos de *spin* nesse ponto.

# Apêndice A

## Discretização da Equação de Schrödinger Independente do Tempo.

A equação de Schrödinger (ES) pode ser discretizada, usando métodos numéricos, para encontrar suas autofunções e seus autovalores. Vamos considerar a ES independente do tempo em uma dimensão com a massa efetiva dependente da posição

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \varphi_n(z) + V(z) \varphi_n(z) = E_n \varphi_n(z), \quad (\text{A.1})$$

em um potencial  $V(z)$  na forma de um poço de potencial, onde  $\varphi_n$ , nesse trabalho, pode ser tanto a função de onda do elétron quanto do buraco pesado ou buraco leve, no nível  $n$ . Vamos escrever esta equação em unidades adimensionais. Desta forma, usando a constante de Rydberg ( $R_y$ ) e o raio de Bohr ( $r_0$ )

$$\begin{aligned} R_y &= \frac{m_0 e^4}{\hbar^2}, \\ r_0 &= \hbar m_0 e^4, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

que encontramos os seguintes valores:  $R_y = 13.6eV$  e  $r_0 = 0.5$ ; sendo  $m_0$  a massa de repouso do elétron e  $e$  sua carga. Definimos os valores adimensionais como

$$\begin{aligned} V'(z) &= \frac{V(z)}{R_y}, \\ E' &= \frac{E_n}{R_y}, \\ z' &= \frac{z}{r_0}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Reescrevendo a Eq. A.1, com seus parâmetros adimensionais

$$-\frac{d}{dz'} \frac{1}{m(z')} \frac{d}{dz'} \varphi_n(z') + V'(z') \varphi_n(z') = E' \varphi_n(z'), \quad (\text{A.4})$$

e tendo em mente que, a partir daqui, a ES está adimensional vamos omitir a linha em  $V'(z)$ ,  $E'$  e  $z'$ , então

$$-\frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \varphi_n(z) + V(z) \varphi_n(z) = E \varphi_n(z). \quad (\text{A.5})$$

Usando a definição de derivada

$$\frac{d\varphi(z)}{dz} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\varphi(z+h) - \varphi(z)}{h}, \quad (\text{A.6})$$

e considerando que no computador não podemos fazer  $h = 0$ , então reescrevemos esta equação na forma

$$\frac{d\varphi(z)}{dz} = \frac{\varphi(z+h) - \varphi(z)}{h} + O(h^2), \quad (\text{A.7})$$

onde  $O(h^2)$  é um erro da ordem de  $h^2$ . Onde  $h$  é a distância entre  $i$  e  $i+1$ , que será tão pequena quanto possível. Devemos perceber que essa discretização é diferente da discretização dos níveis de energia de uma partícula confinada em um poço de potencial. Aqui, nós estamos discretizando a coordenada,  $z$ .

Discretizar significa que nosso sistema está dividido em  $N$  pontos discretos (Fig. A.1). Em cada ponto sabemos o valor da massa e do potencial. A função de onda  $\varphi(z)$  também é discretizada e escreveremos  $\varphi_i(z_i)$ , ou simplesmente de  $\varphi_i$ , como sendo a função de onda no ponto  $i$ , onde  $i = 0, 1, \dots, N-1$ .

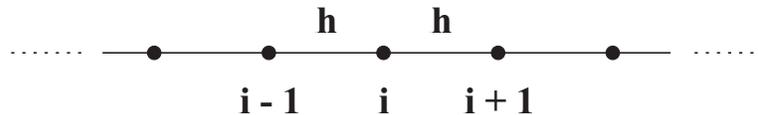


Figura A.1: Pontos de discretização.

