



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

Confinamento em Fios Quânticos Semicondutores

Andrey Chaves

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

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

Confinamento em Fios Quânticos Semicondutores

Andrey Chaves

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

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias (Orientador, UFC)

Dr. José Alexander de King Freire (UFC)

Prof. Dr. Eudenilson Lins de Albuquerque (UFRN)

À minha família e meus amigos.

"Amo, amo a mata. Porque nela não há preços.

Amo o verde que me envolve.

O verde sincero que me diz
que a esperança não é a última que morre.

Quem morre por último é o herói.

E o herói, é o cabra que não teve tempo de correr..."

Chico Anísio, em "Cidadão da Mata".

Agradecimentos

Agradeço aos meus orientadores, Prof. Dr. Gil de Aquino Farias e Dr. José Alexander de King Freire, não só por me proporcionarem a realização deste e de outros trabalhos, mas também pelo apoio, pelos conselhos que me deram e pela amizade que construímos durante estes quatro anos em que trabalhamos juntos.

A todos professores com quem tive aula na graduação e na pós-graduação, em especial aos professores Nilson Sena e Renan Landim, pela contribuição fundamental que deram à minha formação acadêmica.

Aos professores e doutores com quem tive conversas bastante esclarecedoras, e que me ajudaram também a ter idéias para novos trabalhos: Jeanlex, Wagner, Antonio Carlos, Degani e Robson.

Aos colegas de laboratório, os que já se foram e os que ainda permanecem, pelo incentivo: Florêncio, Claudio Lucas, Felipe Munarin, Teldo, Marilza, Jusciane, Erlânia, Welberth, João Claudio, Paulo, Marcelo, Ítalo, Alberto, Diego Lucena, Diego Rabelo, Leandro (Sukita), Davi e Luci.

Aos companheiros das calouradas e dos Congressos, Sérgio Gomes, George "Bush", Tereza, Jota, Pablo, Erneson, Pascoal, Lino, Subênia, Mari e o pessoal de São Carlos, pelos momentos divertidos que passamos.

Aos amigos do LMA, Erivelton, Luciana Magal, Thiago e Ricardo, pelas conversas agradáveis nas horas vagas.

Aos colegas de faculdade, pelos momentos de lazer: Maluf, Ivan (Bróder), Eduardo Girão, Acrísio, Hudson, Márcio (Ney), César, Saulo, Apiano, Franciné, Sara e Audi. Agradeço também aos amigos que fiz durante a licenciatura noturna, com os quais

tenho tido pouco contato ultimamente, mas que são igualmente importantes: Neudo, Wallance, Eudes, Eduardo, Nivaldo, Josebes, "Peixada" e Getúlio.

À minha família e meus amigos, por estarem do meu lado em todos os momentos, difíceis ou não. Incluo também aqui os meus "familiares" de Natal, Rio Grande do Norte: Raissa, Ricardo, Francineide, Geórgia, Jamile, tia Dai e Hellen.

Aos professores Soares e Josué, pelo esforço que eles têm feito para o desenvolvimento do Departamento de Física da UFC.

Ao CNPq e à Rede NanoBioEstruturas pelo apoio financeiro.

Resumo

Avanços nas técnicas de crescimento têm tornado possível a fabricação de estruturas semicondutoras unidimensionais em escala nanométrica, chamadas de fios quânticos. O interesse nestas estruturas tem crescido bastante, devido a suas aplicações em dispositivos eletrônicos e também devido a sua química ser facilmente manipulável. Em particular, trabalhos experimentais têm mostrado o crescimento de fios quânticos *core-shell* e de fios semicondutores com uma heteroestrutura longitudinal.

