

Confinamento Quântico em Hetero-estruturas Semicondutoras de Baixa Dimensionalidade

Jusciane da Costa e Silva

23 de abril de 2008

Jusciane da Costa e Silva

*Confinamento Quântico em
Hetero-estruturas Semicondutoras de
Baixa Dimensionalidade*

Tese apresentada ao Departamento de Física
da Universidade Federal do Ceará, como
parte dos requisitos para a obtenção do
Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

Co-orientador:

Prof. Dr. José Alexander King de Freire
In memoriam

DOUTORADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ.

Fortaleza – CE

17 de Abril de 2008

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- S58c Silva, Jusciane da Costa e.
Conflnamento quântico em hetero-estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade / Jusciane da Costa e Silva. – 2008.
161 f. : il. color.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2008.
Orientação: Prof. Dr. Gil de Aquino Farias.
Coorientação: Prof. Dr. José Alexander King de Freire.
1. Teoria de bandas nos sólidos. 2. Massa efetiva. 3. Conflnamento quântico. I. Título.
- CDD 530
-

Tese de doutorado sob o título Confinamento Quântico em Hetero-estruturas Semicondutoras de Baixa Dimensionalidade, defendida por Jusciane da Costa e Silva e aprovada em 17 de Abril de 2008, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias
Departamento de Física - UFC
Orientador

Prof. Dr. Jeanlex de Sousa
Departamento de Física - UFC

Prof. Dr. Valder Nogueira Freire
Departamento de Física - UFC

Prof. Dr. Eudenilson Lins Alburquerque
Departamento de Física - UFRN

Prof. Dr. Manoel Silva de Vasconcelos
Centro Federal de Educação Tecnológica do Maranhão
- CEFET

*Ao orientador-amigo José Alexander de King Freire.
(In Memoriam)*

Agradecimentos

Agradeço a Deus por todas as conquistas e por sua presença constante em minha vida.

Ao professor Gil de Aquino, pela orientação, disponibilidade, valiosas discursões e confiança em mim depositada, os meus sinceros agradecimentos e gratidão.

Ao professor José Alexander de King Freire pela orientação, disponibilidade, discursões, apoio e principalmente por sua amizade (In Memoriam).

À coordenação desse curso de Pós-graduação, na pessoa do Prof. Dr. Josué Mendes Filho, pelo apoio necessário à realização deste trabalho.

A todos professores da graduação (UERN) e da pós-graduação (UFC), pela contribuição fundamental que deram à minha formação acadêmica.

Aos professores M. H. Degani, Valder Freire e Jeanlex de Sousa pela colaboração nos trabalhos desenvolvidos ao longo do mestrado e doutorado.

Aos membros da banca examinadora, os professores Drs. Jeanlex, Valder, Manoel e em especial ao professor Eudenilson Lins de Albuquerque a quem eu tenho um grande carinho.

Aos colegas de trabalho, Ítalo, Leandro, Davi, Diego, Florêncio, Lucidalva, Felipe Munarin e em especial ao meu amigo Andrey pelas inúmeras discursões e colaborações.

A Jeanlex pelo incentivo, discursões e o entusiasmo sempre presente em nossas conversas.

Aos meus pais, Nitinha e José Melo, minhas irmãs Jeane e Joseane e ao meu amado irmão Jairo (que o Senhor Deus o tirou de nossa presença) e a todos meus sobrinhos (Jamilly, Janine, Jordana, Eudes, Joara, Joana e Ellen) pelo apoio, confiança e amor recebidos.

Aos amigos João Cláudio, Aldilene, Marília Santos, Carlos Alberto, Luciana Angelica, Joelma e xico, pela amizade e carinho.

Aos amigos-irmãos que eu fiz nestes 6 anos de convivência aqui em Fortaleza, Roberval,

Erlânia e Jaidete.

À minha grande amiga-irmã Subênia Karine pelo incentivo, conselhos, força e apoio em todos os momentos.

Aos funcionários do Departamento de Física, em especial aos secretários mais eficientes que já conheci, Elias e Rejane, pela disponibilidade e amizade.

Ao CNPq e à FUNCAP, pelo apoio financeiro.

Resumo

Os materiais semicondutores são responsáveis pelo grande desenvolvimento na indústria eletrônica e surgimento de novas tecnologias. O conceito de hetero-estrutura deu um grande impulso à física do estado sólido. É impossível imaginar a moderna física do estado sólido sem hetero-estruturas semicondutoras. A física de semicondutores está atualmente concentrada no estudo dos chamados sistemas de dimensões reduzidas: poços, fios, pontos e anéis quânticos, assunto de pesquisa de dois terços da comunidade de física de semicondutores.

Neste trabalho, investigaremos o confinamento dos portadores e dos *excitons* em hetero-estruturas de baixas dimensão; poço, ponto e anel quântico. Iniciaremos com o estudo das propriedades excitônicas de poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$, considerando duas possibilidades para o alinhamento de banda: tipo-I, onde os portadores de cargas, elétron e buraco, estão confinados no mesmo material, e tipo-II, onde os portadores estão espacialmente localizados em materiais diferentes. Usaremos um Hamiltoniano que, na aproximação da massa efetiva, leva em conta a existência de interfaces não abruptas entre os materiais que compõe o sistema. Nos sistemas tipo-I, observamos que a energia do *exciton* sofre um aumento quando consideramos campos elétricos aplicados. Já em sistemas tipo-II, o campo magnético afeta bem mais o confinamento do elétron do que o do buraco.

Investigamos alguns fenômenos nos anéis quânticos, como: impurezas, efeitos geométricos, rugosidade e anéis duplos. Calculamos os níveis de energia do elétron em anéis quânticos considerando um campo magnético perpendicular, levando em conta um modelo realístico, que consiste em anéis com barreiras e potenciais finitos, não limitado a pequenas perturbações. Quando consideramos a presença de uma impureza no anel quântico, há uma quebra de simetria no sistema e conseqüentemente as oscilações Aharanov-Bohm (AB) são anuladas. Entretanto, para duas impurezas, as oscilações AB são recuperadas se as distâncias entre as impurezas e o plano forem iguais, no caso das impurezas positivas e para impurezas negativas as oscilações são recuperadas independente das posições das impurezas. A existência de interfaces rugosas é responsável por um considerável deslocamento nas energias dos portadores. Além disso, a degenerescência nos pontos de transição do momento angular nas oscilações AB é levantada quando consideramos superfícies rugosas, em casos especiais, as oscilações AB nas energias do estado fundamental pode ser anuladas.

Fizemos também um estudo teórico da energia dos portadores em pontos quânticos tipo-I e tipo-II, além de um estudo em pontos quânticos duplos $InGaAs/GaAs$ analisando o efeito de afastamento entre os pontos e considerando dois tipos de acoplamento: lateral e vertical. A equação de Schödinger em três dimensões, na aproximação da massa efetiva, é resolvida para elétrons e buracos a partir de um método de evolução temporal da função de onda. Observamos que as curvas do *Stark shift* das energias de ligação e total do *exciton* em pontos quânticos $Si/Si_{0,85}Ge_{0,15}$ tipo-I são assimétricas devido à existência de

um dipolo elétrico intrínseco nestes sistemas. No entanto, quando consideramos o efeito de um campo magnético paralelo ao plano, o *Stark shift* torna-se mais simétrico. No caso dos pontos duplos, vimos que a energia de confinamento do elétron em pontos quânticos acoplados lateralmente, quando consideramos os raios dos pontos iguais, degeneram à medida que a distância entre os pontos aumenta. Entretanto, quando os raios dos pontos são diferentes, essas energias não têm mudanças significativas. Para o caso do acoplamento vertical, o comportamento é semelhante ao dos pontos lado a lado: Para raios iguais em ambos os pontos quânticos, os pares de estados tornam-se degenerados à medida que a distância entre os pontos aumenta, o que não acontece quando consideramos o caso de pontos com raios diferentes.

Abstract

Semiconductor materials are responsible for large development in the electronic industry and appearance of new technologies. The concept of heterostructure gave a large impulse to the solid-state physics. It is impossible to imagine modern solid-state physics without semiconductor heterostructures. The physics of semiconductors is nowadays concentrated in the study of the so-called low dimension systems: quantum wells, wires, dots and rings, which are the subject of research of two-thirds of the semiconductors physics community.

In this work, we investigate the confinement of carriers and excitons in low dimensional heterostructure; quantum well, dots and ring. Starting with the study of the excitonic properties of $Si/Si_{1-x}Ge_x$, we consider two possibilities for the band alignment: type-I, where charge carries, electrons and holes, are confined in the same material, and type-II, where these carriers are spatially separated, in different materials. We use an Hamiltonian that, in effective mass approximation, takes into account the existence of non-abrupt interfaces in the system. In type-I, we observed that the exciton energy is increasing when considering applied electric field. In the type-II systems, application of magnetic field affect more the electron confinement than the hole.

We investigate some phenomena in quantum rings, such as impurities, geometric effects, roughness and double rings. We calculate the energy levels of the electrons in quantum rings considering a perpendicular magnetic field, taking into account a realistic model, which consists of rings with finite barrier and potential, not limited to small perturbation. When considering the presence of impurity in the quantum ring, there is a breaking of symmetry in the system and, consequently, Aharonov-Bohm (AB) fluctuations are vanish. However, for two impurities, fluctuations are AB recovered if $z_1 = z_2$, in the case of positive impurities and for negative impurities fluctuations are recovered independent of positions of impurities. The existence of interfaces roughness is responsible for a considerable shift in the energy carriers. Moreover, the degeneration points of transition in the angular moment AB are raised when the rough surfaces are considered, and in special cases, oscillations in fundamental state are suppressed.

Theoretical study of carriers energy in type-I and type-II quantum dots is performed, and also in double quantum dots $InGaAs/GaAs$, analyzing the effect of distance between the dots, considering two types of coupling: lateral and vertical. The Schödinger equation in three dimensions, in the effective mass approximation, is solved for electrons and holes using a time evolution method of the wave function. We have observed that the curves of *Stark shift* from binding energy and total exciton in $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ type-I quantum dots are asymmetric, because of the existence of an intrinsic electric dipole in these systems. However, when considering the effect of the magnetic field parallel to the plane, *Stark shift* becomes more symmetric. For double dots, we see that electron confinement energies in coupled laterally quantum dots, when considering the same radius for both dots degenerate

as the distance between the dots increases. However, when the radii of the dots are different, their energy are not significantly changed. In the case of vertical coupling, the behavior is similar to the dots side by side. For radii equal in both quantum dots, the pair of states becomes degenerated as distance between the dots increases, which is not the case when considering of dots with different radii.

Sumário

Lista de Figuras	p. xiii
Lista de Tabelas	p. xxii
1 Introdução	p. 23
1.1 Teoria de Bandas nos Sólidos	p. 24
1.2 Aproximação da Massa Efetiva	p. 30
1.3 Confinamento Quântico	p. 32
1.4 Hetero-estruturas	p. 34
1.4.1 Poços Quânticos	p. 35
1.4.2 Fios Quânticos	p. 37
1.4.3 Anéis Quânticos	p. 38
1.4.4 Pontos Quânticos	p. 39
1.4.4.1 Métodos de Crescimento	p. 40
1.5 <i>Excitons</i>	p. 42
1.6 Campo Magnético	p. 45
1.6.1 Efeito Aharonov-Bohm	p. 46
1.7 Síntese da Tese	p. 47
2 Poços Quânticos	p. 49
2.1 Interfaces Graduais	p. 49
2.2 Hamiltoniano do Sistema	p. 51
2.2.1 Alinhamento de Banda Tipo-I em Sistemas $Si/Si_{1-x}Ge_x$	p. 54

<i>Sumário</i>	xii
2.2.2 Alinhamento de Banda em Sistemas Tipo-II	p. 57
2.3 <i>Strain</i>	p. 60
2.4 Resultados e Discussões	p. 62
2.5 Fios Quânticos	p. 73
3 Anéis Quânticos	p. 75
3.1 Modelo Teórico	p. 77
3.1.1 Propagação no Tempo Imaginário	p. 81
3.2 Efeitos Causados por Impurezas nos Níveis Eletrônicos	p. 82
3.3 Efeitos Geométricos nos Níveis Eletrônicos	p. 88
3.4 Anéis Rugosos	p. 94
3.5 Anéis Duplos	p. 97
4 Pontos Quânticos	p. 107
4.1 Método Numérico	p. 109
4.2 Resultados Tipo-I	p. 110
4.3 Resultados Tipo-II	p. 114
4.4 Pontos Quânticos Duplos	p. 117
5 Conclusões e Perspectivas	p. 123
Apêndice A – Cálculos da Energia de Ligação do Exciton em Sistemas 3D	p. 127
Apêndice B – Artigos Publicados	p. 142
Referências	p. 154

Lista de Figuras

- 1 (a) Esquema de níveis de energia para dois átomos isolados. (b) Esquema de níveis de energia para os mesmos dois átomos numa molécula diatômica. (c) Esquema de níveis de energia para quatro átomos do mesmo tipo num cristal rudimentar unidimensional. Observe que o nível mais baixo não é desdobrado apreciavelmente porque as autofunções atômicas para esse nível não se superpõem de forma significativa. . . . p. 25
- 2 Representação esquemática de um (a) cristal de parâmetro de rede a e (b) seu potencial periódico. p. 25
- 3 Energias permitidas em função do vetor κ , para uma rede unidimensional de periodicidade a . A linha tracejada é a energia para o caso de um elétron livre. As bandas de energia permitidas e proibidas resultantes aparecem à direita. p. 27
- 4 Estrutura de banda do GaAs. p. 28
- 5 (a) Transição de *gap* direto, neste caso, a transição através do *gap* ocorre com a emissão de um fóton de frequência $\omega_g = E_g/\hbar$ e com vetor de onda desprezível na escala da figura. (b) No semiconductor de *gap* indireto, a transição através do *gap* envolve um fóton de frequência $\omega \approx \omega_g$ e $\kappa \approx 0$ e um fônon com frequência Ω muito menor que ω_g e vetor de onda ω_g e $\kappa \simeq \kappa_{KZ}$, de tal forma a conservar energia e momentum totais. p. 29
- 6 Representação esquemática de elétrons na banda de valência no espaço κ : (a) na ausência de campo elétrico e (b) e (c) na presença de um campo elétrico aplicado na direção x p. 31
- 7 Banda de condução e valência de um semiconductor. Na banda de valência temos o buraco pesado - (hh) e buraco leve - (lh). p. 32

8	Confinamento das hetero-estruturas em relação a dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c) e seus respectivos densidades de estados.	p. 33
9	Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores diferentes: (a) formando um potencial de confinamento num poço, (b) num fio quântico e (c) um ponto quântico.	p. 35
10	Poço quântico formado pela justaposição de várias camadas semicondutoras.	p. 36
11	Imagens de fios obtida por microspocia de força atômica-AFM.	p. 37
12	Imagens de anéis quânticos <i>InGaAs</i> obtida por microspocia de força atômica-AFM.	p. 38
13	Imagens de um ponto quânticos <i>InAs/GaAs</i> obtida por microspocia de força atômica-AFM.	p. 39
14	Diagrama esquemático das três técnicas de crescimento mais utilizadas: Frank-van der Merwe (a), Volmer-Weber (b), e Stranski-Krastanow (c).	p. 41
15	Imagem de pontos quânticos <i>SiGe</i> , crescido em uma camada de <i>Si</i> por MBE, obtida através microscopia de força atômica [48].	p. 42
16	Representação esquemática mostrando a extensão da função envelope dos <i>excitons</i> de Frenkel e Wannier-Mott numa estrutura periódica[49].	p. 43
17	Representação esquemática do alinhamento de bandas tipo-I e tipo-II.	p. 44
18	Esquema idealizado da experiência proposta por Aharonov-Bohm. Entre as fendas, está colocado um ímã, cujo campo magnético B , como se sabe, só é diferente de zero no seu interior, $B \neq 0$. Já o potencial vetor, diferente de zero em todo o espaço, causa efeitos opostos nas trajetórias 1 e 2.	p. 47
19	(a) Imagem de dois poços quânticos obtida por resolução atômica de um XSTM mostrando a concentração de átomos de Índio (pontos claros) em GaAs [58], (b) Perfil do potencial para alinhamento de banda tipo-I com interfaces graduais. As linhas vertical indicam os limites das regiões interfaciais.	p. 50
20	Representação esquemática de um poço quântico tipo-I.	p. 54

- 21 Representação esquemática de um poço quântico tipo-II. p. 57
- 22 (a) Energia de ligação e (b) total do *exciton* e - hh em poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I em função da largura do poço quântico, usando uma aproximação 2D para a função de onda e considerando interfaces graduais de 0 Å (linha sólida), 5 Å (linha pontilhada), 10 Å (linha tracejada) e 15 Å (linha tracejada-pontilhada). p. 63
- 23 (a) *Stark shift* (linha sólida, símbolo quadrado), energia de ligação (linha tracejada, símbolo círculos) e energia total do *exciton* (linha pontilhada, símbolo triângulo) em função do campo elétrico, em poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I, considerando interfaces abruptas (linhas) e interfaces graduais de $w = 15$ Å de espessura (símbolos). (b) *Shift* da energia do *exciton* devido um campo elétrico $F = 2$ kV/cm em função da largura do poço quântico, considerando interfaces de $w = 0$ Å (linha sólida) e $w = 15$ Å de espessura (linha pontilhada). p. 65
- 24 Valores absolutos da energia de ligação dos *excitons* em poços quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II abruptos como função da largura do poço, considerando as aproximações 2D (linha pontilhada) e 3D (linha sólida) para a função de onda. p. 66
- 25 (a) Valores absolutos da energia de ligação e (b) energia total do *exciton* e - hh em poços quânticos $Si/Si_{0.7}Ge_{0.30}$ tipo-II em função da largura do poço quântico, usando uma função de onda 3D e considerando interfaces abruptas 0 Å (linha sólida), e graduais de 5 Å (linha pontilhada), 10 Å (linha tracejada) e 15 Å (tracejada-pontilhada). p. 67
- 26 *Shift* da energia total do *exciton* como função do campo elétrico em poços quânticos tipo-II $Si/Si_{0.7}Ge_{0.30}$, para um poço de $L = 70$ Å de largura, considerando duas possibilidades para a função de onda: 3D (linhas) e 2D (símbolos) com interfaces abruptas (linha sólida) e interface gradual de $w = 15$ Å (linha pontilhada), para campos magnéticos de $B = 0$ T e $B = 25$ T. p. 68
- 27 *Shift* da energia total do *exciton* em função do campo magnético B , para poços quânticos abruptos de 70 Å de largura $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I (sólido) e $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II usando as aproximações 2D (linha pontilhada) e 3D (linha tracejada). p. 69

- 28 Representação da distribuição da densidade de probabilidade $p(z_e, z_h)$ para um poços quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II abrupto de 50 Å de largura, considerando (a) $B = 0$ T e (b) $B = 25$ T, dentro da aproximação 2D. (c) e (d) são os resultados para mesmo campo magnético, considerando uma função de onda 3D. p. 70
- 29 *Shift* da energia $\Delta E_n = E_n(B) - E_n(B = 0)$, em função do campo magnético para (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, para anéis de tamanho $|\vec{\rho}| = (a + b)/2 = 190$ Å e largura $b - a = 60$ Å (linha sólida), $b - a = 120$ Å (linha tracejada), respectivamente. p. 82
- 30 Energia do (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, em função do campo magnético aplicado, para uma impureza hidrogênica positiva em duas distâncias diferentes do plano do anel z_i , $z_1 = 10$ Å (linha sólida) e $z_2 = 30$ Å (linha tracejada), com $a = 140$ Å e $b = 240$ Å . p. 83
- 31 Raio médio do estado fundamental r_0 (linha sólida) e primeiro estado excitado r_1 (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, para os mesmos parâmetros da Fig.30. p. 84
- 32 Energia do (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, em função do campo magnético aplicado, para uma impureza hidrogênica negativa em duas distâncias diferentes z_i do plano do anel: $z_1 = 10$ Å (linha sólida) e $z_2 = 30$ Å (linha tracejada), para os mesmos parâmetros do anel na Fig. 30. p. 85
- 33 Raio médio do (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, em função do campo magnético aplicado, para uma impureza hidrogênica negativa em duas distâncias diferentes do plano do anel: $z_1 = 10$ Å (linha sólida) e $z_2 = 30$ Å (linha tracejada) para os mesmos parâmetros do anel na Fig.30. p. 86
- 34 Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), para duas impurezas hidrogênicas positivas próximo ao anel quântico de tamanho $a = 140$ Å e $b = 240$ Å com a primeira impureza localizada em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ Å}, 0, z_1)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ Å}, 0, z_2)$. Em (a) $z_1 = 10$ Å e $z_2 = 30$ Å, (b) $z_1 = z_2 = 30$ Å ($z_1 = z_2 = 10$ Å no *inset*). p. 87

- 35 Raio médio do estado fundamental e primeiro estado excitado, para o mesmo anel e parâmetros usado na Fig.34. A linha tracejada corresponde a $z_1 = z_2 = 30 \text{ \AA}$ ($z_1 = z_2 = 10 \text{ \AA}$ no insete), e a linha sólida para $z_1 = 10 \text{ \AA}$ e $z_2 = 30 \text{ \AA}$ o estado fundamental (estado excitado no *inset*), respectivamente. p. 88
- 36 Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), com duas impurezas hidrogênicas negativas próximo ao anel quântico de tamanho $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$ com a primeira impureza localizada em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, z_1)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ \AA}, 0, z_2)$. Em (a) $z_1 = 10 \text{ \AA}$ e $z_2 = 30 \text{ \AA}$, (b) $z_1 = z_2 = 30 \text{ \AA}$ e $z_1 = z_2 = 10 \text{ \AA}$ no *inset*, respectivamente. p. 89
- 37 Raio médio do estado fundamental com duas impurezas hidrogênicas negativas no anel quântico com tamanho $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$ com a primeira impureza fixa em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, z_i)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ \AA}, 0, z_i)$, em duas diferentes posições no plano do anel, $z_1 = 10 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $z_2 = 30 \text{ \AA}$ (linha tracejada), e para a primeira impureza fixa em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, 30 \text{ \AA})$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (190 \text{ \AA}, 0, 30 \text{ \AA})$ (linha pontilhada). p. 90
- 38 Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, para diferentes valores de excentricidade, $R_I = 140 \text{ \AA}$, e $R_E = 240 \text{ \AA}$ p. 91
- 39 Raio médio do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, para diferentes valores de excentricidade. Para os mesmos parâmetros usado para as Fig. 38. p. 92
- 40 Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, com diferentes valores de excentricidade e considerando os casos onde o anel interno tem simetria cilíndrica e a barreira externa é uma elipse concêntrica (sistema *A*), e o anel elíptico com mesma excentricidade (sistema *B*) e mesma área. p. 93

- 41 Raio médio do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético, para o mesmo sistema da Fig. 40. p. 93
- 42 Perfil do potencial para (a) um anel ideal e para anel com rugosidades nas superfícies (b) interna, (c) externa e (d) em ambas superfícies, considerando $R_I = 140 \text{ \AA}$, $R_E = 240 \text{ \AA}$, $\sigma = 2 \text{ \AA}$ e $L_c = 10 \text{ \AA}$ p. 95
- 43 (a) Espectro de energia do elétron e (b) transições das energias do estado fundamental (sólida) para o primeiro (tracejada), segundo (pontilhada) e terceiro (tracejada-pontilhada) estados excitados, em função do campo magnético para um anel ideal, considerando $R_I = 140 \text{ \AA}$ e $R_E = 240 \text{ \AA}$. p. 96
- 44 Espectro de energia do elétron em função do campo magnético em um anel com rugosidade na superfície (a) interna, (b) externa e (c) em ambas superfícies, considerando $L_c = 5 \text{ \AA}$, para $\sigma = 2 \text{ \AA}$ (sólida) e $\sigma = 10 \text{ \AA}$ (pontilhada). p. 96
- 45 Espectro de energia do elétron em função do campo magnético em um anel com rugosidade na superfície (a) interna, (b) externa e (c) em ambas superfícies, considerando $L_c = 20 \text{ \AA}$, para $\sigma = 2 \text{ \AA}$ (sólida) e $\sigma = 10 \text{ \AA}$ (pontilhada). p. 97
- 46 Transições das energias do estado fundamental e segundo estado excitado, em função do campo magnético em um anel com rugosidade na superfície interna (pontilha-da), externa (tracejada) e ambas superfícies (sólida), considerando $L_c = 5 \text{ \AA}$, para (a) $\sigma = 2 \text{ \AA}$ e (b) $\sigma = 10 \text{ \AA}$ p. 98
- 47 Perfil do potencial do elétron em anéis quânticos duplos, considerando quatro possibilidades para a geometria dos anéis: (a) circular, (b) interno elíptico e o externo circular, (c) o anel interno é circular e o externo é elíptico, e (d) ambos anéis, interno e externo, são elípticos. p. 99
- 48 Espectro de energia em função do campo magnético em um anel duplo com geometria circular, com $R_{1,i} = 230 \text{ \AA}$, $R_{1,e} = 330 \text{ \AA}$, $R_{2,i} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{2,e} = 500 \text{ \AA}$ p. 101
- 49 Funções de onda dos quatro primeiro estados do elétron em um anel duplo com geometria circular. p. 101

- 50 Espectro de energia em função do campo magnético, para um sistema consistindo de um anel interno elíptico, considerando (a) $\xi = 0.90$ (b) e $\xi = 0.95$ e o anel externo como sendo circular, com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$ p. 102
- 51 Funções de onda para quatro estados do elétron, para um sistema consistindo de um anel interno sendo elíptico, com $x = 0.95$ e o externo circular, com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$ p. 102
- 52 Espectro de energia em função do campo magnético, para um sistema consistindo de um anel interno circular com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$, e um anel externo elíptico, considerando $\xi = 0.90$ (a) e $\xi = 0.95$ (b). p. 103
- 53 Função de onda para quatro estados do elétron, para um sistema consistindo de um anel interno circular com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$, e o anel externo elíptico com $x = 0.95$ p. 104
- 54 Espectro da energia em função do campo magnético, considerando ambos anéis, interno e externo, como sendo elíptico, com $\xi = 0.99$ (a), $\xi = 0.98$ (b), $\xi = 0.95$ (c) e $\xi = 0.90$ (d). p. 105
- 55 Funções de onda do elétron do estado fundamental e segundo estado excitado considerando duas excentricidade: $\xi = 0.99$ e $\xi = 0.90$, considerando ambos os anéis com geometria elíptica. p. 105
- 56 (a) Potencial de um ponto quântico *Si/SiGe* tipo-I, (b) ponto quântico elipsoidal e (c) potencial de um ponto quântico tipo-II. p. 108
- 57 Energia do *exciton* elétron-buraco pesado ($e-hh$) no estado fundamental em pontos quânticos elipsoidais (linha sólida) e piramidais (linha pontilhada). p. 111
- 58 Energia do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal *Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}* tipo-I em função do raio do QD, sendo a linha sólida para $H = 15 \text{ \AA}$, a tracejada $H = 30 \text{ \AA}$, a pontilhada $H = 60 \text{ \AA}$, e a tracejada-pontilhada $H = 90 \text{ \AA}$ p. 112

- 59 *Shift* da energia de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal tipo-I variando a fração molar da base ao topo, sendo a linha sólida para $H = 30 \text{ \AA}$, a tracejada $H = 35 \text{ \AA}$ e a pontilhada $H = 40 \text{ \AA}$ para $B = 0$ (linhas preta) e $B = 10 \text{ T}$ (linhas vermelhas). p. 113
- 60 Funções de onda do (a) elétron e (b) buraco numa estrutura elipsoidal tipo-II sobre o potencial do ponto. p. 114
- 61 Energia do *exciton* no estado fundamental em pontos quânticos elipsoidais (linha sólida) e piramidais (linha pontilhada). p. 115
- 62 Energia do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II em função do raio do QD, sendo a linha sólida para $H = 15 \text{ \AA}$, a tracejada $H = 30 \text{ \AA}$, a pontilhada $H = 60 \text{ \AA}$, e a tracejada-pontilhada $H = 90 \text{ \AA}$ p. 116
- 63 *Shift* da energia de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal tipo-II variando a fração molar do topo a base e variando as alturas, sendo a linha sólida para $H = 30 \text{ \AA}$, a tracejada $H = 35 \text{ \AA}$ e a pontilhada $H = 40 \text{ \AA}$ para $B = 0$ (linhas preta) e $B = 10 \text{ T}$ (linhas vermelhas). p. 117
- 64 Perfil do potencial do elétron em pontos quânticos duplos para dois casos de acoplamento: (esquerda) empilhados e (direita) lado a lado. p. 117
- 65 Espectro de energia do elétron em função da distância entre os pontos quânticos para o caso de acoplamento lateral, considerando $R_1 = 120 \text{ \AA}$ e (a) $R_2 = 120 \text{ \AA}$ e (b) 150 \AA p. 119
- 66 Funções de onda para o (a) estado fundamental e (b) terceiro estado excitado, para o caso de dois pontos acoplados lateralmente, considerando o mesmo raio $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$ p. 119
- 67 Densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental e primeiro estado excitado para o acoplamento lateral dos pontos quânticos considerando raios iguais e distâncias de $d = 40 \text{ \AA}$ e 120 \AA p. 120
- 68 Espectro de energia do elétron em função da distância entre os pontos quânticos para o caso de acoplamento vertical, considerando $R_1 = 120 \text{ \AA}$ e $R_2 = 120 \text{ \AA}$ (a) e 150 \AA (b). p. 121

- 69 Funções de onda para o (a) estado fundamental e (b) terceiro estado excitado, para o caso de dois pontos acoplados verticalmente, considerando o mesmo raio $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$ p. 122

- 70 Densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental e primeiro estado excitado para o acoplamento vertical dos pontos quânticos considerando raios (a) iguais e (b) diferentes, e distâncias de $d = 25 \text{ \AA}$ e 55 \AA p. 122

Lista de Tabelas

1	Parâmetros usados nas simulações dos poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ [74]	p. 64
---	---	-------

1 Introdução

Depois da invenção do transistor em 1948 [1], a pesquisa na Física dos semicondutores foi uma das áreas que mais se desenvolveu. Na década de 70, o conceito de hetero-estruturas, ou seja, a união de diferentes materiais, deu outro grande impulso à física do estado sólido. É impossível imaginar hoje a moderna física do estado sólido sem as hetero-estruturas semicondutoras. Não só as hetero-estruturas semicondutoras, mas particularmente, hetero-estruturas duplas (DH), incluindo poços, fios e pontos quânticos, que são assunto de pesquisa de dois terços da comunidade de física de semicondutores [2].

O desenvolvimento da física e da tecnologia das hetero-estruturas semicondutoras trouxe grandes mudanças para nossa vida diária. Dispositivos eletrônicos baseados em hetero-estruturas são extensivamente usados em muitas áreas de atividade humana. A vida é pouco concebível sem sistemas de telecomunicação baseados em lasers de hetero-estruturas duplas (que são também encontrados praticamente em todas as casas como parte compacta dos computadores, celulares, câmeras digitais, DVD, CD players entre outros [2]), sem diodos de emissão de luz (LEDs) e sem transistores bipolares ou de alta mobilidade elétrica usados em dispositivos de alta frequência, incluindo sistemas da televisão via satélite.

A Física de semicondutores está atualmente concentrada no estudo dos chamados sistemas de dimensões reduzidas (poços, fios, pontos e anéis quânticos). Estas estruturas são artificialmente crescidas e possuem propriedades físicas não observadas em materiais *bulk* (estruturas que não possuem potencial de confinamento). Hoje em dia, a maioria dos lasers de hetero-estrutura dupla são baseados em estruturas de poços quânticos, onde os portadores têm seu movimento restrito em uma direção. Entretanto, como a física e aplicação dessas estruturas progrediram rapidamente, o meio científico concentrou-se em sistemas com dimensões menores, como fios, pontos e anéis quânticos, os quais exibem confinamento de portadores em duas e três direções, respectivamente. Assim, com o

objetivo de conhecer um pouco mais sobre essas hetero-estruturas, resolvemos fazer um estudo sobre sistemas de dimensões reduzidas, que será apresentado nesta tese.

Neste Capítulo, apresentaremos alguns dos conceitos fundamentais para a compreensão do nosso trabalho. Discutiremos, sobre a estrutura de banda dos semicondutores, bem como, algumas características dos materiais que compõem as hetero-estruturas estudadas. Em seguida, mostraremos os tipos de sistemas hetero-estruturados juntamente com suas densidades de estados. Depois, discutiremos brevemente, sobre os métodos de crescimento usados para o crescimento de hetero-estruturas. Falaremos também de *excitons*, campo magnéticos em hetero-estruturas e os tipos de alinhamentos de bandas.

1.1 Teoria de Bandas nos Sólidos

Átomos isolados possuem níveis de energia discretos que são ocupados por elétrons arranjados em níveis (k, l, m, \dots) e subníveis (s, p, d, f) . Para cada um dos subníveis s , p , d e f existem respectivamente um, três, cinco e sete estados. Nos átomos, os elétrons preenchem apenas os níveis de energia mais baixos, no limite de dois elétrons com *spins* opostos por estado, obedecendo ao princípio de exclusão de Pauli. Os elétrons que ocupam as camadas mais externas são chamados de elétrons da camada de valência. Estes, são extremamente importantes porque participam das ligações entre átomos e influenciam em várias propriedades físicas e químicas dos sólidos.

Quando vários átomos são aproximados, os níveis de energia de cada um são perturbados levemente pela presença do vizinho. Se aproximarmos um grande número de átomos, teremos um grande número de níveis próximos uns dos outros, formando uma estrutura extensa (*bulk*), e as funções de onda dos elétrons se superpõem (especialmente aquelas dos elétrons nos níveis de valência), dando origem a conjuntos (quase) contínuos de estados possíveis e energeticamente distintos, chamados de bandas eletrônicas de energia (ver Fig.1). As regiões energeticamente proibidas dos átomos, onde não existem níveis de energia possíveis, dão origem às bandas proibidas, ou *gaps* [3].

O cálculo dos estados eletrônicos e das energias num sólido é bastante complexo, e só pode ser realizado usando aproximações. Uma aproximação consiste em supor que os núcleos dos átomos são fixos e com posições conhecidas na rede cristalina, onde observaremos o comportamento de apenas um elétron e que todos os outros são parte integrante dos íons que criam o potencial periódico (ver Fig. 2). Esse potencial periódico ao qual o elétron está submetido leva à solução da equação de Schrödinger cujas energias formam

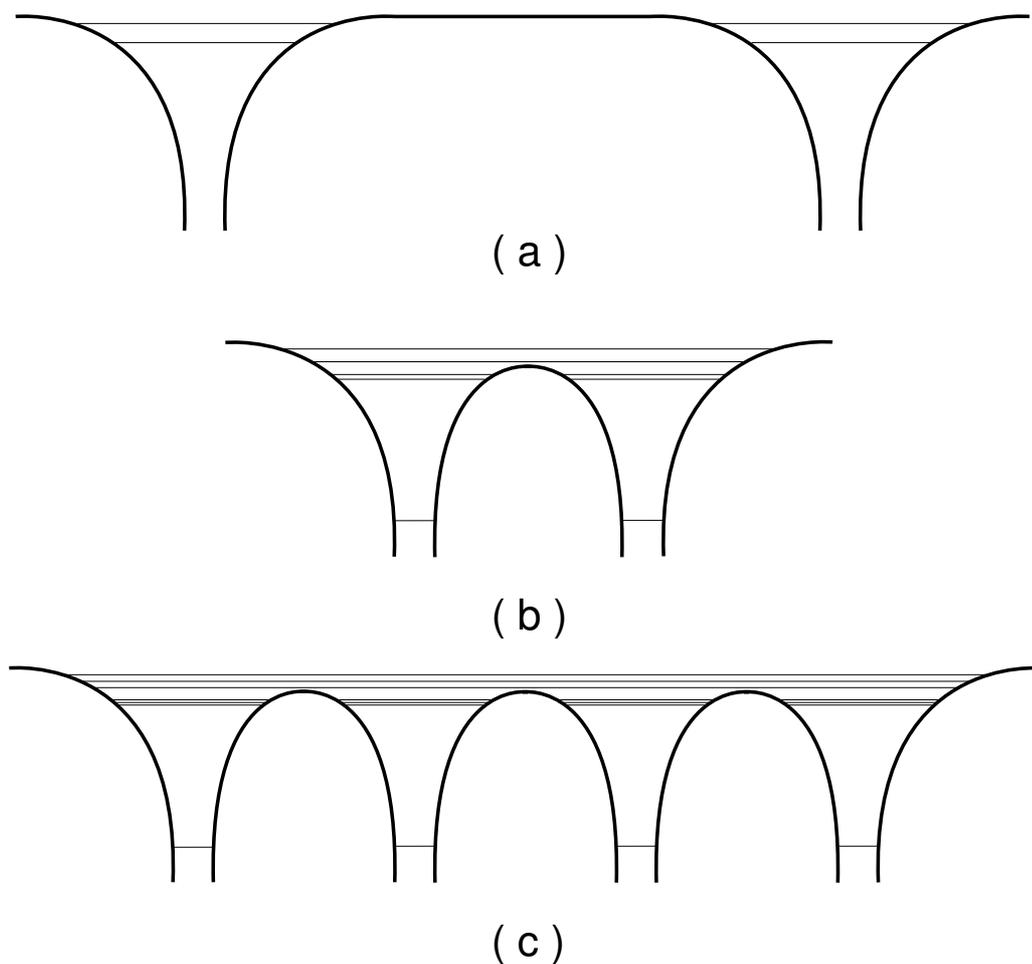


Figura 1: (a) Esquema de níveis de energia para dois átomos isolados. (b) Esquema de níveis de energia para os mesmos dois átomos numa molécula diatômica. (c) Esquema de níveis de energia para quatro átomos do mesmo tipo num cristal rudimentar unidimensional. Observe que o nível mais baixo não é desdobrado apreciavelmente porque as autofunções atômicas para esse nível não se superpõem de forma significativa.

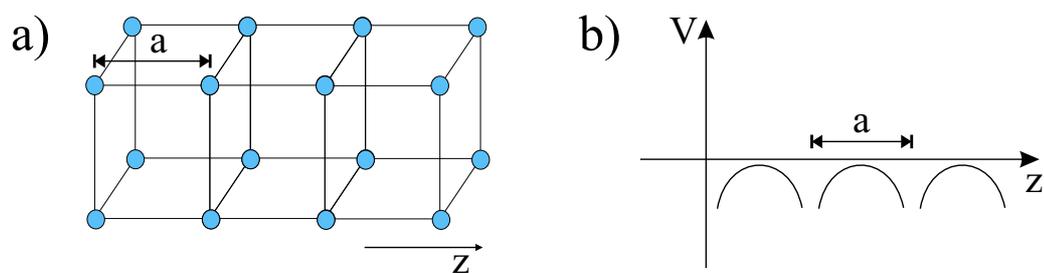


Figura 2: Representação esquemática de um (a) cristal de parâmetro de rede a e (b) seu potencial periódico.

bandas. Para o caso de um metal alcalino, como o sódio, o elétron 3s da última camada vê um potencial do núcleo muito blindado pelos elétrons interiores, de forma que ele fica quase livre. Logo, este elétron sente o potencial como um poço com paredes infinitas nas superfícies do cristal e constante em seu interior. Neste caso, as autofunções do elétron são do tipo

$$\psi(\vec{r}, t) = u_{\kappa}(\vec{r})e^{i\kappa\cdot\vec{r}-\omega t}, \quad (1.1)$$

sendo suas energias

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \quad (1.2)$$

com $\kappa = n\pi/L$, sendo n números inteiros e L a largura do poço. A relação de dispersão Eq.(1.2) está representada pela curva tracejada na Fig. 3. Entretanto, como o potencial devido aos íons não é constante no interior do poço, sua pequena variação periódica altera a propagação da onda do elétron, Eq.(1.1) e conseqüentemente a relação de dispersão. Esta alteração pode ser entendida em analogia ao efeito de uma rede de difração. Considerando a periodicidade da rede em uma dimensão, as ondas mais afetadas são as que têm vetor de onda satisfazendo a condição de Bragg

$$2a = m\lambda = m\frac{2\pi}{\kappa}, \quad (1.3)$$

onde a é o parâmetro de rede e λ é o comprimento de onda. As ondas que satisfazem, a relação Eq.(1.3) são refletidas pela rede, dando origem a uma onda estacionária. Dependendo da configuração espacial da onda estacionária em relação à rede, ela pode ter dois valores de energia. Assim, nos pontos $\kappa = m\pi/a$, onde m é um inteiro positivo ou negativo, a curva de dispersão quebra-se em duas. Isto dá origem às linhas cheias da Fig. 3, que representam a relação de dispersão do elétron num potencial periódico. A separação das linhas resulta em bandas de energia para os estados eletrônicos.

Assim, observando a função de dispersão na Fig. 3, vemos os dois valores de E em cada um dos valores críticos de κ onde ocorre uma reflexão de Bragg. Vemos também como esse fato provoca na curva $E(\kappa)$ um desvio em forma de S do comportamento parabólico próprio do elétron livre, em cada região entre os valores críticos de κ . O intervalo de valores de κ entre $-\pi/a$ e $+\pi/a$ define o que se chama de primeira *zona de Brillouin*. O intervalo entre $-2\pi/a$ e $-\pi/a$ e entre $+2\pi/a$ e $2\pi/a$ define a segunda *zona de Brillouin*, etc.

Um semicondutor é um sólido covalente que pode ser considerado “isolante”, em $T = 0$ K, pois nessa temperatura sua banda de valência está cheia e a banda de condução vazia, porém seu *gap* de energia é inferior a 3 eV. Essas características definem um estado fun-

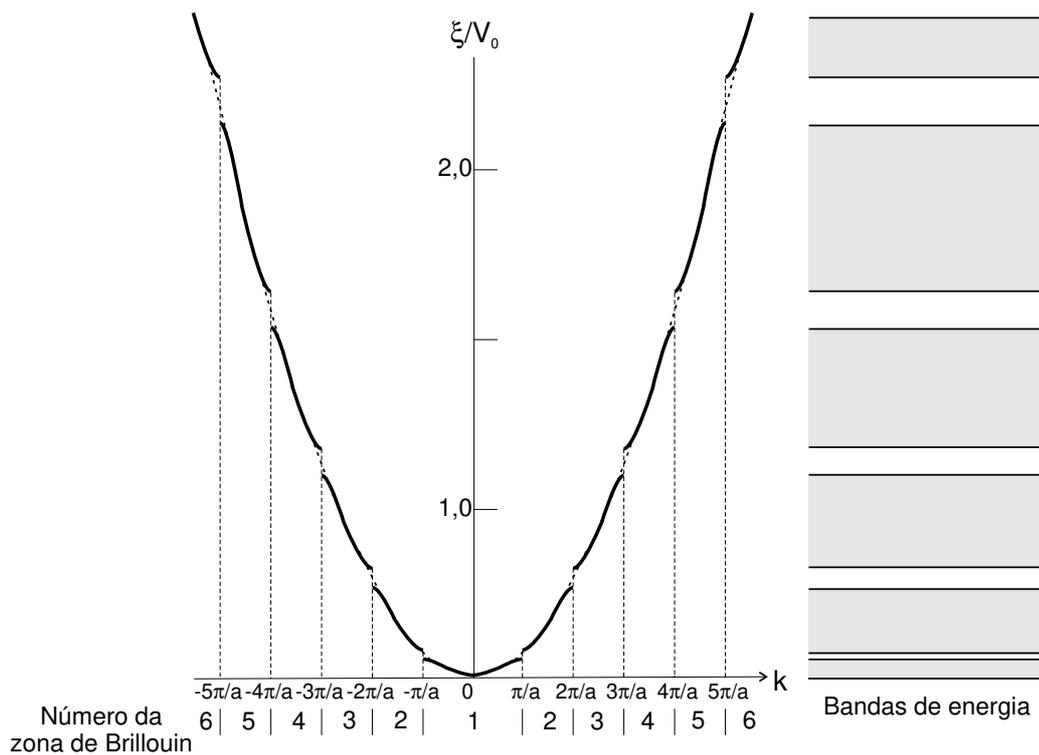


Figura 3: Energias permitidas em função do vetor κ , para uma rede unidimensional de periodicidade a . A linha tracejada é a energia para o caso de um elétron livre. As bandas de energia permitidas e proibidas resultantes aparecem à direita.

damental de um semiconductor. Através de uma excitação óptica, absorção de um fóton, elétrons vão para a banda de condução, deixando estados de excitações elementares, portadores de cargas positivas, chamados buracos, na banda de valência. Estes buracos têm massa, carga e interação com o elétron via o potencial Coulombiano. A este par elétron-buraco, ligado pela atração de Coulomb, chamamos *exciton*. Essa atração Coulombiana entre o elétron e o buraco faz com que seus movimentos sejam correlacionados. Os *excitons* podem se propagar por toda rede cristalina e transportar energia, já que sua energia de formação pode ser recuperada pela quebra do par. Entretanto, como é composto por uma carga positiva e outra negativa, tornando-se assim neutro, não contribui diretamente para a condutividade elétrica [4].

A estrutura de bandas de um semiconductor contém informações sobre uma série de parâmetros fundamentais para caracterização do material e para entendimento de dispositivos a partir deste. Os semicondutores mais importante para eletrônica são o silício (*Si*) e o germânio (*Ge*). Os materiais utilizados nesta tese será *Si* e *Ge* do grupo IV da tabela periódica e *GaAs* e *AlAs* do grupo III-IV, os quais apresentam estrutura cristalina *zincoblenda*. A Fig. 4 mostra a estrutura de banda do *GaAs*, onde temos o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução no ponto Γ da zona de *Brillouin*.

O intervalo da energia entre o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução é de 1,43 eV, a esse intervalo entre as bandas chamamos de *gap* de energia.

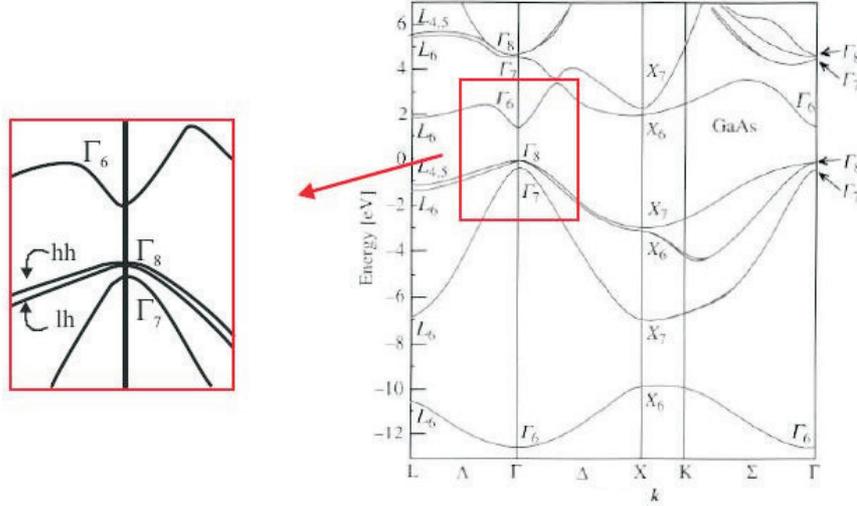


Figura 4: Estrutura de banda do GaAs.

As transições eletrônicas dos elétrons da banda de condução para a banda de valência são acompanhadas da emissão ou absorção de fótons, e devem obedecer à conservação da energia e do momentum. No *Si* e *Ge*, a transição entre o topo da banda de valência e o mínimo da banda de condução só é possível se acompanhada da emissão ou absorção de um fônon, isto porque o fóton com energia E_g tem $\kappa \ll \kappa_{ZB}$ (valor da fronteira da zona de *Brillouin*) e esta transição requer uma variação de vetor de onda da ordem de κ_{ZB} para conservar o momentum. Como os fônons têm energia $\hbar\Omega \ll E_g$ e o vetor de onda na faixa $0 \leq \kappa \leq \kappa_{ZB}$ é então possível ter uma transição através do *gap*. A esta transição chamamos de processo indireto. O semiconductor que apresenta este processo é denominado como semiconductor de *gap* indireto (ver Fig. 5).

O semiconductor de maior aplicação em opto-eletrônica é o composto *GaAs* que é formado pelos elementos *Ga* e *As*. Neste caso, a transição de um elétron do mínimo da banda de condução para o máximo da banda de valência é acompanhada da emissão de um fóton de energia $\hbar\Omega = E_g = 1,43$ eV, cujo o vetor de onda tem módulo $\kappa = 2\pi/\lambda = 7,2 \times 10^4$ cm⁻¹, que é muito menor que o valor da fronteira da zona de *Brillouin* ($\kappa_{ZB} \simeq \pi/a \sim 10^8$ cm⁻¹). Logo o momentum é conservado na emissão do fóton e a transição é permitida, a esta transição chamamos de processo direto.