Podemos calcular a derivada no ponto  $i$  usando o ponto posterior  $i+1$ , no sentido positivo de  $z$

$$\frac{d\varphi_i}{dz} = \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h}, \quad \text{direita}, \quad (\text{A.8})$$

mas também podemos usar o ponto anterior  $i - 1$ , no sentido negativo de  $z$

$$\frac{d\varphi_i}{dz} = \frac{\varphi_{i-1} - \varphi_i}{-h}, \quad \text{esquerda}, \quad (\text{A.9})$$

onde omitimos o termo  $O(h^2)$ . Usando essa derivada discretizada, pela esquerda na Eq. A.5, temos

$$E\varphi_i = -\frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{\varphi_{i-1} - \varphi_i}{-h} + V_i\varphi_i, \quad (\text{A.10})$$

e depois usando a derivada pela direita

$$E\varphi_i = -\left[ \frac{\varphi_{i-1+1} - \varphi_{i+1}}{-h^2 m_{i+1}} - \frac{\varphi_{i-1} - \varphi_i}{-h^2 m_i} \right] + V_i\varphi_i, \quad (\text{A.11})$$

ou seja,

$$E\varphi_i = -\frac{1}{h^2 m_i} \varphi_{i-1} + \left( \frac{1}{h^2 m_{i+1}} + \frac{1}{h^2 m_i} \right) \varphi_i - \frac{1}{h^2 m_{i+1}} \varphi_{i+1} + V_i\varphi_i. \quad (\text{A.12})$$

Com a equação acima podemos construir uma matriz tridiagonal simétrica  $N \times N$  na forma

$$Z\Psi = E\Psi, \quad (\text{A.13})$$

onde

$$Z = \begin{pmatrix} \frac{1}{h^2 m_1} + \frac{1}{h^2 m_0} + V_0 & -\frac{1}{h^2 m_1} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h^2 m_1} & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & -\frac{1}{h^2 m_{N-1}} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{h^2 m_{N-1}} & \frac{1}{h^2 m_N} + \frac{1}{h^2 m_{N-1}} + V_{N-1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

e

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

Vamos chamar os elementos da diagonal principal da matriz  $Z$  de  $D_i$

$$D_i = \frac{1}{h^2} \left( \frac{1}{m_{i+1}} + \frac{1}{m_i} \right) + V_i, \quad (\text{A.16})$$

e os elementos das diagonais secundárias de  $E_i$

$$E_i = \frac{1}{h^2} \frac{1}{m_i}. \quad (\text{A.17})$$

Para obter os autovalores e as autofunções da Eq. A.13 temos que resolver a matriz  $Z$ . Para isso usamos as subrotinas *Eispack* chamadas *IMTQL1* (que calcula somente os autovalores) e *IMTQL2* (que calcula as autofunção e os autovalores). Estas subrotinas encontram os autovalores (e autovetores) de uma matriz tridiagonal simétrica pelo método *ql* implícito.

Os dados de entrada na subrotina *IMTQL1* são os vetores  $D_i$  e  $E_i$ , na saída  $D_i$  indica os autovalores em ordem decrescente.

Os dados de entrada na subrotina *IMTQL1* são os vetores  $D_i$ ,  $E_i$  e a matriz  $Z = I$ , sendo  $I$  igual a matriz identidade, na saída  $D_i$  indica os autovalores em ordem decrescente e  $Z$  as autofunções.

# Apêndice B

## Resolução da Equação de Schrödinger Dependente do Tempo.

Esse método propõe resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo (Eq. (4.5)), para encontrar a função de onda num tempo posterior

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp \left[ -i \frac{\Delta t}{\hbar} \left( \frac{1}{2} \mathbf{P} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \mathbf{P} + V(\mathbf{r}) \right) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.18})$$

o tempo funciona como um parâmetro de iteração dessa equação.

Para resolver a Eq. (B.18) temos que saber aplicar a exponencial do termo cinético ( $\mathbf{P}$ ) com o termo potencial ( $V$ ) em  $\Psi$ . Essa exponencial é do tipo  $\exp(A+B)$ , onde  $A$  e  $B$  são operadores, e só é igual a  $\exp(A)\exp(B)$  quando  $[A,B]=0$ , o que não é o caso, pois o operador cinético não comuta com o operador potencial.