Neste trabalho estudamos as propriedades excitônicas de fios quânticos cilíndricos Si/Si_{1-x}Ge_x *core-shell*, considerando duas possibilidades para o alinhamento da banda de condução: tipo-I, onde elétrons e buracos estão confinados no mesmo material, e tipo-II, onde os portadores estão separados espacialmente. Usamos um Hamiltoniano que leva em conta a existência de interfaces graduais entre materiais. No tipo-I, observamos que a energia do exciton é fracamente afetada pela presença do campo magnético, principalmente para pequenos raios do fio. Já para o tipo-II, o aumento da intensidade do campo magnético leva a transições quase periódicas no momento angular do elétron, o que gera oscilações de Aharonov-Bohm na energia do exciton.

Também investigamos teoricamente como a existência de interfaces graduais pode afetar o confinamento em fios quânticos com heteroestruturas GaAs/GaP e InAs/InP ao longo de seus eixos de crescimento. Nossos resultados mostram que, à medida em que o raio do fio diminui, o potencial efetivo que atua sobre um portador pode forçar sua localização nas barreiras. Quando consideramos interfaces graduais entre os materiais que compõem a heteroestrutura, este potencial efetivo adquire uma forma peculiar, gerando pequenos poços nas interfaces, capazes de confinar os portadores nesta região.

Abstract

Advances in growth techniques have made possible the fabrication of one-dimensional semiconductor nanometric structures, named quantum wires. There has been an increasing interest in such structures, due to their applicability in electronic devices and also because their chemistry is easily manipulated. In particular, experimental works have reported the growth of core-shell quantum wires and semiconductor wires with longitudinal heterostructures.

In this work, the excitonic properties of cylindrical $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ core-shell quantum wires are studied, considering two possibilities for the conduction band alignment: type-I, where electrons and holes are confined at the same material, and type-II, where these carriers are spatially separated. We use a Hamiltonian which takes into account the existence of non-abrupt interfaces between materials. For type-I, it is observed that the exciton energy is weakly affected by the presence of a magnetic field, especially for smaller wire radii. For type-II structures, increasing the magnetic field intensity leads to almost periodic changes on the electron angular momentum, which yields to Aharonov-Bohm oscillations on the exciton energy.

We also investigate theoretically how the existence of graded interfaces may affect the confinement of carriers in cylindrical GaAs/GaP and InAs/InP quantum wires with single heterostructures along the wire axis. Numerical results show that, when abrupt interfaces are considered, as the wire radius becomes thinner the effective potential acting on a carrier might induce its longitudinal localization at the barriers. However, considering smooth interfaces, this effective potential acquires a peculiar form, in which electron and hole states may be confined inside traps formed at the interfacial regions.

Índice

1	Introdução	2
1.1	A Estrutura de Bandas	3
1.2	Massa Efetiva	9
1.3	Reduzindo a Dimensionalidade	15
1.4	Fios Quânticos	18
1.5	Excitons em Fios Quânticos	23
1.6	Sumário	26
2	Fios Quânticos <i>Core-Shell</i>	29
2.1	Modelo Teórico	29
2.2	Efeito Aharonov-Bohm	33
2.3	Resultados e Discussões	34
2.3.1	Fios Quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ (Tipo-I)	35
2.3.2	Fios Quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ (Tipo-II)	37
3	Fios Quânticos Heteroestruturados	44
3.1	Modelo Teórico	44
3.2	Resultados e Discussões	49
3.2.1	Heteroestruturas InP/InAs	51
3.2.2	Heteroestruturas GaP/GaAs	61
4	Conclusões e Perspectivas	71
	Referências	74
A	Hamiltoniano do Exciton	80
B	Solução Numérica da Equação de Schrödinger	85
B.1	Equação de Schrödinger Unidimensional	86
B.2	Equação de Schrödinger Bidimensional	90
C	Artigos Publicados	93