As ligas semiconductoras podem ser formadas de várias formas. Ligas binárias são

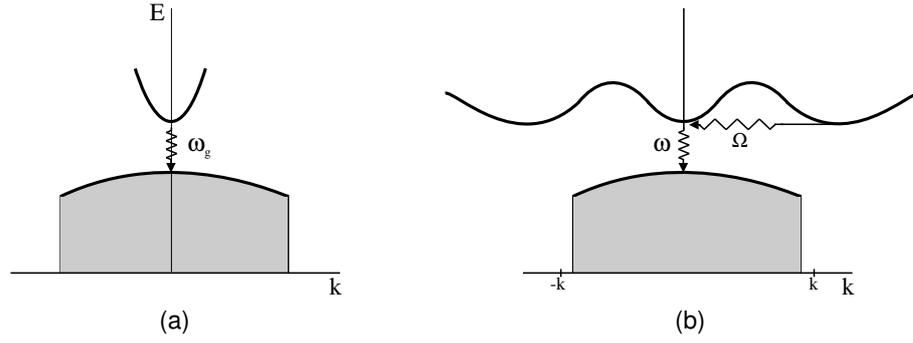


Figura 5: (a) Transição de *gap* direto, neste caso, a transição através do *gap* ocorre com a emissão de um fóton de frequência $\omega_g = E_g/\hbar$ e com vetor de onda desprezível na escala da figura. (b) No semiconductor de *gap* indireto, a transição através do *gap* envolve um fóton de frequência $\omega \approx \omega_g$ e $\kappa \approx 0$ e um fônon com frequência Ω muito menor que ω_g e vetor de onda ω_g e $\kappa \simeq \kappa_{KZ}$, de tal forma a conservar energia e momentum totais.

aquelas composta por dois elementos, tal como o *Si* e *Ge*, formando a liga $Si_{1-x}Ge_x$. As ligas ternárias, formadas por três elementos, têm como exemplo um composto bastante estudado, o $Al_xGa_{1-x}As$. Os *gaps* de energia desses compostos dependem da fração molar x usada. Experimentos feito por Adachi [5] determinaram relações empíricas para a dependência do *gap* de energia dos portadores

$$E_g(x) = E_g(0) + \varepsilon_1 x + \varepsilon_2 x^2, \quad (1.4)$$

onde $E_g(0)$ é o *gap* de energia, ε_1 e ε_2 , as constantes associada com a dependência composicional do *gap* de energia.

Materiais compostos por elementos semicondutores III-V, como *SiGe* e *GaAs*, apresentam a banda de valência formada por orbitais tipo *P*, momento angular orbital atômico $L = 1$, e a banda de condução por orbitais tipo *S*, com $L = 0$. A banda de valência é formada pelos estados do momento angular total, $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$, ou seja, momento de *spin* mais momento angular orbital, logo $J = 3/2$ e $1/2$. Para $J = 3/2$ temos quatro bandas e $J = 1/2$ duas bandas. A interação spin-órbita separa as bandas $J = 1/2$ e $J = 3/2$, veja a região do retângulo na Fig. 4, (região do nosso interesse). A banda de valência é degenerada para $J = 3/2$ (Γ_8) e as componentes do momento total na direção z , $m_J = \pm 3/2$ são conhecidas como subbandas de buraco pesado (*heavy hole* - *hh*) e para $m_J = \pm 1/2$ conhecidas como subbandas de buraco leve (*light hole* - *lh*). Os estados $|J, m_j\rangle = 1/2, \pm 1/2$ são chamados de buracos da banda *split-off* - (*so*).

1.2 Aproximação da Massa Efetiva

Para entendermos as propriedades eletrônicas em hetero-estruturas semicondutoras é preciso uma análise bem definida de como os portadores de carga (elétron e buraco) se comportam sob ação de um campo elétrico externo. Uma forma eficiente de se fazer esta análise é usando a aproximação da massa efetiva, que é tida como uma massa fictícia que leva em consideração todas as interações existentes em um rede cristalina, seja da banda de condução ou da banda de valência. Como o potencial periódico de um cristal não altera a relação energia-momentum da curvatura da banda de energia, para que a banda mantenha-se constante é necessário ocorrer uma variação da massa que se modifica para diferentes direções da propagação do elétron pelo cristal [6].

Para tratarmos o movimento de um portador de carga dentro de um cristal, usaremos o conceito de pacote de ondas, que consiste em um grupo de ondas com energia constante. Esse pacote de onda se movimenta com a velocidade de grupo $v_g = \partial\omega/\partial\kappa$. Como a energia do elétron é $E = \hbar\omega$, temos

$$\frac{\partial E}{\partial \kappa} = \hbar v_g, \quad (1.5)$$

submetendo o elétron a uma força F de um campo elétrico sobre um deslocamento dx será realizado um trabalho

$$dE = F dx = \hbar v_g d\kappa. \quad (1.6)$$

Como $dx = v_g dt$, logo

$$F = \hbar \frac{d\kappa}{dt}, \quad (1.7)$$

com $\hbar\kappa$ sendo o momentum do portador de carga. Para encontramos a aceleração, derivamos a velocidade de grupo na eq. (1.5)

$$\frac{dv_g}{dt} = a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa \partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2} \frac{d\kappa}{dt}, \quad (1.8)$$

substituindo a eq. (1.7), temos

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2} F, \quad (1.9)$$

comparando a equação acima com a equação do movimento (segunda lei de Newton $F = ma$), notamos que os portadores sob a ação de um campo externo num cristal agem da mesma forma que um elétron livre, entretanto com uma massa fictícia obtida a partir da

relação de dispersão $E(\kappa)$ que inclui todos os efeitos da rede cristalina

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa^2}. \quad (1.10)$$

Essa relação entre E e κ não apresenta uma relação isotrópica, ou seja, a massa efetiva depende da direção de κ . Assim, numa definição mais geral, a massa efetiva é uma grandeza tensorial com componentes κ na direção α, β dada por

$$m_{\alpha, \beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa_\alpha \partial \kappa_\beta}, \quad (1.11)$$

que é válido para portadores em metais ou em semicondutores.

As curvaturas da banda de condução e da banda de valência numa hetero-estrutura semicondutora não são iguais, logo as massas efetivas dos elétrons e buracos são diferentes. Assim, para a banda de condução, como os elétrons estão agrupados em torno do mínimo dessa banda, todos elétrons têm aproximadamente a mesma massa efetiva

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{(\partial^2 E / \partial \kappa^2)_{\kappa=\kappa_{mc}}}, \quad (1.12)$$

com κ_{mc} sendo o mínimo da banda de condução. A curvatura da banda de condução é para cima, logo a massa efetiva dos elétrons é positiva, e assim eles têm aceleração no sentido oposto ao campo aplicado.

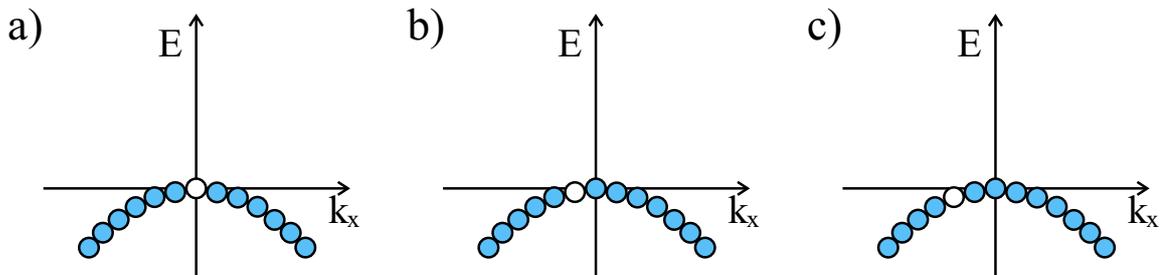


Figura 6: Representação esquemática de elétrons na banda de valência no espaço κ : (a) na ausência de campo elétrico e (b) e (c) na presença de um campo elétrico aplicado na direção x .

Se excitarmos um elétron na banda de valência, ele vai até a banda de condução deixando um estado vazio no topo da banda de valência. A Fig. 6 mostra-nos o comportamento deste estado quando submetido a um campo elétrico ($\vec{E} = \varepsilon \hat{x}$) na direção x . Uma força ($\vec{F} = -e\vec{E}$) faz com que os elétrons se desloquem no espaço $E(\kappa)$ no sentido κ_x negativo ($-e\varepsilon_x = \hbar d\kappa/dt$), resultando num deslocamento do estado vazio no mesmo sentido do espaço do momentum. Logo, o estado vazio tem momento $-\hbar\kappa$, e o momentum total do sistema $+\hbar\kappa$, assim notamos que o sistema se comporta como se fosse formado

por uma nova partícula que chamaremos de buraco, que comporta-se como estado de carga elétrica positiva, com módulo igual ao do elétron e massa efetiva dada por

$$m_h^* = -\frac{\hbar^2}{(\partial^2 E / \partial \kappa^2)_{\kappa=\kappa_{mc}}}. \quad (1.13)$$

Como $\partial^2 E / \partial \kappa^2$ no máximo da banda de valência é negativo, então a massa do buraco é positiva, que é consistente com o fato de que se o campo elétrico é aplicado no sentido $+x$, o buraco têm momentum $\kappa_x > 0$ e portanto movimentam-se no sentido positivo ($+x$) no espaço real.

Alguns cristais possuem mais de uma banda de condução ou de valência e, curvaturas que variam com a direção de κ , tendo várias massas de elétron e buracos (ver Fig. 7). Os buracos que apresentam maiores curvaturas em suas bandas têm menor massa efetiva, e assim são chamados de buracos leves (*light hole - lh*), entretanto os que apresentam curvaturas de banda menores são chamados de buracos pesados (*heavy hole- hh*).

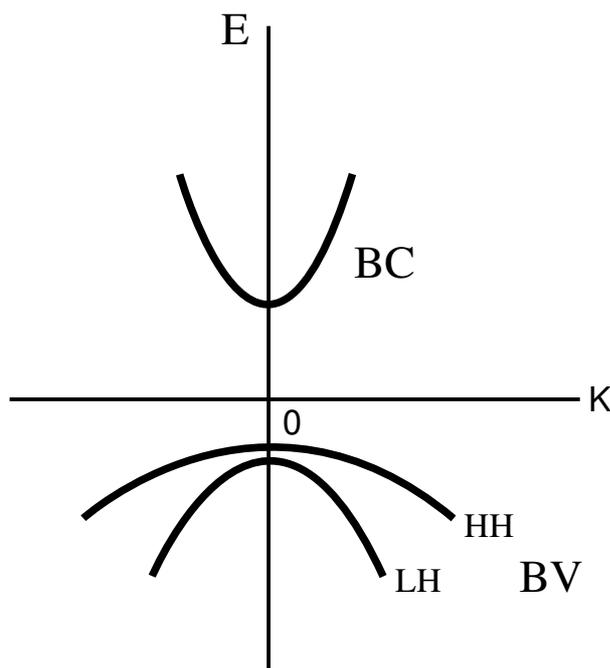


Figura 7: Banda de condução e valência de um semicondutor. Na banda de valência temos o buraco pesado - (*hh*) e buraco leve - (*lh*).

1.3 Confinamento Quântico

A redução na dimensionalidade produzida por confinamento de elétrons (ou buracos) em uma fina camada semicondutora produz uma mudança dramática em seu comportamento. Este princípio pode ser desenvolvido reduzindo a dimensão do elétron de 2D em

poços quânticos, para 1D em fios quânticos e eventualmente para 0D no ponto quântico. Neste contexto, a dimensionalidade refere-se ao número de graus de liberdade no momento do elétron; de fato, no fio quântico o portador está confinado em duas direções e livre em uma, já no poço o grau de liberdade é dois e o confinamento ocorre em uma direção. No ponto quântico, o portador está confinado em todas direções, reduzindo o grau de liberdade do sistema para zero dimensões [7] (ver Fig. 8). Note que

$$D_l + D_c = 3, \quad (1.14)$$

para todos sistemas do estado sólido, onde D_l é o número de graus de liberdade e D_c é o número de direções de confinamento para todo sistema. A Tabela 1.1 nos mostra quatro possibilidades.

Sistema	D_l	D_c
Bulk	3	0
Poço Quântico	2	1
Fio Quântico	1	2
Ponto Quântico	0	3

A energia do portador movendo-se livremente em um material *bulk*, com massa efetiva m^* , é dada por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.15)$$

onde $k_{x,y,z}$ são os vetores de onda nas três dimensões.

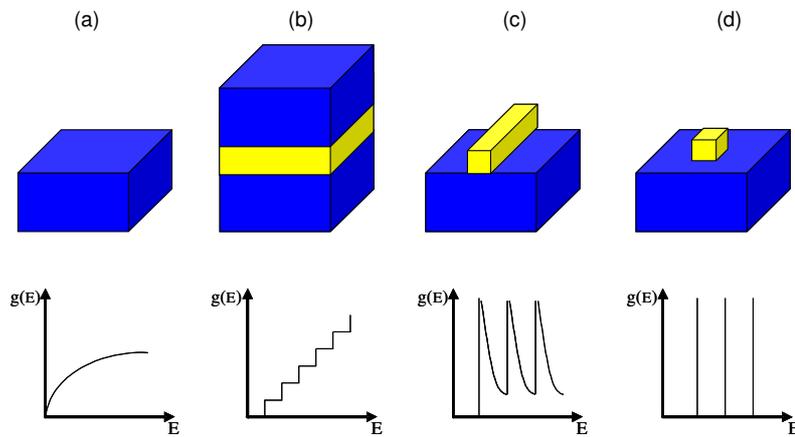


Figura 8: Confinamento das hetero-estruturas em relação a dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c) e seus respectivos densidades de estados.

Em sistemas bi-dimensionais, poços quânticos, onde o portador move-se em uma

direção, e é livre no plano, temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) + E_z^i, \quad (1.16)$$

com $E_z^i = (\hbar^2\pi^2/2m^*L^2)i^2$, onde $i = 1,2,3,\dots$ e L é o comprimento do poço. Agora adicionando um confinamento lateral para o movimento do portador teremos um sistema de uma dimensão

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}k_y^2 + E_x^i + E_z^j, \quad (1.17)$$

com $j = 1,2,3,\dots$ e finalmente, quando o portador está confinado em todas direções,

$$E = E_y^i + E_x^j + E_z^k, \quad (1.18)$$

com $k = 1,2,3,\dots$ onde o espectro de energia é discreto. Devido a esse espectro de energia discreto os ponto quânticos são chamados de "átomos artificiais".

Do ponto de vista das propriedades eletrônicas, a redução de dimensionalidade tem efeito direto na densidade de estados (ver Fig.8). Para o caso dos pontos quânticos por exemplo, os portadores estão confinados nas três direções acarretando em estados discretos de energia e a densidade de estado passa a ser uma função delta $N_{0D}(E) = \delta(E - E_i)$, equivalente aos estados atômicos. Mas diferente dos átomos, os pontos quânticos podem ser manipulados de forma a alterar o potencial de confinamento dos portadores de carga e a energia de transição, além da quantidade de portadores.

1.4 Hetero-estruturas

Com o desenvolvimento das técnicas de crescimento, tais como *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) e *Metal-Organic Chemical Vapour Deposition* (MOCVD), foi possível controlar o crescimento de materiais em nível de camadas atômicas, permitindo uma configuração cristalina dos semicondutores e o crescimento de finas camadas formadas por diferentes materiais. As primeiras investigações sobre hetero-estruturas foram feitas em 1970 por R. Tsu e L. Esaki [8], que propuseram um estudo sobre transporte eletrônico em superrede, isto é, em estruturas com potencial periódico gerado pela dopagem ou pela composição variada de camadas de diferentes materiais semicondutores com período maior, mas ainda comparado com o da rede cristalina do material. Mas somente em 1974 as primeiras demonstrações experimentais sobre tais hetero-estruturas foram publicadas [9].

Em sistemas hetero-estruturados, devido à presença de diferentes materiais, as propriedades ópticas e eletrônicas diferem das propriedades encontradas no *bulk* de um único semiconductor, principalmente nas interfaces. Essas diferenças ocorrem devido a diferentes propriedades dos materiais envolvidos, como a afinidade eletrônica, a função trabalho, a energia de *gap* *etc.* Assim, se conhecermos algumas dessas propriedades dos semicondutores, podemos crescer sistemas com determinadas características ópticas e eletrônicas desejadas. Exemplos de sistemas hetero-estruturados com perfis eletrônicos capazes de confinar portadores de cargas em diferentes dimensões são poços, fios, pontos e anéis quânticos (ver Fig.9).

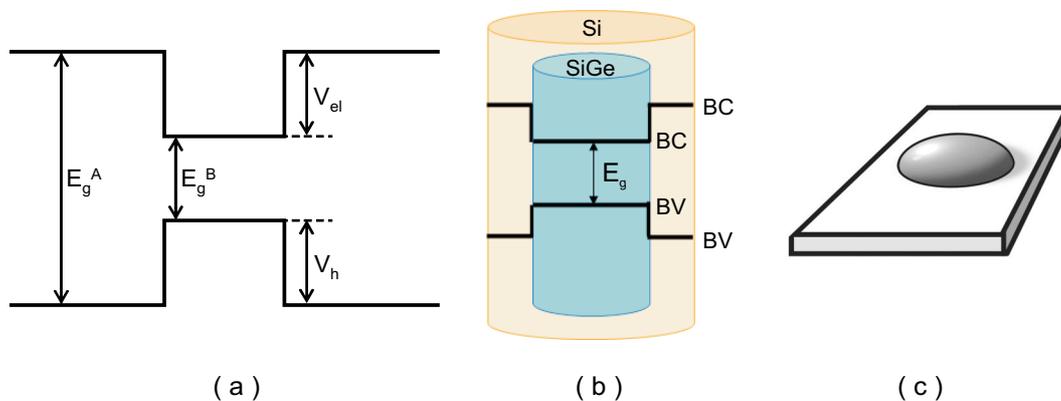


Figura 9: Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores diferentes: (a) formando um potencial de confinamento num poço, (b) num fio quântico e (c) um ponto quântico.

Consideremos um material semiconductor *A* crescido entre duas camadas de um material *B* com *gaps* de energias diferentes, formando um poço de potencial que confina os portadores de cargas em uma, duas ou três dimensões. Quando esse confinamento ocorre em uma dimensão, dizemos que temos um sistema bi-dimensional (2D), já que o portador de carga está confinado em uma direção e livre em duas, e a esse sistema chamamos de poço quântico. Já quando o confinamento é em duas (1D) e três dimensões (0D), teremos um fio e um ponto (e/ou anel) quântico, respectivamente. Como veremos nas Seções seguintes a presença da hetero-estrutura é responsável pela quantização dos níveis.

1.4.1 Poços Quânticos

A junção de finas camadas semicondutoras sobrepostas uma a uma, formando um poço de potencial onde os portadores de carga estão confinados em uma direção e livres em duas, é o que chamamos de poços quânticos - (*Quantum wells-QWs*) (ver Fig. 10).

Grande parte dos estudos em poços quânticos tem sido feito em hetero-estruturas onde os portadores de cargas estão localizados no mesmo material (mesma camada), essas hetero-estruturas são chamadas de sistemas de tipo-I. No entanto, nos últimos anos, tem surgido um grande interesse em hetero-estruturas onde os portadores de cargas estão localizados espacialmente em materiais diferentes (camadas diferentes), a esses sistemas chamamos de hetero-estrutura tipo-II. Muitas aplicações para estes sistemas têm sido estudadas, tais como lasers *mid*-infravermelhos de poços quântico [10, 11], que exibem feixes de melhor qualidade, cascatas quânticas interbanda [12, 13] e fotodetectores baseados em guias de onda com uma vasta faixa de comprimentos de onda de resposta [14].

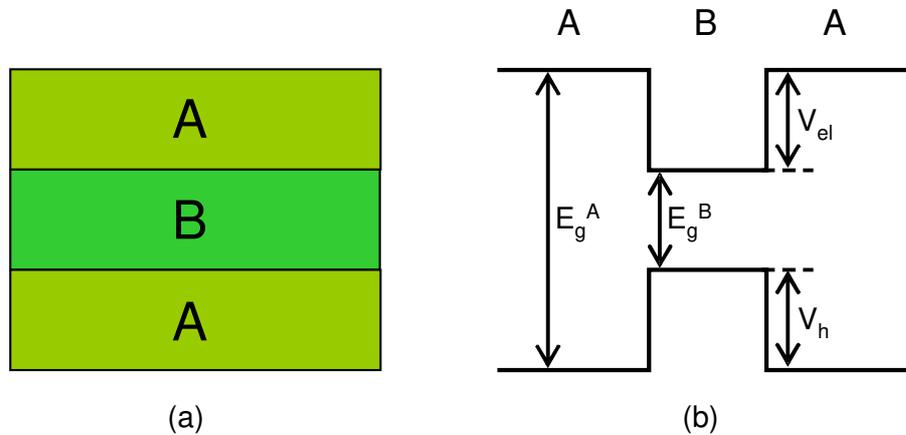


Figura 10: Poço quântico formado pela justaposição de várias camadas semicondutoras.

Hetero-estruturas *SiGe* tipo-II com *strain* também têm atraído grande atenção, pois oferecem a possibilidade de construir heterojunções que podem ser diretamente integradas com circuitos de silício (*Si*) já existentes. Elas prometem melhorias nas capacidades de materiais de sistemas compatíveis com a tecnologia do *Si* e, em recentes estudos, foram mostradas diversas aplicações de hetero-estruturas *Si/Si_{1-x}Ge_x* em fotodetectores infravermelho de alta sensibilidade, alta performance dos transistor MOSFET (*Metal - Oxide - Semiconductor Field - Effect Transistors*) e transistores de modulação dopada tipo-n [15, 16, 17, 18].

A incerteza sobre o alinhamento intrínseco da banda de condução em poços quânticos *Si_{1-x}Ge_x* crescida sob camadas do *Si* (001) tem sido intenso objeto de estudos, no entanto, ainda existem muitas controvérsias sobre estes sistemas [19]. Enquanto a liga forma claramente um poço para os buracos, existem divergências para o elétron. Para baixas concentrações de germânio (*Ge*), não há um consenso se a liga forma um poço (alinhamento tipo-I) ou uma barreira (alinhamento tipo-II) para estes portadores [20, 21, 22]. Cálculos de People *et al.* [23, 24] e Van de Walle *et al.* [25] indicam que para fração molar de *Ge* $x < 0.2$, o alinhamento da banda de condução é tipo-I, mas dados de fo-

toluminescência de Xiao *et al.* [26] dizem que o alinhamento só será tipo-I se $x \leq 0.35$. Penn *et al.* [27] afirma que, para fração molar maior que $x > 0.30$, o alinhamento da banda de condução é tipo-II. Entretanto, Rieger *et al.* [28] assegura que somente para frações molares acima de $x \geq 0.40$ poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ podem ter alinhamento de banda tipo-II. Penn *et al.* [29] também estudaram a magneto-fotoluminescência de poços quânticos $Si/Si_{0.76}Ge_{0.24}$, e mostraram a dependência da energia do *exciton* com o campo magnético aplicado por medidas de fotoluminescência. Seus resultados experimentais são consistentes para um alinhamento de banda tipo-II com um *band-offset* de aproximadamente 55 meV.

1.4.2 Fios Quânticos

Utilizando-se dos avanços nas técnicas de crescimento de materiais, cada vez mais sofisticadas, tornou-se possível confinar portadores de cargas em fios bastante finos, chamados de fios quânticos (*quantum wires-QWRs*) (ver Fig.11). Estas estruturas, onde elétrons e buracos estão confinados bi-dimensionalmente, tendo somente uma dimensão livre, têm sido usadas com sucesso na aplicação de sistemas opto-eletrônicos e sensores biológicos, onde se requer um forte confinamento [30]. Muitos estudos têm sido feito tanto em fios quânticos tipo-I quanto em tipo-II. Além disso, têm sido possível sintetizar vários tipos de fios quânticos: *core-shell*, onde um fio de um material é coberto por uma camada de outro material, *core-multishell*, onde temos um fio de um material coberto por uma sequência de camadas de outros materiais.

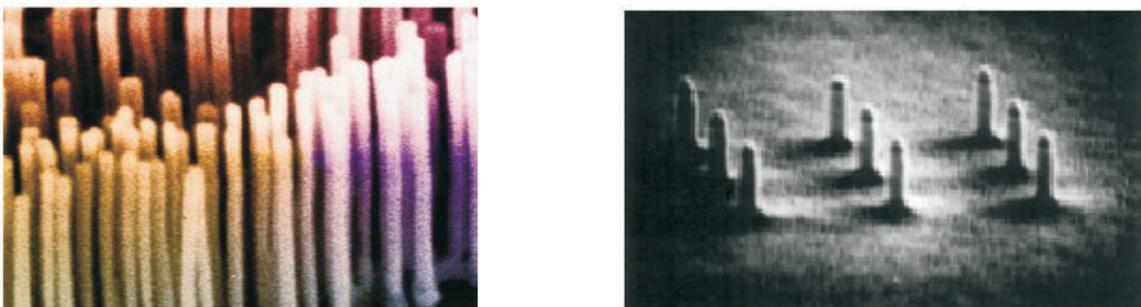


Figura 11: Imagens de fios obtida por microscopia de força atômica-AFM.

Banyai *et al* [31] estudou *excitons* em QWRs tipo-I usando o método variacional e assumindo a barreira de potencial infinito, e encontrou que a energia do *exciton* é maior que em estruturas tri-dimensionais (3D) e bi-dimensionais (2D). Mais tarde, Rorison [32] estudou *excitons* em QWRs $GaAs/AlAs$, e concluiu que a energia de ligação do *exciton* em fios quânticos tipo-II é substancialmente maior que a energia em sistemas de poços

quânticos. Devido esta hetero-estrutura tornar-se um sistema do tipo-II para pequenos raios do fio, onde as energias são naturalmente maiores, ele mostrou também que as energias de ligação destes fios tipo-II são maiores que para sistemas do tipo-I, para os tamanhos apropriados do fio.

1.4.3 Anéis Quânticos

Seguindo a linha das estruturas de baixa dimensões, temos os anéis quânticos (*Quantum rings-QRs*) (ver Fig.12) formados a partir de grandes pontos quânticos de um material *A* cobertos por um material *B* para desestabilizá-los, em seguida submetidos a um processo de *annealing* em uma temperatura mais alta, ocorrendo uma mudança topológica, de tal forma que o ponto quântico original adquire um buraco no seu centro e toma o formato de anel. Desde a primeira vez observadas, essas estruturas com formatos de anéis têm sido extensivamente estudadas tanto experimentalmente quanto teoricamente [33].

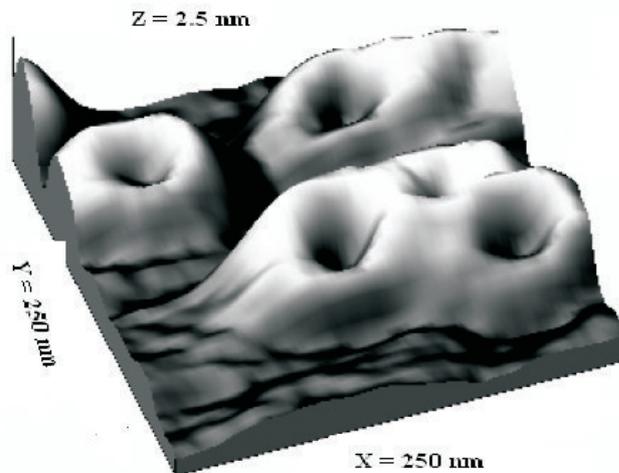


Figura 12: Imagens de anéis quânticos *InGaAs* obtida por microscopia de força atômica-AFM.

Os anéis quânticos são muito interessantes devido às suas propriedades eletrônicas bem diferentes dos pontos quânticos originais, em particular um momento de dipolo gigante [34] devido à separação espacial entre o elétron e o buraco no sentido oposto ao dos pontos quânticos, a alta força de oscilador da transição de banda a banda do estado fundamental e a possibilidade de ajustar seus estados eletrônicos [35]. Quando submetidos a um campo magnético, os anéis quânticos produzem correntes persistentes associadas com a interferência magnetostática do efeito de Aharonov-Bohm: Oscilações na energia

do portador em função do fluxo magnético. O efeito de Aharonov-Bohm e a corrente persistente só são possíveis devido à topologia do anel quântico [36].

1.4.4 Pontos Quânticos

Com o sucesso das estruturas semicondutoras de baixa dimensão, assim como poços quânticos (sistemas bi-dimensionais) e fios quânticos (sistemas de uma dimensão), têm sido apresentado um grande interesse em estudar teoricamente e experimentalmente sistemas semicondutores de zero dimensão, os chamados pontos quânticos (*quantum dots*-QD) (ver Fig.13). Suas propriedades eletrônicas são influenciadas pela forma tipo função- δ da densidade de estados, característica que aparece devido ao confinamento nas três dimensões. Tais estruturas, de certa forma, comportam-se como átomos artificiais onde o potencial do núcleo é substituído pelo potencial de confinamento, resultando em uma forte quantização dos níveis de energia.

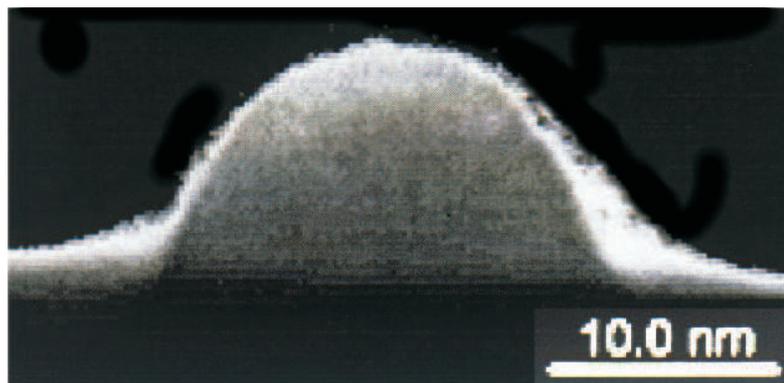


Figura 13: Imagens de um ponto quântico $InAs/GaAs$ obtida por microscopia de força atômica-AFM.

Yih-Yin Lin [37] estudou as propriedades eletrônicas e opto-eletrônicas dos pontos quânticos auto-formados $Si/Si_{1-x}Ge_x$ através do método $k \cdot p$ e mostrou que $Si_{1-x}Ge_x$ transforma-se em uma estrutura tipo-II com fração molar maior que 0.25. O estudo da fotoluminescência desses sistemas confirmou que o alinhamento de banda nestas estruturas é tipo-II.

Laheld *et al.* [38] usou a aproximação variacional para estudar *excitons* em pontos quânticos esféricos tipo-II dentro da aproximação da massa efetiva, assumindo primeiro o potencial infinito e depois estendendo para potenciais finitos [39]. A dependência da energia de ligação do *exciton* e das correlações elétron-buraco na massa efetiva e no raio do ponto quântico foram investigados. Para pequenos raios do ponto, foi encontrado que o elétron e o buraco não estão correlacionados, enquanto para raios maiores o elétron e o

buraco estão fortemente correlacionados espacialmente. Lelong *et al.* [40] estudou pontos quânticos tipo-II em *GaSb/GaAs* e calculou a energia de ligação de *excitons* carregados positivamente e negativamente em pontos quânticos com formato de uma lente, usando a aproximação de Hartree-Fock. Eles encontraram um aumento por um fator 16 vezes da energia de ligação dos *excitons* para *excitons* carregados e bi-*excitons*, comparado com pontos tipo-I. Além disso, encontraram um deslocamento para o azul na energia para os *excitons* carregados positivamente e para e bi-*excitons* com respeito à energia do *exciton*, enquanto para *excitons* negativamente carregados houve um desvio para o vermelho.

1.4.4.1 Métodos de Crescimento

As primeiras tentativas de produzir estruturas com confinamento nas três dimensão (0D), pontos quânticos-(QDs), utilizaram técnicas de fotolitografia e eletrolitografia de alta reso-lução. Contudo, essas técnicas mostraram-se incapazes de produzir QDs com dimensões controladas ou pequenos o suficiente para garantir os efeitos do confinamento. Além disso, as estruturas produzidas por essas técnicas apresentavam má qualidade cristalina, com altas densidades de impurezas e defeitos estruturais provenientes dos tratamentos químicos. Estes problemas foram resolvidos no início da década 80, devido ao progresso das técnicas de crescimento, especialmente a litografia, que permitiu o desenvolvimento de estruturas de estado sólido que confinam os portadores em três dimensões [41]. Vários métodos são propostos para fabricação destas estruturas. O que prevalece num método de crescimento sobre os outros são as diferenças entre as estruturas cristalinas, o *strain*, ou seja, o descasamento de rede e a energia interfacial. Existem três tipos de crescimento (ver Fig. 14) mais utilizados:

- O crescimento Frank-van der Merwe [42] (FvdM) onde a morfologia de crescimento é camada por camada. Esta técnica é observada em materiais com estruturas cristalinas idênticas, e um parâmetro de rede muito parecido, como *AlGaAs* sobre *GaAs*;
- A técnica de Volmer-Weber [43] (VW), onde se cresce a ilha (ponto) diretamente no substrato, e pode ser vista com uma alta energia interfacial;
- Por último, a técnica de Stranski-Krastanow [44] (SK), que é utilizada em materiais com diferentes parâmetro de rede. Inicialmente, cresce-se uma camada de um material sobre o substrato, forçando-o a assumir o parâmetro de rede do mesmo, causando uma tensão mecânica, que aumenta à medida que aumentamos a quantidade (ou número de camadas) de material depositado. Depois disso a camada alcança

uma espessura crítica, na qual a tensão não pode mais ser contida pelas camadas epitaxiais. Quando isso acontece, os átomos das últimas camadas se deslocam e se aglutinam para formarem pequenas ilhas tri-dimensionais, as quais são chamadas de pontos quânticos. O restante das camadas que não foram utilizadas para formar o ponto quântico ficam sob a forma de um filme ultra fino chamado *wetting layer* (camada molhada) abaixo dos QDs.

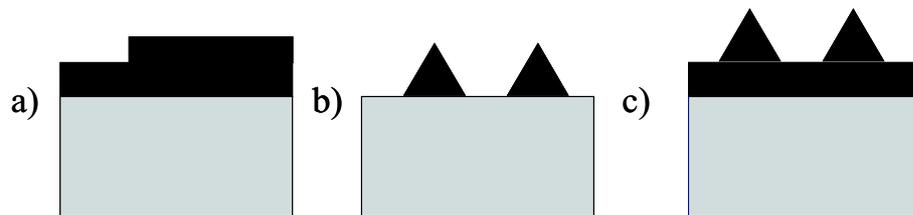


Figura 14: Diagrama esquemático das três técnicas de crescimento mais utilizadas: Frank-van der Merwe (a), Volmer-Weber (b), e Stranski-Krastanow (c).

Dependendo do método de fabricação usado para criar o QD podemos ter diferentes formatos de estruturas, que geralmente são elipsoidais ou piramidais [45, 46]. Os tamanhos dos QDs variam entre dezenas e centenas de nanômetros. O potencial lateral de confinamento também depende do método utilizado, e pode-se usar diferentes aproximações para descrevê-lo. O confinamento vertical se aproxima como um poço quadrado. No caso dos QDs litográficos maiores, o potencial lateral é muito parecido com um poço retangular. No caso dos pontos quânticos auto-formados (*Self-Assembled Quantum Dots*-SAQDs), onde os seus raios são comparáveis ao comprimento característico da variação do potencial lateral perto da borda, pode-se aproximar como um potencial parabólico.

Entre as diferentes maneiras produzir QD, uma atenção especial é dada à técnica de crescimento auto-organizada (ver Fig.15), que tem a vantagem da transição bi-dimensional para tri-dimensional, que ocorre durante o crescimento em sistemas com constantes de rede diferentes [47].

Esta técnica consiste na reorganização espontânea de parte da camada epitaxial tensionada durante o crescimento e produzidos por epitaxia de feixe molecular (*Molecular Beam Deposition*-MBE) ou deposição da vapor químico metal-orgânico (*Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*-MOCVD) com centenas de Angstroms de base e dezenas de Angstroms de altura. As técnicas utilizadas para produzir SAQDs não permitem uma homogeneidade no que diz respeito de seus tamanhos e isso é refletido diretamente nas energias do estado fundamental, por isso que, mesmo que sejam potencialmente úteis, falta ainda um longo caminho a seguir para lograr o aproveitamento das suas características.

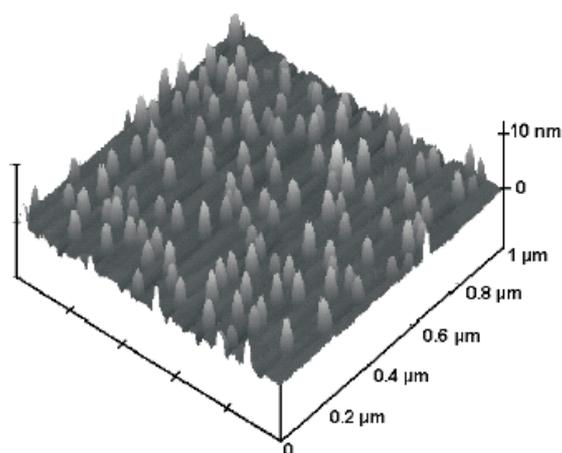


Figura 15: Imagem de pontos quânticos $SiGe$, crescido em uma camada de Si por MBE, obtida através microscopia de força atômica [48].

1.5 Excitons

Como já foi definido na seção 1.2, *exciton* é um sistema formado por um elétron e um buraco que interagem entre si, via atração Coulombiana. E este par, elétron-buraco, move-se por todo cristal, mas por ser uma entidade eletricamente neutra, não transporta corrente elétrica.

Em 1931, J. Frenkel introduziu o conceito de *exciton*, ou seja, a forte atração Coulombiana entre elétron-buraco encontrados em cristais iônicos. Como os cristais iônicos apresentam baixas constantes dielétricas, os elétrons e buracos estão fortemente ligados, a este tipo de *exciton* chamamos de *excitons* de Frenkel. Neste caso, a função envelope é descrita pela combinação linear de funções de onda representando elétrons em átomos individuais do cristal. Uma outra descrição de *exciton* foi dada por G. Wannier e N. F. Mott, onde a interação entre o elétron e o buraco é fraca, já que na maioria dos semicondutores a interação Coulombiana é blindada pelos elétrons de valência devido sua constante dielétrica ser alta. Estes tipos de *excitons* são chamados de *excitons* de Wannier-Mott, e suas propriedades podem ser calculadas usando a aproximação da massa efetiva. Na Fig. 16 temos uma representação uma rede cristalina, que nos mostra a extensão espacial dos *excitons* de Frenkel e de Wannier-Mott.

Como falamos que existem dois tipos de buracos, buracos pesados (hh) e buracos leves (lh), teremos dois tipos de *excitons*: o *exciton* de buraco pesado ($e - hh$), formado pelo par elétron-buraco pesado, e *exciton* de buraco leve, formado pelo par elétron-buraco leve ($e - lh$). Em um semiconductor, a banda de condução é bastante instável, qualquer

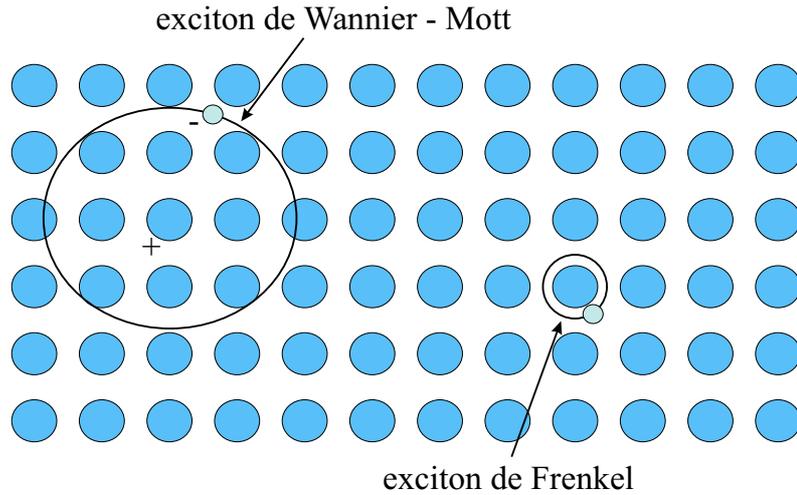


Figura 16: Representação esquemática mostrando a extensão da função envelope dos *excitons* de Frenkel e Wannier-Mott numa estrutura periódica[49].

perturbação faz com que o elétron retorne à banda de valência e, quando isto acontece, um fóton é emitido, e a essa energia liberada damos o nome de energia do *exciton*. Essa energia é maior que a energia dos portadores livres, e a diferença entre a energia do *exciton* e a energia dos portadores (subtraída da energia do *gap* do material) é o que chamamos de energia de ligação.

Em materiais *bulk*, onde não existe o potencial de confinamento para os portadores (e levando em conta que a transição ocorre do mínimo da banda de condução ao máximo da banda de valência), a energia total do *exciton* é simplesmente

$$E_{exc} = E_g - |E_b|, \quad (1.19)$$

onde E_g é a energia do *gap* e E_b a energia de ligação devido à interação Coulombiana entre o elétron e o buraco. Entretanto, para hetero-estruturas (poços, fios e pontos quânticos), existem duas componentes adicionais, devido à energia de confinamento para o elétron e o buraco,

$$E_{exc} = E_g + E_e + E_h - |E_b|, \quad (1.20)$$

onde $E_{e(h)}$ é a energia dos portadores, elétrons (buracos).

A posição relativa das bandas de energia em uma hetero-estrutura é determinada pela estrutura e composição dos materiais semicondutores constituintes [50]. Se os estados de mais baixa energia dos elétrons e mais alta nos buracos em um diagrama de banda são localizados no mesmo material, ou seja, ambos os portadores de carga estão confinados na mesma região do espaço, dizemos que o sistema tem alinhamento de bandas do tipo-I

(ver Fig 17.a)[51, 52]. Neste tipo de alinhamento, a banda de condução (BC) e a banda de valência (BV) criam potenciais de confinamento tanto para o elétron na BC quanto para o buraco na BV, formando o estado de menor energia dos portadores no interior do mesmo material. Alguns exemplos de poços quânticos tipo-I são $GaAs/AlGaAs$, $InGaAs/GaAs$, $InGaAs/InP$ e pontos quânticos de $InAs/GaAs$, $InP/GaInP$, $InAs/InP$, etc.

Quando os elétrons e os buracos estão espacialmente separados em camadas (materiais) diferentes, dizemos que nosso sistema possui alinhamento de bandas do tipo-II (ver Fig 17.b). Nestas hetero-estruturas, apenas uma das bandas possui um potencial capaz de confinar os portadores de carga, assim apenas o elétron ou buraco vai estar confinado no material intermediário. *Excitons* em hetero-estruturas tipo-II, em geral, têm energia de ligação menor que em estruturas tipo-I, e as características de *excitons* em sistemas tipo-II são qualitativamente diferentes das mesmas nos sistemas tipo-I. Em particular, devido à competição entre a atração Coulombiana e as forças de separação dos portadores na interface entre os materiais semicondutores, aparecem interessantes estruturas espaciais do sistema elétron-buraco. Alguns exemplos de poços e pontos quânticos onde o elétron fica confinado no poço de potencial são $CdSe/ZnSeTe$ e $InP/GaAs$; já como exemplos onde o buraco fica confinado, temos $Si/SiGe$ e $GaSb/GaAs$.

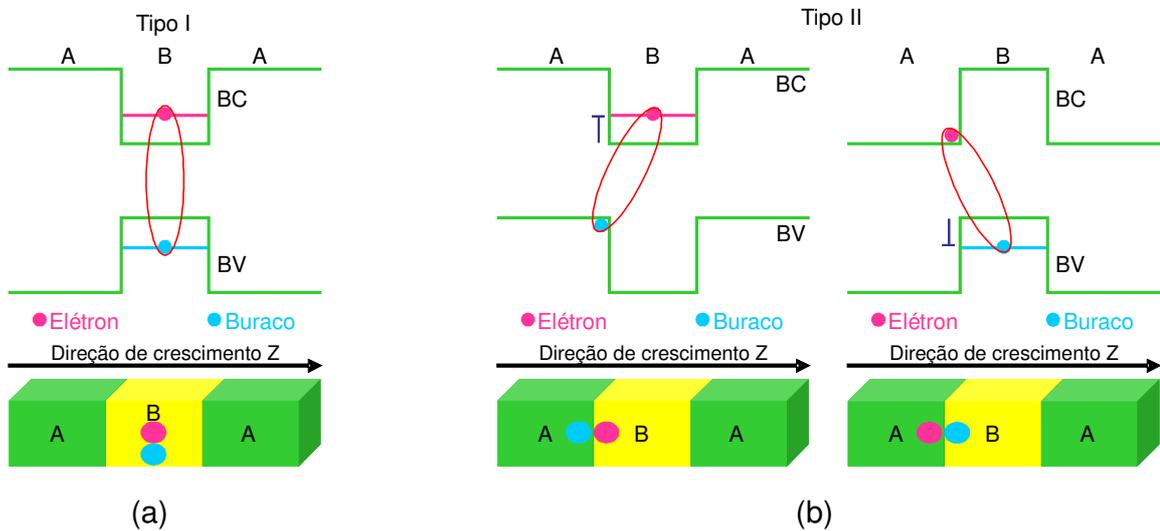


Figura 17: Representação esquemática do alinhamento de bandas tipo-I e tipo-II.

Neste trabalho, estudaremos um sistema que o buraco está confinado no poço $Si_{1-x}Ge_x$ e o elétron está situado na barreira, formada pelo silício, mas em um estado ligado devido a atração Coulombiana entre o par elétron-buraco. Neste cenário, a magnitude da interação Coulombiana elétron-buraco é fortemente dependente da distribuição espacial da carga. O potencial Coulombiano da partícula no poço causa uma zona de depleção próximo a

camada $S_{i_1-x}Ge_x$, a qual é responsável pelo confinamento do elétron, já que temos uma barreira para o mesmo.

1.6 Campo Magnético

Os fenômenos magnéticos são extensivamente estudados e utilizados desde as tradicionais aplicações, como motores, geradores e transformadores até as novas tecnologias, tais como: informática, sensoriamento, prospecção geológica, sistemas de conversão eletromecânica, eletrônica e de telecomunicação, automação industrial até a medicina e a engenharia biomédica. Nesta seção analisaremos os efeitos da aplicação de um campo magnético sob os estados eletrônicos de um sistema qualquer.

Partindo das equações de Maxwell, temos a equação

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.21)$$

que representa a inexistência de monopólos magnéticos. Se o divergente de um campo vetorial é nulo, isso implica que ele pode ser escrito como o rotacional de outro campo vetorial, pois $\nabla \cdot \nabla \times \vec{A} = 0$. Portanto podemos definir um campo vetorial \vec{A} , de forma que

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad (1.22)$$

onde o campo vetorial \vec{A} é o potencial vetor magnético, do qual podemos extrair o campo magnético a partir da operação diferencial acima. Assim, usando por exemplo, um calibre (*gauge*) simétrico, dado por

$$\vec{A} = \frac{1}{2} B \rho \hat{\phi}, \quad (1.23)$$

encontramos o campo magnético na direção z , $\vec{B} = B \hat{z}$. Da mecânica clássica, uma força eletromagnética altera a energia cinética fazendo com que a Hamiltoniana assuma a forma

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(r). \quad (1.24)$$

Na equação acima, vemos claramente que existe uma influência do potencial vetor gerado por um campo magnético sobre a energia cinética. Porém no eletromagnetismo clássico esses potenciais são apenas ferramentas matemáticas auxiliares, não possuindo realidade física. Somente quando passamos para o domínio quântico o potencial vetor magnético é importante em alguns fenômenos, como no *efeito Aharonov-Bohm*, que vamos estudar

em seguida, onde podemos dizer que esse efeito dá realidade física ao potencial vetor magnético, logo o potencial e o campo magnético tornam-se igualmente relevantes.

1.6.1 Efeito Aharonov-Bohm

Em 1959, Yakir Aharonov e David Bohm [53] propuseram um experimento de interferência com um par de feixes de elétrons, no qual o efeito dos potenciais vetores seria diretamente observado através do deslocamento das franjas de interferência. Na experiência de Aharonov-Bohm (Fig.18), uma corrente elétrica é aplicada a um solenóide infinitamente longo, e um campo magnético é produzido apenas dentro do solenóide. Pela mecânica quântica, a energia cinética de uma partícula é dada por

$$T = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}, \quad (1.25)$$

onde \vec{k} é o vetor de onda. Fazendo uma relação entre a equação acima e a equação (1.24), vemos que $\hbar\vec{k} = (\vec{p} - e\vec{A})$, ou seja, se \vec{k} e \vec{A} estiverem na mesma direção o momento aumenta e se estiverem em direções contrárias o mesmo diminui. Como o campo magnético do solenóide pode ser escolhido na direção z , podemos escolher o potencial vetor na direção $\hat{\varphi}$ como na forma da equação (1.23). Desta forma, em cada lado do anteparo da Fig. 18, o potencial vetor vai estar em sentidos diferentes. Porém, os feixes de elétrons, e conseqüentemente os vetores \vec{k} , estão no mesmo sentido nos dois lados do anteparo, isso faz com que o momento em um lado seja diferente do outro. Como a fase da onda do feixe de elétrons está relacionada com seu momento, para duas ondas de elétrons que saem de um único ponto e passam ao redor do solenóide, mesmo que as duas ondas jamais toquem o campo magnético, uma diferença de fase proporcional ao fluxo magnético enlaçado é produzida entre elas.