Nesse sentido usaremos uma expansão proposta por Suzuki [63] para a decomposição de exponenciais de operadores, onde em primeira aproximação, temos

$$\exp[x(A + B)] = \exp(xA) \exp(xB) + O(x^2), \quad (\text{B.19})$$

onde  $O(x^2)$  é um erro da ordem de  $x^2$ . Como foi dito acima, esse erro deverá ser zero quando os operadores comutarem. Outra expansão pode ser feita em segunda aproximação [63]

$$\exp[x(A + B)] = \exp(xB/2) \exp(xA) \exp(xB/2) + O(x^3), \quad (\text{B.20})$$

ou então em terceira aproximação [63]

$$\begin{aligned} \exp[x(A + B)] &= \exp(\gamma x B/2) \exp(\gamma x A) \exp(x B) \exp(\gamma^* x A) \times \\ &\quad \exp(\gamma^* x B/2) + O(x^3), \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

com  $\gamma = (3 + i\sqrt{3})/6$ .

Neste trabalho, vamos usar a segunda aproximação, onde  $x$  é o  $\Delta t$ ,  $A$  é o operador cinético e o  $B$  é o operador potencial. Portanto, a Eq. (B.18) ficará

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \\ \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}V(\mathbf{r})\right) \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\frac{1}{2}\mathbf{P}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}\right) \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}V(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r}, t) &+ O(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Vamos resolver esta equação em três passos diferente. Cada passo será uma aplicação de uma exponencial. Portanto, o primeiro passo será a primeira aplicação que chamaremos de  $\xi$ , ou seja

$$\xi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2\hbar}V(\mathbf{r})\right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.23})$$

Então, a Eq. (B.22) se torna

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}V(\mathbf{r})\right) \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\frac{1}{2}\mathbf{P}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t) + O(\Delta t^3). \quad (\text{B.24})$$

Como segundo passo, temos a aplicação da exponencial de  $\mathbf{P}$  em  $\xi$

$$\eta(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\frac{1}{2}\mathbf{P}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t), \quad (\text{B.25})$$

e decompondo  $\mathbf{P}$  em suas componentes cartesianas, temos

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \\ \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\left(\mathbf{P}_x\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}_x + \mathbf{P}_y\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}_y + \mathbf{P}_z\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}_z\right)\right] \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t). \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

$\mathbf{P}_x$ ,  $\mathbf{P}_y$  e  $\mathbf{P}_z$  comutam entre si, então podemos escrever a exponencial da soma como o produto das exponenciais

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\mathbf{P}_x\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}_x\right) \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\mathbf{P}_y\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}_y\right) \times \\ &\quad \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}\mathbf{P}_z\frac{1}{m(\mathbf{r})}\mathbf{P}_z\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t), \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

ou, substituindo  $\mathbf{P}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ , e da mesma forma para  $y$  e para  $z$ , escrevemos

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial y}\right) \times \\ &\quad \exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial z}\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t). \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Novamente, vamos aplicar cada exponencial por vez. Mas, agora, vamos usar a seguinte expansão

$$\begin{aligned} &\exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial x_i}\right) = \\ &\left(1 - i\hbar\frac{\Delta t}{4}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial x_i}\right)^{-1} \left(1 + i\hbar\frac{\Delta t}{4}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial x_i}\right) + O(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

onde  $x_i = x, y, z$ .

Vamos escrever a Eq. (B.28) na forma

$$\eta(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial x}\right) \eta''(\mathbf{r}, t + \Delta t), \quad (\text{B.30})$$

onde  $\eta''$  é a exponencial da derivada em  $y$  aplicado em  $\eta'$ , onde  $\eta'$  é a exponencial da derivada em  $z$  aplicado em  $\xi$ , ou seja

$$\eta''(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial y}\right) \eta'(\mathbf{r}, t + \Delta t), \quad (\text{B.31})$$

$$\eta'(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(i\hbar\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial z}\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t). \quad (\text{B.32})$$