Lista de Figuras

1.1	Ilustração que representa (a) um cristal de parâmetro de rede a e (b) seu respectivo potencial V periódico.	4
1.2	Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de E como função (a) do parâmetro Δ e (b) do vetor de onda k , na primeira zona de Brillouin.	6
1.3	(a) Esquema ilustrativo das bandas de energia e do gap em um semicondutor, mostrando em azul as bandas preenchidas a $T = 0$ K, incluindo a de valência, e em cinza as que não estão ocupadas a esta temperatura, como a banda de condução. (b) Ilustração mostrando a excitação de um elétron (-), que passa da banda de valência (BV) para a de condução (BC), deixando assim um estado desocupado (+) na primeira.	7
1.4	Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com $gaps$ E_{gap}^B e E_{gap}^W diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas V_e e V_h , respectivamente.	8
1.5	Gráfico qualitativo dos alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II, mostrando as bandas de condução (CB) e valência (VB) em heteroestruturas Si/Si _{1-x} Ge _x	9
1.6	Elétrons na banda de valência no espaço k : (a) na ausência de campo elétrico; (b), (c) na presença de um campo \mathbf{E} aplicado na direção \hat{x} , em dois instantes diferentes.	11

- 1.7 (a) Representação esquemática de uma heteroestrutura AlAs/GaAs crescida na direção z , sendo a espessura da camada de GaAs dada por L . (b) Banda de condução para esta heteroestrutura na direção de crescimento, que apresenta um poço de potencial com altura V_e 15
- 1.8 (a) Imagem de TEM de um fio *core-shell*, composto por SiGe envolto em uma casca de Si amorfo. A barra de escala é de 50 nm. (b), (c) Mapas das concentrações de Si (azul) e Ge (vermelho), respectivamente, no fio mostrado em (a). (d) Mapa das concentrações de Si (azul) e Ge (vermelho) numa seção transversal do fio mostrado em (a). (e) Mapa das concentrações numa seção transversal de uma estrutura composta por um fio de Si (azul) coberto por uma camada de Ge (vermelho), cuja imagem de TEM é mostrada no inset desta figura. (f) Mapa das concentrações numa seção transversal de uma estrutura *core-multishell*, composta por um fio de Si (azul) coberto por uma camada interna de Ge (vermelho) e envolto em outra camada de Si [24]. 19
- 1.9 (a) Imagem de TEM de dois fios heteroestruturados InP/InAs de diâmetro 40 nm. O primeiro (*sample I*) apresenta duas camadas de InAs, de espessuras 11.5 nm (azul) e 22.5 nm (vermelho), separadas por três camadas de InP (9.5 nm, 7 nm e 4 nm). O segundo (*sample II*) apresenta duas camadas praticamente idênticas de InAs, de espessura 15 nm, e três barreiras praticamente idênticas de InP, com 5.8 nm de espessura [40]. (b), (c) Imagens de TEM de um fio heteroestruturado InP/InAs, mostrando sua composição a partir de uma colorização dependente dos parâmetros de rede da estrutura, obtidos numa análise de transformada de Fourier das imagens: identifica-se como verde o parâmetro de rede do InAs e, como vermelho, o do InP [33]. 21

1.10	(a) Imagem de TEM de um fio heteroestruturado GaP/GaAs. A barra de escala é de 20 nm. (b), (c) e (d) Mapas das concentrações de Ga (cinza), P (vermelho) e As (azul), respectivamente, da junção mostrada em (a). (e) Perfil das concentrações de Ga (preto), P (vermelho) e As (azul) ao longo do eixo do fio [35].	22
1.11	Representação esquemática mostrando a extensão da função envelope dos excitons de Frenkel e Wannier-Mott numa estrutura periódica [10].	24
1.12	Esquema que representa um elétron (azul) e um buraco (cinza) em uma heteroestrutura, confinados nas bandas de condução e valência, respectivamente, formando um exciton.	25
2.1	Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide longo (círculo cinza), que gera um campo magnético \mathbf{B} em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas sólidas mostram a direção do potencial vetor \mathbf{A} . . .	34
2.2	Energias de ligação (a) e do estado fundamental (b) dos excitons e - hh em fios quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I como função do raio do fio, para espessuras da interface w de 0 Å (sólida), 5 Å (tracejada), 10 Å (pontilhada) e 15 Å (tracejada-pontilhada).	36
2.3	Energias de ligação (a) e do estado fundamental dos excitons (b) e - hh em fios quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I como função do campo magnético, com $w = 0$ Å (curvas) e $w = 15$ Å (símbolos), para vários valores do raio do fio ρ_2 : 50 Å (pontilhada, \triangle), 100 Å (tracejada, \circ), 150 Å (sólida, ∇) e 200 Å (tracejada-pontilhada, \square).	37
2.4	(a) Potencial Coulombiano efetivo para elétrons em um fio quântico $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-II com raio de 50 Å. (b) O gráfico deste potencial como função de ρ , mostrando uma região de depressão próxima à interface entre os materiais.	38