Assim quando uma partícula passa através de uma trajetória, sua função de onda tem uma mudança de fase devido ao potencial vetor \vec{A} , que é dada por:

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r}, \quad (1.26)$$

onde Φ é o fluxo dentro do solenóide. O efeito Aharonov-Bohm produz uma interferência que pode ser medida, devido à mudança na fase da função de onda, que é dada por:

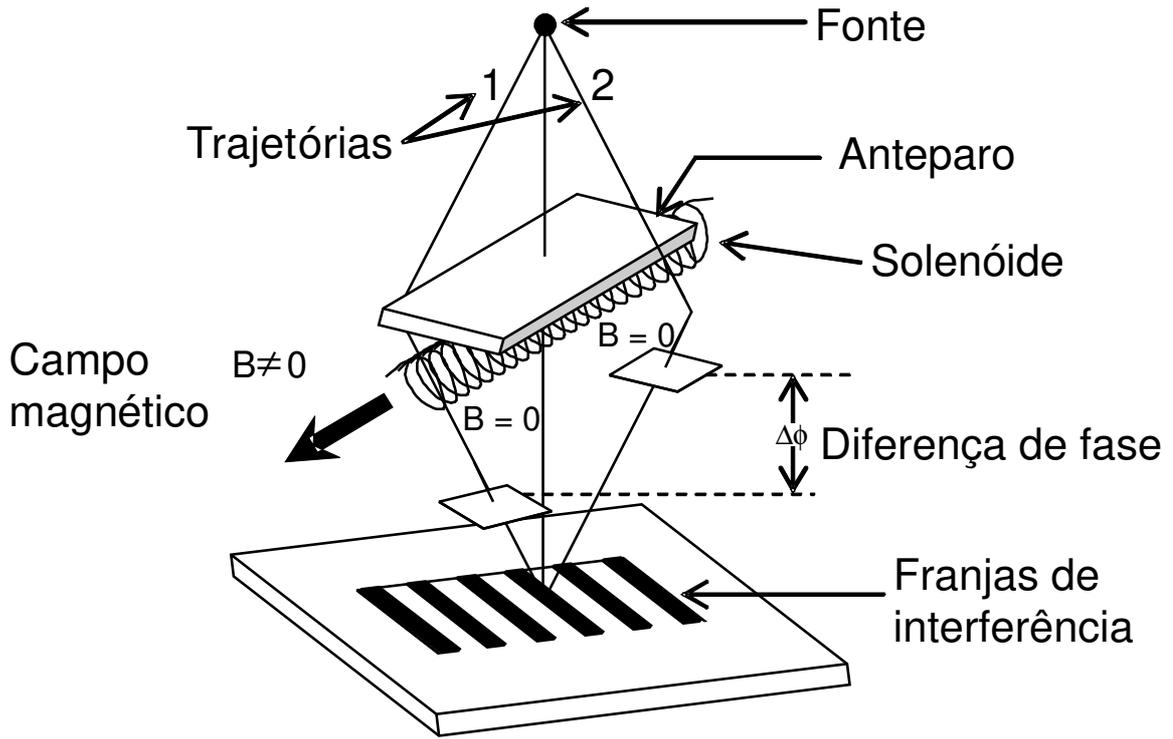


Figura 18: Esquema idealizado da experiência proposta por Aharonov-Bohm. Entre as fendas, está colocado um ímã, cujo campo magnético B , como se sabe, só é diferente de zero no seu interior, $B \neq 0$. Já o potencial vetor, diferente de zero em todo o espaço, causa efeitos opostos nas trajetórias 1 e 2.

$$\Delta\Phi = \frac{2\pi\phi}{\phi_0}, \quad (1.27)$$

com $\phi_0 = h/e$ sendo um quantum de fluxo.

1.7 Síntese da Tese

O objetivo deste trabalho é investigar o confinamento dos portadores e dos *excitons* em hetero-estruturas de baixas dimensões, tais como: poços, pontos e anéis quânticos.

No Capítulo 2, calcularemos a energia de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ com alinhamento de banda tipo-I e tipo-II, sob campos eletromagnéticos aplicados, considerando interfaces graduais. Partiremos de um Hamiltoniano que, na aproximação da massa efetiva, é capaz de simular as interfaces não abruptas existentes no sistema estudado. O efeito de *strain* entre as camadas de Si e $Si_{1-x}Ge_x$ será considerado. Nos poços quânticos tipo-II, será feita uma comparação entre o método variacional usando funções de ondas bi-dimensional (2D) e tri-dimensional (3D),

com o intuito de estudarmos a diferença entre as suas precisões.

Alguns fenômenos que ocorrem nos anéis quânticos $AlGaAs/GaAs$ serão estudados no Capítulo 3, onde calcularemos a energia do elétron em anéis quânticos considerando um campo magnético perpendicular a estas estruturas, levando em conta um modelo realístico, que consiste em anéis com barreiras e potenciais finitos não limitados a pequenas perturbações. O efeito Aharonov-Bohm na presença de impurezas negativas e positivas será investigado. Consideraremos o efeito de rugosidade na superfície do anel no espectro de energia e por último calcularemos os níveis de energia em anéis quânticos duplos.

No Capítulo 4, faremos um estudo teórico da energia dos portadores e dos *excitons* em pontos quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-I e tipo-II, usando um modelo que consiste em resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo propagando a função de onda no tempo imaginário. Faremos também uma comparação entre as energias dos mesmos em pontos quânticos com geometria elipsoidal e piramidal. Além disso, estudaremos pontos quânticos duplos $InGaAs/GaAs$, onde calcularemos os níveis de energia analisando o efeito de afastamento entre os pontos.

Finalmente, no Capítulo 5, temos as conclusões acerca dos trabalhos apresentados nesta tese e a apresentaremos as perspectivas sobre trabalhos futuros.

2 Poços Quânticos

Neste Capítulo, estudaremos as propriedades excitônicas em poços quânticos considerando duas possibilidades para o alinhamento de banda, tipo-I e tipo-II. Calcularemos a energia de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-I e tipo-II, sob campos eletromagnéticos aplicados, considerando interfaces graduais. Dentro da aproximação da massa efetiva, usaremos um Hamiltoniano que descreve o confinamento dos portadores levando em conta a dependência da massa efetiva com as variáveis espaciais. Devido à diferença de 4 % entre as constantes de redes do Si e do Ge , consideraremos o efeito de *strain* entre as camadas do Si e $Si_{1-x}Ge_x$ [54]. Para o modelo de alinhamento de bandas tipo-I ($Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$), observamos que a presença do campo elétrico paralelo ao eixo de crescimento aumenta a energia total do *exciton*, o que está coerente com recentes resultados experimentais [55, 56]. Para poços quânticos tipo-II ($Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$), fizemos uma comparação entre os resultados obtidos pelos métodos variacional usando funções de ondas bi-dimensional (2D) e tri-dimensional (3D) e verificamos que a aproximação 3D é mais precisa, especialmente em sistemas tipo-II, devido à grande extensão espacial da função da onda do portador que não está confinada ao longo da direção z . Além disso, quando os campos eletromagnéticos são aplicados paralelos a direção de crescimento, a aproximação 2D subestima à energia do *exciton*, como veremos neste trabalho [57].

2.1 Interfaces Graduais

A maioria dos trabalhos relacionados com hetero-estruturas semicondutoras tratam a junção entre os materiais como sendo abrupta, tornando os cálculos teóricos mais simples. No entanto, observações experimentais comprovaram a existência de uma região interfacial entre os materiais, onde temos tanto átomos do material da barreira quanto do poço (ver Fig.19) [58]. Essa região de transição entre os materiais que compõem as

hetero-estruturas é o que chamamos de interface gradual, a qual desempenha um importante papel no confinamento dos portadores, alterando significativamente as propriedades óticas das hetero-estruturas semicondutoras [59, 60]. Mesmo com as técnicas de crescimento se tornando cada dia mais sofisticadas, ainda não existe uma forma de se mudar abruptamente de um material para o outro em uma heterojunção, assim não podemos dizer exatamente quando um material termina e quando o outro começa.

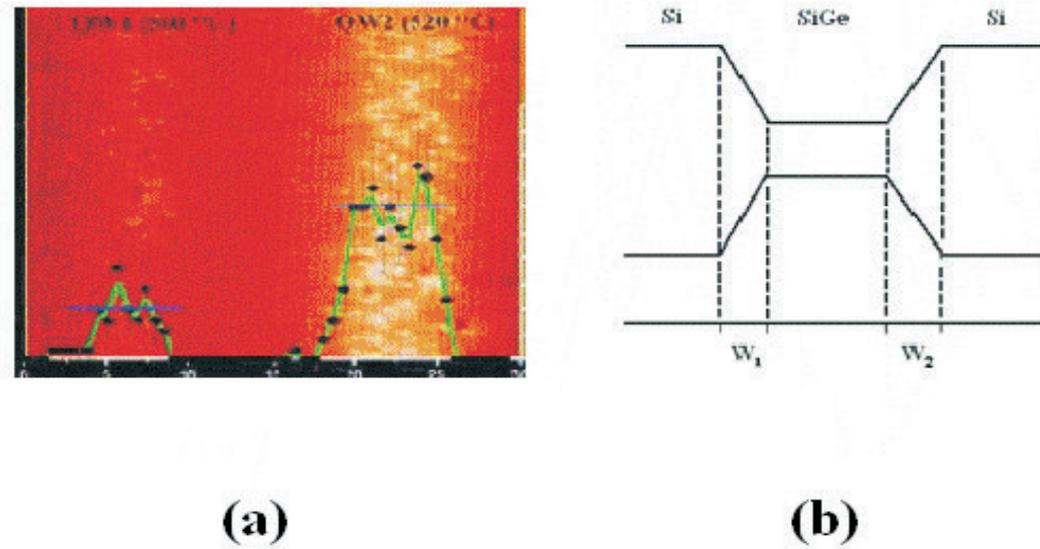


Figura 19: (a) Imagem de dois poços quânticos obtida por resolução atômica de um XSTM mostrando a concentração de átomos de Índio (pontos claros) em GaAs [58], (b) Perfil do potencial para alinhamento de banda tipo-I com interfaces graduais. As linhas vertical indicam os limites das regiões interfaciais.

Para tornar nosso trabalho mais realista, usaremos o modelo proposto originalmente por Freire *et al.* [61] em poços quânticos, que descreve a região interfacial assumindo que a massa e o potencial efetivo dos portadores são dependentes da fração molar na região da interface

$$\begin{aligned} m_i(z_i) &= m^* [\mu_{i,1}\chi(z_i) + \mu_{i,2}(1 - \chi(z_i))]; \\ V_i(z_i) &= Q_i [\varepsilon_1\chi(z_i) + \varepsilon_2\chi^2(z_i)], \end{aligned} \quad (2.1)$$

com i sendo os portadores elétrons e buracos, m^* é a massa efetiva, μ_i são os parâmetros experimentais relacionados com a massa efetiva ($m_{i,1}$ (Ge) e $m_{i,2}$ (Si)), Q_i é o *band-offset*, ou seja, as frações da diferença entre os *gaps* de energias das hetero-estruturas que vão

formar o poço para os portadores, $\chi(z)$ é função linear de z na região interfacial que representa a fração molar, ε_1 e ε_2 constantes associadas com a dependência composicional do *gap* de energia, no nosso caso iguais a 0.86 e - 0.4, respectivamente. Na Fig.19 (a) temos uma imagem com resolução atômica de um XSTM (*Cross-Sectional Scanning Tunneling Microscopy*) que mostra dois poços InGaAs com diferentes concentração de Índio e (b) é mostrada uma representação qualitativa das bandas de valência e condução para alinhamentos de banda tipo-I.

2.2 Hamiltoniano do Sistema

Nosso sistema consiste de um *exciton*, par elétron-buraco pesado (e - hh), ligado pela interação Coulombiana, em poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ sob campos eletromagnéticos aplicados. O Hamiltoniano em coordenadas cilíndricas dentro da aproximação da massa efetiva é

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{i,3D}^2 + V_i(z_i) + V_i^{mag}(\rho_i) - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial\varphi} \pm eF(z_i) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon|\vec{r}_{e,3D} - \vec{r}_{h,3D}|} \right] \quad (2.2)$$

onde $i = e, hh$ (elétron, buraco pesado), $V_i(z_i)$ o potencial de confinamento dos portadores na direção z , $V_i^{mag}(\rho_i)$ a contribuição do campo magnético em ρ , dada por $1/8m\omega^2\rho_i^2$, F o campo elétrico aplicado e m é a massa do portador. Neste sistema temos seis coordenadas espaciais, três para o elétron e três para o buraco pesado. Os portadores estão confinados apenas no eixo z já que o o potencial de confinamento depende somente de z , logo podemos separar o movimento no plano xy e na direção z . Levando em conta que a massa longitudinal m^{\parallel} no plano pode ser diferente da massa perpendicular m^{\perp} no eixo z , podemos escrever o Hamiltoniano da Eq. (2.2) como

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^{\parallel}} \nabla_{e,2D}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e^{\perp}} \frac{d^2}{dz_e^2} + V_e(z_e) + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \rho_e^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial\varphi_e} - eF(z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_h^{\parallel}} \nabla_{h,2D}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^{\perp}} \frac{d^2}{dz_h^2} + V_h(z_h) + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \rho_h^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial\varphi_h} + eF(z_h) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \sqrt{(r_e^{2D} - r_h^{2D})^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] \quad (2.3)$$

Separando os termos relacionados ao elétron, buraco e da interação elétron-buraco, teremos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^{\parallel}} \nabla_{e,2D}^2 + H_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_h^{\parallel}} \nabla_{h,2D}^2 + H_h(z_h) + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \rho_e^2 + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \rho_h^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi_e} - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi_h} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{(r_e^{2D} - r_h^{2D})^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h), \quad (2.4)$$

onde

$$H_i(z_i) = -\frac{\hbar^2}{2m_i^{\perp}} \frac{d^2}{dz_i^2} + V_i(z_i) \pm eF(z_i), \quad (2.5)$$

é o Hamiltoniano de cada portador na direção z .

Usando as coordenadas de centro de massa e o conceito de movimento relativo do *exciton*

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \frac{m_e \vec{r}_e + m_h \vec{r}_h}{m_e + m_h}, \\ \vec{r} &= \vec{r}_e - \vec{r}_h, \end{aligned} \quad (2.6)$$

com $M = m_e + m_h$ sendo a massa total do *exciton*. Fazendo algumas manipulações na Eq. (2.6) teremos

$$\vec{r}_h = \vec{R} - \frac{m_e \vec{r}}{M}, \quad (2.7a)$$

$$\vec{r}_e = \vec{R} + \frac{m_h \vec{r}}{M}. \quad (2.7b)$$

(2.7)

Da regra da cadeia, temos que

$$\begin{aligned} \nabla_e &= \hat{r}_e \frac{\partial r}{\partial \vec{r}_e} \\ &= \underbrace{\hat{r} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}}_{\nabla_{\vec{r}}} \underbrace{\frac{\partial r}{\partial \vec{r}_e}}_1 + \underbrace{\hat{R} \frac{\partial}{\partial \vec{R}}}_{\nabla_{\vec{R}}} \underbrace{\frac{\partial R}{\partial \vec{r}_e}}_{\frac{m_e}{M}} \\ \nabla_e &= \nabla_{\vec{r}} + \nabla_{\vec{R}} \frac{m_e}{M}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

para o elétron, e de forma análoga para o buraco

$$\nabla_h = \nabla_{\vec{R}} \frac{m_h}{M} - \nabla_{\vec{r}}. \quad (2.9)$$

Substituindo as Eqs. (2.7) e (2.9) no Hamiltoniano da Eq. (2.4)

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{m_e}{M} \nabla_{\vec{R}} + \nabla_{\vec{r}} \right)^2}_{A} + H_e(z_e) - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m_h} \left(\frac{m_h}{M} \nabla_{\vec{R}} - \nabla_{\vec{r}} \right)^2}_{B} + H_h(z_h) + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \rho^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{(r_{e,2D} - r_{h,2D})^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] \Psi(\vec{R}, \vec{r}, z_e, z_h) = E \Psi(\vec{R}, \vec{r}, r_e, r_h) \quad (2.10)$$

reescrevendo os termos A e B da Eq. (2.10), teremos

$$A = -\frac{\hbar^2}{2M^2} m_e \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{M} \nabla_{\vec{R}} \cdot \nabla_{\vec{r}} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}}^2. \quad (2.11)$$

e,

$$B = -\frac{\hbar^2}{2M^2} m_h \nabla_{\vec{R}}^2 + \frac{\hbar^2}{M} \nabla_{\vec{R}} \cdot \nabla_{\vec{r}} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_{\vec{r}}^2. \quad (2.12)$$

Substituindo os valores de A e B na Eq. (2.10), temos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M^2} \nabla_{\vec{R}}^2 (m_e + m_h) - \frac{\hbar^2}{2} \nabla_{\vec{r}}^2 \frac{1}{\mu} + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \rho^2 + H_e(z_e) + H_h(z_h) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} \right] \Psi(\vec{R}, \vec{r}, z_e, z_h) = E \Psi(\vec{R}, \vec{r}, z_e, z_h), \quad (2.13)$$

com

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (2.14)$$

sendo a massa reduzida do *exciton*.

Como não temos termos em função de R , podemos desacoplar a função do movimento relativo e o do centro de massa

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}, z_e, z_h) = e^{-iK\vec{R}} \Psi(r, z_e, z_h), \quad (2.15)$$

onde \vec{K} é o vetor de onda associado às coordenadas do centro de massa. Para transições ópticas nos semicondutores, $K \rightarrow 0$, restando-nos portanto três coordenadas na Eq.

(2.13), que é reescrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \vec{r}^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + H_e(z_e) + H_h(z_h) \right] \Psi(\vec{r}, z_e, z_h) = E\Psi(\vec{r}, z_e, z_h), \quad (2.16)$$

que descreve o movimento dos *excitons* nas hetero-estruturas. Temos então $H_i(z_i)$ sendo o Hamiltoniano da cada portador, elétron e buraco, dado pela Eq. (2.5), e H_{eh} o Hamiltoniano que descreve a interação do *excitons*, dado por

$$H_{eh} = - \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} + \frac{e^2 B^2}{8\mu_{\parallel}} \vec{r}^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]. \quad (2.17)$$

2.2.1 Alinhamento de Banda Tipo-I em Sistemas $Si/Si_{1-x}Ge_x$

Em sistemas tipo-I, o elétron e buraco são confinados espacialmente no mesmo poço quântico (mesmo material - $Si_{1-x}Ge_x$). A concentração de germânio para o poço $Si_{1-x}Ge_x$

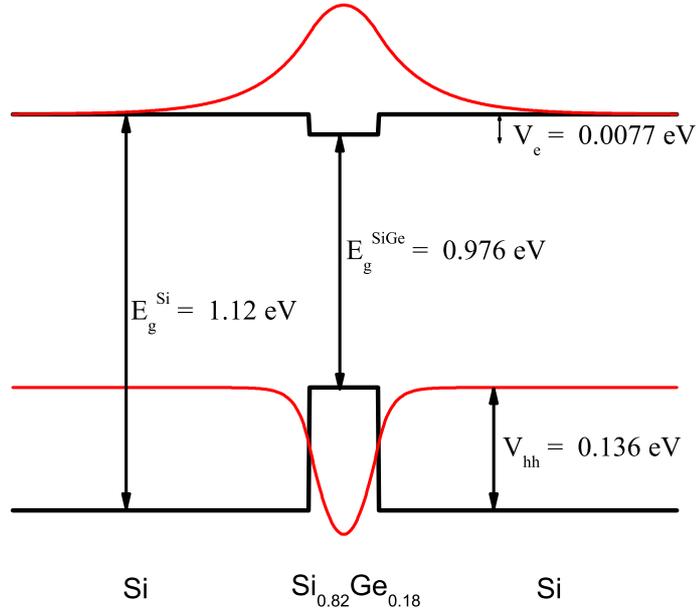


Figura 20: Representação esquemática de um poço quântico tipo-I.

foi $x = 0.18$, resultando num potencial de confinamento do elétron e buraco pesado de

$V_e = 7.7$ meV e $V_{hh} = 136$ meV, respectivamente [55]. O *band-offset* utilizado foi de aproximadamente 0.4 % para a banda de condução e 96 % para a banda de valência. A Fig.20 mostra o potencial de um poço de 70 Å de largura usado para simulação dos poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-I com interfaces abrupta e as funções de onda (linha vermelha) do elétron e buraco nas bandas de condução e valência, respectivamente.

Usando uma função de onda hidrogenóide bi-dimensional (2D) para a o *exciton*, podemos separar o movimento no plano e no eixo:

$$\Psi_{exc}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{2D}(\rho), \quad (2.18)$$

onde $\psi_i(z_i)$ é a função de onda dos portadores no eixo z e $\phi_{2D}(\rho)$ é a função de onda 2D, contento um parâmetro variacional α_{\perp}

$$\phi_{2D}(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha_{\perp}^2}}e^{-\rho/\alpha_{\perp}}. \quad (2.19)$$

A equação tipo Schrödinger para o confinamento de uma partícula numa hetero-estrutura é

$$[H_e(z_e) - E_e]\psi_e(z_e) = 0, \quad (2.20)$$

$$[H_h(z_h) - E_h]\psi_h(z_h) = 0, \quad (2.21)$$

que são resolvidas numericamente usando o método de discretização [62] para encontrar os autovalores e autofunções dos elétrons e buracos. Para o movimento radial, usamos a Eq. (2.16), que descreve o movimento do *exciton* na hetero-estrutura. Assim, multiplicando por Ψ^* , e integrando em todo espaço

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_e^*(z_e)\psi_h^*(z_h)\phi_{2D}^*(\rho) H_e \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{2D}(\rho) + \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_e^*(z_e)\psi_h^*(z_h)\phi_{2D}^*(\rho) H_h \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{2D}(\rho) + \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_e^*(z_e)\psi_h^*(z_h)\phi_{2D}^*(\rho) H_{eh} \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{2D}(\rho) = \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_e^*(z_e)\phi_h^*(z_h)\phi_{2D}^*(\rho) E_{exc} \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{2D}(\rho). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Assumindo $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_e(z_e)\psi_e^*(z_e)dz_e = 1$, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_h(z_h)\psi_h^*(z_h)dz_h = 1$ e $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{eh}(\rho)\phi_{eh}^*(\rho)\rho d\rho = 1$, a

energia do *exciton* será dada por

$$\begin{aligned}
E_{exc} &= E_e + E_h - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2}{\pi\alpha_\perp^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-\rho/\alpha_\perp} \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right\} e^{-\rho/\alpha_\perp} \rho d\rho d\theta + \frac{e^2 B^2}{8\mu_\parallel} \frac{2}{\pi\alpha_\perp^2} \\
&\times \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-\rho/\alpha_\perp} \rho d\rho d\theta - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty \frac{|\psi_e(z_e)|^2 |\psi_h(z_h)|^2 |\phi_{2D}(\rho)|^2}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} dz_e dz_h \rho d\rho \quad (2.23)
\end{aligned}$$

resolvendo o primeiro termo da primeira integral da equação acima, encontramos que:

$$\left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right\} e^{-\rho/\alpha_\perp} = \frac{1}{\alpha_\perp} e^{-\rho/\alpha_\perp} \left[\frac{\rho}{\alpha_\perp} - 1 \right] d\rho, \quad (2.24)$$

assim aplicando o resultando da Eq. (2.24) na Eq. (2.23), ficaremos com

$$\begin{aligned}
E_{exc} &= E_e + E_h - \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{2}{\alpha_\perp^2} \int_0^\infty \frac{1}{\alpha_\perp} \left[\frac{\rho}{\alpha_\perp} - 1 \right] e^{-2\rho/\alpha_\perp} d\rho + \frac{e^2 B^2}{2\mu_\parallel \alpha_\perp^2} \int_0^\infty e^{-2\rho/\alpha_\perp} \rho^3 d\rho \\
&- \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \frac{4}{\alpha_\perp^2} \int_{-\infty}^\infty |\psi_e(z_e)|^2 dz_e \int_{-\infty}^\infty |\psi_h(z_h)|^2 dz_h \int_0^\infty \frac{e^{-2\rho/\alpha_\perp}}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} \rho d\rho, \quad (2.25)
\end{aligned}$$

usando $\int_0^\infty x^n \exp(-\mu x) dx = n! \mu^{-n-1}$ [63] na primeira integral e resolvendo analiticamente a segunda temos

$$\begin{aligned}
E_{exc} &= E_e + E_h - \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{2}{\alpha_\perp^2} \left[\frac{1}{\alpha^2} \left(\frac{2}{\alpha} \right)^{-2} - \frac{1}{\alpha} \left(\frac{2}{\alpha} \right)^{-1} \right] + \frac{3\omega^2 \mu_\parallel \alpha_\perp^2}{16} \\
&- \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \frac{4}{\alpha_\perp^2} \int_{-\infty}^\infty |\psi_e(z_e)|^2 dz_e \int_{-\infty}^\infty |\psi_h(z_h)|^2 dz_h \int_0^\infty \frac{e^{-2\rho/\alpha_\perp}}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} \rho d\rho,
\end{aligned}$$

onde $\omega_c = eB/\mu_\parallel$ é a frequência do ciclotron [64]. Assim, a energia total do *exciton* é

$$E_{exc} = E_{gap} + E_e + E_h + \gamma - E_b, \quad (2.26)$$

onde E_{gap} é a energia do *gap* entre as bandas de condução e valência, $\gamma = \hbar\omega_c/2$ o primeiro nível de energia de Landau, e E_b é a energia de ligação

$$E_b = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \frac{4}{\alpha_\perp^2} \int_{-\infty}^\infty |\psi_e(z_e)|^2 dz_e \int_{-\infty}^\infty |\psi_h(z_h)|^2 dz_h \int_0^\infty \frac{e^{-2\rho/\alpha_\perp}}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} \rho d\rho. \quad (2.27)$$

A última integral pode ser escrita em termos das funções de Struve $S_1(u)$ e Neumann

$N_1(u)$ [65]

$$\frac{e^2}{\pi\epsilon\alpha_{\perp}^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_e(z_e)|^2 |\psi_h(z_h)|^2 |Z_{eh}| \left\{ \frac{\pi}{2} \left[H_1 \left(\frac{2|Z_{eh}|}{\alpha_{\perp}} \right) - N_1 \left(\frac{2|Z_{eh}|}{\alpha_{\perp}} \right) \right] - 1 \right\} dz_e dz_h, \quad (2.28)$$

com $Z_{eh} = z_e - z_h$.

A energia de ligação do *exciton* é calculada pelo método variacional [66], através da minimização da energia:

$$E_b = \frac{\langle \phi_{2D} | H_{eh} | \phi_{2D} \rangle}{\langle \phi_{2D} | \phi_{2D} \rangle}. \quad (2.29)$$

2.2.2 Alinhamento de Banda em Sistemas Tipo-II

Para o alinhamento de banda tipo-II, nosso problema torna-se significativamente diferente. Nestes sistemas, somente uma das bandas, condução ou valência, apresenta um potencial tipo poço que é capaz de confinar os portadores de carga, enquanto o outro portador fica ligado apenas pela interação Coulombiana, e portanto, tem uma ligação fraca. Neste trabalho o portador que está confinado é o buraco na banda de valência, enquanto

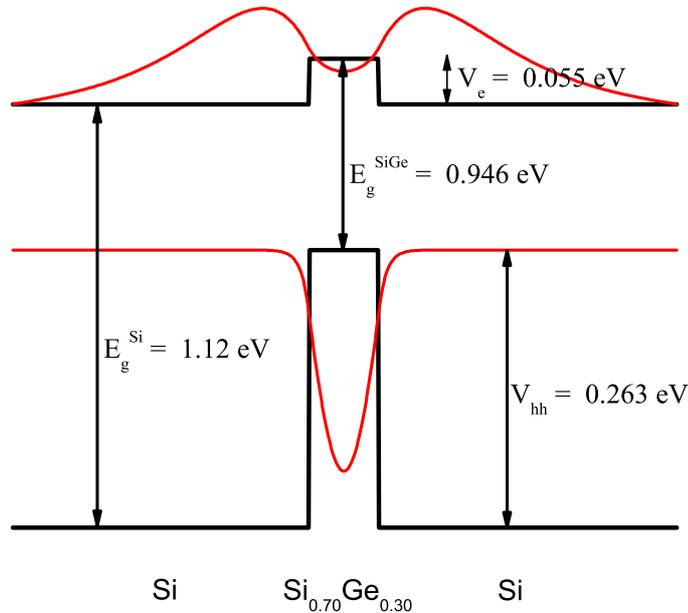


Figura 21: Representação esquemática de um poço quântico tipo-II.

para o elétron a banda de condução forma uma barreira de potencial. Neste caso, a fração

molar usada para o poço $Si_{1-x}Ge_x$ foi $x = 0.30$, que resultou num potencial de $V_e = 55.6$ meV para elétron e $V_{hh} = 263$ meV para o buraco pesado. Já o *band-offset* de condução usado foi de 18 % e o de valência 82 % [29]. Na Fig.21 temos o potencial de um poço $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II de 70 Å de largura com interfaces abruptas e as funções de onda (linha vermelha) do elétron e buraco nas bandas de condução e valência, respectivamente.

A solução da equação Schrödinger para o Hamiltoniano do elétron na Eq.(2.20), será $E_e = 0$, já que temos uma barreira para o mesmo. Assim, usando a função de onda Eq.(2.18) na equação de Schrödinger (Eq.(2.16)), considerando a aproximação 2D da Eq.(2.19), multiplicando pelo complexo conjugado da parte z_h e ρ da função de onda e integrando em todo espaço nas respectivas coordenadas [67], encontramos a energia fundamental do confinamento do *exciton*

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z_e} \left(\frac{1}{m_e(z_e)} \frac{\partial}{\partial z_e} \right) \right] + V_e(z_e) - eFz_e + \frac{\hbar^2}{2\mu_\perp \alpha_\perp^2} \right\} \psi_e(z_e) + \{V_{eff}(\alpha_\perp, z_e) + E_h\} \psi_e(z_e) = E_X \psi_e(z_e), \quad (2.30)$$

com o potencial efetivo dado por

$$V_{eff}(\alpha_\perp, z_e) = \frac{3\omega_c^2 \mu_\perp \alpha_\perp^2}{16} - \frac{e^2}{\pi \epsilon \alpha_\perp^2} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 dz_h \int_0^{\infty} \frac{e^{-2\rho/\alpha_\perp}}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} \rho d\rho. \quad (2.31)$$

A integral de ρ no potencial efetivo na Eq.(2.31) pode ser simplificada em termos das funções de Struve e Neumann, tal como no sistema tipo-I. Na Eq. (2.30), o parâmetro α_\perp é determinado minimizando a energia fundamental do *exciton* E_X . A energia de ligação do *exciton* é dada por $E_b = E_h + \gamma - E_X$ e a energia total do *exciton* é $E_{exc} = E_{gap} + E_X$.

Este formalismo da aproximação 2D tem sido amplamente usado em sistemas que apresentam alinhamento de banda tipo-I, onde de fato para estes sistemas, a função de onda 2D pode ser usada como uma boa aproximação, desde que o confinamento dos portadores na hetero-estrutura seja fortalecido pela interação Coulombiana. Entretanto, em sistemas tipo-II esta aproximação torna-se menos precisa, devido à extensão espacial da função de onda do elétron, que não está confinada. Logo, usaremos uma aproximação 3D, a qual engloba todo espaço. Seguindo o mesmo procedimento de Bellabchara *et al.* [68], a Eq. (2.19), onde temos a função de onda 2D, é substituída por

$$\phi_{3D}(\rho, z_e - z_h) = N \exp \{ -[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2} / \alpha \}. \quad (2.32)$$

Para encontramos o fator de normalização N , integramos a função de onda do *exciton* $\Psi_{exc}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{3D}(\rho, z_e, z_h)$ em ρ, z_e e z_h . Agora, como a função de onda é

3D (dada pela Eq.(2.32)), não podemos separar o movimento do elétron no plano e no eixo, como fizemos anteriormente. O parâmetro variacional α neste caso dá a extensão de z na função de onda. Usando a função de onda 3D, e usando o mesmo formalismo descrito na aproximação 2D para a função de onda, obtemos

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + A(\alpha, z_e) \frac{\partial}{\partial z_e} + V_e(z_e) - eFz_e + \frac{\hbar^2}{2\mu_\perp \alpha^2} \right\} \psi_e(z_e) + \{ V_{eff}(\alpha, z_e) + E_h \} \psi_e(z_e) = E_X(\alpha) \psi_e(z_e), \quad (2.33)$$

onde

$$V_{eff}(\alpha, z_e) = 2 \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e \alpha^2} (T_1 - T_2) + \frac{\hbar^2}{\alpha^2} \left[\frac{1}{\mu_\perp} - \frac{1}{\mu_z} \right] Q - \frac{e^2}{\epsilon \alpha} T_1 \right\} / (T_1 + T_2) + \frac{\omega_c^2 \mu_\perp N^2}{16} \left[\frac{T_4 + 3(T_1 + T_2)}{T_1 + T_2} \right], \quad (2.34)$$

e $T_j = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \exp(-2|z_e - z_h|/\alpha) I_j dz_h$ com ($j = 1, 2, 3$); $I_1 = 1$; $I_2 = 2|z_e - z_h|/\alpha$; $I_3 = 2(z_e - z_h)/\alpha$; $I_4 = 4|z_e - z_h|^2/\alpha^2$; e $Q = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 (Z_{eh}/\alpha)^2 E_1(2|Z_{eh}|/\alpha) dz_h$, onde $E_1(k)$ é a integral da exponencial [63]. O termo da derivada primeira é $A(\alpha, z_e) = \hbar^2 T_3 / [m_e \alpha (T_1 + T_2)]$. Uma descrição mais detalhada do desenvolvimento desse formalismo pode ser vista no Apêndice A.

Na Eq.(2.33), a massa efetiva do elétron deve ser constante para preservar a hermiticidade do Hamiltoniano [68]. Então, na equação de Schrödinger para o confinamento do elétron, dentro da aproximação 3D, somente o potencial do elétron assume a dependência com a concentração do *Ge* $\chi(z)$, enquanto a massa efetiva levada em conta é $m_{e,2}$ (*Si*) para toda hetero-estrutura. A energia de ligação e energia total do *exciton* são dadas pelas mesmas equações da aproximação 2D precedente, $E_b = E_h + \gamma - E_X$ e $E_{exc} = E_{gap} + E_X$, respectivamente.

A fim de discutirmos alguns resultados numéricos e ilustrar as funções de onda, definiremos a densidade de probabilidade $p(z_e, z_h)$, dada por

$$p(z_e, z_h) = 2\pi \int_0^\infty |\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)|^2 \rho d\rho \quad (2.35)$$

onde nos dá a probabilidade de encontrar o elétron em z_e e o buraco em z_h .

2.3 Strain

Com os avanços nas técnicas de crescimento foi possível crescer filmes finos biaxialmente tensionados de alta qualidade, sem que haja defeitos criados pela tensão nas camadas depositadas devido ao descasamento dos parâmetros de rede. Assim, a tensão biaxial, proveniente do descasamento do parâmetro, tornou-se uma variável a mais nos métodos de crescimento de cristais. Essa tensão é responsável por uma deformação na rede cristalina devido à diferença dos parâmetros de rede, essa deformação denominamos de *strain*. Atualmente, utiliza-se inclusive a tensão intrínseca do filme depositado para favorecer o crescimento de pontos quânticos auto-organizados e na fabricação de dispositivos, por exemplo, laser de poços quânticos e transistores MOSFET. Em semicondutores, o *strain* têm um papel importante, já que influência na estrutura de bandas, principalmente na banda de valência, que é formada por três bandas de orbitais atômicos p (e momento angular orbital $l = 1$) onde ele modifica as propriedades de materiais, como a energia do *gap*.

Existem dois tipos de *strain* relativos à localização da tensão, que são classificados de acordo com a presença da tensão nos materiais: pseudomórfico e *free-standing*. No primeiro caso, apenas um dos materiais que compõe a hetero-estrutura tem seu parâmetro de rede ajustado ao outro material. No segundo caso, os parâmetros de rede de ambos materiais se ajustam um ao outro, de forma que a hetero-estrutura tenha um valor intermediário entre os parâmetros de rede dos dois materiais. Neste trabalho usaremos o crescimento pseudomórfico [69].

Os materiais que usaremos serão o silício e o germânio, que apresentam uma diferença de 4% na constante de rede entre suas camadas, tornando-os cristalograficamente incompatíveis. Assim, o efeito do *strain* deve ser levado em conta. Ao crescermos uma camada $Si_{1-x}Ge_x$ pseudomorficamente sob um substrato de Si , uma tensão é causada na constante de rede. O *strain* na camada $Si_{1-x}Ge_x$ reduz a simetria do material e modifica sua estrutura de banda [70]. O Si e o Ge apresentam estrutura de banda *zincoblenda* com três bandas degeneradas no ponto Γ da primeira zona de *Brillouin*, que podem ser descritas por um Hamiltoniano 6×6 pelo modelo de Luttinger-Kohn. Quando consideramos o *strain* e o efeito de acoplamento spin-órbita, ocorre uma separação no topo da banda de valência no ponto Γ em buraco pesado (hh), buraco leve (lh) e o *spin* órbita (so), com uma separação de energia definida por Δ_0 .

Para descrever como o *strain* modifica a estrutura de bandas do material estudado,

usaremos as teorias de Lutting-Kohn e Bir-Pikus [71], que incluem o acoplamento entre as bandas de buraco pesado ($HH, |3/2, \pm 3/2 \rangle$), buraco leve ($LH, |3/2, \pm 1/2 \rangle$) e a banda separada devido a interação spin-órbita, *split-off* ($SO, |1/2, \pm 1/2 \rangle$), ou seja, três subbandas, cada uma degeneradas por *spin*.

O Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, na forma de uma matriz 6 x 6 que descreve a banda de valência, pode ser escrito na forma [71],

$$H = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & -\sqrt{2}R^\dagger & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^\dagger \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S^\dagger & -\sqrt{2}Q & \frac{3}{2}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{matrix} |+\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle \\ |+\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ |+\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |+\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle \\ |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ |+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{matrix}, \quad (2.36)$$

onde

$$\begin{aligned} P &= P_k + P_\varepsilon, \\ Q &= Q_k + Q_\varepsilon, \\ R &= R_k + R_\varepsilon, \\ S &= S_k + S_\varepsilon, \end{aligned} \quad (2.37)$$

com

$$\begin{aligned} P_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \sqrt{3}[-\gamma_2(k_x^2 + k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y] \\ S_k &= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) 2\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y)k_z, \end{aligned} \quad (2.38)$$

e

$$\begin{aligned} P_\varepsilon &= -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \\ Q_\varepsilon &= -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}), \\ R_\varepsilon &= -\frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy}, \\ S_\varepsilon &= -d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}) \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde k é o vetor de onda, γ_1 , γ_2 e γ_3 os parâmetros de Luttinger, a_v , b e d os potenciais de deformação de Bir-Pikus, Δ nos dá a separação das bandas de valência no ponto Γ , devido a interação spin-órbita, ε_{ij} é o tensor simétrico de deformação e a base $|j, m \rangle$ é a

função de onda de Bloch no centro da zona de *Brillouin*, escolhida de forma que a fazer o Hamiltoniano da interação spin-órbita diagonal [72, 73].

O cálculo dos novos níveis de energia, quando consideramos os efeitos de *strain* e spin-órbita, se encontra descrito em detalhes na referência [71]. Assim, as energias das bandas de condução e valência são dadas por

$$\begin{aligned}
E_c &= E_v + E_g + P_c, \\
E_{hh} &= E_v - P_\varepsilon - Q_\varepsilon, \\
E_{lh} &= E_v - P_\varepsilon + \frac{Q_\varepsilon}{2} - \frac{\Delta}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2}, \\
E_{so} &= E_v - P_\varepsilon + \frac{Q_\varepsilon}{2} - \frac{\Delta}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta + 2\Delta Q_\varepsilon + 9Q_\varepsilon^2}, \\
E_v &= E_{v,av} + \frac{\Delta}{3},
\end{aligned} \tag{2.40}$$

onde E_c a banda de condução, E_g é o *gap* de energia, E_{hh} a banda do buraco pesado, E_{lh} buraco leve e E_{so} energia do splitting spin-órbita, E_v é a energia da posição, $E_{v,av}$ é a energia média da banda de valência. Os novos *band offset* de valência e condução são:

$$\Delta V_e = E_c^{Si} - E_c^{Si_{1-x}Ge_x}, \tag{2.41}$$

$$\Delta V_\alpha = E_\alpha^{Si} - E_\alpha^{Si_{1-x}Ge_x}. \tag{2.42}$$

com $\alpha = hh, lh$ e *so*.

2.4 Resultados e Discussões

Calculamos as propriedades eletrônicas dos *excitons* em poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I e $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II, com *strain*, levando em conta o efeito de interfaces. Os parâmetros usados estão mostrados na tabela II.

A Fig.22 mostra (a) energia de ligação e (b) energia total do *exciton* elétron-buraco pesado (*e-hh*) em função da largura do poço quântico $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I, para várias espessuras de interfaces. Observamos que a energia de ligação para larguras do poço maiores que ~ 90 Å aumenta quando consideramos as interfaces graduais. O comportamento oposto ocorre para larguras menores. Para larguras do poço muito estreitas, há um decréscimo na energia, já que para limites pequenos da largura dos poços, o *exciton* passa de um confinamento quasi-bidimensional para um sistema tri-dimensional (material bulk). Para uma interface de 15 Å, estas energias apresentam uma diferença de 8% em relação a uma interface abrupta. Em (b) a energia total do *exciton* elétron-buraco pesado

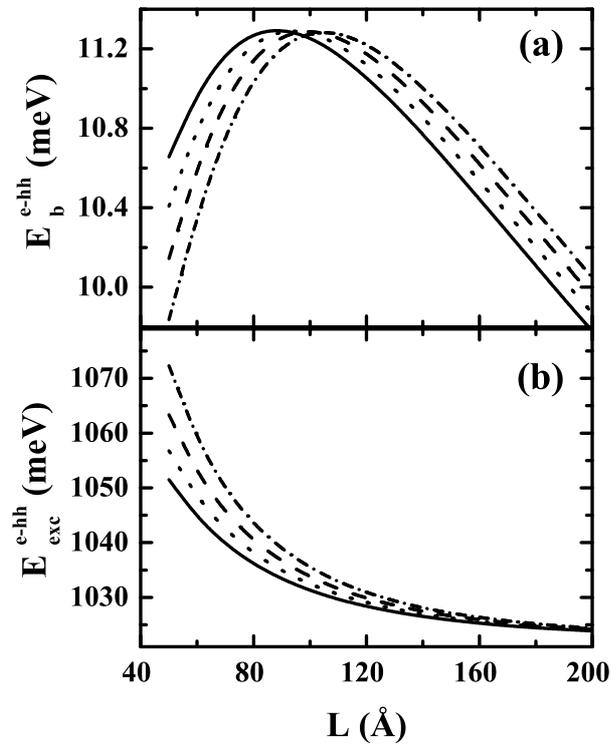


Figura 22: (a) Energia de ligação e (b) total do *exciton* $e-hh$ em poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I em função da largura do poço quântico, usando uma aproximação 2D para a função de onda e considerando interfaces graduais de 0 Å (linha sólida), 5 Å (linha pontilhada), 10 Å (linha tracejada) e 15 Å (linha tracejada-pontilhada).

Parâmetros	Silício	Germânio
$E_g(eV)$	1.12	0.66
$a(\text{Å})$	5.43	5.65
ϵ/ϵ_0	11.9	16.2
m_{\parallel}	0.91	1.57
m_{\perp}	0.19	0.08
$m_{hh\parallel}$	0.21	0.05
$m_{hh\perp}$	0.27	0.20
$C_{11}(10^{10}N/m^2)$	16.75	13.15
$C_{12}(10^{10}N/m^2)$	6.50	4.94
$\Delta(eV)$	0.04	0.297
$E_{v,av}(eV)$	-7.03	-6.35
$a_v(eV)$	2.46	1.24
$a_c(eV)$	1.98	-8.24
$b(eV)$	-1.5	-2.2

Tabela 1: Parâmetros usados nas simulações dos poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ [74]

diminui à medida que as larguras dos poços aumenta, e a mesma sofre um acréscimo quando aumentamos a espessura interfacial no poço. Entretanto esse aumento é menor do que na energia de ligação. Para um poço quântico de 50 Å de largura e interface gradual de 15 Å o aumento é de 20 meV ($\sim 2\%$) em relação a um poço abrupto.

A influência do campo elétrico aplicado, paralelo ao eixo de crescimento, no *stark shift* (linha sólida, símbolos quadrados), energia de ligação (linha tracejada, símbolos circulares), e energia total do *exciton* (linha pontilhada, símbolos triangulares) é mostrada na Fig.23(a), onde os *shifts* de energia $\Delta E(F) = E(F) - E(0)$ são mostrados para poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I, com largura de $L = 70$ Å considerando as interfaces como sendo abruptas (linhas) e graduais $w = 15$ Å (símbolos). Observamos um aumento na energia total do *exciton*, e não um decréscimo como acontece para a maioria dos materiais. Isto ocorre devido ao *band offset* de condução ser muito pequeno, aproximadamente 10 meV, fazendo com que o *stark shift* dos portadores tenha apenas um pequeno declínio (que na maioria dos materiais é bem acentuada), assim, quando somarmos com a energia de ligação, que sofre um aumento, a resultante será um aumento na energia total do *exciton*. Este resultado está coerente com recentes dados experimentais de fotoluminescência mostrados por Y. Miyake *et al.* [55]. Quando considerando a influência de uma interface de $w = 15$ Å, notamos uma variação nas energias, tornado os efeitos causados pelo campo elétrico mais significantes (resultado com símbolos). Na Fig.23(b), temos o *shift* da energia total do *exciton* para um campo elétrico de $F = 2kV/cm$ em função da largura do

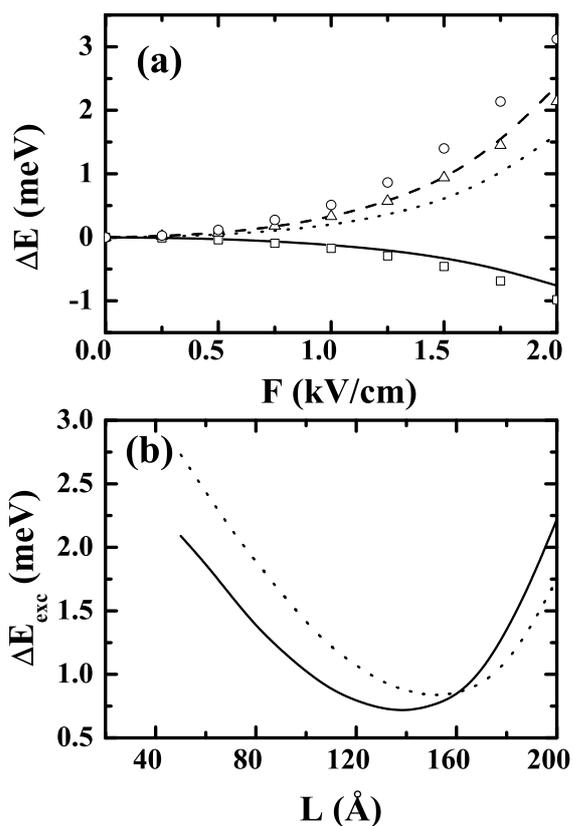


Figura 23: (a) *Stark shift* (linha sólida, símbolo quadrado), energia de ligação (linha tracejada, símbolo círculos) e energia total do *exciton* (linha pontilhada, símbolo triângulo) em função do campo elétrico, em poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I, considerando interfaces abruptas (linhas) e interfaces graduais de $w = 15$ Å de espessura (símbolos). (b) *Shift* da energia do *exciton* devido um campo elétrico $F = 2$ kV/cm em função da largura do poço quântico, considerando interfaces de $w = 0$ Å (linha sólida) e $w = 15$ Å de espessura (linha pontilhada).

poço quântico L , onde o deslocamento do mínimo é observado para larguras intermediárias quando consideramos interfaces graduais. Este comportamento foi atribuído à existência de um valor máximo da energia de ligação em larguras intermediárias para sistemas tipo-I [55]. Apesar do ponto mais elevado da energia de ligação e o menor da energia total do *exciton* na Fig.22(b) ocorrerem para diferentes larguras do poço quântico, uma relação pode ser observada entre elas: quando uma camada interfacial é levada em conta, o valor máximo da energia de ligação é deslocado para larguras maiores (ver Fig.22(a)), da mesma forma que há um deslocamento da energia do *exciton* para um poço de 15 Å espessura na interface (linha pontilhada), que passa a alcançar seu valor mínimo em uma largura maior, quando comparado ao caso abrupto (de linha sólida).