Usando a Eq. (B.29) na equação anterior, temos

$$\eta'(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 - i\hbar\frac{\Delta t}{4}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial z}\right)^{-1} \cdot \left(1 + i\hbar\frac{\Delta t}{4}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial z}\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t). \quad (\text{B.33})$$

Ou então, escrevendo da seguinte forma

$$\left(1 - i\hbar\frac{\Delta t}{4}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial z}\right) \eta'(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 + i\hbar\frac{\Delta t}{4}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m(\mathbf{r})}\frac{\partial}{\partial z}\right) \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t), \quad (\text{B.34})$$

$$\eta'(\mathbf{r}, t + \Delta t) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial z} \eta'(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial z} \xi(\mathbf{r}, t + \Delta t), \quad (\text{B.35})$$

onde  $\varepsilon = i\hbar\Delta t/4$ .

Agora, para trabalharmos com as derivadas vamos escrever  $\xi_i$  em lugar de  $\xi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ , ou seja, vamos usar um função discreta para descrever  $\xi$ , onde o índice  $i$  indica a posição da coordenada na qual se esta derivando. Portanto, a derivada de uma função discreta  $f_i$  pode ser aproximado por

$$\frac{\partial}{\partial z} f_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z}, \quad \text{ou por} \quad (\text{B.36})$$

$$\frac{\partial}{\partial z} f_i = \frac{-f_{i-1} + f_i}{\Delta z}, \quad (\text{B.37})$$

onde aqui,  $f_i$  pode representar tanto  $\xi_i$  quanto  $\eta'_i$ . Estamos considerando  $\Delta z = z_{i+1} - z_i = \text{constante}$ .

Usaremos a derivada de  $f_i$  dado pela Eq. (B.36), portanto

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial z} f_i = \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z} = \frac{\partial}{\partial z} \frac{2}{m_{i+1} + m_i} \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z}, \quad (\text{B.38})$$

onde, também, usamos a massa como uma função discreta  $m_i$  e consideramos a massa  $m(\mathbf{r})$  como sendo o valor médio dos pontos  $i + 1$  e  $i$ .

Para a derivada do último termo na equação anterior, usaremos a Eq. (B.37), então

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial z} f_i = \frac{2}{\Delta z} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{f_{i+1} - f_i}{m_{i+1} + m_i} \right) = \frac{2}{\Delta z^2} \left( -\frac{f_i - f_{i-1}}{m_i + m_{i-1}} + \frac{f_{i+1} - f_i}{m_{i+1} + m_i} \right). \quad (\text{B.39})$$

Portanto, vamos substituir a relação

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial z} f_i = \frac{2}{\Delta z^2} \left( -\frac{f_i - f_{i-1}}{m_i + m_{i-1}} + \frac{f_{i+1} - f_i}{m_{i+1} + m_i} \right), \quad (\text{B.40})$$

na Eq. (B.35), lembrando que  $f_i$  pode ser trocado por  $\eta'_i$  ou por  $\xi_i$

$$\begin{aligned} \eta'_i - \frac{2\varepsilon}{\Delta z^2} \left( -\frac{\eta'_i - \eta'_{i-1}}{m_i + m_{i-1}} + \frac{\eta'_{i+1} - \eta'_i}{m_{i+1} + m_i} \right) = \\ \xi_i + \frac{2\varepsilon}{\Delta z^2} \left( -\frac{\xi_i - \xi_{i-1}}{m_i + m_{i-1}} + \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{m_{i+1} + m_i} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

ou, reescrevendo

$$\begin{aligned}
& -\frac{\varepsilon'}{m_i + m_{i-1}}\eta'_{i-1} + \left(1 + \frac{\varepsilon'}{m_i + m_{i-1}} + \frac{\varepsilon'}{m_{i+1} + m_i}\right)\eta'_i - \frac{\varepsilon'}{m_{i+1} + m_i}\eta'_{i+1} = \\
& \frac{\varepsilon'}{m_i + m_{i-1}}\xi_{i-1} + \left(1 - \frac{\varepsilon'}{m_i + m_{i-1}} - \frac{\varepsilon'}{m_{i+1} + m_i}\right)\xi_i + \frac{\varepsilon'}{m_{i+1} + m_i}\xi_{i+1}. \quad (\text{B.42})
\end{aligned}$$

onde  $\varepsilon' = 2\varepsilon/\Delta z^2 = i\hbar\Delta t/2\Delta z^2$ .