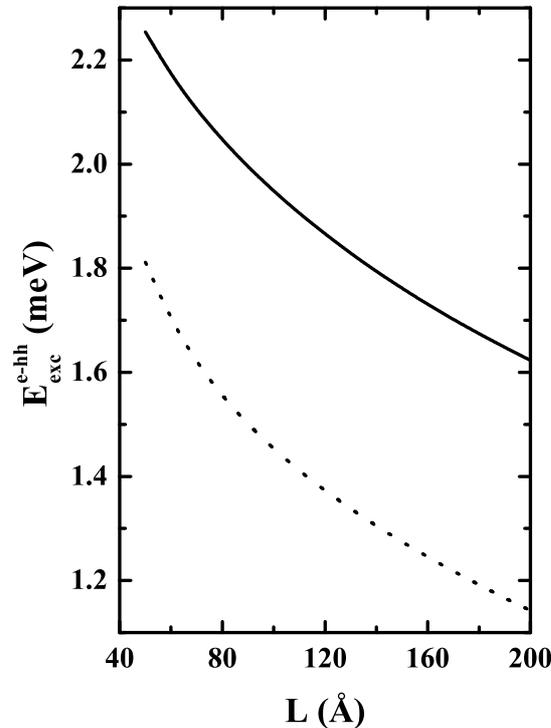


Figura 24: Valores absolutos da energia de ligação dos *excitons* em poços quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II abruptos como função da largura do poço, considerando as aproximações 2D (linha pontilhada) e 3D (linha sólida) para a função de onda.

Na Fig.24, os valores absolutos das energias de ligação em função da largura do poço quântico são mostrados, onde vemos uma comparação entre as energias dos *excitons* para poços quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II abruptos, usando uma função de onda $\Psi_{exc}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ bi-dimensional (2D) e tri-dimensional (3D). A energia sofre um aumento de aproximadamente 30% ao consideramos a aproximação 3D quando comparamos com a aproximação

2D. Em sistemas tipo-II, a interação Coulombiana depende da extensão espacial da função de onda do *exciton*, especialmente na direção z , onde os elétrons e os buracos estão espacialmente separados, assim se usamos a aproximação 3D temos um parâmetro variacional que controla a extensão em ρ e também a dimensão z da função de onda hidrogenóide, levando a uma melhor descrição do confinamento do *exciton*.

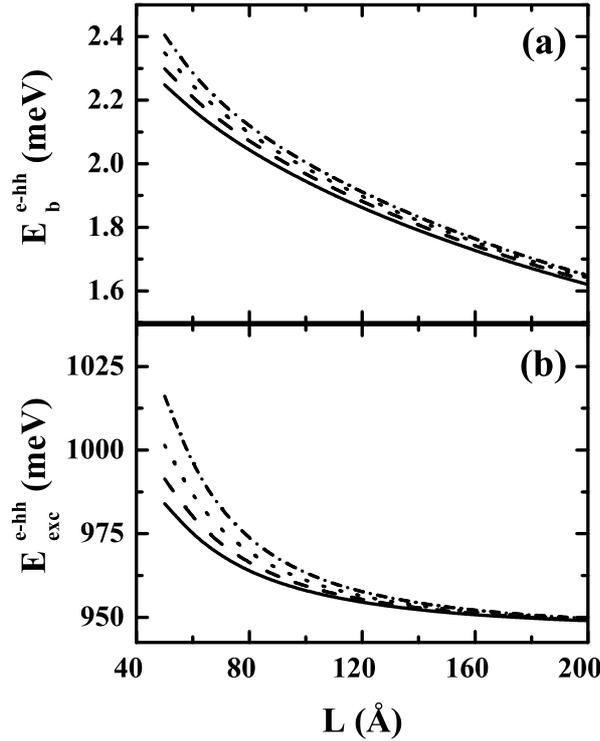


Figura 25: (a) Valores absolutos da energia de ligação e (b) energia total do *exciton* $e-hh$ em poços quânticos $Si/Si_{0.7}Ge_{0.30}$ tipo-II em função da largura do poço quântico, usando uma função de onda 3D e considerando interfaces abruptas 0 Å (linha sólida), e graduais de 5 Å (linha pontilhada), 10 Å (linha tracejada) e 15 Å (tracejada-pontilhada).

O valor absoluto da energia de ligação e a energia total do *exciton* $e-hh$ em função da largura do poço quântico $Si/Si_{0.7}Ge_{0.30}$ tipo-II, são mostrados na Fig. 25(a) e (b), respectivamente. Usamos a aproximação 3D para a função de onda, e consideramos diferentes espessuras da camada interfacial para o poço quântico. Em sistemas tipo-II, os elétrons não estão confinados no poço de potencial já que temos uma barreira para os mesmos, os elétrons estão ligados apenas pela interação Coulombiana com o buraco (na banda de valência), que causa uma região de depleção na banda de condução responsável pelo aprisionamento do elétron. Devido a isso, a energia de ligação nestes sistemas é muito pequena, no nosso caso, menor que 2.4 meV. Tal como para sistemas tipo-I, a dependência da energia dos *excitons* com a interfaces graduais é bastante significativa: para um poço

com 50 Å largura e uma interface de 15 Å encontramos um aumento de $\sim 7.5\%$ e $\sim 2.5\%$ para energia de ligação e total do *exciton*, respectivamente, quando comparadas com um poço abrupto.

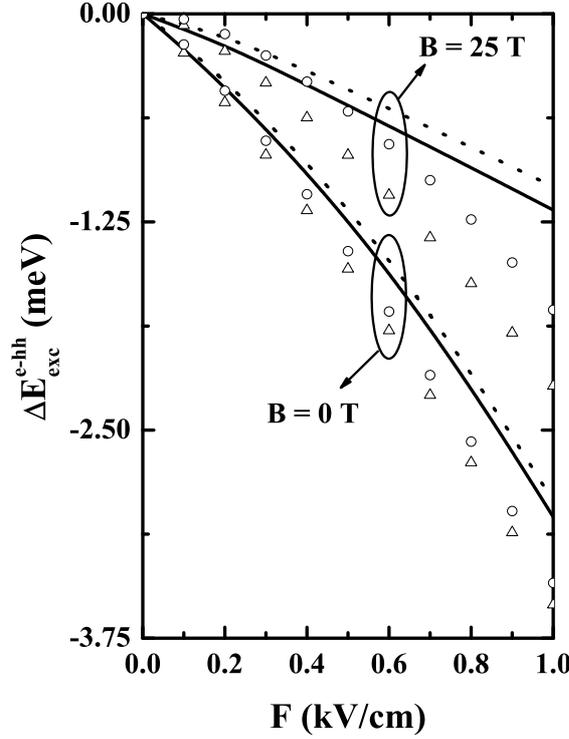


Figura 26: *Shift* da energia total do *exciton* como função do campo elétrico em poços quânticos tipo-II $Si/Si_{0.7}Ge_{0.30}$, para um poço de $L = 70$ Å de largura, considerando duas possibilidades para a função de onda: 3D (linhas) e 2D (símbolos) com interfaces abruptas (linha sólida) e interface gradual de $w = 15$ Å (linha pontilhada), para campos magnéticos de $B = 0$ T e $B = 25$ T .

Os efeitos de campo elétrico na energia do *exciton* para poços quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II com largura de $L = 70$ Å são mostrados na Fig 26, onde temos o *shift* na energia do *exciton* $\Delta E_{exc}(F) = E_{exc}(F) - E_{exc}(0)$ em função do campo elétrico, para $w = 0$ Å (linha sólida, símbolo triângulo) e $w = 15$ Å (linha pontilhada, símbolo círculos), considerando duas possibilidades para a função de onda: as aproximações 3D (linhas) e 2D (símbolos) para campos magnéticos de $B = 0$ T e $B = 25$ T. Uma dependência não parabólica em F é encontrada para estes deslocamentos, devido à existência de um forte momento de dipolo elétrico causado pela presença do campo elétrico, que supre o termo quadrático na equação da relação do *stark shift* $E(F) = E(0) - pF + \beta F^2$, onde p é o momento de dipolo e β é a polarizabilidade do sistema elétron-buraco [75]. Na aproximação

2D, o *exciton* é menos ligado que na 3D (veja Fig.24), conseqüentemente, a influência do campo elétrico é maior em 2D, o que rende as variações superestimadas da energia. Na presença de um campo magnético $B = 25$ T, a energia de ligação sofre um aumento e faz com que a energia do *exciton* seja menos afetada pelo campo elétrico, conduzindo a um deslocamento menor quando comparado ao caso de $B = 0$ T.

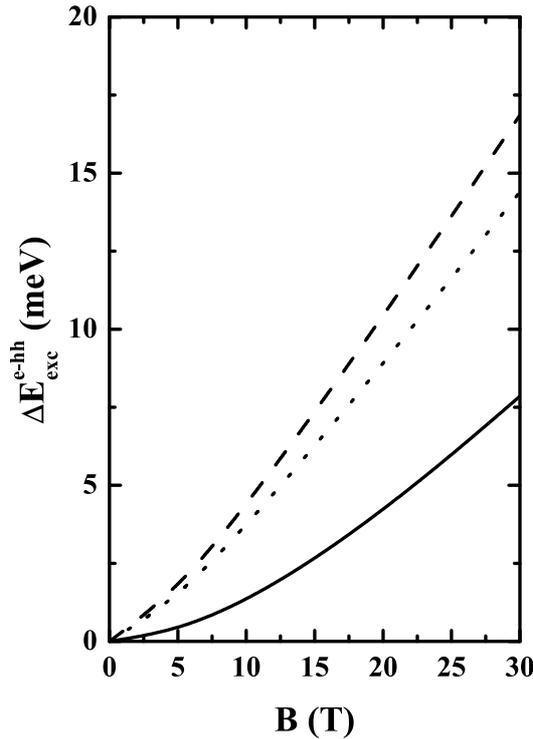


Figura 27: *Shift* da energia total do *exciton* em função do campo magnético B , para poços quânticos abruptos de 70 \AA de largura $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I (sólido) e $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II usando as aproximações 2D (linha pontilhada) e 3D (linha tracejada).

Agora, podemos discutir a influência de um campo magnético externo constante aplicado na direção z , na energia do *exciton* em poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-I e tipo-II abruptos. Na Fig.27 temos um *shift* da energia total do *exciton* em função do campo magnético para um poço de 70 \AA de largura. Nossos resultados mostram um aumento de 7.8 meV para poços tipo-I e 14.4 meV (16.8 meV) para o alinhamento de banda tipo-II usando a aproximação 2D (3D) na a função de onda, respectivamente, para um campo magnético de 30 T . Comparando as hetero-estruturas tipo-I e tipo-II (aproximação 3D), a energia apresenta maior variação para sistemas tipo-II. Este fato já é esperado, já que nestes sistemas o elétron não está confinado pelo potencial da hetero-estrutura, conseqüentemente qualquer confinamento adicional representa uma mudança significativa nas

energias. O *shift* nas energias total do *exciton* devido ao campo magnético é subestimado na aproximação 2D da função de onda quando comparado com 3D. De fato, a aproximação 3D na presença do campo magnético cria um novo potencial de confinamento em z para os elétrons, o qual não pode ser visto na aproximação 2D. Isto é razoável, porque na aproximação 3D as partes em ρ e z da função de onda do *exciton* não são separadas, assim, quando aplicamos o campo magnético $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$, este leva a um potencial de confinamento em ρ , que afeta não só a parte radial desta função, mas toda a função de onda do *exciton*.

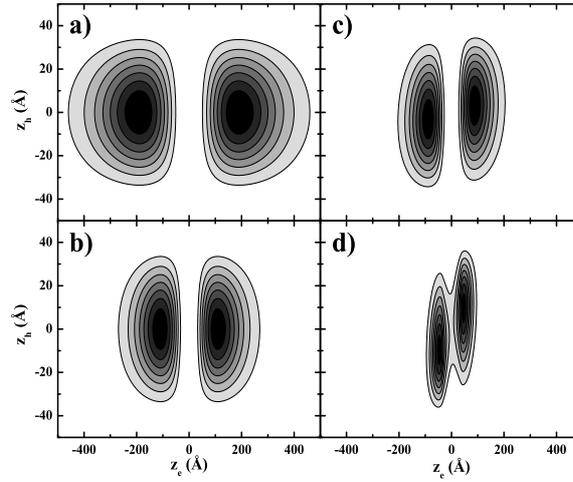


Figura 28: Representação da distribuição da densidade de probabilidade $p(z_e, z_h)$ para um poço quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II abrupto de 50 \AA de largura, considerando (a) $B = 0 \text{ T}$ e (b) $B = 25 \text{ T}$, dentro da aproximação 2D. (c) e (d) são os resultados para mesmo campo magnético, considerando uma função de onda 3D.

A influência do campo magnético na função de densidade de probabilidade $p(z_e, z_h)$ em poços quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II é ilustrada na Fig.28. Os itens (a) e (b) mostram as densidades de probabilidade de $p(z_e, z_h)$ em um poço quântico abrupto de 50 \AA de largura, para campos magnéticos aplicados de $B = 0 \text{ T}$ e $B = 25 \text{ T}$, respectivamente, para uma aproximação 2D da função de onda. Já nos itens (c) e (d), temos os a densidade de probabilidade usando a aproximação 3D da função de onda. Observamos que o campo magnético quase não afeta o confinamento do buraco. Isto se deve ao fato do buraco já estar confinado pelo potencial da hetero-estrutura, enquanto que o elétron está localizado nas camadas do Si , com sua função de onda deslocalizada. A deslocalização do elétron implica numa área maior e, conseqüentemente, um fluxo magnético maior. Note que $p(z_e, z_h)$ é simétrica em $z_e = 0$ e $z_h = 0$ para a aproximação 2D, já para 3D a simetria é no eixo $z_e = -z_h$. Isto ocorre à devido forma da função 3D, que depende da exponencial de $|z_e - z_h|$, alcançando seus valores mais baixos neste eixo.

Publicações. Os resultados apresentados neste Capítulo foram publicados como:

★ *Excitonic properties of type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells.*

Andrey Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire e G. A. Farias,

Journal of Applied Physics **101**, 113703 (2007).

Paralelo ao trabalho apresentado, foram feitos outros trabalhos em poços quânticos com aplicabilidade na área de capacitores MOS. O capacitor MOS é uma estrutura básica para o estudo dos dispositivos MOSFET. Ele é formado por uma fina camada de óxido isolante (SiO_2 , HfO_2 , etc) localizado entre o substrato semiconductor e uma placa metálica também conhecida como *gate*. Os materiais mais comuns utilizados para fabricar o *gate* são o alumínio (Al) e o silício policristalino (*poli-Si*) altamente dopado. Foram feitas simulações à temperatura ambiente, assumindo que os dopantes são totalmente ionizados. A equação de Poisson é resolvida numericamente dentro da aproximação de diferenças finitas levando em conta a dependência da constante dielétrica com a posição e usando as condições de contorno dielétrica para cada interface semiconductor/óxido. Na aproximação semiclassical, as densidades são representadas pela distribuição de Fermi-Dirac. Se os portadores de carga na camada de inversão são tratadas quanticamente, suas densidades de cargas devem ser proporcionais ao quadrado das funções de onda. O efeito de quantização na camada de inversão é um decréscimo da capacitância acima do limiar porque a posição média das cargas de inversão é deslocada para longe da interface do óxido, enquanto na aproximação semi-classica a posição média é localizada na interface substrato/óxido.

- No caso clássico, estudamos o papel da fração molar de Ge nas curvas de capacitância CV dos dispositivos policristalinos $n-Si_{1-x}Ge_x/HfO_2/p-Si$, onde observamos que com o aumento da fração molar do Ge é possível diminuir o efeito da depleção no *gate*, o qual degrada a capacitância total sob o regime de inversão. Também constatamos que a voltagem limiar aumenta ligeiramente com a quantidade de Ge . No entanto, o nosso resultado mais notável foi a que a combinação do filme dielétrico HfO_2 e do *gate* policristalino conduz ao efeito de inversão no *gate* para finas camadas de filmes dielétricos.

★ *Numerical simulation of Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS devices.*

J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias e E. F. da Silva Jr.

Phys. stat. Sol. c **2**, 2955 (2005).

- No caso quântico, nossos resultados mostraram que a combinação de filmes dielétricos (como o HfO_2) e *gates* policristalinos causa inversão das cargas nas camadas do substrato e do *gate* para camadas de óxido ultrafinas. Este efeito é consequência da alta constante dielétrica do HfO_2 , e é esperado que ocorra para todos os dispositivos MOS baseados em poligates de altas constantes dielétrica. No entanto, a dopagem relativa da concentração entre o *gate* policristalino e o substrato pode ser usado para diminuir os efeitos de inversão do *gate*.

★ *Gate Inversion Effect in $Si_{1-x}Ge_x/HfO_2/Si$ MOS Devices.*

J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G. A. Farias,

Applied Physics Letters, **86**, 24350 (2005).

Um outro trabalho, foi realizado em poços quânticos compostos de *Si* e *Ge* e nanoestrutura de óxidos de altas constantes dielétrica (k). As propriedades dos excitons em poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ com *strain* foram calculados levando em conta os efeitos de interfaces e duas possibilidades para o alinhamento da banda de condução, tipo-I e tipo-II. Consideramos também o efeito de carga imagem em poços quânticos em materiais que apresentam alta constante dielétrica, como o $Si/SrTiO_3$ e Si/HfO_2 e como esse efeito pode modificar suas propriedades eletrônicas em tais materiais.

- Nossos resultados mostraram que o efeito de *strain* e a existência de interfaces graduais muda consideravelmente a energia de ligação e total do exciton. Para um poço quântico $Si/Si_{0.8}Ge_{0.2}$ tipo-I ($Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}$ tipo-II) de 50 Å de largura com uma flutuação de 10 Å na interface há um aumento na energia do exciton de 20 meV (10 meV) em relação a uma interface abrupta. Com relação ao efeito imagem, os resultados dos poços quânticos $Si/SrTiO_3$ (Si/HfO_2) indicam que a diferença da emissão de recombinação, quando comparada com o caso onde o efeito imagem não é incluído, é na ordem de 1.5 eV (0.7 eV). Logo esses resultados nos permite concluir que para uma melhor descrição da energia do exciton em poços quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-I e tipo-II com *strain* e do confinamento do exciton em poços quânticos $Si/SrTiO_3$ e Si/HfO_2 , que são formados por materiais com constantes

dielétricas altas, será mais precisa se levarmos em conta a existência de interfaces graduais e o efeito de carga imagem.

★ *Si and SiGe high-k oxide nanostructures for optoelectronic devices.*

J. A. K. Freire, T. A. S. Pereira, J. Costa e Silva, G. A. Farias, V. N. Freire e E. F. da Silva Jr.

Anais da Conferência (2005).

2.5 Fios Quânticos

Reduzindo a dimensionalidade do nosso sistema, passamos de um poço para um fio quântico, onde agora nossos portadores vão está confinados em duas direções e livre em uma. Assim, foi feito mais um estudo paralelo a essa tese sendo que agora em fios quânticos $Si/Si_{1-x}Ge$ considerando duas possibilidades para o alinhamento de bandas: tipo-I e tipo-II. Esse trabalho foi feito junto ao amigo do Grupo de Semicondutores da UFC, Andrey Chaves, o qual nos rendeu dois artigos:

★ *Influence of graded interfaces on the exciton energy of type-I and type-II $Si/Si_{1-x}Ge_x$ quantum wires.*

Andrey Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, M. H. Degani, V. N. Freire e G. A. Farias,

Journal of Materials Science **42**, 2314 (2007).

- Onde estudamos as propriedades excitônicas de fios quânticos cilíndricos $Si_{1-x}Ge_x$ envoltos por uma camada de Si . Usamos o método variacional para o cálculo da energia do *exciton* em fios quânticos cilíndricos com alinhamento de banda tipo-I, onde os portadores estão confinados espacialmente no mesmo material e alinhamento tipo-II, onde os portadores estão confinados espacialmente em materiais diferentes. Neste sistema levamos em consideração a existência de interface gradual entre os materiais, para isto, propomos um Hamiltoniano que descreve o confinamento dos portadores, levando em conta que a massa efetiva depende das variáveis espaciais. Calculamos a energia do *exciton* variando o raio do fio e a espessura da interface. Nossos resultados numéricos mostraram que flutuações interfaciais de 15 Å em fios $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ ($Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}$) tipo-I (tipo-II) conduzem a uma variação da energia do *exciton* de 10 meV em relação ao fio com interface abrupta, levando a um deslocamento para o azul [76].

★ *Theoretical investigation of excitons in type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wires.*

J. Costa e Silva, Andrey Chaves, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G. A. Farias, Physical Review B **74**, 085317 (2006).

- Estudamos o comportamento de elétrons e buracos sob campos magnéticos aplicados paralelos ao eixo dos fios quânticos cilíndricos $Si/Si_{1-x}Ge_x$. Levamos em conta a existência de interfaces graduais, e usamos a aproximação da massa efetiva para calcular as energias dos *excitons*. Uma análise do raio médio do elétron em sistemas tipo-II foi feita para ilustrar melhor as variações de momento angular, que são responsáveis pelo surgimento das oscilações nas energias à medida que aumentamos a intensidade do campo nestes sistemas. Nossos resultados mostraram que a existência de interfaces graduais são responsáveis por um aumento significativo na energia do *exciton* para fios quânticos finos. Para um QRs $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I ($Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II) com um raio de 30 Å, e espessura interfacial de 15 Å a energia de ligação aumenta cerca de 5.5 % (12 %) em relação ao mesmo caso abrupto, enquanto a energia total do *exciton* tem um aumento de cerca de 20 (10) meV para as mesmas condições.

A presença de um campo magnético paralelamente ao eixo do fio não afeta muito o estado fundamental dos *excitons* em QRs tipo-I, especialmente para pequenos raios do fio. No entanto, apesar dos fios quânticos tipo-II apresentarem um potencial para elétrons com características parecidas com as de um anel quântico, a periodicidade das oscilações de Aharonov-Bohm nestas estruturas exibe pequenas variações à medida que o campo magnético aumenta, ao contrário do que é comumente encontrado nos auto-estados de energia de anéis quânticos, onde esta periodicidade é constante e bem definida. A periodicidade claramente depende da área de seção transversal do fio: o número de trocas de momento angular do elétron aumenta quando o raio do fio aumenta, o que representa um menor período para maiores valores de raio. Uma vez que a periodicidade depende da área cercada por este potencial do tipo anel quântico, sua variação em fios tipo-II até mesmo quando o raio do fio é constante pode também ser explicada, porque aumentando-se a intensidade do campo magnético, a função de onda do buraco é afetada, fazendo com que o potencial Coulombiano efetivo que confina o elétron também varie com o campo. Assim, a área cercada por este potencial efetivo para elétrons, e conseqüentemente a periodicidade das oscilações Aharonov-Bohm, não permanecem constantes para todos os valores de campo. [77].

3 Anéis Quânticos

Recentes progressos nas técnicas de fabricação de nanoestruturas permitiram a construção de uma nova estrutura de confinamento chamada de anel quântico (*quantum rings* - QR's). Os anéis quânticos são modelados por um grande ponto quântico cilíndrico com uma cavidade interna axialmente simétrica. Esta nova geometria têm atraído muita atenção nos últimos anos [78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87]. Na presença de um campo magnético na direção axial, ocorrem oscilações na energia do elétron em função do fluxo magnético, que é conhecido como efeito Aharonov-Bohm (*Aharonov-Bohm effect* - ABE) [88]. As oscilações Aharonov-Bohm ocorrem devido a mudança de fase na função de onda quando o fluxo magnético ϕ que passa através do anel alcança o fluxo magnético quântico $\phi_0 = h/e$ (com h sendo a constante de Planck e e a carga elétrica). A modificação na estrutura faz com que as propriedades eletrônicas dos anéis sejam totalmente diferente das apresentadas em pontos quânticos. Os anéis quânticos podem ser obtidos, por exemplo, a partir de um grande ponto quântico *GaAs* coberto por uma camada de *Ga(Al)As* [80], colocado no processo de *annealing*, o qual origina um grande buraco no seu centro, tomando o formato de um anel quântico. Outros materiais, tais como *InGaN/GaN* [79], *In(Ga)As* [85] e *InAs/InP* [85], também têm sido usado na formação dos anéis quânticos.

O estudo dos estados eletrônicos em anéis quânticos na presença de campos externos têm recebido muita atenção [89, 90, 91, 82, 83, 93] e alguns trabalhos na literatura indicam que as propriedades ópticas e os estados eletrônicos dessas estruturas são fortemente afetados por impurezas e imperfeições na geometria do sistema. Considerando uma impureza no centro de um QR semiconductor, B.S, Monozon *et al.* [82] calculou analiticamente a energia de ligação de um elétron na presença de um campo elétrico e magnético, considerando um potencial de barreira infinita para o QR. A. Bruno-Alfonso e A. Latgé [89, 93] também estudaram os efeitos de impurezas nos QRs. Nos seus cálculos, eles usaram a aproximação variacional para obter o estado fundamental de impurezas doadoras, com a impureza localizada dentro do QR e a uma distância média dos raios

interno e externo, sob um campo magnético aplicado. Eles observaram que, neste caso particular, a energia de ligação é independente do campo magnético. L. G. G. Dias da Silva *et al.* [83] analisaram os efeitos de impurezas nas oscilações AB em QRs e suas conseqüências na emissão da fotoluminescência (*photoluminescence* - PL). B. S. Monozon *et al.* [82] consideraram uma aproximação analítica para o problema da impureza em QR, mas seus resultados são válidos somente para alguns regimes intensos do campo elétrico ou magnético e casos limites de parâmetros geométricos associado com o confinamento no QR.

Mudanças geométricas no QR também são importantes nas propriedades eletrônicas. Recentemente L. A. Lavenere-Wanderley *et al.* [92], A. Latge [93], e A. Bruno-Alfonso [94] analisaram os efeitos da excentricidade em QRs, e viram que ela pode anular as oscilações AB. Considerando o QR sem a presença de um campo magnético aplicado, D. Gridin *et al.* [95] estudaram os estados eletrônicos em QR com formas arbitrárias, mostrando a presença de estados localizados na região de máxima curvatura. Em todos os cálculos, observa-se as mesmas restrições devido ao método de perturbação ou pelo fato dos portadores estarem confinados em barreiras de potencial infinitas.

Um outro ponto interessante, o qual têm recebido boa ênfase dos grupos de pesquisas, é a possibilidade de se estudar a topologia [96] de anéis quânticos semicondutores devido a forma de crescimento auto-formado (*self-assembled*). Muitos trabalhos experimentais em anéis quânticos encontrados na literatura mostraram que estas estruturas têm superfícies rugosas, ao invés de uma forma circular perfeita [97]. T. Kuroda *et al.* [80] observou que a falta de simetria em anéis não-circulares causava relaxação no momento angular mais rápido do que as transições entre os níveis de energia.

Neste Capítulo estudaremos a energia do elétron em anéis quânticos semicondutores considerando um campo magnético aplicado perpendicularmente a estas estruturas, levando em conta um modelo realístico consistindo em anéis com barreiras e potenciais finitos, não limitado a pequenas perturbações. Investigaremos o efeito Aharanov-Bohm na presença de uma e duas impurezas hidrogênicas negativas e positivas. Os efeitos no espectro de energia devido a deformações arbitrárias, tais como, a falta de simetria cilíndrica na geometria da estrutura, rugosidade nas superfícies dos anéis e o caso de anéis duplos, também são considerados [98]. Contrário a alguns estudos teóricos, usaremos o método não-perturbativo que pode ser usado para qualquer intensidade de campo magnético, localização de impurezas e forma de anéis. Além disso, o método permite-nos um estudo dos estados excitados dos anéis e pode ser facilmente generalizado para lidar com diferentes

perfis de potenciais radiais.

Este Capítulo será apresentado da seguinte forma: Na Seção 3.1 discutiremos o modelo e método usado para resolver a equação de Schrödinger. A Seção 3.2 mostra os efeitos de impurezas nos níveis eletrônicos. Na Seção 3.3 analisaremos as oscilações AB no anel apresentando excentricidade, em seguida trataremos do caso do anel com rugosidade na superfície e, finalmente, na Seção 3.5 falaremos de anéis duplos.

3.1 Modelo Teórico

Consideraremos um anel quântico formado pela revolução em torno do eixo z de um cubo com raio interno (externo) $|\vec{\rho}| = a(b)$ e altura h_z ao longo do eixo de crescimento (z) (ver *inset* da Fig.29). Geralmente $h_z \ll a, b$ de modo que possamos desacoplar o movimento do elétron ao longo da direção z e do plano $x-y$, e reter-se apenas na análise do primeiro estado ao longo da direção z (aproximação adiabática). Conseqüentemente, sem perder a generalização, nosso sistema pode ser considerado como um caso bi-dimensional (2D), com o elétron confinado no plano $z = 0$. Consideremos um campo magnético uniforme \vec{B} paralelo ao eixo z e as impurezas hidrogênicas localizada em $\vec{\rho} = \vec{\rho}_{imp}$ à uma distância $z = z_i$ do plano do QR. Dentro da aproximação da massa efetiva, o potencial de confinamento é dado por

$$V_e(\vec{\rho}) = \begin{cases} 0, & \text{se } a < |\vec{\rho}| < b \\ V_0, & \text{de outra forma.} \end{cases} \quad (3.1)$$

O QR é envolto por uma camada de $(GaAl)As$ com uma barreira de potencial de $V_0 = 190$ meV, correspondendo a uma concentração do Al de $x = 0.25$. Considerando a banda de condução parabólica independente da posição, o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} + q\vec{A})^2 + V_e(\vec{\rho}) + \sum_{i=1}^N V_{imp}^i + \delta V_e(\vec{\rho}), \quad (3.2)$$

onde m^* é massa efetiva do elétron ($m^* = 0.067m_0$ com m_0 a massa do elétron livre) e o potencial vetor escolhido é um *gauge* simétrico $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{\rho}$. O potencial devido a cada impureza tem a forma $V_{imp}^i = \frac{Z_i e}{4\pi\epsilon\epsilon_0} / [(\rho - \rho_{imp})^2 + z_i^2]^{1/2}$, sendo Z_i a carga da impureza, N é o número de impurezas, e a constante dielétrica do $GaAs$ é $\epsilon = 12.5$. O último termo em Eq. (3.2) é uma perturbação no potencial de confinamento que quebra a simetria

cilíndrica.

O método da evolução temporal *split-operator* será usado para obter os níveis de energia, o qual é baseado na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo [99, 100, 101]. Não limitado a pequenas perturbações, este método pode ser usado para efeitos não lineares, incluindo as condições extremas criadas pelos pulsos dos lasers. Usando este método, somente os estados de interesse são envolvidos e o cálculo pode ser feito para escala linear com o tamanho do sistema, contrário aos métodos baseados no formalismo linear de resposta que envolve a diagonalização de grandes matrizes. Uma outra vantagem deste método, que podemos mencionar, é que não se usa expansão em bases ou os parâmetros ajustáveis e o efeito de campos externos é tratado de uma maneira não perturbativa. Estas características são muito importantes quando tratamos problemas com impurezas, até então tratados usando diferentes métodos, tais como o método variacional ou expansão em bases das funções de onda, devido à falta de simetria, onde é muito difícil escolher uma função de onda razoável ou a solução de uma expansão de bases das funções de onda para qualquer intensidade de campo magnético.

A solução geral da equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t/\hbar}\Psi(\vec{r}, t). \quad (3.3)$$

Usamos o método proposto por M. H. Degani [99, 100, 101] para encontrar os autoestados, o qual consiste em usar uma função de onda tentativa $\Psi(\vec{r}, t)$ propagar no tempo imaginário e assim encontrar uma função de onda no tempo posterior, onde a função de onda tenha convergido para o estado fundamental do sistema. Note que, à primeira vista, o ideal seria usar coordenadas cilíndricas, já que se trata de um elétron em um anel, no entanto, como um de nossos propositos é analisar os efeitos de impurezas e defeitos de geometria nestes sistemas, os quais quebram a geometria cilíndrica do anel, é mais conveniente usar coordenadas cartesianas (o que torna também mais facil a implementação numérica) em nossos cálculos.

Substituindo o Hamiltoniano da (Eq.3.2) na solução da equação Schrödinger na Eq.(3.3) e como o mesmo independe do tempo, chegamos a uma exponencial da soma dos termos, cinético e potencial. Sabendo que os operadores cinético e potencial não comutam, não podemos usar uma expansão do tipo $\exp(A + B) = \exp(A)\exp(B)$, onde A e B são operadores, pois esta só é válida se $[A,B] = 0$. Usaremos assim uma expansão proposta por Suzuki [102] para a decomposição de exponenciais de operadores. Aplicando esta

aproximação, para o nosso caso, a evolução temporal da função de onda (Eq.3.3), pode ser escrita como

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar}V(\vec{r})\right] \exp\left(\frac{-i\Delta t}{\hbar}T\right) \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}V(\vec{r})\right] \Psi(\vec{r}, t) + O(\Delta t^2), \quad (3.4)$$

onde a energia cinética total do sistema é $T = T_y + T_x$, sendo

$$\begin{aligned} T_x &= \frac{1}{2m}(p_x - qyB/2)^2 = \frac{1}{2m}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - qyB/2\right]^2, \\ T_y &= \frac{1}{2m}(p_y + qxB/2)^2 = \frac{1}{2m}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} + qxB/2\right]^2. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Assim, chamando

$$\eta(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{\hbar}T_y\right] \eta'(\vec{r}, t + \Delta t), \quad (3.6)$$

$$\eta'(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left[-i\hbar\frac{\Delta t}{2m}T_x\right] \xi(\vec{r}, t + \Delta t), \quad (3.7)$$

e

$$\xi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left[-i\Delta t\frac{V(\vec{r})}{2\hbar}\right] \Psi(\vec{r}, t), \quad (3.8)$$

usando uma função de onda tentativa $\Psi(\vec{r}, t)$ na forma de uma gaussiana para encontrar $\xi(\vec{r}, t + \Delta t)$ na Eq.(3.8) e depois aplicando esse resultado na Eq.(3.7) e usando a forma de Crank-Nicholson [103] da exponencial de um operador, teremos

$$\eta'(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left[\frac{-i\hbar\Delta t}{2m}(T_x)\right] \xi(\vec{r}, t + \Delta t) = \frac{1 - \frac{i\hbar\Delta t}{2m}T_x}{1 + \frac{i\hbar\Delta t}{2m}T_x} \xi(\vec{r}, t + \Delta t), \quad (3.9)$$

logo

$$\eta'(\vec{r}, t + \Delta t) \left(1 + i\hbar\frac{\Delta t}{2m}T_x\right) = \left(1 - i\hbar\frac{\Delta t}{2m}T_x\right) \xi(\vec{r}, t + \Delta t). \quad (3.10)$$

Substituindo T_x da Eq.(3.5) na equação acima, temos

$$\begin{aligned} \left\{1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4m}\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{qyB}{i\hbar}\frac{\partial}{\partial x} + \left(\frac{qyB}{2\hbar}\right)^2\right]\right\} \eta'(\vec{r}, t + \Delta t) = \\ \left\{1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m}\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{qyB}{i\hbar}\frac{\partial}{\partial x} + \left(\frac{qyB}{2\hbar}\right)^2\right]\right\} \xi(\vec{r}, t + \Delta t). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Para resolver essa equação, usaremos o método de diferenças finitas, ou seja, vamos discretizar os espaços e as funções $\eta'(\vec{r}, t + \Delta t)$ e $\xi(\vec{r}, t + \Delta t)$. Neste esquema de diferenças finitas escrevemos as derivadas como

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial z} f_i &= \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z} = -\frac{f_{i-1} - f_i}{\Delta z} \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} f_i &= \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta z^2},\end{aligned}\quad (3.12)$$

substituindo a derivada segunda de f_i na Eq. (3.11), onde f_i pode ser trocado por $\eta'(\vec{r}, t + \Delta t)$ e $\xi(\vec{r}, t + \Delta t)$. Logo, teremos

$$\begin{aligned}-\beta_x(1 + i\alpha^y)\eta'_{i-1} + [1 + \beta_x(2 + (\alpha^y)^2)]\eta'_i - \beta_x(1 - i\alpha^y)\eta'_{i+1} = \\ \beta_x(1 + i\alpha^y)\xi_{i-1} + [1 - \beta_x(2 + (\alpha^y)^2)]\xi_i - \beta_x(1 - i\alpha^y)\xi_{i+1},\end{aligned}\quad (3.13)$$

com $\alpha^y = \Delta x \omega_c \hbar y / 4R_y$ e $\beta_x = iR_y \Delta t / 2\hbar(\Delta x)^2$, sendo ω_c e R_y a frequência do ciclotron e a constante de Rydberg, respectivamente, e Δx e Δy a malha no espaço real. Podemos reescrever a equação acima na forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 + \beta_x(2 + (\alpha^y)^2) & -\beta_x(1 - i\alpha^y) & 0 & 0 \\ -\beta_x(1 + i\alpha^y) & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & -\beta_x(1 - i\alpha^y) \\ 0 & 0 & -\beta_x(1 + i\alpha^y) & 1 + \beta_x(2 + (\alpha^y)^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta'_1 \\ \eta'_2 \\ \vdots \\ \eta'_N \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} 1 - \beta_x(2 + (\alpha^y)^2) & \beta_x(1 + i\alpha^y) & 0 \\ -\beta_x(1 + i\alpha^y) & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \beta_x(1 + i\alpha^y) \\ 0 & 0 & -\beta_x(1 + i\alpha^y) & 1 - \beta_x(2 + (\alpha^y)^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_N \end{pmatrix}.$$

A equação matricial acima é resolvida numericamente através da subrotina TRIDAG do *Numerical Recipes*. Após encontrarmos a função $\eta'(\vec{r}, t + \Delta t)$, aplicaremos esse resultado na Eq.(3.6) e faremos o mesmo procedimento para a propagação relacionada ao operador T_y , onde obtemos

$$\begin{aligned}-\beta_y(1 + i\alpha^x)\eta_{i-1} + [1 + \beta_y(2 + (\alpha^x)^2)]\eta_i - \beta_y(1 - i\alpha^x)\eta_{i+1} = \\ \beta_y(1 + i\alpha^x)\eta'_{i-1} + [1 - \beta_y(2 + (\alpha^x)^2)]\eta'_i - \beta_y(1 - i\alpha^x)\eta'_{i+1},\end{aligned}\quad (3.14)$$

onde $\alpha^x = \Delta y \omega_c \hbar x / 4R_x$ e $\beta_y = iR_y \Delta t / 2\hbar (\Delta y)^2$. Resolvemos de novo uma equação matricial, agora a da Eq.(3.14), usando o mesmo método utilizado na Eq.(3.13), e assim encontramos η . Com isso podemos finalmente encontrar a função de onda do instante $t + \Delta t$, dada por

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp \left[-i\Delta t \frac{V(\vec{r})}{2\hbar} \right] \eta(\vec{r}, t + \Delta t). \quad (3.15)$$

3.1.1 Propagação no Tempo Imaginário

Usaremos a propagação no tempo imaginário, $t = -i\tau$, para encontrar uma solução da função de onda estacionária. Para cada instante temos

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n \exp \left(-i \frac{E_n t}{\hbar} \right) |\psi_n\rangle, \quad (3.16)$$

que é combinação linear das funções espaciais ψ_n de todos estados ligados naquele instante, sendo E_n seus respectivos autovalores de energia.

Usando a propagação no tempo imaginário, chegamos a

$$|\Psi(\tau)\rangle = \sum_n a_n \exp \left(-\frac{E_n \tau}{\hbar} \right) |\psi_n\rangle, \quad (3.17)$$

com a normalização desta função sendo dada por

$$|\Psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{\sum_n a_n \exp \left(-\frac{E_n \tau}{\hbar} \right) |\psi_n\rangle}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 \exp \left(-\frac{2E_n \tau}{\hbar} \right) |\psi_n\rangle}}, \quad (3.18)$$

Para encontrar o estado fundamental, basta fazer $\tau \rightarrow \infty$, ou seja,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\Psi(\tau)\rangle^{norm} = |\psi_0\rangle. \quad (3.19)$$

Para obter os estados excitados, usamos a ortonormalização de Gram-Schmidt, devido às funções de onda dos estados excitados serem ortogonais entre si.

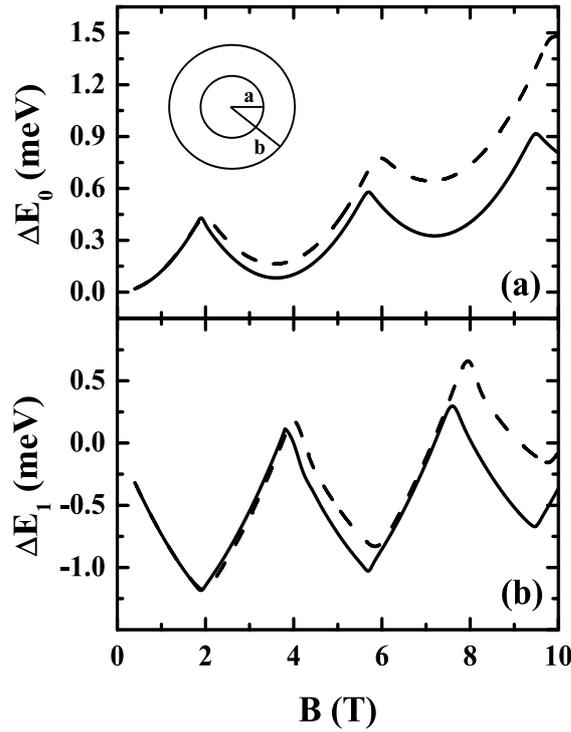


Figura 29: *Shift* da energia $\Delta E_n = E_n(B) - E_n(B = 0)$, em função do campo magnético para (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, para anéis de tamanho $|\vec{\rho}| = (a + b)/2 = 190 \text{ \AA}$ e largura $b - a = 60 \text{ \AA}$ (linha sólida), $b - a = 120 \text{ \AA}$ (linha tracejada), respectivamente.

Para ilustrar o método da evolução para o QRs, mostramos na Fig.29 os resultados obtidos com este método para os deslocamentos $\Delta E_n = E_n(B) - E_n(B = 0)$ nas energias do (a) estado fundamental ($n = 0$) e (b) primeiro estado excitados ($n = 1$), em função do campo magnético aplicado, para diferentes valores de largura w do anel ($w = 60 \text{ \AA}$ sólido e $w = 120 \text{ \AA}$ tracejado) em QRs ideal (sem a presença das impurezas ou rugosidade). As oscilações AB estão presentes e o período das oscilações aumenta ligeiramente com o nível de energia e a largura do anel. Este fato é esperado, já que o estado excitado é mais espalhado dentro da região do anel do que o estado fundamental e porque a área do anel aumenta com sua largura, e assim o fluxo magnético através do anel diminui com ambos os fatores.

3.2 Efeitos Causados por Impurezas nos Níveis Eletrônicos

Para analisarmos os efeitos das impurezas hidrogênicas, consideraremos inicialmente um anel com tamanho $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$ e uma única impureza de carga positiva localizada a uma posição $\vec{r}_{imp} = (190 \text{ \AA}, 0, z_i)$ com duas diferentes distâncias do plano do anel, $z_1 = 10 \text{ \AA}$ e $z_2 = 30 \text{ \AA}$. As Figs.30 e 31 apresentam, respectivamente, as energias

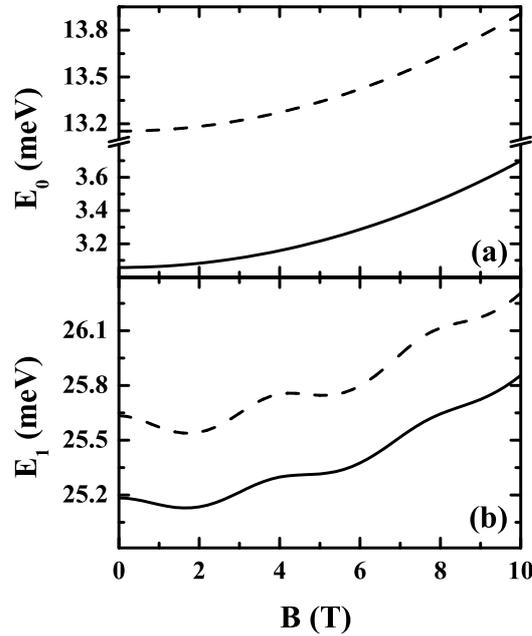


Figura 30: Energia do (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, em função do campo magnético aplicado, para uma impureza hidrogênica positiva em duas distâncias diferentes do plano do anel z_i , $z_1 = 10 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $z_2 = 30 \text{ \AA}$ (linha tracejada), com $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$.

e raios médios no plano do estado fundamental e do primeiro estado excitado em função do campo magnético aplicado. Devido à quebra de simetria causada pela presença da impureza positiva, o estado fundamental não apresenta oscilações AB. Contudo para o primeiro estado excitado, como o elétron está deslocalizado, ele não sente de maneira intensa a quebra de simetria, mantendo assim fracas oscilações. Esses efeitos na estrutura eletrônica causados por uma única impureza hidrogênica são similares à presença de um campo elétrico aplicado no plano do anel (que pode ser visto na ref. [81]) representando uma quebra de simetria relacionada ao campo que atua no confinamento do elétron. Na Fig.30 (a), observamos que as oscilações AB são anuladas no estado fundamental para todas as posições z_i das impurezas. O potencial hidrogênico quebra a simetria cilíndrica e o estado fundamental do elétron confinado é fortemente relacionado com a carga da impureza. Isto acontece porque a carga é positiva, então o elétron tende a ser atraído e conseqüentemente confina-se próximo à impureza. De fato, como podemos ver na Fig.31, o raio médio para o estado fundamental está muito próximo da impureza no plano na posição 190 \AA e quase independe do campo magnético aplicado (menor que 10 T). No primeiro estado excitado (Fig.30(b)) como o elétron está mais deslocalizado e mais distante da impureza, a função de onda do elétron é mais simétrica e assim as energias ainda oscilam

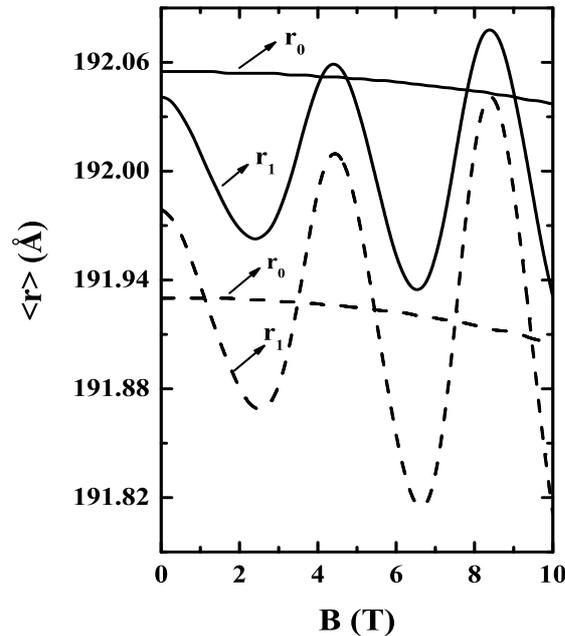


Figura 31: Raio médio do estado fundamental r_0 (linha sólida) e primeiro estado excitado r_1 (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, para os mesmos parâmetros da Fig.30.

mesmo que fracamente. As oscilações nas energias são acompanhadas pelo efeito análogo no raio médio, como mostrado na Fig.31. Entretanto, o potencial hidrogênico é mais forte para o primeiro estado excitado onde observamos pequenas oscilações no raio médio, menores que 1 \AA , indicando que o estado do elétron é ainda confinado pela impureza positiva.

Consideraremos o mesmo anel, mas com uma impureza hidrogênica negativa nas mesmas localizações das Figs.30 e 31. As Figs.32 e 33 mostram respectivamente as energias e o raio médio para o estado fundamental e primeiro estado excitado, em função do campo magnético. Novamente, devido à quebra de simetria, o efeito AB foi anulado para o estado fundamental para todas as posições da impureza, já o primeiro estado excitado apresenta pequenas oscilações à medida que a impureza vai se afastando do plano do anel. Como a impureza é negativa, a energia (da ordem de 34 meV para o estado fundamental), é muito diferente do caso da impureza positiva (da ordem de 3 meV , para o mesmo caso) já que agora temos uma repulsão das cargas e não uma atração. Mesmo que o raio médio nas Fig.31 e 33 tenha quase a mesma ordem de magnitude, apesar disso, observamos que a função de onda do elétron torna-se localizada ao longo da circunferência do anel na presença de uma impureza: negativa (positiva) o elétron é confinado dentro do anel o

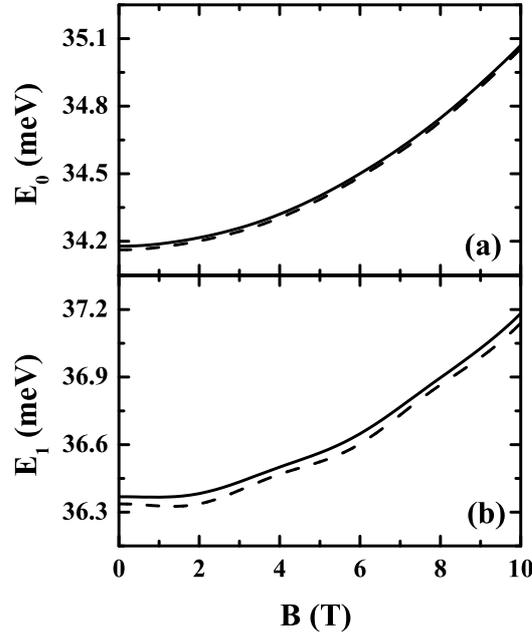


Figura 32: Energia do (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, em função do campo magnético aplicado, para uma impureza hidrogênica negativa em duas distâncias diferentes z_i do plano do anel: $z_1 = 10 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $z_2 = 30 \text{ \AA}$ (linha tracejada), para os mesmos parâmetros do anel na Fig. 30.

mais distante do centro de repulsão (mais próximo do centro de atração).

Agora vamos considerar o sistema com duas impurezas hidrogênicas de mesmo sinal em um anel com tamanho de $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$, com a primeira impureza em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, z_1)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ \AA}, 0, z_2)$. A existência de duas impurezas apresenta mais complexidade na análise e a existência ou não de oscilações AB depende fortemente da posição relativa das impurezas ao longo de z . As Figs. 34 e 35 apresentam respectivamente as energias e raios médios para o estado fundamental e primeiro estado excitado em função do campo magnético para duas impurezas positivas. Na Fig.34 (a) observamos que a energia do estado fundamental e primeiro estado excitado não oscilam se $z_1 \neq z_2$. Neste caso, temos duas impurezas não simétricas positivas, que apresentam na região do anel uma média não nula do gradiente do potencial (como no caso de uma impureza no centro nas Figs.30-33). Se as impurezas hidrogênicas estão à mesma distância do plano do anel ($z_1 = z_2 = 30 \text{ \AA}$), o potencial total é simétrico (a média no plano do gradiente do potencial é nula para qualquer estado do anel) e conseqüentemente podemos ver na Fig.34(b) fracas oscilações em ambos os níveis de energia. À medida que aproximamos essas impurezas do anel ($z_1 = z_2 = 10 \text{ \AA}$ inset), as oscilações do estado fundamental e primeiro estado excitado diminuem rapidamente por causa da forte

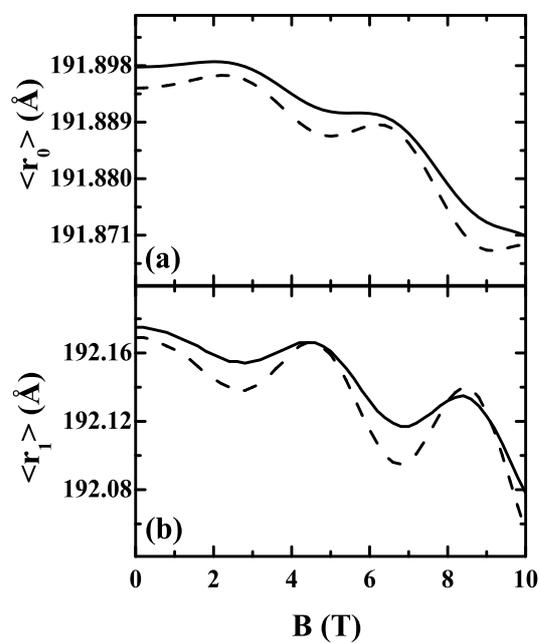


Figura 33: Raio médio do (a) estado fundamental e (b) primeiro estado excitado, em função do campo magnético aplicado, para uma impureza hidrogênica negativa em duas distâncias diferentes do plano do anel: $z_1 = 10 \text{\AA}$ (linha sólida) e $z_2 = 30 \text{\AA}$ (linha tracejada) para os mesmos parâmetros do anel na Fig.30.

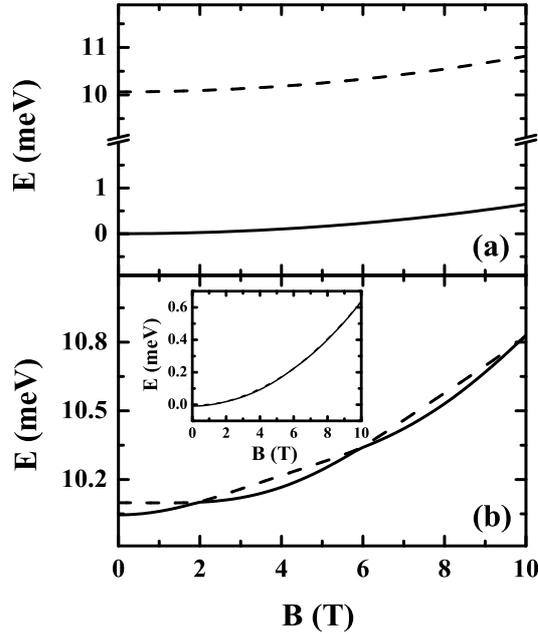


Figura 34: Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), para duas impurezas hidrogênicas positivas próximo ao anel quântico de tamanho $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$ com a primeira impureza localizada em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, z_1)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ \AA}, 0, z_2)$. Em (a) $z_1 = 10 \text{ \AA}$ e $z_2 = 30 \text{ \AA}$, (b) $z_1 = z_2 = 30 \text{ \AA}$ ($z_1 = z_2 = 10 \text{ \AA}$ no *inset*).

perturbação das impurezas no plano do anel. Este efeito pode ser melhor observado no raio médio (Fig.35), onde verificamos que as amplitudes de oscilações realmente diminuem quando aproximamos as impurezas do QR em $z_1 = z_2$.

Considerando duas impurezas hidrogênicas negativas, nas Figs.36 e 37 temos respectivamente, as energias e os raios médio dos estados fundamentais e primeiros estados excitados em função do campo magnético aplicado. Na Fig.36 observamos que todos os níveis de energias oscilam independentemente das posições das impurezas hidrogênicas. Isto significa que com duas impurezas hidrogênicas negativas o campo magnético é mais efetivo, quando comparado com duas impurezas positivas. Este resultado pode ser entendido devido ao fato que as cargas positivas agem como fontes atrativas, enquanto as cargas negativas produzem repulsão no campo e, conseqüentemente não apresentam estado confinado próximo ao centro da impureza. As oscilações nos níveis de energia são acompanhadas pelo raio médio (ver Fig.37). Agora, todos os estados apresentam oscilações no raio médio, entretanto, o mais importante ocorre quando as cargas negativas estão na posição de simetria ($z_1 = z_2$).

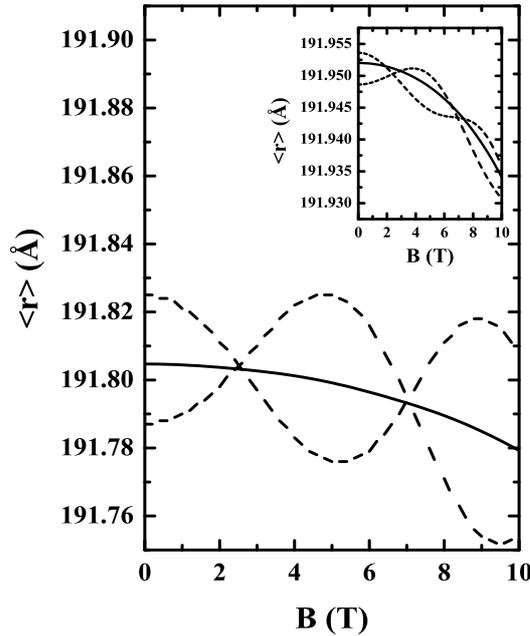


Figura 35: Raio médio do estado fundamental e primeiro estado excitado, para o mesmo anel e parâmetros usado na Fig.34. A linha tracejada corresponde a $z_1 = z_2 = 30 \text{ \AA}$ ($z_1 = z_2 = 10 \text{ \AA}$ no insete), e a linha sólida para $z_1 = 10 \text{ \AA}$ e $z_2 = 30 \text{ \AA}$ o estado fundamental (estado excitado no *inset*), respectivamente.

3.3 Efeitos Geométricos nos Níveis Eletrônicos

Para estudar os efeitos geométricos nas oscilações AB, consideraremos um anel com o formato elipsoidal composto por elipses de barreiras internas e externas concêntricas. Para uma análise mais clara dos efeitos geométricos, vamos considerar o sistema com diferentes excentricidades, mas com a mesma área, para que o fluxo magnético através do anel seja o mesmo, sem a presença de impurezas. As interfaces interna ($j = I$) e externa ($j = E$) dos anéis elípticos são definidas pela excentricidade $\xi_i = a_j/b_j$, com eixo menor (maior) $a_j = R_j\sqrt{\xi_j}$ ($b_j = R_j/\sqrt{\xi_j}$) (ver Fig.38). Consideraremos inicialmente o anel elíptico com mesma excentricidade ξ interna e externa e com $R_I = 140 \text{ \AA}$ e $R_E = 240 \text{ \AA}$. As Figs.38 e 39 mostram respectivamente, as energias e raios médios de ambos no estado fundamental e primeiro estado excitado, em função do campo magnético, para diferentes valores de excentricidade. Observamos que as oscilações AB são anuladas quando ξ diminui. De fato, quando ξ diminui os primeiros dois estados tendem a degenerar e a densidade de carga é localizada nas regiões onde os QRs tem maior curvatura. A amplitude das oscilações do efeito AB diminui à medida que ξ diminui, com energias quase degeneradas em $\xi = 0.65$. Isto ocorre devido os estados se afastarem, formando dois bicos nas extremidades

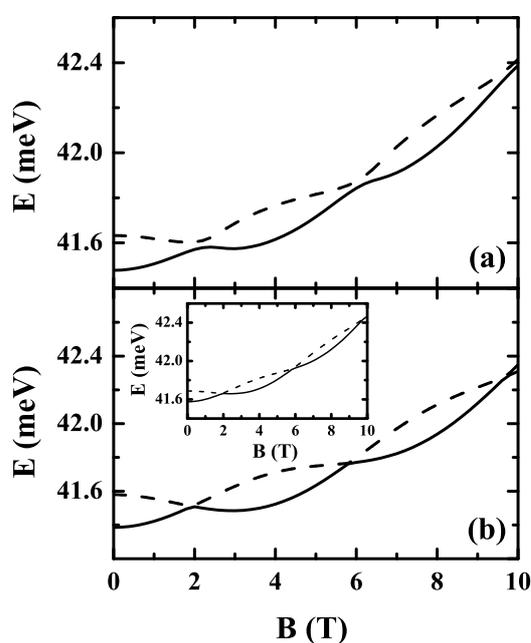


Figura 36: Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), com duas impurezas hidrogênicas negativas próximo ao anel quântico de tamanho $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$ com a primeira impureza localizada em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, z_1)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ \AA}, 0, z_2)$. Em (a) $z_1 = 10 \text{ \AA}$ e $z_2 = 30 \text{ \AA}$, (b) $z_1 = z_2 = 30 \text{ \AA}$ e $z_1 = z_2 = 10 \text{ \AA}$ no *inset*, respectivamente.

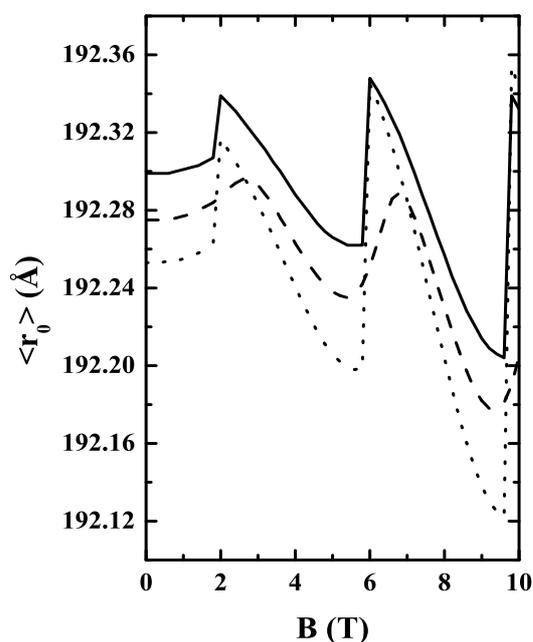


Figura 37: Raio médio do estado fundamental com duas impurezas hidrogênicas negativas no anel quântico com tamanho $a = 140 \text{ \AA}$ e $b = 240 \text{ \AA}$ com a primeira impureza fixa em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, z_i)$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (-190 \text{ \AA}, 0, z_i)$, em duas diferentes posições no plano do anel, $z_1 = 10 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $z_2 = 30 \text{ \AA}$ (linha tracejada), e para a primeira impureza fixa em $\vec{r}_{imp}^{(1)} = (190 \text{ \AA}, 0, 30 \text{ \AA})$ e a segunda em $\vec{r}_{imp}^{(2)} = (190 \text{ \AA}, 0, 30 \text{ \AA})$ (linha pontilhada).

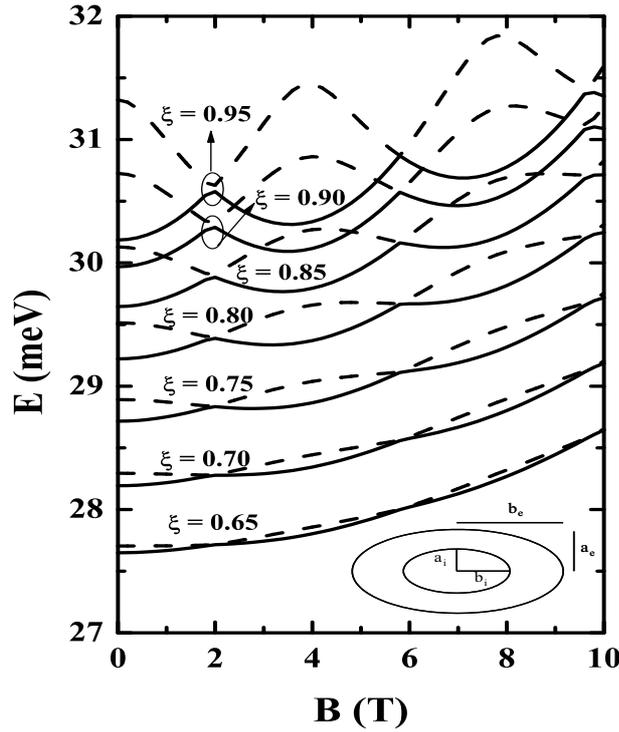


Figura 38: Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, para diferentes valores de excentricidade, $R_I = 140 \text{ \AA}$, e $R_E = 240 \text{ \AA}$.

da elipse, análogo ao caso de dois átomos próximos onde à medida que os afastamos um do outro a degenerescência é observada. Esse resultado também é similar ao obtido para duas impurezas positivas (com posições simétricas $z_1 = z_2$) quando z_i diminui (ver Fig.34). Para o caso dos raios médios variando com ξ na Fig.39, observamos um comportamento semelhante ao dos níveis de energia, onde à medida que diminuimos a excentricidade as energias se degeneram, sendo que neste caso, o valor do raio médio aumenta com a diminuição da ξ .

Uma mudança geométrica diferente nos QR é considerar um sistema em que a barreira interna tem simetria cilíndrica e a externa uma elipse concêntrica, sistema *A*. Este sistema pode se reproduzido experimentalmente, devido a diferença das constantes de rede na formação dos QR. Vamos considerar o caso em que a interface interna tem raio $R_I = 140 \text{ \AA}$ e a elipse externa apresenta excentricidade no eixo menor (maior) $a_j = R_E \sqrt{\xi}$ ($b_j = R_E / \sqrt{\xi}$) com $R_E = 240 \text{ \AA}$. Um segundo caso, sistema *B*, é considerarmos um QR composto por elipses concêntricas, com mesma área. Para o sistema *B* usamos as mesmas definições para os eixos menor (maior) das elipses concêntricas, consideramos os raios internos (externos) $R_I = 140 \text{ \AA}$ ($R_E = 240 \text{ \AA}$). Ambos os sistemas têm a mesma área, assim os mínimos e os máximos das oscilações ocorrem nos mesmos valores do campo

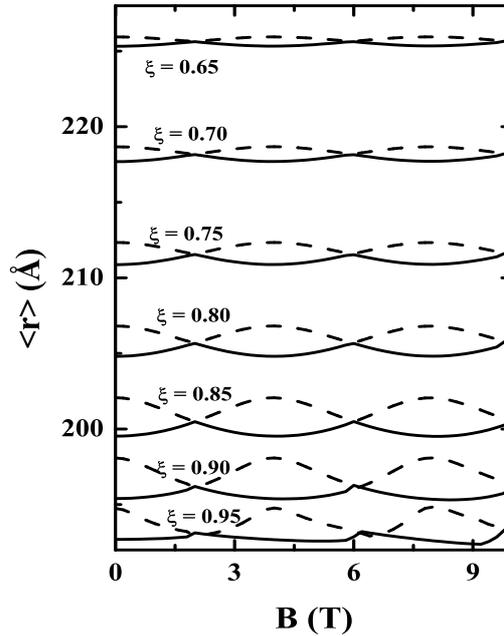


Figura 39: Raio médio do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, para diferentes valores de excentricidade. Para os mesmos parâmetros usado para as Fig. 38.

magnético. Na Fig.40 temos a energia no estado fundamental e primeiro estado excitado em função do campo magnético, para diferentes valores da excentricidade. Observamos que as oscilações da mesma ordem de magnitude ocorrem para valores muito diferentes da excentricidade: as variações para $\xi = 0.94$ e $\xi = 0.85$ no sistema *A* correspondem a $\xi = 0.85$ e $\xi = 0.65$ no sistema *B*. Esta diferença resulta do fato que no sistema *B* a largura do anel é constante, enquanto no sistema *A* a largura é muito pequena ao longo do eixo menor, quando comparada com os valores ao longo do eixo maior. Conseqüentemente, a função de onda no sistema *A* será localizada nas regiões perto do eixo maior da elipse, correspondendo a dois estados quasi-degenerados, similar ao efeito de duas impurezas positivas. Os raios médios dos sistemas *A* e *B* são mostrados na Fig.41. Como esperávamos, como os sistemas apresentam pequenas oscilações na energia (*A* com $\xi = 0.85$ e *B* com $\xi = 0.65$) eles têm oscilações baixas no raio médio (ver Fig.41(b)). Nos sistemas com energias da mesma ordem de magnitude, os raios médios correspondentes em *B* são sempre maiores do que esses no sistema *A*, uma vez que as elipses concêntricas (sistema *B*) têm excentricidades maiores do que o sistema *A*.

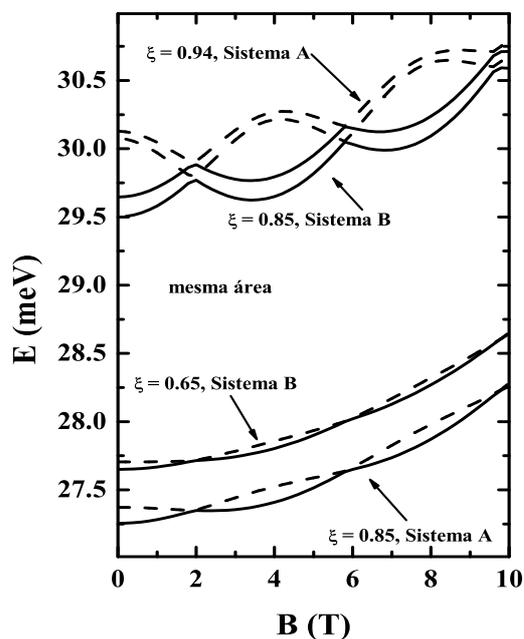


Figura 40: Energia do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético aplicado, com diferentes valores de excentricidade e considerando os casos onde o anel interno tem simetria cilíndrica e a barreira externa é uma elipse concêntrica (sistema A), e o anel elíptico com mesma excentricidade (sistema B) e mesma área.

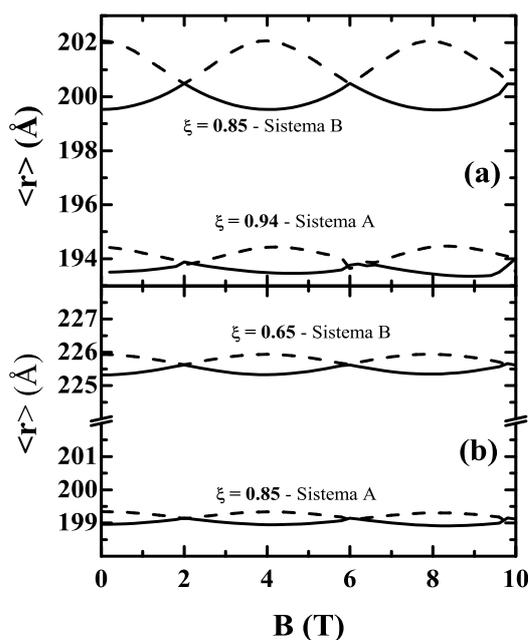


Figura 41: Raio médio do estado fundamental (linha sólida) e primeiro estado excitado (linha tracejada), em função do campo magnético, para o mesmo sistema da Fig. 40.

3.4 Anéis Rugosos

Das várias linhas de pesquisas em anéis quânticos semicondutores, uma delas está relacionada com os efeitos de topologia [104, 105] causados na formação dos mesmos. Alguns trabalhos experimentais mostram que essas estruturas apresentam rugosidades interfaciais, ao invés de uma superfície perfeitamente lisa [97, 106]. Assim, consideraremos a existência de rugosidades nas interfaces do anel. Estas rugosidades são saliências, protuberâncias na barreira ou/e na região do anel. Agora, simularemos os QR assumindo suas interfaces rugosas com raios internos e externos descritos por uma função do tipo [107]

$$R(\theta) = R_{av} + r(\theta), \quad (3.20)$$

com

$$r(\theta) = 2\sigma_R \sqrt{\frac{L_C}{\sqrt{2\pi}R_{av}}} \sum_{n>0} \exp \left[- \left(\frac{nL_C}{2R_{av}} \right)^2 \right] \cos(n\theta + \varphi_n), \quad (3.21)$$

onde θ é o ângulo no plano, φ_n são as fases aleatórias, R_{av} a média do raio, $(\langle r(0)^2 \rangle)^{1/2} = \sigma_R$ o deslocamento do raio médio e L_C é o comprimento de correlação do raio na interface. Os três parâmetros (φ_n , L_C e σ_R) são geralmente diferentes para as interfaces internas ($R_{av} = R_I$) e externa ($R_{av} = R_E$).

Na Fig. 42 temos quatro possibilidades de perfis de potenciais para os anéis que analisaremos neste trabalho: (a) um anel ideal (liso), isto é, sem rugosidade nas interfaces, e anéis com rugosidade na superfície (b) interna, (c) externa, e (d) ambas superfícies. O raio médio interno e externo são $R_I = 140 \text{ \AA}$ e $R_E = 240 \text{ \AA}$, respectivamente, e os parâmetros da superfície rugosa são $\sigma = 2 \text{ \AA}$ e $L_c = 5 \text{ \AA}$.

O espectro de energia (a) e a energia de transição (b) do elétron, em função do campo magnético aplicado para um anel ideal (ver Fig. 42 (a)), são mostradas na Fig.43. As oscilações na energia em função do campo magnético aplicado ocorrem devido a transições do momento angular do elétron. Essas mudanças ocorrem porque, quando aplicamos o campo magnético, as funções de ondas tendem a se estreitar, forçando assim sua penetração na barreira, e conseqüentemente aumentando a energia, com isso passa a existir um estado de menor energia que possui um $l \neq 0$. As energias oscilam com a intensidade do campo magnético seguindo um período bem definido, em torno de 1.9 T. Na Fig.43 (b) observamos as transições do momento angular das energias do estado fundamental para o primeiro e segundo estado excitado, onde vemos uma diferença menor que 7 meV em

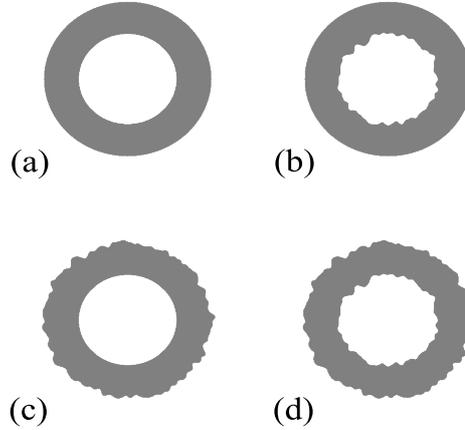


Figura 42: Perfil do potencial para (a) um anel ideal e para anel com rugosidades nas superfícies (b) interna, (c) externa e (d) em ambas superfícies, considerando $R_I = 140 \text{ \AA}$, $R_E = 240 \text{ \AA}$, $\sigma = 2 \text{ \AA}$ e $L_c = 10 \text{ \AA}$.

relação ao estado fundamental.

O espectro de energia em função do campo magnético em QR com rugosidade nas superfícies (a) interna, (b) externa e (c) ambas, são mostradas na Fig.44 para dois diferentes grupos de parâmetros da rugosidade: considerando $L_C = 5 \text{ \AA}$, para $\sigma = 2 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $\sigma = 10 \text{ \AA}$ (linha pontilhada). Notamos que na presença de superfícies rugosas e com o aumento do deslocamento do raio médio, as oscilações AB tornam-se mais fracas e as energias de confinamento são deslocadas, especialmente quando ambas as superfícies são rugosas (aproximadamente 16%) e com menor intensidade quando apenas a superfície externa (aproximadamente 1%) apresenta rugosidades.

Na Fig.45 temos o espectro de energia em função do campo magnético em QR com rugosidade nas superfícies (a) interna, (b) externa e (c) ambas, considerando agora $L_C = 20 \text{ \AA}$, para $\sigma = 2 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $\sigma = 10 \text{ \AA}$ (linha pontilhada). Observamos que como no caso anterior, as oscilações AB tornam-se mais fracas quando aumentamos o deslocamento do raio médio, chegando até desaparecer totalmente e sofrendo um aumento de aproximadamente 35% no caso em que ambas as superfícies, interna e externa, são rugosas. No entanto, quando apenas uma das superfícies, interna ou externa, apresenta superfície rugosa a variação na energia de confinamento é bem menor (da ordem de 1%).

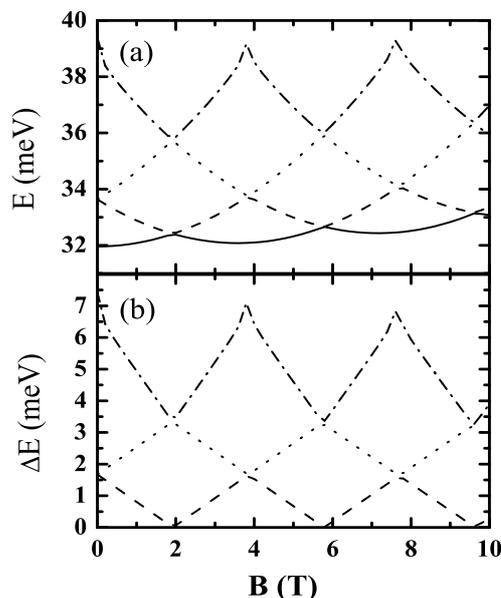


Figura 43: (a) Espectro de energia do elétron e (b) transições das energias do estado fundamental (sólida) para o primeiro (tracejada), segundo (pontilhada) e terceiro (tracejada-pontilhada) estados excitados, em função do campo magnético para um anel ideal, considerando $R_I = 140 \text{ \AA}$ e $R_E = 240 \text{ \AA}$.

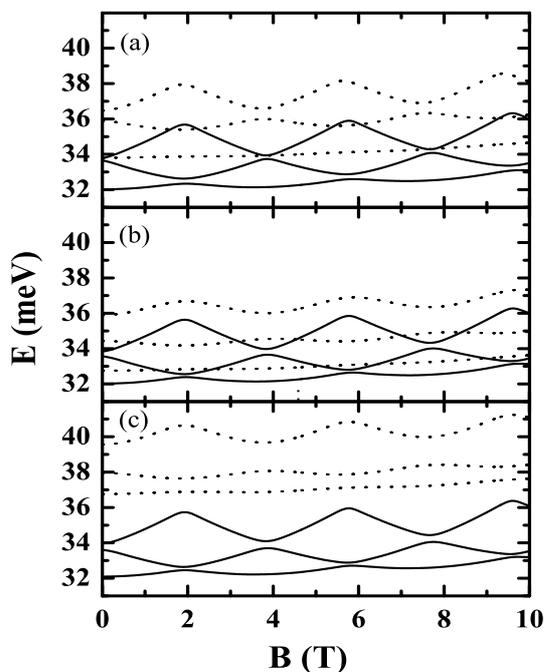


Figura 44: Espectro de energia do elétron em função do campo magnético em um anel com rugosidade na superfície (a) interna, (b) externa e (c) em ambas superfícies, considerando $L_c = 5 \text{ \AA}$, para $\sigma = 2 \text{ \AA}$ (sólida) e $\sigma = 10 \text{ \AA}$ (pontilhada).

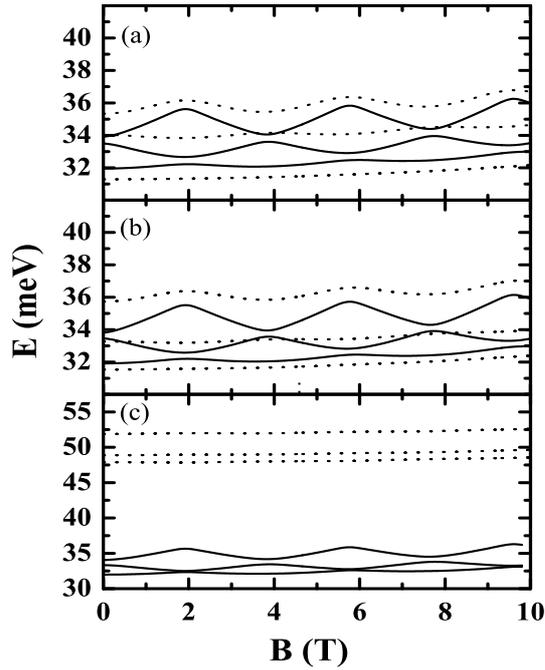


Figura 45: Espectro de energia do elétron em função do campo magnético em um anel com rugosidade na superfície (a) interna, (b) externa e (c) em ambas superfícies, considerando $L_c = 20 \text{ \AA}$, para $\sigma = 2 \text{ \AA}$ (sólida) e $\sigma = 10 \text{ \AA}$ (pontilhada).

As transições na energia do estado fundamental para o primeiro ($E_1 - E_0$) e o segundo para o terceiro ($E_2 - E_0$) estado excitado, em função do campo magnético, em um anel com rugosidade interna (tracejada), externo (pontilhada) e ambos anéis rugoso (sólida) são mostrados na Fig.46, considerando $L_C = 5 \text{ \AA}$, com (a) $\sigma = 2 \text{ \AA}$ e (b) $\sigma = 10 \text{ \AA}$. Podemos observar que a existência de superfícies rugosas levanta a degenerescência nos pontos de transições do momentum angular, e este efeito torna-se mais forte quando a amplitude σ é aumentada. Embora o deslocamento da energia devido à presença de rugosidade em ambas as superfícies do anel seja máximo (ver Fig.44 (c) e 45 (c)), as energias de transições nesse caso são menores que as encontradas quando consideramos apenas uma das superfícies do anel como sendo rugosa.

3.5 Anéis Duplos

Recentemente foi possível crescer estruturas consistindo de dois anéis. Estas estruturas tem sido estudadas tanto teoricamente quanto experimentalmente. Em seu recente trabalho, T. Kuroda *et al.* [80] usou a técnica epitaxial *droplet* para crescimento de anéis, onde estudou as transições ópticas em anéis quânticos complexos *strain-free*, considerando

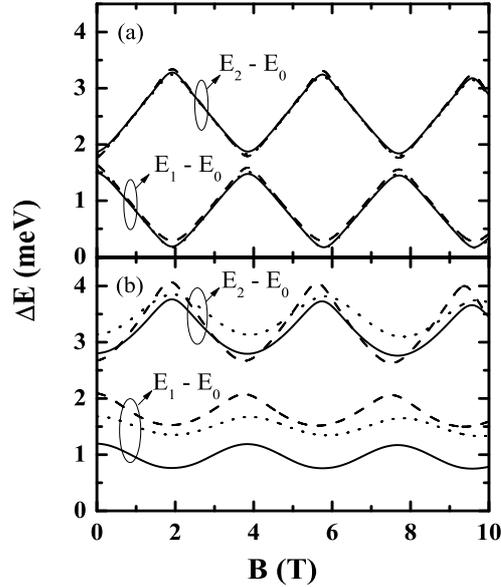


Figura 46: Transições das energias do estado fundamental e segundo estado excitado, em função do campo magnético em um anel com rugosidade na superfície interna (pontilhada), externa (tracejada) e ambas superfícies (sólida), considerando $L_c = 5 \text{ \AA}$, para (a) $\sigma = 2 \text{ \AA}$ e (b) $\sigma = 10 \text{ \AA}$.

duas possibilidades: um anel simples e um anel duplo concêntrico. Foi observado que os portadores são quantizados ao longo de dois graus de liberdade ortogonais (movimento radial e movimento rotacional) para um sistema de anel simples. Já no sistema dos anéis duplos concêntricos [108, 109], seus resultados mostraram que o estado fundamental é confinado no anel externo enquanto o primeiro estado excitado em ambos os anéis [80].

Os estados eletrônicos em anéis quânticos duplos na presença de um campo magnético tem sido tema de estudos nos últimos anos. B. Szafran *et al.* [111] apresentou um estudo de diagonalização exata das propriedades de estados de poucos elétrons confinados em anéis quânticos concêntricos e observou que o período das oscilações AB com o campo magnético é significativamente diferente para os anéis internos e externos. J. Planelles *et al.* [110] fez um estudo teórico nas propriedades magneto-óptico em anéis concêntricos duplos, como função de um acoplamento interno-externo e encontrou que, quando o sistema pode ser descrito como um único anel com uma pequena fenda na parte superior ligado pela mesma base, os níveis de energias do elétron mostram dois diferentes períodos de oscilações, o que indica que os portadores são localizados no anel interno ou externo.

Outro tópico interessante em sistemas de anéis quânticos é relacionado à análise do

efeito da geometria não circular no espectro de energia e nas oscilações Aharonov-Bohm. Gridin *et al.* [95] estudou o confinamento em anéis quânticos de formas arbitrárias, onde observou que, quando a simetria circular é removida, há uma quebra nos níveis eletrônicos e as funções de onda são localizadas nas regiões de maior curvatura. Além dos resultados experimentais de T. Kuroda *et al.* [80] em sistemas de anéis simples, tem demonstrado que a relaxação do momento angular é muito mais rápida do que as transições entre os níveis de energia ou recombinação elétron-buraco. Este efeito foi atribuído à simetria não-circular de anéis reais, de modo que o momentum angular não é um número quântico bom.

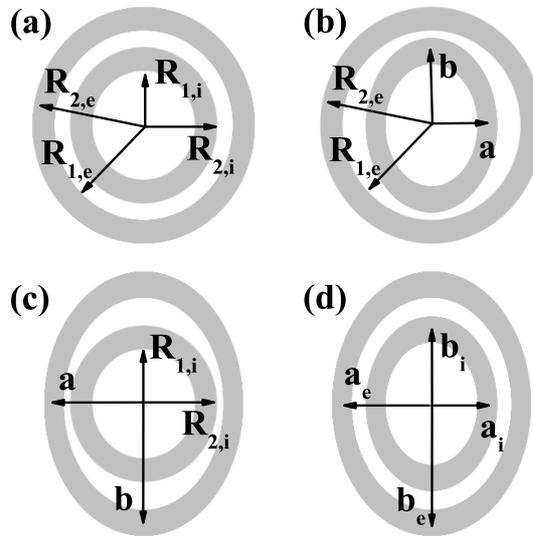


Figura 47: Perfil do potencial do elétron em anéis quânticos duplos, considerando quatro possibilidades para a geometria dos anéis: (a) circular, (b) interno elíptico e o externo circular, (c) o anel interno é circular e o externo é elíptico, e (d) ambos anéis, interno e externo, são elípticos.

Assim resolvemos fazer uma análise no espectro de energia em anéis duplos concêntricos $GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As$ considerando quatro casos de anéis simétricos, mostrados na Fig. 47. Em (a) ambos os anéis, interno e externo, são circulares, onde o interno é limitado pelos raios interno e externo $R_{1,I} = 230 \text{ \AA}$ e $R_{2,I} = 330 \text{ \AA}$ respectivamente, já o anel externo tem raios $R_{1,E} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{2,E} = 500 \text{ \AA}$. Em (b), o anel interno é elíptico, enquanto

o anel externo continua sendo circular, (c) o anel interno é circular, enquanto o externo é elíptico, e (d) ambos anéis, internos e externos, têm geometria elíptica. As elipses são definidas pela excentricidade $\xi = a/b$, onde a e b são as distâncias médias entre os limites dos anéis elípticos nas direções x e y respectivamente. A área do anel é preservada.

As energias de confinamento para os quatro primeiros estados de um anel duplo circular (ver Fig.47 (a)) em função do campo magnético, são mostrado na Fig.48. A energia não exibe uma periodicidade definida em suas oscilações com o aumento do campo magnético, o que difere do espectro de energia para um anel simples mostrado anteriormente (ver Fig.43), onde as oscilações AB apresentam periodicidade [111, 83]. Se analisarmos as funções de onda do elétron nos estados confinados em tal estrutura, as quais são mostradas Fig.49, podemos ver que as mesmas estão dispersadas em ambos os anéis, os estados estão acoplados no anel interno e externo e isto é a razão pela qual as oscilações AB não exibem uma periodicidade bem definida. Este resultado é diferente do mostrado por T. Kuroda *et al.* [80], onde os primeiros estados estão sempre localizados somente em um anel. De fato, seu modelo de QRs duplo trata de um único anel com um fenda no alto, formando um sistema de dois anéis conectados pela base, que é diferente do nosso sistema, onde os anéis são completamente separados [104]. Entretanto, seus resultados mostram que os estados excitados em anéis duplos circulares estão localizados em ambos os anéis, que está de acordo com o comportamento encontrado no nosso trabalho.

A Fig.50 mostra a energia do elétron em função do campo magnético, considerando o anel interno elíptico e o anel externo circular (ver Fig.47(b)). Os valores de excentricidade considerados para a elipse foram: (a) $\xi = 0.90$ e (b) $\xi = 0.95$. Observamos que as oscilações AB são recuperadas pela existência de um anel elíptico. Enquanto a excentricidade diminui, o estado fundamental (E_0) e primeiro estado excitado (E_1) tornam-se mais energeticamente separados, do segundo (E_2) e terceiro estados excitados (E_3). Isto pode ser entendido se pensarmos os focos da elipse como dois átomos separados: enquanto a excentricidade diminui, os focos torna-se mais separados e os primeiros pares de estados degeneram. Devido à degenerescência nestes estados, a amplitude das oscilações AB é reduzida com o decréscimo da excentricidade, então tais oscilações são melhores observadas para o caso de $\xi = 0.95$. Diferentes períodos de oscilações foram encontrados para cada par de estados: E_0 e E_1 oscilam com período de $B \sim 1.7$ T, enquanto E_2 e E_3 , exibem periodicidade em $B \sim 0.6$ T. Podemos analisar as funções da onda do elétron neste sistema, mostradas na Fig.51, onde observamos que $\Psi_0(x, y)$ e $\Psi_1(x, y)$ são distribuídos somente no anel interno, e estes estados são claramente localizados nas regiões de curvatura máxima, devido à geometria elipsoidal deste anel [95]. Já, $\Psi_2(x, y)$ e $\Psi_3(x, y)$ são localizados no

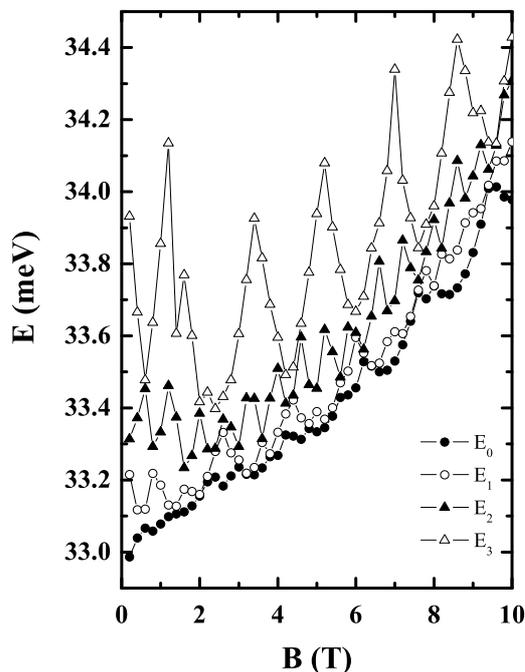


Figura 48: Espectro de energia em função do campo magnético em um anel duplo com geometria circular, com $R_{1,i} = 230 \text{ \AA}$, $R_{1,e} = 330 \text{ \AA}$, $R_{2,i} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{2,e} = 500 \text{ \AA}$.

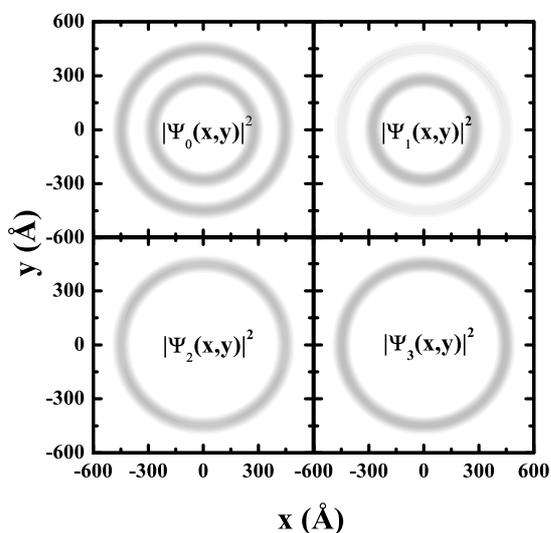


Figura 49: Funções de onda dos quatro primeiro estados do elétron em um anel duplo com geometria circular.

anel externo que tem formato circular. Isto explica a maior periodicidade encontrada nas oscilações do E_0 e de E_1 , quando comparado com E_2 e E_3 : já que a periodicidade das oscilações AB depende do inverso da área [62], os estados localizados no anel interno

devem apresentar um período menor das oscilações AB.

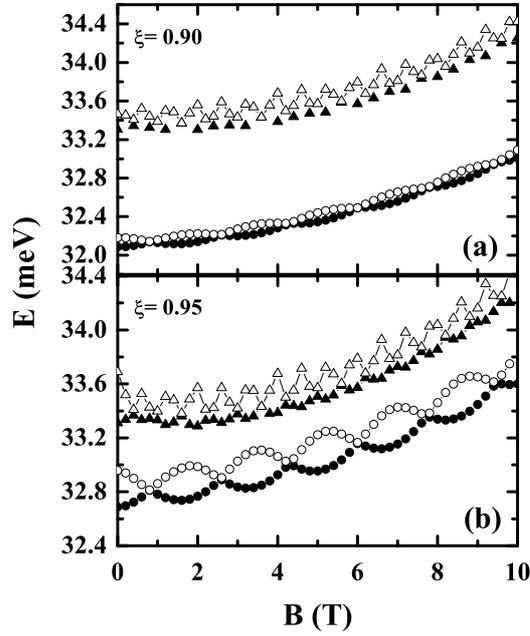


Figura 50: Espectro de energia em função do campo magnético, para um sistema consistindo de um anel interno elíptico, considerando (a) $\xi = 0.90$ (b) e $\xi = 0.95$ e o anel externo como sendo circular, com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$.

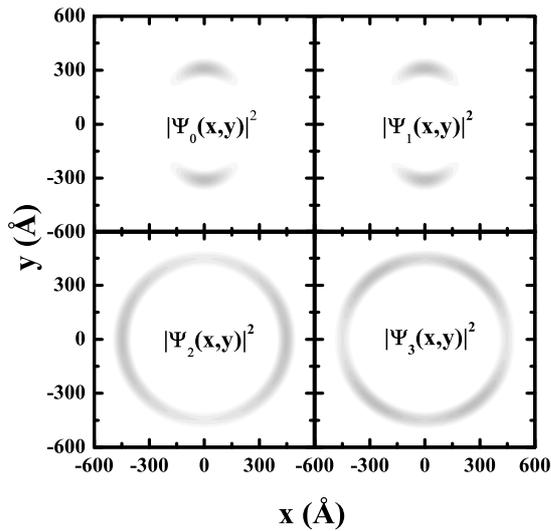


Figura 51: Funções de onda para quatro estados do elétron, para um sistema consistindo de um anel interno sendo elíptico, com $x = 0.95$ e o externo circular, com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$.

O espectro de energia do elétron para um sistema consistindo de um anel interno

circular e o externo elipsoidal (ver Fig.47(c)) é mostrado na Fig.52, para excentricidades $\xi = 0.90$ (a) e $\xi = 0.95$ (b). Os estados E_0 e E_1 são quase degenerados, e exibem fracas oscilações nas energias. Agora, em contraste o resultado mostrado na Fig.50, as oscilações na energia apresentam maior periodicidade para os estados E_2 e E_3 , de $B \sim 1.7$ T, quando comparado com o E_0 e E_1 . De fato, observando as funções de onda do elétron na Fig.53, podemos ver que a localização desses estados é invertida quando comparados com o resultado mostrado na Fig.51: o estado fundamental e primeiro estado excitado estão confinados no anel externo, enquanto o segundo e terceiro estado excitado são confinados no anel interno. Uma vez que, as funções de onda dos estados E_0 e E_1 são confinados no

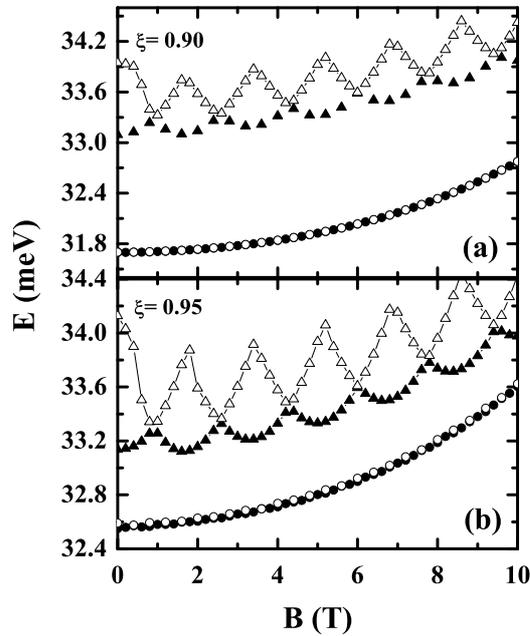


Figura 52: Espectro de energia em função do campo magnético, para um sistema consistindo de um anel interno circular com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$, e um anel externo elíptico, considerando $\xi = 0.90$ (a) e $\xi = 0.95$ (b).

anel externo, é de se esperar que o período de oscilação nas energias seja menor neste caso. No entanto, não podemos observar devido à degenerescência desses estados, atribuído à forma elíptica do anel externo, tornando-se mais forte do que as oscilações de energia em um sistema desse tipo. De fato, no caso anterior (Fig.51), E_0 e E_1 estão confinados ao anel interno, que apresenta geometria elíptica, e nós observamos as oscilações AB, mas agora, estes estados encontram-se no anel externo (Fig.53), que é maior e apresenta seus focos mais separados, daí E_0 e E_1 tornam-se mais degenerados neste caso.