Essa equação pode ser posta na forma de uma matriz tridiagonal

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} 1 + \frac{\varepsilon'}{2m_1} + \frac{\varepsilon'}{m_2+m_1} & -\frac{\varepsilon'}{m_2+m_1} & 0 & 0 \\ -\frac{\varepsilon'}{m_2+m_1} & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & -\frac{\varepsilon'}{m_N+m_{N-1}} \\ 0 & 0 & -\frac{\varepsilon'}{m_N+m_{N-1}} & 1 + \frac{\varepsilon'}{m_N+m_{N-1}} + \frac{\varepsilon'}{2m_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta'_1 \\ \eta'_2 \\ \vdots \\ \eta'_N \end{pmatrix} = \\
& \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon'}{2m_1} - \frac{\varepsilon'}{m_2+m_1} & \frac{\varepsilon'}{m_2+m_1} & 0 & 0 \\ \frac{\varepsilon'}{m_2+m_1} & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \frac{\varepsilon'}{m_N+m_{N-1}} \\ 0 & 0 & \frac{\varepsilon'}{m_N+m_{N-1}} & 1 - \frac{\varepsilon'}{m_N+m_{N-1}} - \frac{\varepsilon'}{2m_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_N \end{pmatrix}, \quad (\text{B.43})
\end{aligned}$$

onde queremos encontrar a matriz  $\eta'$ .

Para resolver a matriz acima nós recorreremos a uma subrotina encontrada nos livros de *Numerical Recipes*. Com isso, resolvemos a Eq. (B.34), para resolver a Eq. (B.33) e encontrar  $\eta''$  temos que resolver essa matriz novamente substituindo os seguintes termos:  $\Delta z \rightarrow \Delta y$ ,  $\xi \rightarrow \eta'$  e  $\eta' \rightarrow \eta''$ . Conhecendo a matriz  $\eta''$ , podemos fazer o mesmo procedimento anterior para calcular  $\eta$ . Portanto, para encontrar a função de onda no tempo  $t + \Delta t$ , só nos resta calcular

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{\Delta t}{2\hbar}V(\mathbf{r})\right)\eta(\mathbf{r}, t + \Delta t). \quad (\text{B.44})$$

# Apêndice C

## Artigos Publicados

C. L. N. Oliveira, J. S. Souza, J. A. K. Freire, V. N. Freire, M. H. Degani, G. A. Farias, *Lifetime of Quase-bound States in Open Semiconductor Quantum Structures*. Physica Status Solidi C (em impressão).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Effects of Interfacial Profiles on Quantum Levels in  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  Graded Spherical Quantum Dots*. Applied Surface Science **237**, 266 (2004).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Inhomogeneous Broadening arising from Interface Fluctuations in Strained  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  and  $(In_uGa_{1-u}As)_v(InP)_{1-v}/InP$  Quantum Wells*. Applied Surface Science **234**, 38 (2004).

## Trabalhos Apresentados em Encontros Internacionais

C. L. N. Oliveira, J. S. Souza, J. A. K. Freire, V. N. Freire, M. H. Degani, G. A. Farias, *Lifetime of Quase-bound States in Open Semiconductor Quantum Structures*. XII International Conference on Superlattices, Nanostructured and Nanodevices, Cancun - Mexico (2004).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Inhomogeneous broadening in  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  strained quantum dots*. 7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures, Nara - Japão (2003).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Inhomogeneous Broadening Arising from Interface Fluctuations in Strained  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  and  $(In_xGa_{1-x}As)_z(InP)_{1-z}/InP$  Quantum Well*. 9th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces, Interfaces and Nanostructures, Madrid - Espanha (2003).