A Fig.54 mostra o espectro de energia para um anel quântico duplo, considerando

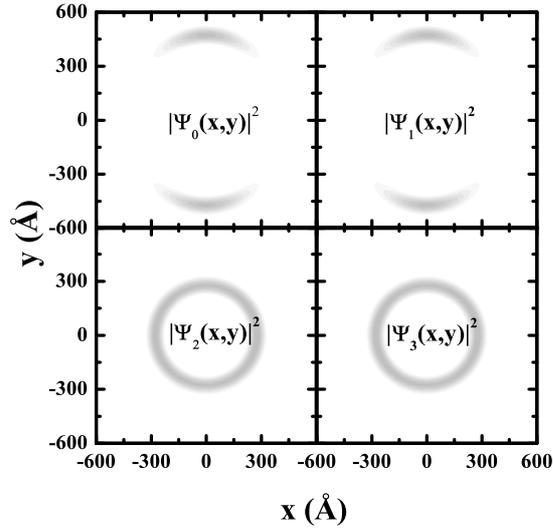


Figura 53: Função de onda para quatro estados do elétron, para um sistema consistindo de um anel interno circular com $R_{i,1} = 400 \text{ \AA}$ e $R_{i,2} = 500 \text{ \AA}$, e o anel externo elíptico com $x = 0.95$.

ambos os anéis interno e externo, com o formato elíptico. Usamos a excentricidade $\xi = 0.95$ para o anel interno (ver Fig.47(d)) e o anel externo usaremos várias excentricidades: (a) $\xi = 0.99$, (b) $\xi = 0.98$ (c) $\xi = 0.95$ e (d) $\xi = 0.90$. Para $\xi = 0.99$, como o anel externo é quase circular ainda, o comportamento nas oscilações é similar ao mostrado na Fig.50 onde temos o caso do anel interno elíptico e externo circular, e apresentam periodicidade de $B \sim 1.7 \text{ T}$ para os estados E_0 e E_1 , e E_2 e E_3 exibem um período de $B \sim 0.6 \text{ T}$. Para $\xi = 0.98$, os estados de energia E_0 e E_1 ainda oscilam com a mesma periodicidade que $\xi = 0.99$ ($B \sim 1.7 \text{ T}$), entretanto E_2 e E_3 deixam de exibir periodicidade nas oscilações a medida que o campo magnético aplicado aumenta. Para as excentricidades $\xi = 0.95$ e $\xi = 0.90$, o comportamento é modificado: as energias dos estados E_0 e E_1 são quase degenerados, enquanto E_2 e E_3 exibem uma periodicidade maior ($B \sim 1.7 \text{ T}$). A Fig.55 ilustra as funções de onda do elétron no estado fundamental e segundo estado excitado, para os sistemas elípticos considerado na Fig.54 (a) ($\xi = 0.99$) e Fig.54 (d) ($\xi = 0.90$), onde podemos ver a transição na localização dos estados do elétron. No caso $\xi = 0.99$, a função de onda do estado fundamental é distribuída no anel interno, o que é razoável, já que o elétron tende a estar sempre na região de maior curvatura. Como a geometria do anel externo torna-se mais elíptico, o estado fundamental do elétron passa do anel interno para o externo. Esta transição, da localização do estado fundamental do anel interno para o externo, é responsável pela degenerescência de E_0 e E_1 mostrada na Fig.54 (c) e (d), onde agora estes estados são localizados no anel elíptico maior. Além disso, uma

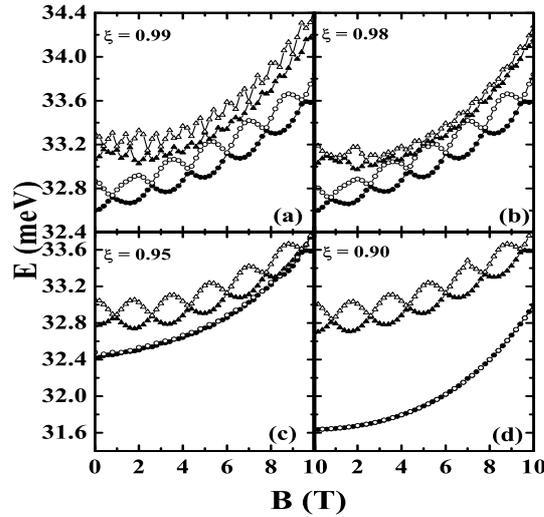


Figura 54: Espectro da energia em função do campo magnético, considerando ambos anéis, interno e externo, como sendo elíptico, com $\xi = 0.99$ (a), $\xi = 0.98$ (b), $\xi = 0.95$ (c) e $\xi = 0.90$ (d).

transição da localização do elétron do anel externo para o interno ocorre para os estados E_2 e E_3 , que explica porque a periodicidade de tais oscilações nos estados de energias nestes sistemas de anéis aumenta quando a excentricidade do anel externo é reduzida (ver também Figs.55 (c) e 55 (d)), já que a periodicidade depende do inverso da área englobada pela função de onda.

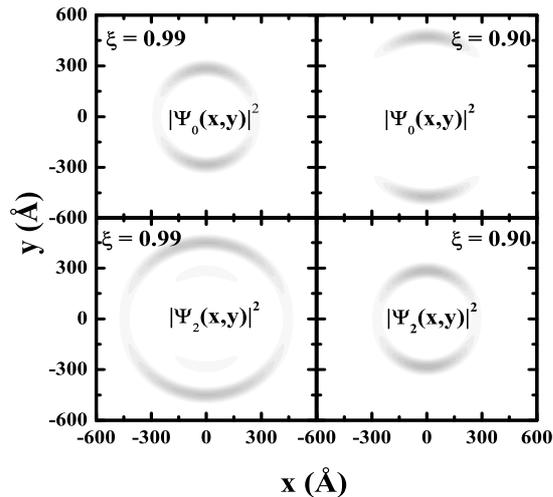


Figura 55: Funções de onda do elétron do estado fundamental e segundo estado excitado considerando duas excentricidade: $\xi = 0.99$ e $\xi = 0.90$, considerando ambos os anéis com geometria elíptica.

Publicações. Os resultados apresentados neste Capítulo foram publicados como:

- *Impurities and Geometrical Effects on the Electron Energy Spectrum of Quantum Rings.*

G. A. Farias, M. H. Degani, J. A. K. Freire, J. Costa e Silva, e R. Ferreira, Physical Review B **77**, 85316 (2008).

- *Quantum Confinement in Double Quantum Rings.*

J. Costa e Silva, A. Chaves, M. H. Degani, J. A. K. Freire e G. A. Farias, Brazilian Journal of Physics (aceito).

- *The role of surface roughness on the electron confinement in semiconductor quantum rings.*

Andrey Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire e G. A. Farias, Proc. of 6th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices (2007).

4 Pontos Quânticos

Estruturas que confinam os portadores de cargas nas três dimensões, o que chamamos de pontos quânticos (*quantum dots* - QDs), comportam-se como átomos artificiais onde o potencial do núcleo é substituído pelo potencial de confinamento, resultando em uma forte quantização dos níveis de energia. Além disso, podemos utilizá-los para simular átomos ou moléculas artificiais, porém com a vantagem de poder manipular os portadores de cargas e sua energia de transição. Para entendermos um pouco sobre a importância deste forte confinamento, consideremos um ponto quântico com apenas dois estados. As energias desses estados são tão precisas quanto permitem a relação de incerteza de Heisenberg (ignorando os efeitos de temperatura), e assim, por este motivo, a transição de um elétron do nível mais alto, primeiro estado excitado (já que temos apenas dois estados) para o mais baixo, estado fundamental, ocorre mediante a emissão de um fóton de energia bem definida. Podemos usar esta transição para construir um *laser* [112] que emite num comprimento de onda bem definido. Se quisermos o contrário, fazer com que o elétron transite do nível de menor energia, estado fundamental, para o estado mais alto, ele deve absorver um fóton de energia igualmente bem definida, e deste fato construir um fotodetector [113] capaz de identificar um comprimento de onda muito específico. Assim temos duas pontas de uma linha de transmissão de dados: Um emissor (*laser*) e um receptor (fotodetector).

Essas nanoestruturas ofereceram uma nova perspectiva para o desenvolvimento da eletrônica, fotônica ou dispositivos opto-eletrônicos, tais como, transistores monoeletrônicos [114], memórias ópticas [115], traçadores biológicos [116], LEDs (*light emitting diode*) orgânicos [117], e um possível grande papel no desenvolvimento da recente computação quântica [118]. Essas aplicações apresentam vantagens sobre as similares atuais, por exemplo, no caso dos traçadores biológicos, os QDs oferecem um espectro de emissão mais estreito que os atuais traçadores baseados em tintas orgânicas fluorescentes, facilitando e melhorando a interpretação dos resultados. Além de não oferecerem prejuízos à saúde do

paciente já que não são radioativos, que é o caso dos atuais.

O crescimento de QDs semicondutores e o estudo de suas propriedades físicas tem sido uma área muito ativa nas duas últimas décadas [120, 121]. Os QDs têm sido crescidos com várias geometrias. O formato dos QDs é difícil de ser controlado, pois depende do método, da temperatura e do tempo de crescimento da estrutura [122, 123]. Além disso, o formato pode ser alterado quando cobrimos o ponto com um outro material. Apesar da variedade de formatos, a maioria dos grupos que crescem QD considera geralmente as formas elipsoidal, piramidal e pirâmide truncada. Em nosso trabalho consideraremos pontos quânticos com geometria elipsoidal (ver Fig. 56.(b)).

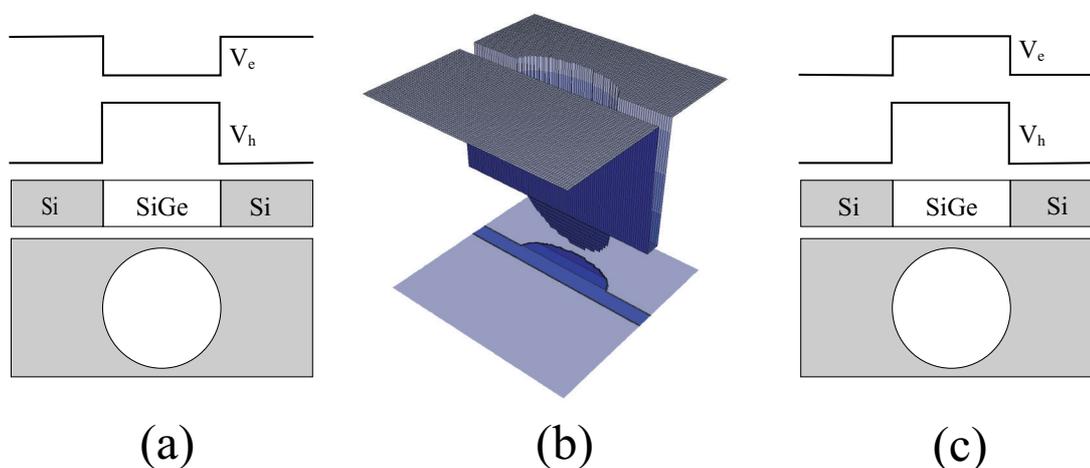


Figura 56: (a) Potencial de um ponto quântico $Si/SiGe$ tipo-I, (b) ponto quântico elipsoidal e (c) potencial de um ponto quântico tipo-II.

Dentre o grande número de trabalhos em pontos quânticos tanto na área experimental quanto teórica, a maioria têm sido feito em hetero-estruturas tipo-I (ver Fig. 56.(a)), já que a maioria dos materiais apresentam alinhamento de banda tipo-I. No entanto, alguns trabalhos têm sido feitos em pontos quânticos tipo-II (ver Fig. 56.(c)). Este Capítulo será dividido em duas partes, na primeira faremos um estudo teórico sobre pontos quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ que dependendo da fração molar usada, apresentará alinhamento de banda tipo-I ou tipo-II ($x = 0.15$ e $x = 0.30$, respectivamente). A equação de Schrödinger em três dimensões, na aproximação da massa efetiva, é resolvida para os portadores a partir de um método de evolução temporal da função de onda, onde encontramos os níveis de energias dos portadores e a energia total do *exciton* em pontos quânticos elipsoidais. Uma comparação entre as geometrias elipsoidal e piramidal também será feita. Na segunda parte, estudaremos pontos quânticos duplos $InGaAs/GaAs$, onde calcularemos os níveis de energia analisando o efeito de afastamento, considerando dois tipos de acoplamentos entre os pontos.

4.1 Método Numérico

Ao contrário ao que foi feito para poços quânticos, onde só consideramos o potencial Coulombiano para sistemas tipo-II, já que nas estruturas tipo-I o potencial de confinamento da hetero-estrutura era suficiente para confinar os portadores de carga, agora vamos considerar o potencial Coulombiano para os dois sistemas, já que estamos trabalhando com uma liga cuja a fração molar é bastante baixa para sistemas tipo-I, assim o potencial da hetero-estrutura para o elétron fica bastante pequeno, não confinando os portadores dentro do poço de potencial. Logo, para confiná-los, teremos que considerar a interação Coulombiana entre o elétron e o buraco também para sistemas tipo-I. No caso dos pontos quânticos duplos $InGaAs/GaAs$ não consideraremos a interação Coulombiana, já que o poço de potencial criado pelas hetero-estrutura é suficiente para confinar os portadores de carga.

Nossos sistemas são compostos por um (dois) pontos quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ ($InGaAs/-GaAs$) que serão descritos pelo mesmo método usado para encontrar as energias do caso dos anéis quânticos, o método de evolução temporal *split-operator*, o qual é baseado na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para obter os níveis de energias. Considerando um campo magnético \vec{B} paralelo ao eixo z , o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} + q\vec{A})^2 + V(\vec{r}) + q\vec{F}(x), \quad (4.1)$$

com m sendo a massa do elétron ($m = 0.067 m_0$ e m_0 a massa do elétron livre), o potencial vetor é um *gauge* simétrico $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{\rho}$, \vec{F} é o campo elétrico aplicado no eixo x e $V(\vec{r})$ o potencial total de confinamento. Para o caso do o buraco no sistema $Si/Si_{1-x}Ge_x$, o potencial de confinamento $V(\vec{r})$ da hetero-estrutura é o suficiente para confiná-lo, enquanto o do elétron é dado por $V(\vec{r}) = V_{het}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) + V_{Coul}(\vec{r}_e - \vec{r}_h)$, com

$$V_{het}(\vec{r}) = Q_i[\varepsilon_1\chi(z) + \varepsilon_2\chi^2(z)]; \quad V_{Coul}(\vec{r}_e - \vec{r}_h) = -e^2/4\pi\epsilon\sqrt{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|^2}. \quad (4.2)$$

Para o caso do $Si/Si_{1-x}Ge_x$, resolvemos a equação de Schrödinger, primeiramente para o buraco e seguida para o elétron onde consideraremos a interação Coulombiana entre os mesmos. Quando fazemos isso encontraremos uma energia $E_X = E_e + E_h - E_b$, onde E_e é o nível de energia do elétron livre da interação Coulombiana na hetero-estrutura (que para tipo-II é igual a zero, já que temos uma barreira), E_h o nível de energia do buraco pesado e E_b é a energia de ligação. Logo a energia do *exciton* será dada por

$E_{exc} = E_g + E_X$, com E_g sendo a energia do *gap* da liga. Para o caso dos pontos quânticos duplos *InGaAs/GaAs*, calculamos cada portador isoladamente.

A solução geral da equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t/\hbar}\Psi(\vec{r}, t). \quad (4.3)$$

Usando o método da evolução temporal, e substituindo o Hamiltoniano da Eq. (4.1) na solução da equação de Schrödinger (Eq. 4.3), teremos uma exponencial com a soma do termo cinética e o potencial, como tivemos no caso do anel. Sendo que o termo cinético ($T = T_x + T_y + T_z$) tem como operadores de energia cinética

$$T_z = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - qy \frac{B}{2} \right)^2; \quad T_y = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + qz \frac{B}{2} \right)^2; \quad T_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (4.4)$$

logo como no caso dos anéis, os operadores cinético e potencial não comutam, assim, de forma semelhante, usaremos a expansão proposta por Suzuki [102], que consiste na decomposição das exponenciais dos operadores e em seguida usamos uma função de onda tentativa na forma de uma gaussiana e propagamos no tempo imaginário ($t = -i\tau$) até que a função de onda convirja para o estado fundamental do sistema e finalmente encontramos os autoestados do sistema.

4.2 Resultados Tipo-I

Nesta Seção analisaremos os resultados dos pontos quânticos elipsoidais *Si/Si_{1-x}Ge_x* tipo-I com base circular de raio $R = 160 \text{ \AA}$ [45, 124, 125, 126], onde x é a fração molar do germânio. Apesar de não existir um consenso da fração molar exata para termos um sistema de alinhamento de bandas tipo-I ou tipo-II, consideraremos $x = 0.15$ para sistemas tipo-I, já que é bastante utilizado na literatura [127, 128]. Devido à diversidade das geometrias dos pontos quânticos, fizemos uma comparação entre as energias em geometrias elipsoidais e piramidais para uma mesma estrutura. Calculamos as energias de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em função dos raios das elipses. Além disso, calculamos a energia de ligação e total do *exciton* considerando a fração molar variando da base ao topo do ponto, já que a maioria dos pontos quânticos auto-crescido na literatura varia a fração molar da base ao topo do ponto [129, 130], sob um campos eletromagnéticos aplicados. Os *band offset* de condução (V_e) e valência (V_h) considerados são: $V_e = 26.77 \text{ meV}$ e $V_h = 240.98 \text{ meV}$. A massa efetiva do elétron e buraco são $m_e = 0.191 m_0$ e $m_h = 0.277 m_0$ respectivamente.

Na Fig.57 temos uma comparação entre as energias dos pontos elipsoidais e piramidais mantendo a mesma área da base. Para um ponto elipsoidal com altura $H = 60 \text{ \AA}$ e raio de 160 \AA temos uma energia de 1.006 meV , enquanto para um ponto com formato piramidal a energia é 1.050 meV , ou seja, a diferença entre as geometrias não chega a 5% , o que nos prova que a escolha da geometria é irrelevante neste sistema em estudo. Assim resolvemos fazer nosso estudo em cima de pontos quânticos elipsoidais com a base circular.

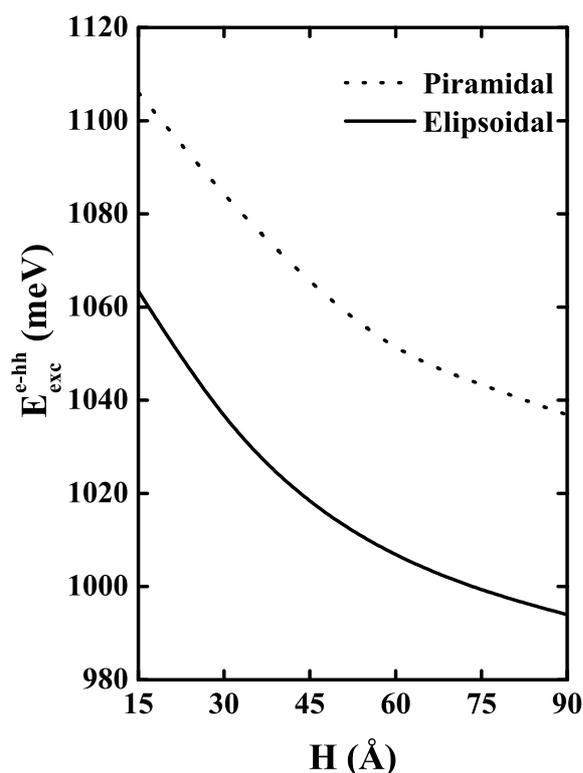


Figura 57: Energia do *exciton* elétron-buraco pesado ($e - hh$) no estado fundamental em pontos quânticos elipsoidais (linha sólida) e piramidais (linha pontilhada).

A Fig.58 mostra-nos a energia total do *exciton* elétron-buraco pesado no estado fundamental para pontos quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ elipsoidais em função do raio, variando a altura de $H = 15 \text{ \AA}$ até $H = 90 \text{ \AA}$. Observamos que, para uma determinada altura, a energia não apresenta mudança significativa em relação ao raio. No entanto quando mudamos a altura do ponto vemos mudanças mais intensas nas energias. Isso era esperado já que, enquanto os raios dos pontos costumam ser entre 100 \AA e 200 \AA (ou seja, 100% de diferença), as alturas costumam variar bem mais, no nosso caso, de 15 \AA a 90 \AA (600% de diferença) [131, 132]. A energia para um ponto com altura $H = 30 \text{ \AA}$ e raio de 160 \AA é de aproximadamente 1.03 eV . Para um ponto com altura $H = 90 \text{ \AA}$ e com um raio

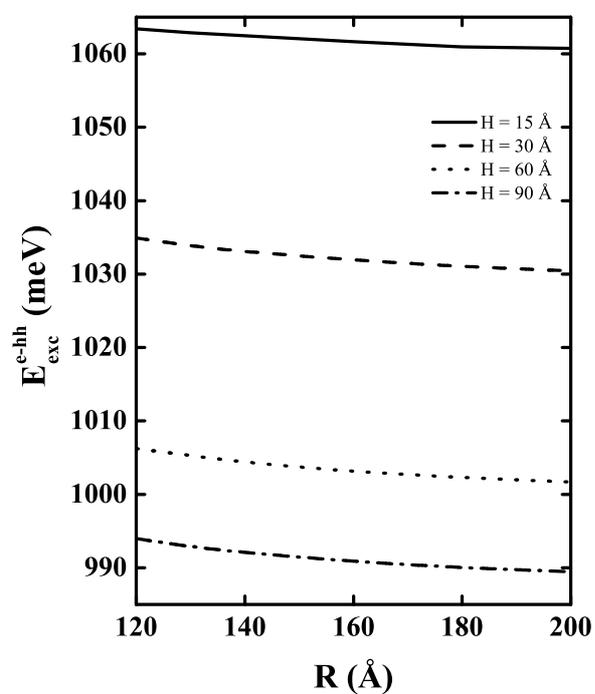


Figura 58: Energia do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I em função do raio do QD, sendo a linha sólida para $H = 15$ Å, a tracejada $H = 30$ Å, a pontilhada $H = 60$ Å, e a tracejada-pontilhada $H = 90$ Å.

de 160 Å a diferença de energia chega a 70 meV em relação a uma altura de $H = 15$ Å.

Na Fig.59 temos o *shift* da energia de ligação e total do *exciton* variando a altura do ponto quântico e considerando o campo magnético $B = 0$ (linhas preta) e $B = 10$ T (linhas vermelhas). A fração molar varia linearmente da base ao topo ($x = 0.15$ e $x = 0.25$ respectivamente). Observamos que as curvas do *stark shift* são assimétricas devido a existência de um dipolo elétrico intrínseco nestes sistemas ($B = 0$ T). Já quando consideramos o efeito do campo magnético paralelo ao plano, o *stark shift* torna-se mais simétrico. Isto ocorre porque quando aplicamos o campo magnético, cria-se um potencial parabólico que faz com que a distância do dipolo diminua, fazendo com que o sistema se torne simétrico. Vimos também uma variação na energia quando consideramos a presença do campo magnético: para $B = 0$ T o *stark shift* da energia de ligação é de aproximadamente 3 meV para um campo elétrico de 8 kV/cm, já para $B = 10$ T nas mesmas condições o *stark shift* é de 0.5 meV. Se comparamos esses valores com o campo elétrico igual a zero, notamos que a energia é menos susceptível ao campo elétrico quando passamos a considerar o campo magnético.

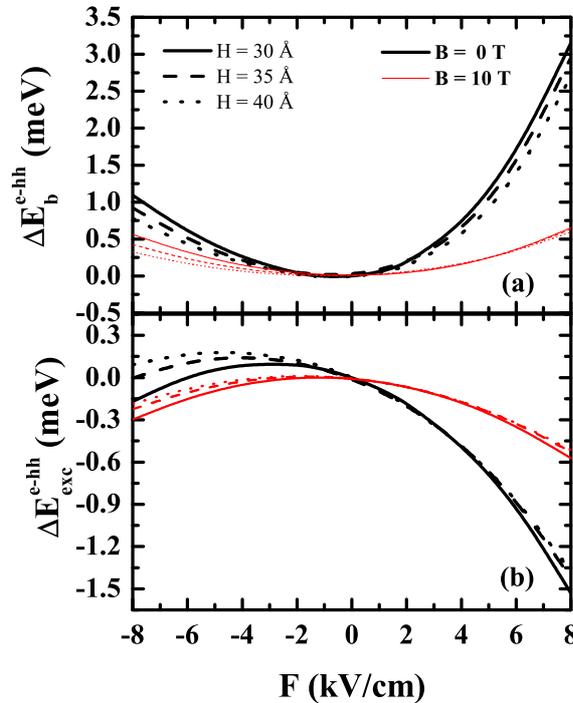


Figura 59: *Shift* da energia de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal tipo-I variando a fração molar da base ao topo, sendo a linha sólida para $H = 30$ Å, a tracejada $H = 35$ Å e a pontilhada $H = 40$ Å para $B = 0$ (linhas preta) e $B = 10$ T (linhas vermelhas).

4.3 Resultados Tipo-II

Nestes sistemas os portadores estão espacialmente localizados em regiões diferentes, formando um *exciton* indireto. Yih-Yin Lin [37] estudou as propriedades eletrônicas e opto-eletrônicas dos pontos quânticos auto-formados $Si/Si_{1-x}Ge_x$ através do método k-p e confirmou que $Si_{1-x}Ge_x$ transforma-se para uma estrutura tipo-II com fração molar maior que 0.25. O estudo da fotoluminescência desses sistemas confirma que o alinhamento de banda nestas estruturas é tipo-II.

O tempo de vida de recombinação em estruturas de banda tipo-II é muito maior que em materiais tipo-I, devido à recombinação espacialmente indireta. Essas características podem fazer dos pontos quânticos tipo-II atrativos para fabricação de dispositivos, como os de memória óptica. Outro aspecto fundamental de grande interesse nos QDs é o deslocamento para o azul do pico de fotoluminescência enquanto se aumenta a potência do laser em QDs do tipo-II.

Nesta Seção estudaremos pontos quânticos elipsoidais $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-II com base circular, onde agora a fração molar usada na hetero-estrutura é $x = 0.30$ [136]. Os *band-offset* usados são $V_e = 47.63$ meV e $V_h = 523.94$ meV. Calculamos a energia do *exciton* no estado fundamental e o *stark shift* considerando campos magnéticos aplicados em pontos quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ elipsoidais tipo-II. Além disso uma comparação entre a geometria dos pontos elipsoidal e piramidal também foi feita.

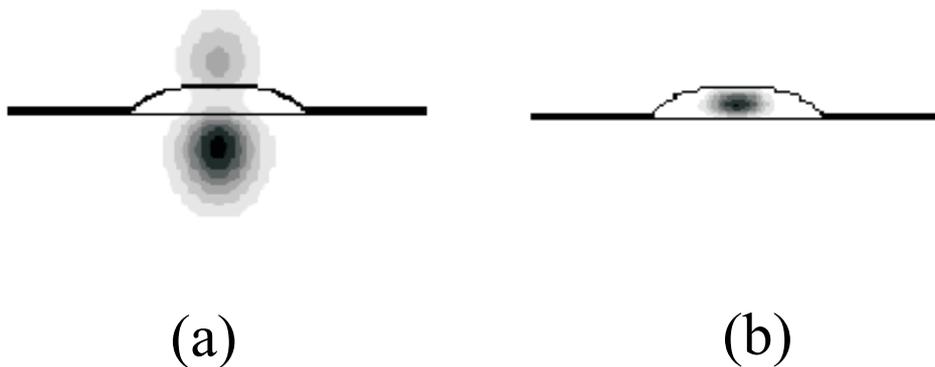


Figura 60: Funções de onda do (a) elétron e (b) buraco numa estrutura elipsoidal tipo-II sobre o potencial do ponto.

A Fig.60 mostra-nos as funções de onda do (a) elétron e (b) buraco pesado (hh) numa estrutura elipsoidal tipo-II sobre o potencial do ponto. Nota-se que o pico inferior apresenta maior amplitude na função de onda do elétron, o que representa que o elétron tem maior probabilidade de ser encontrado neste local. Isso pode ser explicado pelo fato

de que o pico da função de onda do buraco está na base do ponto, pois lá o raio é maior, fazendo com que a interação Coulombiana nessa região seja mais intensa.

Na Fig.61 temos a comparação entre as energias dos pontos quânticos elipsoidais e piramidais. Observamos que para pequenas alturas do ponto a energia é praticamente a mesma, o que é explicado pelo fato de existir uma menor redução do volume do ponto neste caso. À medida que a altura aumenta vai havendo uma maior separação entre as

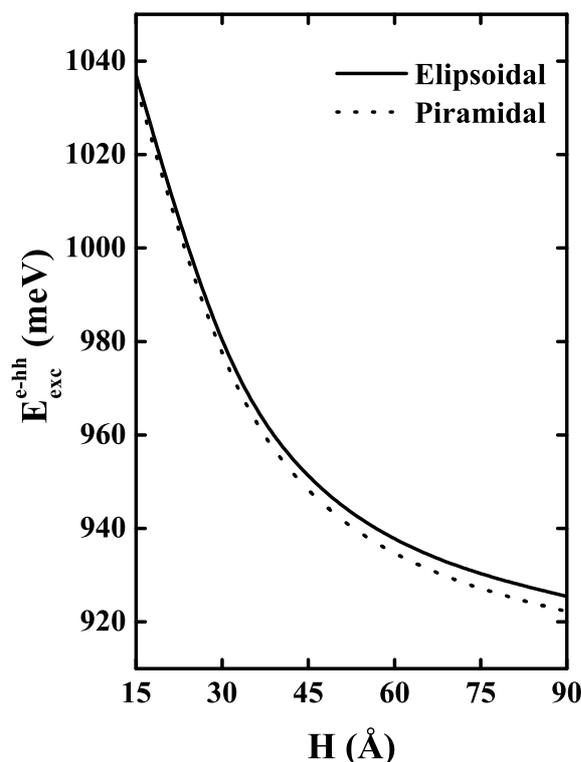


Figura 61: Energia do *exciton* no estado fundamental em pontos quânticos elipsoidais (linha sólida) e piramidais (linha pontilhada).

energias para os dois casos. Porém, na situação onde há maior diferença, esta ainda é de somente 0.4 %, que é desprezível. Neste caso as energias são mais próximas que as energias para os sistemas do tipo-I, o que se deve ao fato de que para sistemas do tipo-I a estrutura geométrica altera significativamente as energias do elétron e do buraco. Já nos sistemas do tipo-II a energia de ligação é pouco alterada e o nível de energia do elétron é zero. Assim, já que a diferença entre as energias nas geometrias analisadas é praticamente insignificante também para sistemas tipo-II, resolvemos simular pontos quânticos elipsoidais em nossos trabalhos.

A Fig.62 nos mostra a energia total do *exciton* elétron-buraco pesado ($e - hh$) no

estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ em função do raio e da altura. Notamos que para uma altura fixa quase não há mudança na energia em relação ao raio. Já quando variamos a altura, observamos que a energia diminui à medida

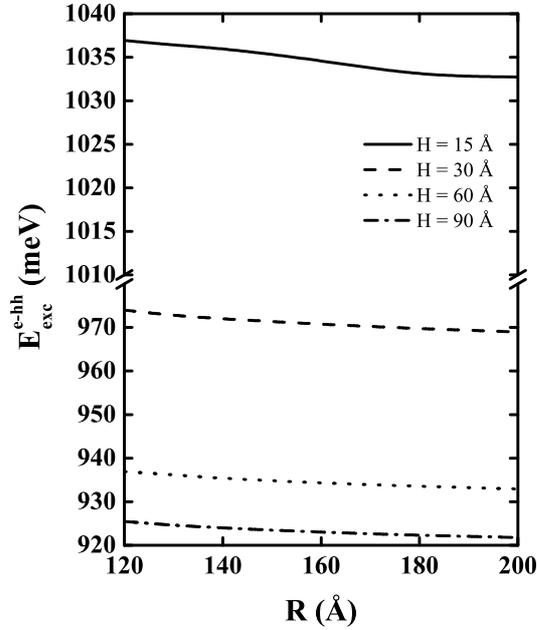


Figura 62: Energia do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II em função do raio do QD, sendo a linha sólida para $H = 15 \text{ \AA}$, a tracejada $H = 30 \text{ \AA}$, a pontilhada $H = 60 \text{ \AA}$, e a tracejada-pontilhada $H = 90 \text{ \AA}$.

que aumentamos a altura do ponto. A energia do *exciton* para um ponto com altura $H = 30 \text{ \AA}$, e raio de 160 \AA , é de aproximadamente 970 meV . Para um ponto com altura $H = 90 \text{ \AA}$ e com um raio de 160 \AA a diferença de energia chega a 110 meV em relação a uma altura de $H = 15 \text{ \AA}$.

Na Fig.63 temos o *shift* da (a) energia de ligação e (b) total do *exciton* no estado fundamental em pontos quânticos tipo-II variando a fração molar da base $x = 0.3$ ao topo $x = 0.5$, para algumas alturas de pontos quânticos: $H = 30 \text{ \AA}$ linha sólida, $H = 35 \text{ \AA}$ linha tracejada e $H = 40 \text{ \AA}$ linha pontilhada. Veremos também como a energia se comporta na presença de campo magnético aplicado, $B = 10 \text{ T}$ (linha vermelha), considerando as mesmas alturas. Observamos uma variação na energia à medida que variamos a altura do ponto e que a presença do campo magnético, assim como no caso do ponto quântico tipo-I, deixa o *stark shift* da energia mais simétrico devido à distância entre as cargas no dipolo elétrico intrínseco diminuir com a existência do potencial parabólico criado pela presença do campo magnético.

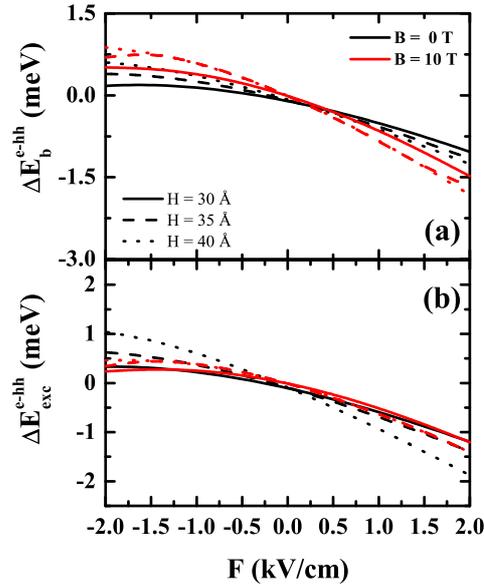


Figura 63: *Shift* da energia de ligação e total do *exciton* no estado fundamental em um ponto quântico elipsoidal tipo-II variando a fração molar do topo a base e variando as alturas, sendo a linha sólida para $H = 30 \text{ \AA}$, a tracejada $H = 35 \text{ \AA}$ e a pontilhada $H = 40 \text{ \AA}$ para $B = 0$ (linhas preta) e $B = 10 \text{ T}$ (linhas vermelhas).

4.4 Pontos Quânticos Duplos

Estudaremos agora, as propriedades eletrônicas em pontos quânticos duplos *InGaAs*/*GaAs*, analisando dois tipos de acoplamento: lado a lado e empilhado (ver Fig.64). Calculamos os espectros de energia para elétrons, onde para tal hetero-estrutura, o *band offset* de condução Q_c é 55 % e a massa efetiva $m_e/m_0 = 0.067$ [133].

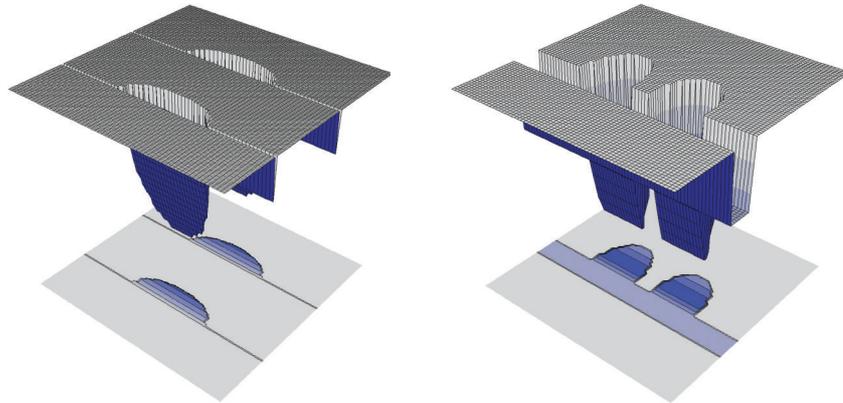


Figura 64: Perfil do potencial do elétron em pontos quânticos duplos para dois casos de acoplamento: (esquerda) empilhados e (direita) lado a lado.

Alguns trabalhos sobre pontos quânticos empilhados têm sido feito, um dos primeiros trabalhos foi feito por Solomon *et al.* [134], onde eles analisaram a fotoluminescência de amostras de *InAs/GaAs* com diferentes números de camadas empilhadas, separadas por camadas de *GaAs* e observaram que a energia de transição diminui com o aumento do número de camadas empilhadas. Baseado em efeito de confinamento quântico, a redução na energia de emissão dos pontos quânticos significa um aumento do seu tamanho com o número de camadas empilhadas. No entanto, análises de microscopia eletrônica de transmissão não mostram um aumento significativo nos tamanhos dos pontos quânticos de maneira que a redução da energia de transição foi atribuída ao acoplamento vertical dos pontos quânticos, pois o acoplamento reduz a energia de transição do estado fundamental. O acoplamento de muitos pontos quânticos levaria também à formação de minibandas de energia.

Ledentsov *et al.* [135] também estudou o efeito de acoplamento de pontos quânticos de *InAs/GaAs*, onde observaram a redução da energia de transição com aumento do número de camadas. Eles também analisaram um conjunto de amostras com três camadas de QDs de *InAs* variando a espessura (d) de *GaAs* que separa as camadas, e notaram um aumento da energia de transição com o afastamento das camadas. Este fato reforça a idéia de acoplamento vertical dos pontos quânticos, já que com aumento das distâncias entre as camadas reduz-se o acoplamento quântico, aumentando assim a energia de transição.

A Fig.65 mostra (a) a energia de confinamento do elétron para estado fundamental (E_0), primeiro (E_1), segundo (E_2), terceiro (E_3), quarto (E_4) e quinto (E_5) estados excitados, em função da distância entre os pontos para o caso de um acoplamento lateral entre os pontos, considerando os raios dos pontos iguais para ambos pontos $R_1 = R_2 = 120$ Å e (b) diferentes raios para cada ponto $R_1 = 120$ Å e $R_2 = 150$ Å. Podemos observar que os pares de energia dos estados $E_0 - E_1$, $E_2 - E_3$ e como também $E_4 - E_5$ degeneram à medida que a distância entre os pontos aumenta, quando consideramos o mesmo raio para ambos os pontos. Entretanto, quando os raios dos pontos são diferentes, essas energias não têm mudanças significativas. Isto ocorre porque quando temos um sistema com dois pontos de raios iguais, ao afastarmos um ponto do outro, isolando cada um, a energia do estado fundamental será a mesma em ambos os pontos, semelhante ao caso do poço quântico (ou a dois átomos de hidrogênio muito afastados, cada elétron ocupa o estado $1s$ de cada átomo, quando aproximamos os dois átomos, devido à interação entre eles, os níveis se separam). Quando os pontos apresentam raios diferentes, no limite onde o acoplamento entre pontos pode ser negligenciado, é como se tivéssemos dois sistemas diferentes, com diferentes energias do estado fundamental para cada um, assim quando

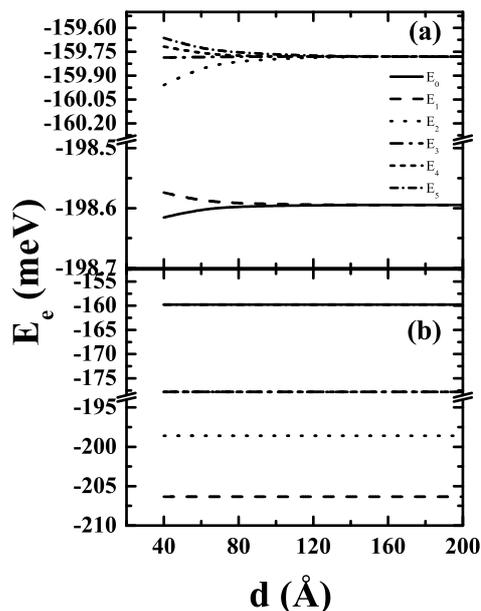


Figura 65: Espectro de energia do elétron em função da distância entre os pontos quânticos para o caso de acoplamento lateral, considerando $R_1 = 120 \text{ \AA}$ e (a) $R_2 = 120 \text{ \AA}$ e (b) 150 \AA .

afastamos esses pontos suas energias não se alteram.

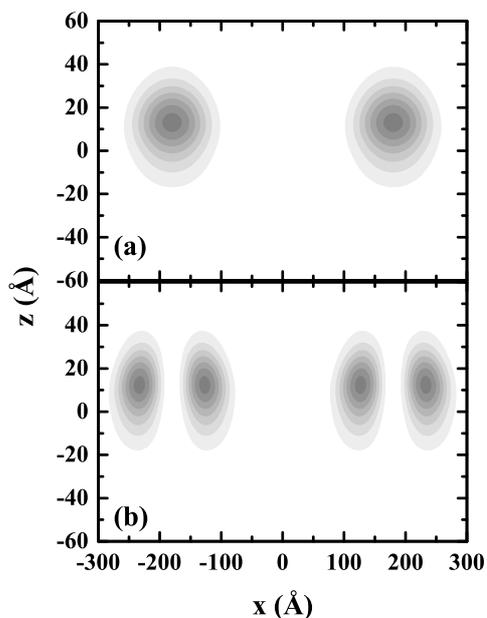


Figura 66: Funções de onda para o (a) estado fundamental e (b) terceiro estado excitado, para o caso de dois pontos acoplados lateralmente, considerando o mesmo raio $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$.

A Fig.66 mostra as funções de onda do (a) estado fundamental e (b) terceiro estado excitado para pontos de raios iguais. As energias do estado fundamental estão no estado s e tem simetria em cada ponto, já para o terceiro estado, temos o estado p que também apresenta simetria em cada ponto, no entanto quando consideramos todo o sistema, ele não apresenta mais simetria circular já que o potencial depende de ϕ .

Na Fig.67 temos as funções de onda do estado fundamental e primeiro estado excitado quando a distância entre os pontos são $d = 40 \text{ \AA}$ e $d = 120 \text{ \AA}$, considerando raios iguais (a) e raios diferentes (b). Quando os raios são iguais $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$, vemos que a probabilidade de encontrar o elétron quando os pontos estão à uma distância de 40 \AA e 120 \AA é a mesma em ambos os pontos independente das distâncias entre os eles. No entanto, quando consideramos raios diferentes $R_1 = 120 \text{ \AA}$ $R_2 = 150 \text{ \AA}$ o elétron tem predileção a um ponto, assim a probabilidade de encontrá-lo em cada ponto é diferente.

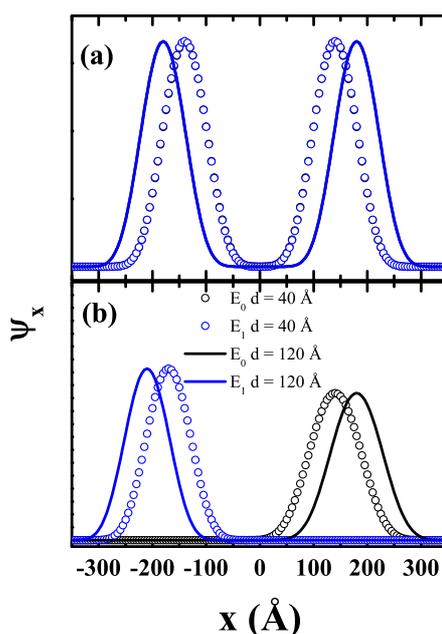


Figura 67: Densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental e primeiro estado excitado para o acoplamento lateral dos pontos quânticos considerando raios iguais e distâncias de $d = 40 \text{ \AA}$ e 120 \AA .

Na Fig.68 temos o espectro de energia do elétron em pontos quânticos acoplados verticalmente em função da distância entre os pontos, considerando (a) raios iguais para ambos os pontos, $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$, e (b) diferentes raios para cada ponto, $R_1 = 120 \text{ \AA}$ e $R_2 = 150 \text{ \AA}$. Temos que os pares de energia para os estados $E_0 - E_1$, $E_2 - E_3$ e $E_4 - E_5$, para o caso dos raios iguais, apresentam as mesmas características do caso dos pontos acoplados lateralmente: os estados tornam-se degenerados à medida que a

distância entre os pontos aumenta. Além disso, os pares de estados $E_2 - E_3$ e $E_4 - E_5$ são degenerados devido a geometria do ponto apresentar base circular (simetria angular), assim tais estados são os autoestados p . O estado fundamental e primeiro estado excitado são ambos estados s apesar, de sofrerem uma variação nas suas energias, degeneram apenas em $d = 90 \text{ \AA}$. No caso dos raios diferentes (b) as energias não se degeneram

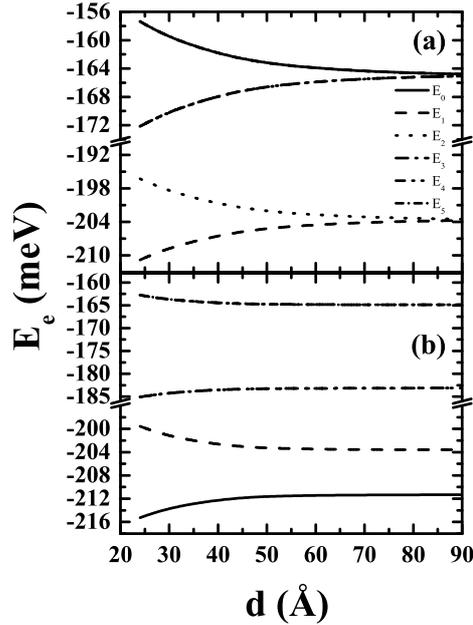


Figura 68: Espectro de energia do elétron em função da distância entre os pontos quânticos para o caso de acoplamento vertical, considerando $R_1 = 120 \text{ \AA}$ e $R_2 = 120 \text{ \AA}$ (a) e 150 \AA (b).

mesmo se afastarmos os pontos, pois no limite em que os pontos estão muito distantes, o sistema se comporta como se tivéssemos dois pontos diferentes, onde um não afeta o outro independentemente da distância entre eles. Apesar disso, os pares de estados $E_2 - E_3$ e $E_4 - E_5$ ainda apresentam degenerescência em suas energias, também devido à simetria circular do sistema em questão. Na Fig.69 temos as funções de onda do (a) estado fundamental e (b) terceiro estado excitado para pontos de raios iguais. As funções de onda do estado fundamental apresentam simetria circular em cada ponto já que estão no estado s , no entanto para o terceiro estado excitado temos o estado p que representa um estado $l = 1$ para o sistema inteiro, não só para um dos pontos, dessa forma os estados $l = \pm 1$ são degenerados (explicando a degenerescência de E_2 e E_3 da Fig.68). A degenerescência das energias E_4 e E_5 pode ser explicada de forma semelhante.

A Fig.70 mostra-nos as funções de onda do estado fundamental e primeiro estado excitado considerando as distâncias entre os pontos quânticos de $d = 25 \text{ \AA}$ e $d = 55 \text{ \AA}$,

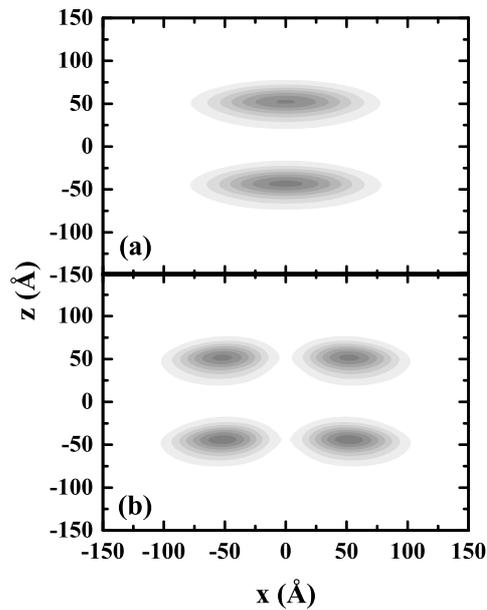


Figura 69: Funções de onda para o (a) estado fundamental e (b) terceiro estado excitado, para o caso de dois pontos acoplados verticalmente, considerando o mesmo raio $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$.

para raios (a) iguais e (b) raios diferentes. Quando os raios são iguais $R_1 = R_2 = 120 \text{ \AA}$, vemos que a probabilidade de encontrar o elétron quando os pontos estão à uma distância de 25 \AA e 55 \AA também é a mesma para ambos os casos. Já quando consideramos raios diferentes $R_1 = 120 \text{ \AA}$ e $R_2 = 150 \text{ \AA}$ a probabilidade de encontrar o elétron em um dos pontos é maior em um dos pontos, e a medida que afastamos um ponto do outro é como se o ponto não “enxergasse” mais o outro, então a probabilidade de encontrar o portador em um dos pontos é máxima.

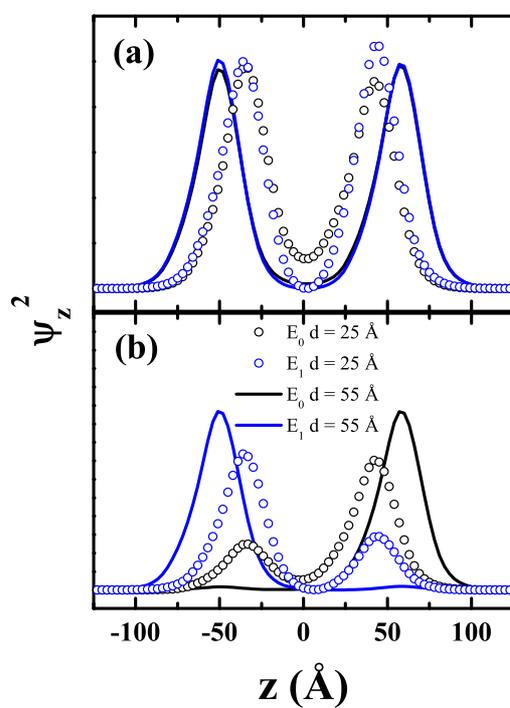


Figura 70: Densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental e primeiro estado excitado para o acoplamento vertical dos pontos quânticos considerando raios (a) iguais e (b) diferentes, e distâncias de $d = 25$ Å e 55 Å.