## Trabalhos Apresentados em Encontros Nacionais

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Excitons em Poços Quânticos  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  e  $(In_xGa_{1-x}As)_y(InP)_{1-y}/InP$* . XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Poços de Caldas - MG (2004).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Alargamento Não-Homogêneo em Pontos Quânticos  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  com Strain*. XXI Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, Fortaleza - CE (2003).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Energia de ligação em poços Quânticos  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  e  $(In_xGa_{1-x}As)_z(InP)_{1-z}/InP$  com Strain: Cálculo Variacional X Potencial Efetivo*. XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu - MG (2003).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Excitons em Poços Quânticos  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  com Strain sob a ação de um Campo Elétrico Aplicado*. XX Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, Recife - PE (2002).

C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Efeitos Interfaciais nas propriedades óticas de poços quânticos  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$* . XIX Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, Natal - RN (2001).

# Referências

- [1] <http://www.lsi.usp.br/> chip.
- [2] <http://www.pbs.org/transistor/>.
- [3] Adenilson J. Chiquito, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **21**, 514 (1999).
- [4] G. Margaritondo, *Electronic Structure of Semiconductor Heterojunctions*, (Jaca Book, Milão, 1988).
- [5] L. Esaki and R. Tsu, IBM Res. Note, **RC-2418** (1969).
- [6] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [7] K. Capelle, R. Gargano, A. C. Borin, J. C. Belchior, E. C. Montenegro, G. M. Ribeiro, A. N. Brito, H. F. Santos, R. B. Alencastro, D. S. Galvão, R. Mota, S. O. Dantas, G. A. Farias, R. H. Miwa, e E. Z. Silva, *Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, organizado por Hélio F. Santos, Pablo Z. Coura, Sócrates O. Dantas, e Paulo M. V. B. Barone (Livraria da Física, São Paulo, 2003).
- [8] P. Matagne, *Quantum Modelling of Single-Electron Charging in Vertical Quantum Dots*, Thèse de doctorat défendue en Sciences appliquées de l'Université de Liège, Belgique, (2001).
- [9] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (Addison Wesley Longman, New York, 1994).

- 
- [10] R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
- [11] L. L. Chang, L. Esaki and R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- [12] L. Esaki, and L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 495 (1974).
- [13] R. Dingle, W. Wiegman, and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827 (1974).
- [14] S. M. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2004).
- [15] C. M. Wolfe, N. Holonyak Jr., G. E. Stillman *Physics Properties of Semiconductor*, (Prentice Hall, New Jersey, 1989).
- [16] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, (John Wiley and Sons, New Jersey, 1969).
- [17] M. Balkanski, and R. F. Wallis, *Semiconductor Physics and Applications*, (Oxford, New York, 2000).
- [18] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*, (John Wiley and Sons, New York, 1995).
- [19] A. C. Gossard, *IEEE of Quantum Electronics*, **QE-22**, No. 9, 1649 (1986)
- [20] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias, *Appl. Surf. Science* **234**, 38 (2004).
- [21] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias, *Appl. Surf. Science* **237**, 266 (2004).
- [22] J. H. Davies, D. M. Bruls, J. W. A. M. Vugs, and P. M. Koenraad, *J. Appl. Phys.* **91**, 4171 (2002).
- [23] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, (Les Éditions de Physique, France, 1988).

- 
- [24] M. C. A. Lima, G. A. Farias, and V. N. Freire, Phys. Rev. B **52**, 5777 (1995).
- [25] J. R. Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, Superlat. and Microstr. **20**, 155 (1996).
- [26] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, (Springer-Verlag, Germany, 1988).
- [27] J. Frenkel, Phys. Rev. **37**, 17 e 1276 (1931).
- [28] G. H. Wannier, Phys. Rev. **55**, 191 (1937).
- [29] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics*, (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976).
- [30] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics*, (John Wiley and Sons, England, 2000).
- [31] W. D. Callister, Jr., *Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução*, (LTC, Rio de Janeiro, 2002).
- [32] J. M. Hinckley, and J. Singh, Phys. Rev. B, **42**, 3546 (1990).
- [33] <http://www.physlink.com/News/071403QuantumDotLED.cfm>.
- [34] Viying Wu, Rong Fan, and Peidong Yang, NanoLetters **2**, 83 (2002).
- [35] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, Appl. Phys. Rev. **89**, 5815 (2001).
- [36] E. Herbert Li, Phys. E **5**, 215 (2000).
- [37] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).
- [38] S. Adachi, J. Appl. Phys. **61**, 4869 (1987).

- 
- [39] K. H. Schmidt, G. Medeiros-Ribeiro, M. Oestreich, P. M. Petroff, and G. H. Döhler, Phys. Rev. B **54**, 11346 (1996).
- [40] R. Atanasov, F. Bassani, A. D'Andrea, and N. Tomassini, Phys. Rev. B **50**, 14381 (1994-I).
- [41] Chris G. Van de Walle, Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989-II).
- [42] Ji-Wei Wu, Solid State Communic. **69**, 1057 (1989).
- [43] F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1468 (1996).
- [44] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Wood, and C. A. Burrus, Phys. Rev. B **32**, 1043 (1985).
- [45] P. Harrison, T. Piorek, W. E. Hagston, and T. Stirner, Superlatt. Microstruct **20**, 45 (1996).
- [46] J. Diouri, A. Taqi, A. El Haddad, M. Katih, and E. Feddi, Semicond. Sci. Technol. **18**, 377 (2003).
- [47] F. L. Madarasz, F. Szmulowicz, F. K. Hopkins, and D. L. Dorsey, Phys. Rev. B **49**, 13528 (1994).
- [48] G. Li, S. V. Branis, and K. K. Bajaj, J. Appl. Phys. **77**, 1097 (1995).
- [49] A. Balandin, and S. Bandyopadhyay, Superlat. and Microstr. **19**, 97 (1996).
- [50] A. Balandin, and S. Bandyopadhyay, Phys. Rev. B **52**, 8312 (1995).
- [51] D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, (John Wiley and Sons, England, (1999).
- [52] M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, and A. Forchel, Nature **405**, 923 (2000).

- 
- [53] D. M. Bruls, J. W. A. M. Vugs, P. M. Koenraad, H. W. M. Salemink, J. H. Wolter, M. Hopkinson, M. S. Skolnik, Fei Long, and S. P. A. Gill, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1708 (2002).
- [54] D. M. Bruls, P. M. Koenraad, H. W. M. Salemink, J. H. Wolter, M. Hopkinson, and M. S. Skolnik, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3758 (2003).
- [55] H. Eisele, A. Lenz, Ch. Hennig, R. Timm, M. Ternes, and M. Dähne, *J. of Crystal Growth* **248**, 322 (2003).
- [56] P. W. Fry, I. E. Itskevich, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, J. J. Finley, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, L. R. Wilson, I. A. Larkin, P. A. Maksym, M. Hopkinson, M. Al-Khafaji, J. P. R. David, A. G. Cullis, G. Hill, and J. C. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 733 (2000).
- [57] M. H. Degani, *Phys. Rev. B* **66**, 233306 (2002).
- [58] M. H. Degani, and J. P. Leburton, *Phys. Rev. B* **44**, 10901 (1991).
- [59] M. H. Degani, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 57 (1991).
- [60] M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, E. Ribeiro, G. Medeiros-Ribeiro, W. Carvalho, Jr., M. Z. Maialle, and M. H. Degani, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2743 (2002).
- [61] J. R. Madureira, M. Z. Maialle, and M. H. Degani, *Phys. Rev. B* **66**, 075332 (2002).
- [62] J. R. Madureira, M. H. Degani, and M. Z. Maialle, *Phys. Rev. B* **68**, 161301(R) (2003).
- [63] M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **146**, 319 (1990).