5 Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho realizamos um estudo das propriedades ópticas em hetero-estruturas de baixa dimensionalidade: poços, pontos e anéis quânticos. No poço quântico, usando o método variacional, calculamos as energias do exciton em hetero-estruturas $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-I e tipo-II sob campos eletromagnéticos aplicados, fazendo uma comparação entre as funções de ondas bidimensional (2D) e tridimensional (3D) quando consideramos o alinhamento de banda tipo-II. Nos pontos quânticos, calculamos os níveis de energia dos portadores e dos excitons usando o método proposto por Degani em sistemas com alinhamento de banda tipo-I e tipo-II. Além disso fizemos um estudo das propriedades eletrônicas em pontos quânticos duplos $InGaAs/GaAs$ analisando o efeito de afastamento entre os pontos considerando dois tipos de acoplamento entre eles. E por último, estudamos alguns fenômenos que ocorrem no plano de um anel quântico sob campos magnéticos aplicados e considerando alguns efeitos, tais como: rugosidade, presença de impurezas, geometria em anéis simples e duplos.

Dentre os principais resultados dos poços quânticos podemos destacar:

- A presença de interfaces graduais altera consideravelmente as propriedades eletrônicas dos poços quânticos quando consideramos pequenas larguras do poço (menores que 120 Å). Para um poço quântico tipo-I, vimos que as flutuações interfaciais são responsáveis por um aumento na energia total do exciton de aproximadamente 21 meV para um poço de 50 Å de largura e 15 Å de espessura interfacial em relação a um poço abrupto. Já para um poço quântico tipo-II, usando uma função 3D e considerando as mesmas condições do sistema tipo-I, o aumento na energia total do exciton é de aproximadamente 32 meV.
- Fizemos uma comparação entre as energias dos excitons para poços quânticos tipo-II usando as funções de ondas 2D e 3D e vimos que a aproximação 3D é mais precisa

quando comparada com a função 2D. Isto acontece porque a função de onda 3D controla tanto a extensão em ρ quanto em z , descrevendo melhor o confinamento do exciton. A energia sofre um aumento de aproximadamente 30% ao consideramos a aproximação 3D quando comparamos com a 2D.

- A energia de ligação e total do exciton para poços quânticos $Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}$ tipo-I sofre um aumento quando consideramos campos elétricos aplicados, o que não é usualmente observado em outros materiais, mas que está de acordo com resultados experimentais. Isto ocorre devido ao *band offset* de condução ser muito pequeno, fazendo com que o *stark shift* dos portadores tenha um pequeno declínio, assim quando somarmos com a energia de ligação a energia total do *exciton* sofre um aumento.
- A aplicação de um campo magnético na direção z afeta bem mais o confinamento do elétron do que o do buraco em sistemas tipo-II. Isto acontece porque o elétron nestes sistemas não está confinado, assim qualquer alteração no sistema é mais sentido pelo elétron.

Dentre os principais resultados dos anéis quânticos podemos destacar:

- Quando consideramos a presença de uma impureza no anel quântico, há uma quebra de simetria no sistema e conseqüentemente as oscilações AB são anuladas. Entretanto, para duas impurezas, as oscilações AB são recuperadas se $z_1 = z_2$, no caso das impurezas positivas e com impurezas negativas as oscilações são recuperadas independente das posições das impurezas.
- Quando consideramos os efeitos geométricos nas oscilações AB, variando as excentricidades, vimos que as amplitudes das oscilações AB são reduzidas à medida que diminuimos a excentricidade.
- A existência de interfaces rugosas é responsável por um considerável deslocamento nas energias dos portadores. Além disso, a degenerescência nos pontos de transição do momento angular nas oscilações AB é levantada quando as superfícies rugosas são consideradas, e no caso especial, as oscilações nas energias do estado fundamental podem ser anuladas.
- Em anéis duplos concêntricos $GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As$ sob um campo magnético aplicado, considerando várias geometrias, vimos que, quando consideramos os anéis

com geometria circular, o aumento da intensidade do campo magnético conduz às oscilações na energia que não apresentam um período bem definido. Entretanto, as oscilações AB são encontradas quando consideramos um dos anéis com formato elíptico, mesmo quando consideramos excentricidades pequenas. Além disso, quando analisamos a periodicidade das oscilações AB em um sistema em que um anel é circular e o outro elipsoidal, observamos que as funções de ondas são espacialmente separadas: o primeiro e segundo estado excitados estão sempre confinados no anel elíptico, enquanto o segundo e o terceiro estado no anel circular, e cada energia apresenta periodicidade diferentes. Quando ambos os anéis são elípticos, quando a excentricidade do anel externo diminui, a energia de cada estado diminui. Para excentricidades pequenas, o estado fundamental e primeiro estado excitado são confinados no anel interno, enquanto o segundo e terceiro estados excitados estão confinados no anel externo. Entretanto, para excentricidades menores que a do anel interno ($\xi < 0.95$), observamos o comportamento oposto: o estado fundamental e primeiro estado excitado estão confinados no anel externo, e o segundo e terceiro estados excitados no anel interno.

Dentre os principais resultados dos pontos quânticos podemos destacar:

- Quando Consideramos uma determinada altura a energia não tem mudança significativa em relação ao raio, no entanto quando variamos a altura vemos mudanças mais intensas nas energias. Para um ponto com altura de 90 Å com raio de 160 Å a diferença de energia chega a 52 meV em relação a uma altura de 15 Å.
- Comparamos as energias dos pontos elipsoidais e piramidais para sistemas tipo-I e tipo-II e observamos que as diferenças entre as geometrias são de 5 % e 1% respectivamente, provando que no nosso sistema a escolha da geometria é irrelevante.
- As curvas do *stark shift* das energia de ligação e total do exciton em pontos quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I e $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II são assimétricas devido à existência de um dipolo elétrico intrínseco nestes sistemas. No entanto, quando consideramos o efeito do campo magnético paralelo ao plano, o *stark shift* torna-se mais simétrico.
- A energia de confinamento do elétron em pontos quânticos acoplados lateralmente, quando consideramos os raios dos pontos iguais degeneram a medida que a distância entre os pontos aumenta. Entretanto, quando os raios dos pontos são diferentes,

essas energias não têm mudanças significativas. Para o caso do acoplamento vertical, o comportamento é semelhante ao dos pontos lado a lado. Para raios iguais em ambos os pontos quânticos, os pares de estados tornam-se degenerados à medida que a distância entre os pontos aumenta, o que não acontece quando consideramos o caso de pontos com raios diferentes.

No decorrer deste trabalho notamos a vasta área ainda ser trabalhada.

- Analisar os estados eletrônicos em fios elípticos tipo-I e tipo-II e aplicar campos elétricos na direção de cada eixo das elipses. Estudaremos também o caso de um fio *free-standing* com uma hetero-estrutura $Si/Si_{1-x}Ge_x$.
- Calcular as auto-energias e a energia do *exciton* em fios quânticos *core-multishell*, com e sem o efeito imagem, e o coeficiente de transmissão e o diagrama $i \times V$ em fios de super-rede.
- Calcular absorção em pontos quânticos, o efeito *stark*, o efeito do afastamento entre pontos quânticos duplos sobre as auto-energias, e a propagação de estados de *spins* nestes sistemas.
- Estudar pontos quânticos duplos com e sem o efeito de campos aplicados e ainda calcular a probabilidade de tunelamento entre pontos quânticos sujeitos a campos elétricos.
- Estudar as propriedades de transporte em pontos, fios e anéis quânticos, considerando um e dois elétrons.

APÊNDICE A – Cálculos da Energia de Ligação do Exciton em Sistemas 3D

No Capítulo de poços quânticos, trabalhamos com dois tipos de funções de onda, uma mais simples, a função de onda bi-dimensional (2D) que foi desenvolvida no próprio Capítulo e outra tri-dimensional (3D) que requer um pouco mais de matemática. Neste Apêndice desenvolveremos os cálculos para o caso da função de onda a tri-dimensional.

Nosso sistema consiste de um par elétron-buraco confinado em um poço quântico, interagindo via potencial Coulombiano sob a ação de campos eletromagnéticos. O Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\hat{H}_{exc} = \underbrace{\hat{T}_e + \hat{V}_e}_{\hat{H}_e} + \underbrace{\hat{T}_h + \hat{V}_h}_{\hat{H}_h} + \underbrace{\hat{T}_{eh} + \hat{V}_{eh}}_{\hat{H}_{eh}}, \quad (\text{A.1})$$

com H_e e H_h sendo os Hamiltonianos dos portadores, elétron e buraco, respectivamente e H_{eh} o Hamiltoniano que descreve a interação do exciton.

A equação de Schrödinger que descreve o sistema é

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z_i} \left(\frac{1}{m_i(z_i)} \frac{\partial}{\partial z_i} \right) \right] + V_i(z_i) \mp eFz_{e(h)} - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \nabla_{\rho^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8\mu_{\parallel}} \right\} \Psi_{exc} = E_{exc} \Psi_{exc}, \quad (\text{A.2})$$

assumindo que a função de onda do exciton pode ser desacoplada

$$\Psi_{exc}(\vec{r}_e - \vec{r}_h) = \psi_e(z_e) \psi_h(z_h) \phi_{3D}(\rho, z_e - z_h), \quad (\text{A.3})$$

com

$$\phi_{3D}(\rho, z_e - z_h) = C \exp(\rho^2 + (z_e - z_h)^2)^{1/2} / \alpha, \quad (\text{A.4})$$

onde C é uma constante. Aplicando o operador no produto de funções

$$\widehat{H}(fg) = \widehat{T}(fg) + \widehat{V}(fg), \quad (\text{A.5})$$

com

$$\widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (\text{A.6})$$

logo

$$\widehat{T}(fg) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} fg, \quad (\text{A.7})$$

assim

$$\begin{aligned} \widehat{T}(fg) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} fg \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} g + 2 \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial g}{\partial z} + f \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} \right] \\ &= (\widehat{T}f)g - \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial g}{\partial z} \right) + f(\widehat{T}g). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Aplicando no Hamiltoniano

$$\widehat{H}(fg) = \left[(\widehat{T} + \widehat{V})f \right] g - \frac{\hbar^2}{m} \left[\frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial g}{\partial z} \right] + f(\widehat{T}g). \quad (\text{A.9})$$

Para o elétron

$$\widehat{H}_e \Psi(\vec{r}_e - \vec{r}_h) = \psi_h(z_h) \widehat{H}_e [\psi_e(z_e) \phi_{3D}(\rho, z_e - z_h)], \quad (\text{A.10})$$

logo

$$\begin{aligned} \widehat{H}_e \Psi(\vec{r}_e - \vec{r}_h) &= \psi_h(z_h) \widehat{H}_e [\psi_e(z_e) \phi_{3D}] \\ &= \psi_h(z_h) \left[\widehat{H}_e \psi_e(z_e) \phi_{3D} - \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{\partial}{\partial z_e} \frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} + \widehat{T}_e \phi_{3D} \psi_e(z_e) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Para o buraco

$$\begin{aligned}\widehat{H}_h\Psi(\vec{r}_e - \vec{r}_h) &= \psi_e(z_e)\widehat{H}_h[\psi_h(z_h)\phi_{3D}(\rho, z_e - z_h)] \\ &= \psi_e(z_e)\left[\underbrace{\widehat{H}_h\psi_h(z_h)}_{E_h\psi_h(z_h)}\phi_{3D} - \frac{\hbar^2}{m_h}\frac{\partial}{\partial z_h}\frac{\partial}{\partial z_h}\phi_{3D} + \widehat{T}_h\phi_{3D}\psi_h(z_h)\right]\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

E para o par elétron-buraco

$$\widehat{H}_{eh}\Psi(\vec{r}_e - \vec{r}_h) = \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\widehat{T}_{eh}\phi_{3D} + \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\phi_{3D}\widehat{V}_{eh}, \quad (\text{A.13})$$

sendo

$$\widehat{T}_{eh} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right]; \quad \widehat{V}_{eh} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{r^2 + (z_e - z_h)^2}}. \quad (\text{A.14})$$

O Hamiltoniano total do sistema será

$$(\widehat{H}_e + \widehat{H}_h + \widehat{H}_{eh})\Psi_{exc}(\vec{r}_e - \vec{r}_h) = E_{exc}\Psi_{exc}(\vec{r}_e - \vec{r}_h), \quad (\text{A.15})$$

assim

$$\begin{aligned}(\widehat{H}_e + \widehat{H}_h + \widehat{H}_{eh})\Psi_{exc}(\vec{r}_e - \vec{r}_h) &= \left\{\psi_h(z_h)\phi_{3D}\widehat{H}_e - \frac{\hbar^2}{m_e}\psi_h(z_h)\frac{\partial}{\partial z_e}\phi_{3D}\frac{\partial}{\partial z_e} + \psi_h(z_h)\times\right. \\ &\quad \left.(\widehat{T}_e\phi_{3D}) + E_h\psi_h(z_h)\phi_{3D} - \frac{\hbar^2}{m_h}\frac{\partial}{\partial z_e}\psi_h(z_h)\frac{\partial}{\partial z_e}\phi_{3D} +\right. \\ &\quad \left.\psi_h(z_h)(\widehat{T}_h\phi_{3D})\psi_h(z_h)(\widehat{T}_h\phi_{3D}) + \psi_h(z_h)\phi_{3D}\widehat{V}_{eh}\right\}\psi_e(z_e) \\ &= E_{exc}\psi_h(z_h)\phi_{3D}\psi_e(z_e),\end{aligned}\quad (\text{A.16})$$

dividindo ambos os membros por $\psi_h(z_h)\phi_{3D}$

$$\begin{aligned}\left\{\widehat{H}_e - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{\phi_{3D}}\frac{\partial}{\partial z_e}\phi_{3D}\frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{1}{\phi_{3D}}(\widehat{T}_e\phi_{3D}) + E_h - \frac{\hbar^2}{m_h}\frac{1}{\psi_h(z_h)}\frac{\partial}{\partial z_h}\frac{1}{\phi_{3D}}\frac{\partial}{\partial z_h}\phi_{3D} +\right. \\ \left. + \frac{1}{\phi_{3D}}(\widehat{T}_h\phi_{3D}) + \frac{1}{\phi_{3D}}(\widehat{T}_{eh}\phi_{3D}) + \widehat{V}_{eh}\right\}\psi_e(z_e) = E_{exc}\psi_e(z_e),\end{aligned}\quad (\text{A.17})$$

temos

$$\left\{ \widehat{H}_e - \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{1}{\phi_{3D}} \frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} \frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{1}{\phi_{3D}} (\widehat{T}_e + \widehat{T}_h + \widehat{T}_{eh}) \phi_{3D} + E_h + \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2}{m_h} \frac{1}{\psi_h(z_h)} \frac{\partial}{\partial z_h} \frac{1}{\phi_{3D}} \frac{\partial}{\partial z_h} \phi_{3D} + \widehat{V}_{eh} \right\} \psi_e(z_e) = E_{exc} \psi_e(z_e), \quad (\text{A.18})$$

multiplicando ambos os membros por $(\psi_h(z_h)\phi_{3D})^2$ e integrando em ρ e z_h

$$\begin{aligned} & \widehat{H}_e \psi_e(z_e) \underbrace{\int (\psi_h(z_h)\phi_{3D})^2 dz_h \rho d\rho}_{I_1} + \frac{\partial}{\partial z_e} \psi_e(z_e) \left[\underbrace{\frac{\hbar^2}{m_e} \int \psi_h(z_h)\phi_{3D} \frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} dz_h \rho d\rho}_{I_2} \right] \\ & + \psi_e(z_e) \left[\underbrace{\int (\psi_h(z_h))^2 \phi_{3D} (\widehat{T}_e + \widehat{T}_h + \widehat{T}_{eh}) \phi_{3D} dz_h \rho d\rho}_{I_3} \right] + \\ & + \psi_e(z_e) \left[-\frac{\hbar^2}{m_h} \underbrace{\int \psi_h(z_h) \frac{\partial}{\partial z_h} \psi_h(z_h) \phi_{3D} \frac{\partial}{\partial z_h} \phi_{3D} dz_h \rho d\rho}_{I_4} \right] + \psi_e(z_e) \underbrace{\int \widehat{V}_{eh} (\psi_h(z_h)\phi_{3D})^2 dz_h \rho d\rho}_{I_5} \\ & + \psi_e(z_e) \left[\underbrace{E_h \int (\psi_h(z_h)\phi_{3D})^2 dz_h \rho d\rho}_{I_1} \right] = \psi_e(z_e) \left[\underbrace{E_{exc} \int (\psi_h(z_h)\phi_{3D})^2 dz_h \rho d\rho}_{I_1} \right], \end{aligned}$$

teremos

$$\widehat{H}_e \psi_e I_1 - \frac{\partial}{\partial z_e} \psi_e \left[\frac{\hbar^2}{m_e} I_2 \right] + \psi_e I_3 - \psi_e \left[\frac{\hbar^2}{m_h} I_4 \right] + \psi_e I_5 + \psi_e E_h I_1 = \psi_e E_{exc} I_1, \quad (\text{A.19})$$

dividindo ambos os lados por I_1

$$\widehat{H}_e \psi_e(z_e) - \frac{\partial}{\partial z_e} \psi_e(z_e) \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{I_2}{I_1} \right) + \left(\frac{I_3 + I_5}{I_1} \right) \psi_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{m_h} \left(\frac{I_4}{I_1} \right) + E_h \psi_e(z_e) = \psi_e(z_e) E_{exc}. \quad (\text{A.20})$$

Para simplificar nosso problema vamos resolver a equação acima por partes, assim começando por I_1 , teremos

$$I_1 = \int (\psi_h(z_h)\phi_{3D})^2 dz_h \rho d\rho = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 dz_h \underbrace{\int_0^{\infty} \phi_{3D}^2 \rho d\rho}_{I_{11}}, \quad (\text{A.21})$$

com

$$I_{11} = \int_0^{\infty} \phi_{3D}^2 \rho d\rho = \int_0^{\infty} e^{\frac{-2}{\alpha} \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \rho d\rho = \int_0^{\infty} e^{\frac{-2|z_e - z_h|}{\alpha} \sqrt{\left(\frac{\rho}{z_e - z_h}\right)^2 + 1}} \rho d\rho \quad (\text{A.22})$$

chamando

$$x^2 = 1 + \left(\frac{\rho}{z_e - z_h}\right)^2, \quad (\text{A.23})$$

com

$$k = \frac{2|z_e - z_h|}{\alpha}; \quad |z_e - z_h| = k\alpha/2, \quad (\text{A.24})$$

logo

$$x^2 = 1 + \left(\frac{2}{k\alpha}\right)^2 \rho^2, \quad (\text{A.25})$$

derivando

$$2x dx = \left(\frac{2}{k\alpha}\right) 2\rho d\rho, \quad (\text{A.26})$$

$$\rho d\rho = \left(\frac{k\alpha}{2}\right) x dx, \quad (\text{A.27})$$

nos limites $\rho \rightarrow 0; x \rightarrow 1$ e $\rho \rightarrow \infty; x \rightarrow \infty$, substituindo em I_{11} temos

$$I_{11} = \int_1^{\infty} \exp(-kx) \left(\frac{k\alpha}{2}\right)^2 x dx = \left(\frac{k\alpha}{2}\right)^2 \int_1^{\infty} \exp(-kx) x dx. \quad (\text{A.28})$$

Da tabela de integrais temos que

$$V_N(k) = \int_1^{\infty} \exp(-kx) x^N dx = \frac{e^{-k}}{k} + \frac{N}{k} V_{N-1}(k), \quad (\text{A.29})$$

para $N = 0$

$$V_0(k) = \int_1^{\infty} \exp(-kx) x^0 dx = \frac{e^{-k}}{k}, \quad (\text{A.30})$$

assim voltando para I_{11} , teremos

$$I_{11} = \left(\frac{k\alpha}{2}\right)^2 V_1(k), \quad (\text{A.31})$$

$$I_{11} = \left(\frac{k\alpha}{2}\right)^2 \left[\frac{e^{-k}}{k} + \frac{1}{k} \frac{e^{-k}}{k} \right] = \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 (1+k) e^{-k}, \quad (\text{A.32})$$

logo

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 I_{11} dz_h. \quad (\text{A.33})$$

Para encontrarmos I_2

$$I_2 = \int |\psi_h(z_h)|^2 \phi_{3D} \frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} dz_h \rho d\rho = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 dz_h \underbrace{\int_0^{\infty} \phi_{3D} \frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} \rho d\rho}_{I_{21}}, \quad (\text{A.34})$$

com

$$\frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} = \frac{\partial}{\partial z_e} e^{(-1/\alpha \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2})} = \underbrace{\exp^{(-1/\alpha \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2})}}_{\phi_{3D}} \frac{\partial}{\partial z_e} \left[-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}{\alpha} \right] \quad (\text{A.35})$$

$$\frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} = \phi_{3D} \left(-\frac{1}{\alpha} \right) \frac{1}{2} \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2} 2(z_e - z_h) = \phi_{3D} \left(-\frac{1}{\alpha} \right) \frac{z_e - z_h}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (\text{A.36})$$

assim

$$I_{21} = - \left(\frac{z_e - z_h}{\alpha} \right) \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{\phi_{3D}^2(\rho, z_e - z_h)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \rho d\rho}_{I_{211}}, \quad (\text{A.37})$$

de forma análogo ao que foi feito para I_{11} , fazendo mudança de variável, encontraremos

I_{211} em função de k

$$I_{211} = \int_0^{\infty} \frac{\phi_{3D}^2(\rho, z_e - z_h)}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \rho d\rho = \frac{\alpha}{2} e^{-k}, \quad (\text{A.38})$$

logo

$$I_{21} = \left(-\frac{z_e - z_h}{\alpha} \right) \frac{\alpha}{2} e^k, \quad (\text{A.39})$$

assim

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 I_{21} dz_h. \quad (\text{A.40})$$

Lembrando de alguns artifícios matemáticos para simplificar nossas contas futuras, temos

$$J_{MN} = \int_0^{\infty} \frac{\phi_{3D}^2}{R^N} \rho^M \rho d\rho, \quad (\text{A.41})$$

com $M = 0, 2, 4 \dots$ e $N = 1, 2, 3, \dots$. Com

$$R = \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2} = |z_e - z_h| \sqrt{1 + \underbrace{\frac{\rho^2}{(z_e - z_h)^2}}_x}, \quad (\text{A.42})$$

assim

$$x^2 = 1 + \rho^2 / (z_e - z_h)^2; \rho^2 = (z_e - z_h)^2 (x^2 - 1) = (\alpha k / 2)^2 (x^2 - 1). \quad (\text{A.43})$$

Encontrando quem é $[\phi_{3D}(\rho, z_e - z_h)]^2$

$$\phi_{3D}^2 = e^{-2R/\alpha} = e^{-2|z_e - z_h|x/\alpha} = e^{-kx} \quad (\text{A.44})$$

e substituindo na equação (A.41)

$$J_{MN} = \int_1^{\infty} e^{-kx} \frac{[(\alpha k / 2)^2 (x^2 - 1)]^{M/2} (\alpha k / 2)^2}{[(\alpha k / 2) x]^N} x dx, \quad (\text{A.45})$$

temos

$$J_{MN} = \frac{\left(\frac{\alpha k}{2}\right)^{2M/2} \left(\frac{\alpha k}{2}\right)^2}{\left(\frac{\alpha k}{2}\right)^N} \int_1^{\infty} \frac{e^{-kx} (x^2 - 1)^{M/2}}{x^N} x dx = \left(\frac{\alpha k}{2}\right)^{M-N+2} \int_1^{\infty} \frac{e^{-kx} (x^2 - 1)^{M/2}}{x^N} x dx \quad (\text{A.46})$$

Para $M = 0$

$$J_{0N} = \left(\frac{\alpha k}{2}\right)^{-N+2} \underbrace{\int_1^{\infty} e^{-kx} x^{-(N-1)} dx}_{\xi} \quad (\text{A.47})$$

chamando

$$\xi_w = \int_1^{\infty} e^{-kx} x^{-w} dx, \quad (\text{A.48})$$

usando derivadas por partes

$$\xi_w = \int_1^{\infty} e^{-kx} x^{-w} dx = -e^{-kx} \frac{1}{-w+1} + \frac{k}{-w+1} \underbrace{\int_1^{\infty} e^{-kx} x^{-(w-1)} dx}_{\xi_{w-1}} = \frac{1}{w+1} [e^{-kx} - k\xi_{w-1}], \quad (\text{A.49})$$

logo

$$J_{0N} = (\alpha k/2)^{-N+2} \xi_{N-1}. \quad (\text{A.50})$$

Para $M = 2$

$$J_{2N} = (\alpha k/2)^{-N+4} \int_1^{\infty} e^{-kx} x^{-(2-1)} x^{-(N-1)} dx = (\alpha k/2)^{-N+4} \{\xi_{N-3} - \xi_{N-1}\}. \quad (\text{A.51})$$

Para $M = 0$ e $N = 1$

$$J_{01} = (\alpha k/2)^{-1+2} \xi_0 = (\alpha k/2) e^{-k}/k, \quad (\text{A.52})$$

com $\xi_0 = e^{-k}/k$.

Agora para $M = 0$ e $N = 2$

$$J_{02} = (\alpha k/2)^{-2+2} \xi_{2-1} = (\alpha k/2)^0 \xi_1(k) = \xi_1(k). \quad (\text{A.53})$$

Para $M = 0$ e $N = 3$

$$J_{03} = (\alpha k/2)^{-3+2} \xi_2(k) = (\alpha k/2)^{-1} [e^{-k} - k\xi_1(k)] = (2/\alpha k) [e^{-k} - k\xi_1(k)]. \quad (\text{A.54})$$

Para $M = 2$ e $N = 2$

$$J_{22} = (\alpha k/2)^{-2+4} [\xi_1 - \xi_1(k)]. \quad (\text{A.55})$$

Para $M = 0$ e N ,

$$\xi_{-N} = \xi_N = \int_1^{\infty} e^{-kx} x^{-N} dx = \frac{e^{-k}}{k} + \frac{N}{k} \xi_{N-1} = \frac{1}{k} [e^{-k} + N\xi_{N-1}]. \quad (\text{A.56})$$

Para $M = 0$ e $N = 1$

$$\xi_{-1} = \frac{1}{k} [e^{-k} + \xi_0] = e^{-k}/k(1 + k). \quad (\text{A.57})$$

$M = 2$ e $N = 2$

$$J_{22} = (\alpha k/2)^2 \left[\frac{e^{-k}}{k^2} (1 + k) - \xi_1(k) \right] = (\alpha/2)^2 [e^{-k} (1 + k) - k^2 \xi_1(k)]. \quad (\text{A.58})$$

$M = 0$ e $N = 0$

$$J_{00} = (\alpha k/2)^2 \left[\frac{e^{-k}}{k^2} (1 + k) - \right] = (\alpha/2)^2 e^{-k} (1 + k). \quad (\text{A.59})$$

Assim sintetizando

$$\begin{aligned}
 J_{MN} &= \int_0^{\infty} \frac{\phi_{3D}^2}{R^N} \rho^M \rho d\rho; \\
 J_{00} &= \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 e^{-k} (1+k); \\
 J_{01} &= \left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{-k}; \\
 J_{02} &= \xi_1(k); \\
 J_{03} &= \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 [e^{-k} (1+k) - k^2 \xi_1(k)] \\
 J_{22} &= (\alpha/2)^2 [e^{-k} (1+k) - k^2 \xi_1(k)].
 \end{aligned}$$

Agora sim, podemos retornar a equação A.41, com

$$\frac{\partial}{\partial z_e} \phi_{3D} = -\frac{(z_e - z_h)}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} = -\frac{\rho}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R}, \quad (\text{A.60})$$

e

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \phi_{3D} &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} + \frac{1}{\alpha} (z_e - z_h)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^3} + \frac{1}{\alpha^2} (z_e - z_h)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^2} \\
 &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} + \frac{1}{\alpha} \phi_{3D} \frac{\rho^2}{R^3}, \quad (\text{A.61})
 \end{aligned}$$

voltando ao valor de I_1 e I_2

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 I_{11} dz_h = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 J_{00} dz_h = \frac{\alpha^2}{4} (T_1 + T_2), \quad (\text{A.62})$$

com $I_{11} = J_{00}$, e

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 I_{21} dz_h, \quad (\text{A.63})$$

com

$$I_2 = -\left[\frac{z_e - z_h}{\alpha}\right] \underbrace{\frac{\alpha}{2} e^{-k}}_{J_{01}}, \quad (\text{A.64})$$

logo

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \left[-\frac{z_e - z_h}{\alpha}\right] J_{01} dz_h = \frac{\alpha}{4} T_3. \quad (\text{A.65})$$

Encontrando I_3

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \phi_{3D} (\widehat{T}_e + \widehat{T}_h + \widehat{T}_{eh}) \phi_{3D} dz_h \rho d\rho \quad (\text{A.66})$$

assim

$$\begin{aligned} I_3 = & \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \phi_{3D} \widehat{T}_e \phi_{3D} dz_h \rho d\rho + \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \phi_{3D} \widehat{T}_h \phi_{3D} dz_h \rho d\rho \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \phi_{3D} \widehat{T}_{eh} \phi_{3D} dz_h \rho d\rho \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

substituindo os valores de \widehat{T}_e , \widehat{T}_h e \widehat{T}_{eh}

$$\begin{aligned} I_3 = & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \int_0^{\infty} \left[-\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} + \frac{1}{\alpha} (z_e - z_h)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^3} + \frac{1}{\alpha^2} (z_e - z_h)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^2} \right] \phi_{3D} dz_h \rho d\rho \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_h} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \int_0^{\infty} \left[-\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} + \frac{1}{\alpha} (z_e - z_h)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^3} + \frac{1}{\alpha^2} (z_e - z_h)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^2} \right] \phi_{3D} dz_h \rho d\rho \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_\mu} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \int_0^{\infty} \left[-\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} + \frac{1}{\alpha} r^2 \frac{\phi_{3D}}{R^3} + \frac{1}{\alpha^2} r^2 \frac{\phi_{3D}}{R^2} - \frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} \right] \phi_{3D} dz_h \rho d\rho \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

como

$$\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} = \frac{1}{\mu} \quad (\text{A.69})$$

logo

$$\begin{aligned} I_3 = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_\perp} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \int_0^{\infty} \underbrace{\left[-\frac{1}{\alpha} J_{01} + \frac{1}{\alpha} (z_e - z_h)^2 J_{03} + \frac{1}{\alpha^2} (z_e - z_h)^2 J_{02} \right]}_{A_1} dz_h \\ & - \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \int_0^{\infty} \underbrace{\left[-\frac{1}{\alpha} J_{01} + \frac{1}{\alpha} J_{23} + \frac{1}{\alpha^2} J_{22} \right]}_{B_1} dz_h - \frac{1}{\alpha} J_{01} \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

com

$$\begin{aligned} A_1 & = -\frac{1}{\alpha} J_{01} + \alpha \left(\frac{k}{2} \right)^2 J_{03} + \left(\frac{k}{2} \right)^2 J_{02} = -\frac{1}{\alpha} \left(\frac{\alpha}{2} e^{-k} \right) + \alpha \left(\frac{k}{2} \right)^2 \left(\frac{2}{\alpha} e^{-k} - \xi_1(k) \right) \\ A_1 & = -\frac{1}{2} e^{-k} (1 - k) - \frac{k^2}{4} \xi_1(k), \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

e

$$\begin{aligned}
 B_1 &= -\frac{2}{\alpha}J_{01} + \frac{1}{\alpha}J_{23} + \frac{1}{\alpha^2}J_{22} \\
 B_1 &= -\frac{2}{\alpha}\left(-\frac{\alpha}{2}e^{-k}\right) + \frac{1}{\alpha}\left[\frac{2}{\alpha}e^{-k}(1-k) + k^2\xi_1(k)\right] + \frac{1}{\alpha^2}\left[\frac{\alpha^2}{4}e^{-k}(1+k) - k^2\xi_1(k)\right] \\
 B_1 &= \frac{1}{4}(1+k)e^{-k}\frac{k^2}{4}\xi_1(k), \tag{A.72}
 \end{aligned}$$

assim substituindo em A.70 teremos

$$\begin{aligned}
 I_3 &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\left[-\frac{1}{2}e^{-k}(1-k) - \frac{k^2}{4}\xi_1(k)\right]dz_h + \\
 &\quad -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\left[-\frac{1}{4}e^{-k}(1+k) + \frac{k^2}{4}\xi_1(k)\right]dz_h, \tag{A.73}
 \end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned}
 I_3 &= -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\perp}}\right)\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\frac{k^2}{4}\xi_1(k)dz_h}_Q + \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\frac{1}{4}(1+k)e^{-k}dz_h}_{I_1/\alpha^2} \\
 &\quad + \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\frac{1}{2}(1-k)e^{-k}dz_h}_F, \tag{A.74}
 \end{aligned}$$

e assim

$$I_3 = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\perp}}\right)Q + \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}}I_1/\alpha^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}}F. \tag{A.75}$$

Agora encontrando I_4

$$\begin{aligned}
 I_4 &= \int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\frac{\partial}{\partial z_h}\psi_h(z_h)\phi_{3D}\frac{\partial}{\partial z_h}\phi_{3D}dz_h\rho d\rho = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z_h}|\psi_h(z_h)|^2\frac{1}{2}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial z_h}\phi_{3D}^2\rho d\rho}_{G}dz_h \\
 I_4 &= \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial z_h}|\psi_h(z_h)|^2Gdz_h = -\frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\frac{\partial}{\partial z_h}Gdz_h = -\frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(z_h)|^2\frac{\partial}{\partial z_h}Gdz_h, \tag{A.76}
 \end{aligned}$$

resolvendo a derivada de G na equação acima

$$\frac{\partial}{\partial z_h} G = \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial z_h} \phi_{3D} \rho d\rho = \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial z_h} \left(2\phi_{3D} \frac{\partial}{\partial z_h} \phi_{3D} \right) \rho d\rho = 2 \underbrace{\int_0^\infty \left[\left(\frac{\partial}{\partial z_h} \phi_{3D} \right)^2 + \phi_{3D} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \phi_{3D} \right] \rho d\rho}_{C_1}, \quad (\text{A.77})$$

com

$$\left(\frac{\partial}{\partial z_h} \phi_{3D} \right)^2 = \frac{|z_e - z_h| \phi_{3D}^2}{\alpha^2 R^2} = \left(\frac{k}{2} \right)^2 \frac{\phi_{3D}^2}{R^2} = -\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}}{R} + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\alpha k}{2} \right)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^3} + \frac{1}{\alpha^2} \left(\frac{\alpha k}{2} \right)^2 \frac{\phi_{3D}}{R^2}, \quad (\text{A.78})$$

e

$$\begin{aligned} C_1 &= \int_0^\infty \left[\left(-\frac{1}{\alpha} \frac{\phi_{3D}^2}{R} + \alpha \left(\frac{k}{2} \right)^2 \frac{\phi_{3D}^2}{R^3} + \left(\frac{k}{2} \right)^2 \frac{\phi_{3D}^2}{R^2} + \left(\frac{k}{2} \right)^2 \frac{\phi_{3D}^2}{R^2} \right) \right] \rho d\rho \\ &= -\frac{1}{\alpha} J_{01} + \alpha \left(\frac{k}{2} \right)^2 J_{03} + 2 \left(\frac{k}{2} \right)^2 J_{02}, \end{aligned} \quad (\text{A.79})$$

substituindo na equação A.76

$$\begin{aligned} I_4 &= -\frac{1}{4} \int_{-\infty}^\infty 2 |\psi_h(z_h)|^2 \left[-\frac{1}{\alpha} J_{01} + \alpha \left(\frac{k}{2} \right)^2 J_{03} + 2 \left(\frac{k}{2} \right)^2 J_{02} \right] dz_h \\ &= \int_{-\infty}^\infty |\psi_h(z_h)|^2 \underbrace{\left[\frac{1}{2\alpha} J_{01} - \frac{\alpha}{2} \left(\frac{k^2}{2} \right) J_{03} + \left(\frac{k^2}{2} \right) J_{02} \right]}_L dz_h, \end{aligned} \quad (\text{A.80})$$

com L sendo

$$L = \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{\alpha}{2} e^{-k} \right) - \left[\frac{\alpha}{2} \left(\frac{k^2}{2} \right) \frac{2}{\alpha} \frac{e^{-k}}{k} - \frac{2}{\alpha} \xi_1(k) \right] - \left(\frac{k^2}{2} \right) \xi_1(k) = \frac{1}{4} (1-k) e^{-k}, \quad (\text{A.81})$$

substituindo em A.80, temos

$$I_4 = \int_{-\infty}^\infty |\psi_h(z_h)|^2 \frac{1}{4} (1-k) e^{-k} = \frac{F}{2}. \quad (\text{A.82})$$

Para encontrarmos I_5

$$\begin{aligned} I_5 &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \left[\int_0^{\infty} \frac{\phi_{3D}^2}{R} \rho d\rho \right] dz_h = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 J_{01} dz_h, \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \frac{\alpha}{2} T_1. \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

Agora que já sabemos quem é I_1 , I_2 , I_3 , I_4 e I_5 podemos voltar para a equação de Schrödinger

$$\widehat{H}_e \psi_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{I_2}{I_1} \right) \frac{\partial}{\partial z_e} + \left[\frac{I_1 - \hbar^2/m_h I_4 + I_5}{I_1} + E_h \right] \psi_e(z_e) = E_{exc} \psi_e(z_e), \quad (\text{A.84})$$

substituindo os valores encontrados

$$\begin{aligned} \widehat{H}_e \psi_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{-\alpha/4T_3}{\alpha^2/4(T_1 + T_2)} \right) \frac{\partial}{\partial z_e} + \left[\frac{-\hbar^2/m_h F/2 - \hbar^2/2(1/\mu - 1/\mu_{\perp})Q + \hbar^2/m_h \alpha^2 I_1}{\alpha^2/4(T_1 + T_2)} \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2/\mu_{\perp} F (-e^2/4\pi\epsilon_0 \alpha/2T_1)}{\alpha^2/4(T_1 + T_2)} + E_h \right] \psi_e(z_e) = E_{exc} \psi_e(z_e), \end{aligned} \quad (\text{A.85})$$

logo

$$\begin{aligned} \widehat{H}_e \psi_e(z_e) + \frac{\hbar^2}{2m_e \alpha} \left(\frac{T_3}{T_1 + T_2} \right) \frac{\partial}{\partial z_e} + \frac{\hbar^2}{2\mu \alpha^2} \psi_e(z_e) + E_h \psi_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{2\alpha^2} \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\perp}} \right) \frac{Q}{T_1 + T_2} \\ - \frac{2e^2}{\epsilon_r \alpha} \frac{T_3}{T_1 + T_2} + \frac{2\hbar^2}{m_e \alpha^2} \frac{F}{T_1 + T_2}, \end{aligned} \quad (\text{A.86})$$

com

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 \frac{1}{2} (1 - k) e^{-k} dz_h, \quad (\text{A.87})$$

$$T_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 e^{-k} dz_h, \quad (\text{A.88})$$

$$T_2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 k e^{-k} dz_h, \quad (\text{A.89})$$

e

$$T_1 - T_2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_h(z_h)|^2 (1 - k) e^{-k} dz_h = 2F, \quad (\text{A.90})$$

assim

$$F = \frac{T_1 - T_2}{2} \quad (\text{A.91})$$

logo

$$\widehat{H}_e \psi_e(z_e) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{m_e \alpha} \left(\frac{T_3}{T_1 + T_2} \right)}_A \frac{\partial}{\partial z_e} \psi_e(z_e) + \frac{\hbar^2}{2\mu\alpha^2} \psi_e(z_e) + E_h \psi_e(z_e) - \frac{2e^2}{\varepsilon_r \alpha} \frac{T_3}{T_1 + T_2} + \left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\alpha^2} \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu_{\perp}} \right) \frac{Q}{T_1 + T_2} + \frac{2\hbar^2}{m_e \alpha^2} \frac{F}{T_1 + T_2} \frac{T_1 - T_2}{T_1 + T_2}}_w \right] \psi_e(z_e) \quad (\text{A.92})$$

e finalmente

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + A \frac{\partial}{\partial z_e} + V_e(z_e) + w + \frac{\hbar^2}{2\mu\alpha^2} + E_h \right\} \psi_e(z_e) = E_{exc} \psi_e(z_e). \quad (\text{A.93})$$

APÊNDICE B – Artigos Publicados

Artigos relacionados a tese

- *Excitonic properties of type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells.*
Andrey Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire e G. A. Farias,
Journal of Applied Physics **101**, 113703 (2007).
- *Excitons in type-I type-II strained Si/Si_{1-x}Ge_x graded quantum well.*
J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G. A. Farias,
Phys. stat. Sol. c **2**, 2958 (2005).
- *Gate Inversion Effect in Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS Devices.*
J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G.
A. Farias,
Applied Physics Letters, **86**, 24350 (2005).
- *Numerical simulation of Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS devices.*
J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G.
A. Farias e E. F. da Silva Jr.
Phys. stat. Sol. c **2**, 2955 (2005).
- *Si and SiGe high-k oxide nanostructures for optoelectronic devices.*
J. A. K. Freire, T. A. S. Pereira, J. Costa e Silva, G. A. Farias, V. N. Freire e E. F.
da Silva Jr.
(2005).
- *Impurities and Geometrical Effects on the Electron Energy Spectrum of Quantum Rings.*
G. A. Farias, M. H. Degani, J. A. K. Freire, J. Costa e Silva, e R. Ferreira,
Physical Review B **77**, 85316 (2008).

- *Quantum Confinement in Double Quantum Rings.*
J. Costa e Silva, A. Chaves, M. H. Degani, J. A. K. Freire e G. A. Farias,
Brazilian Journal of Physics (aceito).
- *The role of surface roughness on the electron confinement in semiconductor quantum rings.*
Andrey Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire e G. A. Farias,
Proc. of 6th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices
(2007).
- *Theoretical investigation of excitons in type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wires.*
J. Costa e Silva, Andrey Chaves, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G. A. Farias,
Physical Review B **74**, 085317 (2006).
- *Influence of graded interfaces on the exciton energy of type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wires.*
Andrey Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, M. H. Degani, V. N. Freire e G.
A. Farias,
Journal of Materials Science **42**, 2314 (2007).

Excitonic properties of type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells

Andrey Chaves,^{a)} J. Costa e Silva,^{b)} J. A. K. Freire,^{c)} and G. A. Farias^{d)}

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received 11 January 2007; accepted 15 March 2007; published online 8 June 2007)

The exciton properties of Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells (QWs) are investigated within a variational approach, taking into account interface effects for two possibilities of the band alignment, type I and type II. For the latter, two-dimensional (2D) and three-dimensional (3D) variational wave functions are used in order to give a better description of the exciton confinement, where a large enhancement on the exciton binding energy (about 30% for a 70 Å well width) is found for the 3D case. The effects due to the presence of external electromagnetic fields on exciton energies are also analyzed. Our theoretical results explain the exciton energy blueshifts recently found in photoluminescence experiments for type-I Si/Si_{0.82}Ge_{0.18} QWs when electric fields are applied in the growth direction. Exciton energy shifts due to magnetic fields are calculated, and a comparison between such shifts in the 2D and 3D approaches is performed for type-II wells. Numerical results show that interfacial layers of 15 Å thickness for a type-I (type-II) Si/Si_{0.82}Ge_{0.18} (Si_{0.70}Ge_{0.30}) QW lead to a variation of about 20 meV (25 meV) in relation to the abrupt well for a 50 Å well width, yielding a blueshift on the exciton total energy. © 2007 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.2723857]

I. INTRODUCTION

In recent years, there has been an increasing interest in type-II heterostructures, where charge carriers are spatially confined in different materials. Many applications for these systems have been reported, such as mid-infrared quantum well lasers^{1,2} that exhibit improved beam quality, interband quantum cascades,^{3,4} and waveguide-based photodetectors with broad wavelength range photoresponse.⁵ Theoretical studies on the stability of electron-hole plasma and 1s excitons in type-II GaAs/AlAs quantum wells (QWs), under applied electric fields, have suggested the possibility of observing the former as the lowest excited state in narrow wells.⁶

SiGe type-II heterostructures with strained layers have also attracted much attention, since they offer the possibility of constructing heterojunctions that can be directly integrated with existing Si circuits. They promise enhanced capabilities in material systems compatible with Si technology, and recent reports have shown several applications of Si/Si_{1-x}Ge_x heterostructures in highly sensitive infrared photodetectors, high-performance metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors, and *n*-type modulation doped field-effect-transistors.⁷⁻¹⁰

The uncertainty about the intrinsic alignment of the conduction band of Si/Si_{1-x}Ge_x QWs grown in Si (001) layers has been widely studied, and one can note that many controversies still exist about these systems.¹¹ While the alloy clearly forms a well for holes, divergences occur for the electron. For low Ge concentrations, there is no consensus if the alloy forms a well (type-I alignment) or a barrier (type-II alignment) for this carrier.¹²⁻¹⁴ Calculations of People *et al.*^{15,16} and Van de Walle *et al.*¹⁷ indicate that for a germa-

nium molar fraction $x < 0.2$ the conduction band is in type-I alignment, but PL data of Xiao *et al.*¹⁸ were interpreted as type I for $x \leq 0.35$. Penn *et al.*¹⁹ affirm that, for a molar fraction bigger than $x > 0.30$, the conduction band is in type-II alignment. However, Rieger *et al.*²⁰ assert that only with a germanium molar fraction $x \geq 0.40$ could the Si/Si_{1-x}Ge_x QW have type-II band alignment. Penn *et al.*²¹ also studied the magnetoluminescence of Si/Si_{0.76}Ge_{0.24} quantum wells, showing the dependence of the exciton energy with applied magnetic fields by photoluminescence measurements. Their experimental results are consistent with a type-II conduction band offset of about 55 meV. In the present study, we have assumed germanium concentrations of $x=0.18$ and $x=0.30$ for type-I and type-II alignments, respectively.

In this work, we calculate binding and total energies of ground-state excitons in Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells with type-I and type-II band alignments, under external electromagnetic fields, considering graded interfaces. Within the effective mass approximation, we use a Hamiltonian that describes the carriers confinement taking into account the effective mass dependence on spatial variables. Due to the 4% lattice mismatch between Si and Ge, it also becomes necessary to consider strain effects between Si and Si_{1-x}Ge_x layers.²² With a type-I model for Si/Si_{0.82}Ge_{0.18}, our results show that the presence of an electric field parallel to the growth axis blueshifts the total exciton energy, which is in good agreement with experimental results in recent reports.^{23,24} For type-II Si/Si_{0.70}Ge_{0.30} QW, a comparison is performed between the results obtained from variational methods with 2D and 3D trial exciton wave functions. The 3D approximation is more accurate, especially in type-II systems, due to the large spatial extension of the unconfined carrier wave function along the *z*-direction. Previous works on such structures have shown that this constitutes a serious improvement: for GaAs/AlAs type-II systems, binding ener-

^{a)}Electronic mail: andrey@fisica.ufc.br

^{b)}Electronic mail: jusciane@fisica.ufc.br

^{c)}Corresponding author; electronic mail: king@fisica.ufc.br

^{d)}Electronic mail: gil@fisica.ufc.br

phys. stat. sol. (c) 2, No. 8, 2958–2961 (2005) / DOI 10.1002/pssc.200460729

Excitons in type-I type-II strained Si/Si_{1-x}Ge_x graded quantum well

J. Costa e Silva¹, J. A. K. Freire^{*1}, V. N. Freire¹, G. A. Farias¹, and E. F. da Silva, Jr.²

¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências Exatas, Campus do Pici, Caixa Postal 6030, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

² Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Cidade Universitária, 50670-901 Recife, Pernambuco, Brazil

Received 19 July 2004, revised 21 July 2004, accepted 9 August 2004

Published online 9 May 2005

PACS 71.35.-y, 73.21.Fg, 78.66.Hf

The exciton properties of Si/Si_{1-x}Ge_x strained quantum wells (QW's) are calculated taking into account interface and strain effects. Our numerical results allow us to conclude that interface fluctuations of only 10 Å in a type-I (type-II) strained Si/Si_{0.8}Ge_{0.2} (Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}) 50 Å QW leads to a 25 meV (10 meV) blueshift of the exciton energy.

© 2005 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

1 Introduction The natural way to expand the possibilities of Si as the dominant material in semiconductor technology is through the integration of hetero components made of Ge or alloys of Ge with Si [1]. Recent improvement in the growth of high quality SiGe samples is opening new possibilities to build heterostructures devices on a Si basis and therefore to introduce the concept of band-gap engineering into Si technology [2]. It is necessary to take into account the former due to high lattice mismatch ($\sim 4\%$) between the compounds, which gives rise to strain in SiGe confinement layers. Strained Si_{1-x}Ge_x layers can be deposit pseudomorphically on Si by MBE or CVD. Nowadays, fully strained Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells of high quality can be grown on silicon substrates for germanium fractions up to 36%.

Depending on the lineup of the band offset, different localizations of electrons and holes can occur. The most studied case is the so-called type-I lineup, where electrons and holes are confined within the same layers and with larger binding energies [3]. However in the last years, there is a growing interest in the so-called type-II case, where both carriers are maintained apart in the two different layers, which induces a loosening of the Coulombic binding energy, as compared with the type-I system [4]. Many experimental data are available but there is still a controversy on the conduction band lineup in Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells. There is a consensus that the Si/Si_{1-x}Ge_x creates a well for holes, but it is unclear whether it forms a well (type-I) or a barrier (type-II) for the electrons [5–8]. One of the last attempts to solve this problem was made by Thewalt *et al.* [9] involving photoluminescence under applied stress, where they stabled the idea of a very small type-II conduction-band offset.

In this work, we study the excitonic properties of strained Si/Si_{1-x}Ge_x graded quantum wells, taking into account both possibilities of the band lineup of the conduction-band offset, type-I and type-II.

2 Theoretical model The Schrödinger-like equation related to the exciton confinement in Si/Si_{1-x}Ge_x graded quantum wells can be expressed as

* Corresponding author: e-mail: king@fisica.ufc.br, Phone: +55 85 40089915, Fax: +55 85 40089450

[HTML ABSTRACT + LINKS](#)

APPLIED PHYSICS LETTERS 86, 243507 (2005)

Gate inversion effect in Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si metal-oxide-semiconductor devices

J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa,^{a)} J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias
 Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, 60455-760 Fortaleza-CE, Brazil

(Received 4 January 2005; accepted 3 May 2005; published online 10 June 2005)

The electrical properties of polycrystalline Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si metal-oxide-semiconductor (MOS) devices are investigated theoretically by solving self-consistently the Poisson and Schrödinger equations. Our calculations demonstrate that the combination of HfO₂ as dielectric film and polycrystalline gates causes charge inversion in both substrate and gate layer for ultrathin oxide layers. This effect is a consequence of the high dielectric constant of HfO₂, and it is expected to occur for all high- κ -based polygated MOS devices. However, the relative doping concentration between polycrystalline gate and substrate can be used to decrease the effect of gate inversion. © 2005 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1946919]

The metal-oxide-semiconductor (MOS) structure is, without doubt, the core structure in modern microelectronics whose success is a consequence of the outstanding physical and electrical properties of the SiO₂ gate dielectric grown on Si substrates.¹ However, the continued downscaling of the characteristic lengths of metal-oxide-semiconductor field effect transistor (MOSFET) structures will soon reach dimensions where direct tunneling becomes the dominant transport mechanism, raising concerns about unacceptably high leakage currents, which grow exponentially as the oxide thickness decreases. Slowing down the shrinkage of gate lengths, keeping the promised improvements of Moore's law, requires, among some few alternatives, the replacement of SiO₂ by high- κ dielectrics. The capacitance of ultrathin SiO₂ layers can be obtained with thicker high- κ dielectric layers, which decrease gate tunneling.

Among several high- κ dielectrics currently under study, HfO₂ is considered the most promising because its electrical and thermodynamic properties are reasonably compatible with conventional poly-Si gate electrodes.^{2,3} However, the electrical properties of MOS capacitors with a poly-Si/HfO₂ gate stack are dependent on the temperature at which poly-Si films are deposited. Unfortunately, this dependence may result in the degradation of the device electrical properties.⁴ Moreover, even though the use of poly-Si/HfO₂ gate stacks achieves significant reductions of the leakage current, concerns about high threshold voltages (V_T) and poly-Si depletion, which degrades the total capacitance of the device, still remain.⁵ Therefore, other gate materials must be investigated also to replace poly-Si films. In this regard, poly-Si_{1-x}Ge_x films have attracted considerable attention due to the suppression of boron penetration and gate depletion.⁶⁻⁸ In this letter, we present a theoretical investigation of the electronic properties of poly-Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS devices.

Figure 1 depicts the conduction and valence band profiles across the entire Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS structure under an external gate bias (V_G). Two important effects are commonly observed in deep submicron devices: (i) space quantization effects in the inversion layer of the substrate

and (ii) polygate depletion.^{9,10} Therefore, it is obvious that an accurate calculation of the total gate capacitance requires a self-consistent solution of the Poisson equation

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\varepsilon(z) \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right] = -q [p(z) - n(z) + N_D^+(z) - N_A^-(z)], \quad (1)$$

and the Schrödinger equation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_i(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_i(z) \right] \Psi_{i,n}(z) = E_{i,n} \Psi_{i,n}(z). \quad (2)$$

In Eq. (1), $\varepsilon(z)$ is the position-dependent dielectric constant, q is the magnitude of the electron charge, $p(z)$, $n(z)$, $N_D^+(z)$, and $N_A^-(z)$ represent the hole and electron mobile densities, ionized donor, and acceptor fixed densities, respectively.¹¹ We assume that gate and substrate are both uniformly doped with n-type ($N_D = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) and p-type ($N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) impurities, respectively. For simplicity, our simulations are performed at room temperature, for which impurities are fully ionized. We also disregard the existence of charges in the oxide layer. In Eq. (2), the index $i=(e, h)$ indicates the type of carrier and $m_i(z)$ represents its position-dependent effective mass. $V_i(z) = \Delta E_i(z) \mp q\phi(z)$ describes the conduction (or

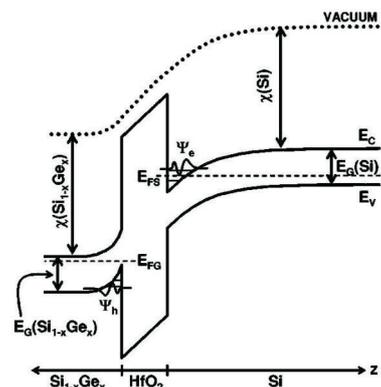


FIG. 1. Schematics of the conduction and valence band profiles of a Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS structure.

^{a)}Electronic mail: jeanlex@fisica.ufc.br

phys. stat. sol. (c) 2, No. 8, 2955–2957 (2005) / DOI 10.1002/pssc.200460724

Numerical simulation of Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS devices

J. Costa e Silva¹, E. L. de Oliveira¹, J. A. K. Freire¹, J. S. de Sousa¹, V. N. Freire¹, G. A. Farias¹, and E. F. da Silva, Jr.^{*2}

¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências Exatas, Campus do Pici, Caixa Postal 6030, 60455-970 Fortaleza, Ceará, Brazil

² Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco Cidade Universitária, 50670-901 Recife, Pernambuco, Brazil

Received 19 July 2004, revised 21 July 2004, accepted 29 October 2004

Published online 9 May 2005

PACS 02.60.Cp, 84.32.Tt, 85.30.De

We study Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS devices focusing on the simulation of the total gate capacitance. We found that the threshold voltage slightly increases with the amount of Ge and that it is possible to decrease the gate depletion effect by controlling the content of Ge. The most remarkable result is that the combination of HfO₂ as dielectric film and polycrystalline gates leads to gate inversion effect for small thicknesses of the dielectric film.

© 2005 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

1 Introduction The use of HfO₂ films has been recently proposed to replace SiO₂ in metal-oxide-semiconductor (MOS) field effect transistors. The high dielectric constant of HfO₂ films provides lower leakage currents and improved reliability without decreasing the oxide capacitance. It has been shown that electrical and thermodynamic properties of HfO₂ films are reasonably compatible with conventional poly-Si gate electrodes and their structural stability and interfacial characteristics are widely available [1–5]. However, the electrical properties of poly-Si/HfO₂ stacks seem to depend on the temperature the poly-Si films were deposited, in which the degradation of the device properties may occur. Moreover, as the size of depletion layer becomes large enough to degrade the total capacitance of MOS devices with thin oxides [6], other gate materials (such as metal and poly Si_{1-x}Ge_x films) must be investigated to replace poly-Si films. In this work, we study Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS devices focusing on the total gate capacitance modifications with respect to poly-Si/HfO₂/Si devices.

2 Theoretical model The electrostatic potential $\phi(\mathbf{r})$ across the device is determined by the nonlinear Poisson equation

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \nabla \phi(\vec{r})] = -q[p(\vec{r}) - n(\vec{r}) + N_D^+(\vec{r}) - N_A^-(\vec{r})] \quad (1)$$

where $\varepsilon(\mathbf{r})$ is the position-dependent dielectric constant, q is the modulus of the electron charge, $p(\vec{r})$, $n(\vec{r})$, $N_D^+(\vec{r})$ and $N_A^-(\vec{r})$ represent the holes and electrons mobile densities, ionized donor and acceptor fixed densities, respectively [7]. As for charge distribution, poly-crystalline gate is n-doped, semiconductor substrate is p-doped, while there are no charges in the oxide layer. For simplicity, we perform our simulations at room temperature, for which we assume that dopants are fully ionized. Poisson equation is solved numerically within a finite-difference scheme that takes into account the position-dependent di-

* Corresponding author: e-mail: eron@ufpe.br

Invited Paper

Si- and SiGe- high- k oxide nanostructures for optoelectronic devices

J. Alexander de K. Freire^a, Teldo A. S. Pereira^a, Jusciane Costa e Silva^a, Gil A. Farias^a,
Valder N. Freire^a and Eronides F. da Silva Jr.^b

^aUniversidade Federal do Ceará, Departamento de Física,
Caixa Postal 6030, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

^bDepartamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco,
50670-901 Recife, Pernambuco, Brazil

ABSTRACT

In this work, we will discuss Si-/SiGe and high- k oxides nanostructures. The exciton properties of strained Si/Si_{1-x}Ge_x quantum well (QW) are calculated taking into account interface effects and both possibilities of the band lineup of the conduction-band offset, type-I and type-II. Our numerical results show that interface fluctuations of only 10 Å in a Si/Si_{1-x}Ge_x 50 Å type-I QW (type-II QW) leads to a 25 meV (10 meV) blueshift of the exciton (transition) energy. Concerning high- k nanostructures, our simulation was performed in order to analyse how the charge image effects can modify the electronics properties in Si/HfO₂ and Si/SrTiO₃ based quantum wells. The results of Si/SrTiO₃ (Si/HfO₂) quantum wells indicate a recombination emission difference, as compared with the case when no charge image effects are included, of the order of 1.5 eV (0.7 eV).

Keywords: high- k , nanostructures, SiGe, Si

1. INTRODUCTION

SiGe as an electronic, structural and optical material is having a dramatic impact on device electronics. The natural way to expand the possibilities of Si as the dominant material in semiconductor technology is through the integration of hetero components made of Ge or alloys of Ge with Si.¹ It is necessary to take into account strain effects due to high lattice mismatch ($\sim 4\%$) between the compounds, which gives rise to strain in SiGe confinement layers. Nowadays, fully strained Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells of high quality can be grown on silicon substrates for germanium fractions up to 36%.^{2,3} This offers the unique possibility to build heterostructures devices on a Si basis and therefore to introduce the concept of band-gap engineering into Si technology.

Depending on the lineup of the band offset, different localizations of electrons and holes can occur. The most studied case is the so-called type-I lineup, where electrons and holes are confined within the same layers and its larger binding energies. However in the last years, there is a growing interest in the so-called type-II case, where both carriers are maintained apart in the two different layers, which induces a loosening of the Coulombic binding energy, as compared with the type-I system.⁴ Many experimental data are available but there is still a controversy on the conduction band lineup in Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells. There is a consensus that the Si/Si_{1-x}Ge_x creates a well for holes, but it is unclear whether it forms a well (type-I) or a barrier (type-II) for the electrons.⁵⁻⁸ One of the last attempts to solve this problem was made by Thewalt *et al.*⁹ involving photoluminescence under applied stress, where they stabled the idea of a very small type-II conduction-band offset.

Research focusing on high dielectric constant materials aims to extend Moore's law to equivalent gate oxide thickness below 10 Å by silicon dioxide replacement. SrTiO₃ and HfO₂ are two important high- k candidates, the former having dielectric constant $\epsilon_{SrTiO_3}(0) \approx 300$ and the latter $\epsilon_{HfO_2}(0) \approx 25$. Successful Si-based devices with SrTiO₃ and HfO₂ as gate dielectrics with equivalent oxide thickness smaller than 1.0 nm have been demonstrated.¹⁰ Recent research shows that high- k materials are the most promising candidates to replacement

Further author information: (Send correspondence to J.A.K.F.)
J.A.K.F.: E-mail: king@fisica.ufc.br, Telephone: +55.85.32889915

Impurities and geometrical effects on the electron energy spectrum of quantum rings

G. A. Farias,^{1,*} M. H. Degani,^{1,†} J. A. K. Freire,^{1,‡} J. Costa e Silva,^{1,§} and R. Ferreira^{2,¶}

¹*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,
Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil*

²*Laboratoire Pierre Aigrain, Ecole Normale Supérieure,
24 Rue Lhomond, F75005 Paris, France*

Abstract

The energy spectrum in semiconductor quantum rings (QR's) is calculated. Considering an external magnetic field applied perpendicular to those structures, the electronic energy levels are calculated taking into account a realistic model consisting of rings with finite size and barrier potential. The solutions of the Schrödinger equation are found by using an evolution method not limited to small perturbations. The magnetic field leads to the Aharonov-Bohm (AB) oscillations, which are strongly dependent on the presence of static defects. We consider charged impurities and interface roughness, which break the cylindrical ring symmetry and can strongly affect, or even destroy, the AB oscillations.

PACS numbers: 73.21-b, 73.20.Hb

Quantum Confinement in Double Quantum Rings

J. Costa e Silva, A. Chaves, J. A. K. Freire, M. H. Degani and G. A. Farias
 Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,
 Caixa Postal 6030, 60455-900, Fortaleza, CE, Brazil
 (Received on 24 March, 2006)

This work presents a theoretical study of the energy spectrum of GaAs/AlGaAs concentric double quantum rings, under applied magnetic fields perpendicular to the ring plane. The Schrödinger equation for this system is solved in a realistic model consisting of rings with finite barrier potentials. Numerical results show that increasing the magnetic field intensity leads to oscillations on the ground state energy which do not present a well defined period, due to the coupling between internal and external rings states. However, when one considers an elliptical geometry for the rings, the energy spectra of the internal and external ring states are decoupled and hence the periodicity of the oscillations is recovered.

Keywords: Quantum Rings; Aharonov-Bohm Effect

I. INTRODUCTION

The increasing development on growth techniques has made possible the fabrication of nanometric structures which exhibits strong quantum confinement, such as quantum dots and quantum rings [1, 2]. Semiconductor quantum rings have attracted much attention because they combine the optical properties of self-assembled nanostructures with unique features under applied magnetic fields originated by the ring topology, namely the Aharonov-Bohm (AB) effect [3, 4]. Recently, the growth of self-assembled GaAs/AlGaAs concentric double quantum rings has been reported, opening a new route to study AB oscillations and quantum interference effects [1, 5]. Physical understanding and accurate modelling of such structures are required for their design and application.

In this work, a time evolution method is used to calculate the energy eigenstates of electrons in GaAs/AlGaAs concentric double quantum rings, within the effective mass approximation. We deal with a model with finite barrier potentials, which is not limited to small perturbations and which allows us to study rings with arbitrary sizes and shapes. For circular rings, our numerical results show that when the magnetic field intensity is increased, energy oscillations are found, but they do not present well defined periodicity, contrary to the AB oscillations found for single rings in literature [6, 7]. Our results also show that the periodicity of AB oscillations is recovered when elliptic rings are considered. In this case, the periodicity of the energy oscillations for the ground and first excited states is different from that found for the second and third excited states.

II. THEORETICAL MODEL

Our model consists of two concentric planar quantum rings, under an applied magnetic field $\vec{B} = B\hat{k}$, *i.e.*, perpendicular to the ring plane. The Hamiltonian for such a system, using the symmetric gauge $\vec{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$, is given by

$$H(\vec{r}) = T_x + T_y + V(x, y), \quad (1)$$

where

$$T_x = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{eB}{2} \right)^2, \quad (2)$$

and

$$T_y = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + x \frac{eB}{2} \right)^2, \quad (3)$$

are the kinetic energy operators. The confinement potential is defined as $V(x, y) = 0$ within the ring region and $V(x, y) = V_e$ at the barrier region, where V_e is the electron band offset.

From the time dependent Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H \Psi(\vec{r}, t), \quad (4)$$

it is straightforward to find the time evolution of an arbitrary wavefunction $\Psi(\vec{r}, t)$ as

$$\Psi(\vec{r}, t + \delta t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} H \delta t \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (5)$$

The eigenstates of the Hamiltonian in Eq. (1) are then found by propagation of an arbitrary initial state in imaginary time domain $\tau = it$. The differential operators in Eq. (2) and (3) are discretized, following a finite differences scheme. When $\tau \rightarrow \infty$, the initial state converges to the ground state of the system. Excited states are found by mixing this procedure with the Gram-Schmidt orthonormalization method [8].

Figure 1 illustrates the two cases of double ring potentials discussed in this work: in Fig. 1(a), both internal and external rings are circular, limited by radii $R_{i,1}$ and $R_{i,2}$ for the internal, and $R_{e,1}$ and $R_{e,2}$ for the external rings. In Fig. 1(b), the circular external ring is kept, but the internal ring is elliptic. The ellipses are defined by the eccentricity $\xi = a/b$, where a and b are the average distance between the limits of the internal ring in x and y , respectively, chosen to preserve the internal ring area.

III. RESULTS AND DISCUSSION

We have calculated the energy spectrum for electrons in GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As double concentric quantum rings. For

The Role of Surface Roughness on the Electron Confinement in Semiconductor Quantum Rings

A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire and G. A. Farias

*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,
Caixa Postal 6030, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil*

Abstract

The electron energy spectrum of GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As quantum rings under applied magnetic fields is calculated, taking into account the existence of rough interfaces between materials. The Schrödinger equation, within the effective mass approximation, is solved in a realistic model, not limited to small perturbations. Our numerical results show that the existence of roughness on the ring surface modifies significantly the electron confinement energy, lifts the degeneracy of the electron angular momentum transition points of the Aharonov-Bohm oscillations, and in some special cases, it can even suppress the ground state energy oscillations.

Key words: interface roughness, quantum rings, Aharonov-Bohm effect.
PACS: 73.61.Ey

1. Introduction

Recently, several research groups reported the growth of self-assembled ring shaped semiconductor structures, which have attracted much interest due to the possibility of studying quantum topological effects [1,2]. Under applied magnetic fields perpendicular to the ring plane, periodic oscillations on the confinement energies are expected in such structures due to angular momentum transitions, as the magnetic field intensity increases, which is the so called Aharonov-Bohm (AB) effect [3,4].

Most of the experimental works on quantum rings in the literature have shown that these structures have rough surfaces, instead of a perfect circular shape [5,6]. The aim of this work is to study the influence of the surface roughness on the electron confinement energies in GaAs/AlGaAs quantum rings, in the presence of an applied magnetic field parallel to the ring axis. A simple model is used to describe the roughness, where internal and external ring radii are defined as depending on the angular coordinate. The Schrödinger equation for such a system is solved by a time evolution method in a realistic model, with finite barrier potentials and not limited to small perturbations. Numerical results show that the existence of rough surfaces lifts

the degeneracy of the AB oscillations and it is also responsible for a significant shift on the energy levels.

2. Theoretical Model

Our model consists of a single QR in the presence of a magnetic field, applied perpendicular to the ring plane, $\vec{B} = B\hat{z}$. The QR is limited by internal and external radii defined as R_i and R_e , respectively. In order to reproduce the surface roughness of a real ring, a simple model is proposed, where the internal (external) ring radius depends on the angular variable θ as:

$$R_{i(e)}(\theta) = 2\sigma \sqrt{\frac{L_C}{R_{i(e)}}} \sum_{n>0} e^{(nL_C/2\overline{R_{i(e)}})^2} \times \cos(n\theta + \varphi_n) + \overline{R_{i(e)}} \quad (1)$$

where σ denotes the roughness amplitude, $\overline{R_{i(e)}}$ is the internal (external) average radius, L_C is the correlation length and φ_n is a random phase. The confinement potential is then defined as

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{if } R_i \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq R_e \\ V_e & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

where V_e is the electron band offset.

Email address: andrey@fisica.ufc.br (A. Chaves).

PHYSICAL REVIEW B 74, 085317 (2006)

Theoretical investigation of excitons in type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wiresJ. Costa e Silva,^{*} Andrey Chaves,[†] J. A. K. Freire,[‡] V. N. Freire, and G. A. Farias[§]*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil*

(Received 26 April 2006; published 25 August 2006)

This work presents a theoretical study of the excitonic properties of Si_{1-x}Ge_x cylindrical quantum wires surrounded by a Si matrix, considering two possibilities for the conduction band alignment, type I and type II. The effect of nonabrupt interfaces between these materials on the exciton energies is investigated: an interfacial region of 15 Å in a 50 Å wide Si_{0.85}Ge_{0.15}(Si_{0.7}Ge_{0.3}) type-I (type-II) quantum wire leads to an exciton energy blueshift of the order of 10 meV. The excitonic behavior under an applied magnetic field parallel to the wire axis is also studied: exciton energies in type-I wires are weakly affected, while for type-II wires, increasing the field causes the electron angular momentum to change almost periodically, giving rise to Aharonov-Bohm oscillations of the exciton ground state energy.

DOI: 10.1103/PhysRevB.74.085317

PACS number(s): 78.67.Lt, 71.35.-y

I. INTRODUCTION

Over the past few years, many researchers have studied one-dimensional nanoscale structures such as quantum wires (QWR), due to their potential applications in electronic devices, e.g. transistors, diodes, lasers, and biological sensors, and also because their chemistry is quite easily manipulated.¹⁻³ Many groups have used several growth techniques to synthesize QWR composed of two single-crystalline semiconductor materials, forming core-sheath, core-multishell, and block-by-block heterostructures.⁴⁻⁶ In particular, recent papers have reported the growth of Si/SiGe QWR by using *chemical vapor deposition* and *vapor liquid solid deposition* methods, which exhibit enhanced electrical transport properties making possible high-mobility devices.^{4,7}

Experimental studies on Si_{1-x}Ge_x quantum wells, wires, and dots surrounded by a Si matrix have indicated that such heterostructures exhibit a peculiar characteristic of their band structure: the valence band always forms a well for holes, whereas there are two possible kinds of band alignment for electrons, depending on the Ge concentration x . It has been shown that for low Ge concentrations, the conduction band forms a well (type I) for electrons, while at higher concentrations it may form a barrier (type II).⁸⁻¹²

There are many papers in the literature related to excitons in type-II quantum dots and wells. Although the exciton confinement in type-II wires is also an interesting problem, there have been few theoretical works on this subject. Rorison¹³ was one of the first ones to present theoretical studies of excitonic properties of type-II QWR systems, in which exciton binding energies and oscillator strengths were calculated for GaAs/AlAs QWR, for both finite and infinite confining barrier cases, using a variational approach and a self-consistent method. However, his work did not study how the excitonic properties of these systems may be affected by the presence of external magnetic fields. Recently, the problem of exciton confinement was addressed for type-II planar quantum dots under an applied magnetic field, perpendicular to the dot plane, by Janssens *et al.*,¹⁴ where interesting results were found about the angular momenta of carriers in the ground state for high fields. The influence of magnetic fields on the exciton states in QWR has also been widely studied,¹⁵⁻¹⁹ but mainly in type-I systems.

Another important topic is the influence of an interfacial layer between Si and SiGe on the calculation of exciton energies, since in almost all recent experimental publications, the composition analysis of the wires indicates the presence of nonabrupt interfaces between materials. The problem of graded interfaces in low dimensional systems, such as quantum dots and quantum wells, has been widely studied, and significant alterations of the exciton energy spectrum have been demonstrated.²⁰⁻²²

The aim of the present work is to study the excitonic properties of Si_{1-x}Ge_x cylindrical quantum wires embedded in a silicon matrix. We consider the two known possibilities for band alignment in these systems, type I and type II, for appropriate Ge compositions. Taking into account the existence of graded interfaces, the effective mass approximation is used to calculate the exciton energies. The electron and hole behaviors under an applied magnetic field parallel to the wire axis are also investigated, showing Aharonov-Bohm (AB) oscillations of the electron ground state energies of type-II Si/Si_{1-x}Ge_x QWR.

II. THEORETICAL MODEL

Considering the symmetry of the problem, circular cylindrical coordinates are used, taking ρ as the confinement direction and z as the free direction. Using the symmetric gauge for the vector potential, $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\theta$, the Hamiltonian that describes the system is given by²⁵

$$H_{exc} = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^\parallel(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) + \frac{1}{m_i^\parallel(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\mu_\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} m_i^\parallel \rho_i^2 \omega_c^2 + V_i(\rho_i), \quad (1)$$

where $i=e, h$, m_i^\parallel is the in plane ρ -dependent effective mass of each charge carrier, μ_\perp is the electron-hole reduced mass in the z direction, and $\omega_c = eB/m_i^\parallel$ is the cyclotron angular frequency. We use the relative coordinates $z = |z_e - z_h|$ and $\theta = \theta_e - \theta_h$. The potential $V_i(\rho_i)$ includes the heterostructure potential $V_i^{het}(\rho_i)$ and the Coulomb interaction between electrons and holes.

J Mater Sci (2007) 42:2314–2317
DOI 10.1007/s10853-006-0617-3

4TH BRAZILIAN MRS MEETING

Influence of graded interfaces on the exciton energy of type-I and type-II Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wires

Andrey Chaves · Jusciane da Costa e Silva ·
José Alexander de King Freire ·
Marcos Henrique Degani · Valder Nogueira Freire ·
Gil de Aquino Farias

Received: 7 November 2005 / Accepted: 23 June 2006 / Published online: 27 February 2007
© Springer Science+Business Media, LLC 2007

Abstract The exciton properties of Si/Si_{1-x}Ge_x cylindrical quantum wires (QWRs) are calculated using the variational method and taking into account the existence of an interface layer between the materials. We consider two possibilities for the conduction band lineup, type-I and type-II. Our numerical results show that an interfacial fluctuation of 15 Å in a Si_{0.85}Ge_{0.15} (Si_{0.70}Ge_{0.30}) type-I (type-II) wire of 50 Å wire radius leads to an exciton energy blue shift of the order of 10 (10) meV.

Introduction

With the success of low dimension semiconductor structures, like quantum wells (quasi-bi-dimensional system) and quantum dots (zero-dimensional systems), relevant theoretical and experimental interest in studying one dimensional semiconductor systems have been presented. Advances in growth materials techniques made possible to confine charge carriers in quite thin wires, named quantum wires (QWRs). These structures in which electrons and holes are bi-dimensionally confined, having only one free dimension, have been successfully used in opto-electronics and biological sensors, where strong confinement is required [1, 2, 3, 4].

Banyai et al [5] studied excitons in type-I QWRs using a variational approach and assuming infinite

potential barriers. They found that the exciton binding energy is vastly increased in these structures when compared to three-dimensional (3D) and bi-dimensional (2D) cases. Later, J. M. Rorison [6] studied excitons in GaAs/AlAs QWRs, and concluded that the exciton binding energy in type-II wires is substantially larger than that energy of type-II quantum well systems. Since this heterostructure forms a type-II system only for thin wires, where the energies are naturally larger, he also showed that the binding energies of these type-II wires are greater than those ones for type-I systems, for the appropriate wire sizes. More recently, comparisons between experimental measurements of PL peak energies and theoretical results obtained within the effective mass approximation were made by Y. Sidor et al [7] and J. Maes et al [8] for InAs/InP QWRs, where a good agreement was attained.

The alloy SiGe allows the construction of heterojunctions that may be directly integrated with Si circuits already existent, giving improvement in the capacity of silicon technology compatible systems [9]. Much experimental data of these materials is available. Although there is consensus that the heterostructure creates a well potential for holes in the valence band, there is still a controversy about the conduction band alignment. It has been reported that the conduction band might form a well (type-I) or a barrier (type-II) for electrons depending on the germanium concentration in the alloy [10].

In this work we use a one parameter variational method to calculate exciton energies in cylindrical semiconductor quantum wires with type-I (type-II) band alignment, where the charge carriers are spatially confined in the same (different) materials. In our system, we take into account the existence of graded

A. Chaves (✉) · J. da Costa e Silva ·
J. A. de King Freire · M. H. Degani ·
V. N. Freire · G. de Aquino Farias
Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará, Brazil
e-mail: andrey@fisica.ufc.br

Referências

- [1] Chiquito, A. J.; e Lanciotti Jr., F.; Rev. Bras. de Ensino de Física, **20**, p. 4 (1998).
- [2] Alferov, Zh. I.; Semiconductors, **32**, p. 1063 (1998).
- [3] Eisberg, R.; e Resnick, R.; *Física quântica*, Ed. Campus, (1979).
- [4] Albuquerque, E. L.; e Cottam M. G.; *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*, Elsevier B.V. (2004).
- [5] Adachi, S.; *J. Appl. Phys.*, **88**, p. R1 (1985).
- [6] Rezende, S. M.; *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, 2a edição (2004).
- [7] Harrison, P.: Wiley J.; e Sons, LTD. *Quantum Well, Wires and Dots, Theoretical and Computational Physics*, (1999).
- [8] Esaki, L.; e Tsu R.; IBM *J. Res. Dev.*, **14**, p. 61 (1970).
- [9] Esaki, L.; e Chang L. L.; IBM *Thomas J. Watson Research Center*, p. 10598 (1974).
- [10] Vurgaftman, I.; Meyer, J. R.; Tansu, N.; e Mawst, L. J.; *Appl. Phys. Lett.* **83** p. 2742 (2003).
- [11] Ongstad, A. P.; Kaspi, R.; Chavez, J. R.; Dente, G. C.; Tilton, M. L.; e Gianardi, D. M.; *J. Appl. Phys.* **92** p. 5621 (2002).
- [12] Bradshaw, J. L.; Breznay, N. P.; Bruno, J. D.; Gomes, J. M.; Pham, J. T.; Towner, F. J.; Wortman, D. E.; Tober, R. L.; Monroy, C. J.; e Olver, K. A.; *Physica E* **20** p. 479 (2004).
- [13] Diehl, L.; Mentese, S.; Müller, E.; Grützmacher, D.; Sigg, H.; Fromherz, T.; Faist, J.; Gennser, U.; Campidelli, Y.; Kermarrec, O.; e Bensahel, D.; *Physica E* **16** p. 315 (2003).
- [14] Giehl, A. R.; Gumbel, M.; Schwender, C.; Herhammer, N.; e Fouckhardt, H.; *IEEE Photonic. Tech. L.* **16** p. 1358 (2004).
- [15] Liu, F.; Tong, S.; Kim, H.-J.; e Wang, K. L.; *Opt. Mater.* **27** p. 864 (2005).
- [16] Boucaud, P.; Kurdi, M. E.; e Hartmann, J. M.; *Appl. Phys. Lett.* **85** p. 46 (2004).
- [17] Krapf, D.; Adoram, B.; Shappir, J.; Saar, A.; Thomas, S. G.; Liu, J. L.; e Wang, K. L.; *Appl. Phys. Lett.* **78** p. 495 (2001).
- [18] Yang, L.; Watling, J. R.; Wilkins, R. C. W.; Boriçi, M.; Barker, J. R.; Asenov, A.; e Roy, S.; *Semicond. Sci. Technol.* **19** p. 1174 (2004).

- [19] Rowell, N. L.; Aers, G. C.; Lafontaine, H.; e Williams, R. L.; *Thin Solid Films* **321** p. 158 (1998).
- [20] Matsuura, M.; e Shinozuka, Y.; *Phys. Rev. B* **38** p. 9830 (1988).
- [21] Sauer, R.; Thonke, K.; e Tsang, W. T.; *Phys. Rev. Lett.* **61** p. 609 (1988).
- [22] Fukatsu, S.; e Shiraki, Y.; *Appl. Phys. Lett.* **63** p. 2378 (1993).
- [23] People, R.; e Bean, J. C.; *Appl. Phys. Lett.* **48** p. 538 (1985).
- [24] People, R.; Bean, J. C.; e Lang, D. V.; *Proceedings of the 18th International Conference on Physics of Semiconductors* (1987).
- [25] Van de Walle, C. G.; 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1871.
- [26] Baier, T.; Mantz, U.; Thonke, K.; Sauer, R.; Schäffler, F.; e Herzog, H.-J.; *Phys. Rev. B* **50** p. 15191 (1994).
- [27] Penn, C.; Schäffler, F.; Bauer, G.; e Glutsch, S.; *Phys. Rev. B* **59** p. 13314 (1999).
- [28] Rieger, M. M.; e Vogl, P.; *Phys. Rev. B* **48** p. 14276 (1993).
- [29] Penn, C.; Schäffler, F.; Bauer, G.; Christianen, P. C. M.; Maan, J. C.; e Glutsch, S.; *Phys. Rev. B* **61** p. 13055 (2000).
- [30] Yi Cui, Qingqiao Wei, Hongkun Park e Charles M. Lieber, *Science*, **293**, 1289 (2001).
- [31] L Banyai, I. Galbraith, C. Ell, e H. Haug *Phys. Rev. B* **36**, 6099 (1987).
- [32] J. M. Rorison *Phys. Rev. B* **50**, 8008 (1994).
- [33] Granados, D.; e Garcia J. M.; *Applied Phys. Letters* **82**, p. 2401 (2003).
- [34] Levy, L.P.; Dolan, G.; Dunsmuir, J.; e Bouchiat, H.; *Phys. Rev. Lett.* **64**, p. 2074 (1990).
- [35] Raz, T.; Ritter, D.; e Bahir, G.; *Appl. Phys. Lett.* **82**, p. 1706 (2003).
- [36] Monozon, B. S.; e Schimmelcher, P.; *Phys Rev. B* **67**, p. 045203 (2003).
- [37] Lin, Y.-Y.; e Singh, J.; *Journal Applied Phys.* **96**, p. 1059 (2004).
- [38] Laheld, U. E. H.; Pedersen, F. B.; e Hemmer, P. C.; *Phys Rev. B* **48**, p. 4659 (1993).
- [39] Laheld, U. E. H.; Pedersen, F. B.; e Hemmer, P. C.; *Phys Rev. B* **52**, p. 2697 (1995).
- [40] Lelong, Ph.; Suzuki, K.; Bastard, G.; Sakaki, H.; e Arakawa, Y.; *Phys. E* **7**, p. 393 (2000).
- [41] Lee, J.; Chou, W.-C.; Yang C.-S.; e Jan G. J.; *Chinese Journal of Phys.* **42**, p. 102 (2004).
- [42] Frank, F. C.; e van der Merwe, J. H.; *Proc. R. Soc. London Ser. A* **198**, p. 205 (1949).
- [43] Volmer, M.; e Weber, A.; *Phys. Chem.* **119**, p. 227 (1926).

- [44] Stranski, I. N.; e Krastanow, L.; Sitzungsberichte d. Akad. d. Wissenschaften in Wien, Abt III, Band **146**, p. 797 (1937).
- [45] Califano M.; e Harrison, P.; Journal Applied Phys. **91**, p. 389 (2002).
- [46] Schmidt O. G.; e Eberl K.; Phys. Rev. B **62**, p. 16715 (2000).
- [47] Thanh V. L.; Boucaud, P.; Dèbarre, D.; Zheng, Y.; Bouchier, D.; e Lourtioz, J. -M.; Phys. Rev. B **58**, p. 13115 (1998).
- [48] www.people.virginia.edu/~jld/qdots/mage.htm
- [49] Jasprit Singh, *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures* (1993).
- [50] Dvurechenskii, A. V.; e Yakimov, A. I.; *Semiconductors* **35**, p. 1095 (2001).
- [51] Degani, M. H.; Phys. Rev. B **35**, p. 9345 (1987).
- [52] Muljarov, E. A.; Zhukov, E. A.; Dneprovskii, V. S.; e Masamoto, Y.; Phys. Rev. B **65**, p. 7420 (2000).
- [53] Aharonov, Y.; e Bohm, D.; Phys. Rev. B **115**, p. 485 (1959).
- [54] Song S.-H.; Tsui, D. C.; e Fang, F. F.; *Solid State Commun.* **96** p. 61 (1995).
- [55] Miyake, Y.; Kim, J. Y.; Shiraki, Y.; e Fukatsu S.; *Appl. Phys. Lett.* **68** p. 2097 (1996).
- [56] Miyake, Y.; Kim, J. Y.; Shiraki, Y.; e Fukatsu, S.; *J. Cryst. Growth* **175** p. 465 (1997).
- [57] Chaves, A.; Costa e Silva, J.; Freire, J. A. K.; e Farias, G. A.; *J. Appl. Phys.* **101**, p. 113703 (2007).
- [58] Davies, J. H.; Bruls, D. M.; Vugs, J. W. A. M.; e Koenraad, P. M.; *J. Appl. Phys.* **91**, p. 4171 (2002).
- [59] Taguchi, T.; Kawakami, Y.; Bastard, G.; e Esaki, L.; *Phys. Rev. B* **26**, p. 1974 (1982).
- [60] Taguchi, T.; e Kawakami, Y.; *Physica B* **191**, p. 23 (1993).
- [61] Freire V. N.; Auto M. M.; e Farias, G. A.; *Superlattices and Microstructures* **11**, p. 17 (1992).
- [62] Costa e Silva, J.; Chaves, A.; Freire, J. A. K.; Freire, V. N.; e Farias, G. A. *Phys. Rev. B* **74** p. 085317 (2006).
- [63] Abramowitz, M.; e Stegun, I.; *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York) p. 227-51 (1964).
- [64] Greene, R. L.; e Bajaj, K. K.; *Phys. Rev. B* **31** p. 6498 (1985).
- [65] Miller, D. A. B.; Chemla, D. S.; Damen, T. C.; Gossard, A. C.; Wiegmann, W.; Wood, T. H.; e Burrus, C. A.; *Phys. Rev. B* **32** p. 1043 (1985).

- [66] Bastard, G.; Mendez, E. E.; Chang, L. J.; e Esaki *Phys. Rev. B* **26** p. 1974 (1982).
- [67] Costa e Silva, J.; Freire, J. A. K.; e Farias, G. A.; *Dissertação de Mestrado* (2004).
- [68] Bellabchara, A.; Lefebvre, P.; Christol, P.; e Mathieu, H.; *Phys. Rev. B* **50** p. 11840 (1994).
- [69] Park, S.-H.; Chuang, S. L.; *J. Appl. Phys.*, **87**, p. 353, (2000).
- [70] Song, J.; e Ulloa, S. E.; *Phys. Rev. B* **63**, p. 125302 (2001).
- [71] Chuang, S. L.; *Physics of Optoelectronic Devices* Ed. Wiley Interscience (1995).
- [72] Richard, S.; *Journal of Applied Phys* **94**, p. 1795 (2003).
- [73] Cavassilas, N.; *Journal of Applied Phys* **94**, p. 5088 (2003).
- [74] Dekel, E.; Ehrenfreund, E.; Gershoni, D.; Boucaud, P.; Sagnes, I.; e Campidelli, Y.; *Phys. Rev. B* **56** p. 15734 (1997).
- [75] Janssens, K. L.; Partoens, B.; e Peeters, F. M.; *Phys. Rev. B* **65** p. 233301 (2002).
- [76] Chaves, A.; Costa e Silva, J.; Freire, J. A. K.; Degani, M. H.; Freire, V. N.; e Farias, G. A.; *Journal of Materials Science* **42**, p. 2314 (2007).
- [77] Costa e Silva, J.; Chaves, A.; Freire, J. A. K.; Freire, V. N.; e Farias, G. A.; *Phys. Rev. B* **74**, p. 085317 (2006).
- [78] Szafran, B.; e Peeters, F. M.; *Europhys. Lett.* **12**, p. 271 (2005).
- [79] Choi, H. W.; Jeon, C. W.; Liu, C.; Watson, I. M.; Dawson, M. D.; Edwards, P. R.; Martin, R. W.; Tripathy, S.; e Chua, S. J.; *Appl. Phys. Lett.* **86**, p. 021101 (2005).
- [80] Kuroda, T.; Mano, T.; Ochiai, T.; Sanguinetti, S.; Sakoda, K.; Kido G.; e Koguchi, N.; *Phys. Rev. B* **72**, p. 205301, e references therein (2005).
- [81] Monozon, B. S.; Ivanov, M. V.; e Schmelcher, P.; *Phys. Rev. B* **70**, p. 205336 (2004).
- [82] Monozon, B. S.; e Schmelcher P.; *Phys. Rev. B* **67**, p. 045203 (2003).
- [83] Dias da Silva, L. G. G. V.; Ulhoa, S. E.; e Govorov, A. O.; *Phys. Rev. B* **70**, p. 155318 (2004).
- [84] Raz, T.; Ritter D.; e Bahir, G.; *Appl. Phys. Lett.* **82**, p. 1706 (2003).
- [85] Granados, D.; e Garcia, J. M.; *Appl. Phys. Lett.* **82**, p. 2401 (2003).
- [86] Barticevic, Z.; Pacheco, M.; e Latgé A.; *Phys. Rev. B* **62**, p. 6963 (2000).
- [87] Lorke, A.; Luyken, R. J.; Govorov, A. O.; Kotthaus, J. P.; Garcia, J. M.; e Petroff, P. M.; *Phys. Rev. Lett.* **84**, p. 2223 (2000).
- [88] Aharonov, Y.; e Bohm, D.; *Phys. Rev.* **115**, p. 485 (1959).
- [89] Bruno-Alfonso, A.; e Latgé, A.; *Phys. Rev. B* **61**, p. 15887 (2000).

- [90] Song, J.; e Ulloa, S. E.; Phys. Rev. B **63**, p. 125302 (2001).
- [91] Hu, H.; Zhu, J.-L.; Li, D.-J.; e Xiong, J.-J.; Phys. Rev. B **63**, p. 195307 (2001).
- [92] Lavenère-Wanderley, L. A.; Bruno-Alfonso, A.; e Latgé, A.; J. Phys.: Condens. Matter **14**, p. 259 (2002).
- [93] Bruno-Alfonso, A.; e Latgé A.; Phys. Rev. B **71**, p. 125312 (2005).
- [94] Lavenère-Wanderley, L. A.; Bruno-Alfonso, A.; e Latgé, A.; J. Phys. Condens. matter **14**, p. 259 (2002).
- [95] Gridin, D.; Adamou, A. T. I.; e Craster, R. V.; Phys. Rev. B **69**, p. 155317 (2004).
- [96] Kuroda, T.; Mano, T.; Ochiai, T.; Sanguinetti, S.; Noda, T.; Kuroda, K.; Sakoda, K.; Kido, G.; e Koguchi, N.; Physica E **32** p. 46 (2006).
- [97] Mashanov, V. I.; Cheng, H. -H.; Chia, C. -T.; e Chang, Y. -H.; Physica E **28** p. 531 (2005).
- [98] Farias, G. A.; Degani, M. H.; Freire, J. A. K.; Costa e Silva, e J.; Ferreira, R.; Phys. Rev. B **77**, p. 85316, (2008).
- [99] Degani, M. H.; Phys. Rev. B **66**, p.233306 (2002).
- [100] Degani, M. H.; e Leburton, J. P.; Phys. Rev. B **44**, p. 10901 (1991).
- [101] Degani, M. H.; Appl. Phys. Lett. **59**, p. 57 (1991).
- [102] Suzuki, M.; Phys. Lett. A **146**, p. 319 (1990).
- [103] Watanabe, N.; e Tsukada, M.; Phys. Rev. E **62**, p. 2914 (2000).
- [104] Kuroda, T.; Mano, T.; Ochiai, T.; Sanguinetti, S.; Noda, T.; Kuroda, K.; Sakoda, K.; Kido, G.; e Koguchi, N.; 2006 Physica E **32** 46.
- [105] Yu, X.; Zhu, J. -L.; e Hu, X.; Appl. Phys. Lett. **82** p. 4567 (2003).
- [106] Granados, D.; e García, J. M.; Appl. Phys. Lett. **82** p. 2401 (2003).
- [107] Ziman, J. M.; Models of Disorder (Cambridge University Press, Cambridge, (1979).
- [108] Sorel, M.; Giuliani, G.; Scirè, A.; Migliarina, R.; Donati, S.; e Laybourn, P. J. R.; *IEEE J. Quantum Electron.*, **39**, p. 10 (2003).
- [109] Grimm, D.; Muniz, R. B.; e Latge, A.; *Phys. Rev. B* **68**, p. 193407 (2003).
- [110] Planelles, J.; e Climente, J. I.; *Eur. Phys. J. B* **48**, p. 65 (2005).
- [111] Szafran, B.; e Peeters, F. M.; *Phys. Rev. B* **72**, p. 155316 (2005).
- [112] Fafard, S.; Hinzer, K.; Raymond, S.; Dion, M.; McCaffrey, J.; Feng, Y.; e Charbonneau S.; Science **274**, p. 1350 (1996).
- [113] Phillips, J.; Kamath, K.; e Bhattacharya, P.; Appl. Phys. Lett. **72**, p. 2020 (1998).

- [114] Kim, G. H.; Nicholls, J. T.; Khondaker, S. I.; Farrer, I.; e Ritchie, D. A.; Phys. Rev. B **61**, p. 10910 (2000).
- [115] Shields, A. J.; O' Sullivan, M. P.; Farrer, I.; Ritchie, D. A.; Cooper, K.; Foden, C. L.; e Pepper, M.; Appl. Phys. Lett. **74**, p. 735 (1999).
- [116] Dubertret, B.; Skourides, P.; Norris, D. J.; Noireaux, V.; Brivanlou, A. H.; e Libchaber, A.; Science **298**, p. 1759 (2002).
- [117] Coe, S.; Woo, W. K.; Bawendi, M.; e Bulovi, V.; Nature **420**, p. 800 (2002).
- [118] Venere, E.; *Quantum dots could form basis of new computers*, (2001).
- [119] Baribeau, J.-M.; Wu, X.; Rowell, N. L.; e Lockwood, D. J.; *J. Phys. Condens. Matter* **18** p. R139 (2006)
- [120] Reed, M. A.; Bate, R. T.; Bradshaw, K.; Dulkan, W. M.; Fresley, W. M.; Lee, J. W.; e Smith, H. D.; *J. Vacuum Sci. Technol. B*, **4**, p. **358** (1986).
- [121] Alchalabi, K.; Zimin, D.; Kostorz, G.; e Zoog, H.; *K. Phys. Rev. B* **90** (2003).
- [122] Bimberg, D.; Grunmann, M.; e Ledentsov, N. N.; *Quantum Dot Heterostructures* Wiley Ed. (1999).
- [123] Jacak, L.; Hawrylak, P.; e Wójs, A.; *Quantum Dots* Springer Ed. (1998).
- [124] Dunaevskii, M. S.; Titkov, A. N.; Krasnik, Z. F.; Novikov, A. V.; e Lobanov, D. N.; *Applied Phys. Lett.* **85**, p. 1999 (2004).
- [125] Yang, M.; Sturm, J. C.; e Prevoost, J.; *Phys. Rev. B* **56** p. 1973 (1997).
- [126] Pinto, N.; Murri, R.; Rinaldi, R.; e barucca, G.; *Micron* **31**, p. 315 (2000).
- [127] Kim, H. J.; Chang, J. Y.; e Xie, Y. H.; *Journal of Crystal Growth* **247**, p. 251 (2003).
- [128] Tersoff, J.; e LeGoues, F. K.; *Phys. Rev. Lett.* **72**, p. 31 (1994).
- [129] Shumway, J.; Williamson, A. J.; Zunger, A.; Passaseo, A.; DeGiorgi, M.; Cingolani, R.; Catalano M.; e Crozier P.; *Phys. Rev. B* **64**, p. 125302 (2001).
- [130] Bruls, D. M.; Vugs, J. W. A. M.; Koenraad, P. M.; Salemink, H. W. M.; Wolter, J. H.; Hopkinson, M.; e Skolnick, M. S.; *Appl. Phys. Lett.* **81**, p. 1708 (2002).
- [131] Thanh, V. L.; Tam, T. T. Ngo.; Huy, B.; Bouchier, D.; Tuyen T. T. Le.; e Khoi H. Phan.; *Thin Solid Films* **428**, p. 144 (2003).
- [132] Thanh, V. L.; Vinh, V. A.-F.; Zheng, Y.; Bouchier, D.; Guedj, C.; e Hincelin, G.; *Thin Solid Films* **294**, p. 59 (1997).
- [133] Li, E. H.; *Physica E* **5**, p. 215 (2000).
- [134] Solomon, G. S.; Trezza, J. A.; Marchall, A. F.; e Harris Jr., J. S.; *Phys. Rev. Lett.*, **76**, p. 952 (1996).

- [135] Ledentsov, N. N.; Shchukin, V. A.; Grundmann, M.; Kirstaedter, N.; Böhrer, J.; Schmidt, O.; Bimberg, D.; Ustinov, V. M.; Egorov, A.; Zhokov, A. E.; Kopev, P. S.; Zaitsev, V.; Gordeev, N. Y.; Alferov, Zh. I.; Borovkov, A. I.; Kosogov, A. O.; Ruvmov, S. S.; Werner, P.; Gösele, U.; e Heydenreich Phys. Rev. B, **54**, p. 8743 (1996).
- [136] Vinh, L. T.; Aubry-Fortuna, V.; Zheng, Y.; Bouchier, D.; Guedj, C.; e Hincelin, G.; Thin Solid Fims **294**, p. 59 (1997).