- 2.5 Energias de ligação (a) e do estado fundamental (b) dos excitons $e-hh$ em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-I como função do raio do fio, para espessuras da interface w de 0 Å (sólida), 5 Å (tracejada), 10 Å (pontilhada) e 15 Å (tracejada-pontilhada). 39
- 2.6 Energia de ligação (a) e energia total do exciton (b) $e-hh$ em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II como função do campo magnético para raios de 50 Å, 100 Å, e 150 Å, considerando uma interface abrupta. As linhas sólidas e pontilhadas representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente. 40
- 2.7 Raio médio dos elétrons em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II como função do campo magnético, para raios do fio de 50 Å, 100 Å e 150 Å, considerando $w = 0$ Å (sólida) e $w = 15$ Å (tracejada). Inset: comportamento da energia do exciton no estado fundamental e no primeiro estado excitado para o fio de raio 50 Å, sob um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo do fio, considerando estas duas espessuras de interface. 42
- 3.1 (a) Esquema que representa um fio heteroestruturado com interfaces graduais. (b) Perfil qualitativo do potencial $V_i^{het}(z)$ da heteroestrutura, de $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ e da soma dos potenciais $V_{eff}(z) = V_i^{het}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ como função de z , considerando interfaces abruptas (pontilhado) e não-abruptas (sólido) 48
- 3.2 Funções de onda do estado fundamental de um elétron em um fio quântico circular de raio $R = 200$ Å com potencial infinito, para campos magnéticos $B = 0$ T (sólido), 10 T (tracejado-pontilhado), 20 T (pontilhado) e 30 T (tracejado) 49

- 3.3 Energia de confinamento de um elétron em um fio quântico com uma heteroestrutura InP/InAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 Å (a), 7.5 Å (b) e 15 Å (c), como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos vários valores de raio do fio: 40 Å (preto), 50 Å (vermelho), 75 Å (azul) e 100 Å (verde). 53
- 3.4 Energia de confinamento de um buraco pesado em um fio quântico com uma heteroestrutura InP/InAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 Å (a), 7.5 Å (b) e 15 Å (c), como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos vários valores de raio do fio: 40 Å (preto), 50 Å (vermelho), 75 Å (azul) e 100 Å (verde). 55
- 3.5 Energias de confinamento do elétron para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs, sob campos magnéticos $B = 0$ T (preto), 15 T (vermelho) e 30 T (azul), como função da largura do poço L . Consideramos três valores para o raio R do fio: (a), (d) 50 Å; (b), (e) 70 Å e (c), (f) 85 Å, assumindo interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita). Inset: ampliação dos resultados para $l = 1$ em (d), e os resultados para $B = 40$ T (verde). 56
- 3.6 Energias de confinamento do buraco pesado para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs, sob campos magnéticos $B = 0$ T (preto), 15 T (vermelho) and 30 T (azul), como função da largura do poço L . Consideramos três valores para o raio R do fio: (a), (d) 50 Å; (b), (e) 70 Å e (c), (f) 85 Å, assumindo interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita). 58

- 3.7 Funções de onda do elétron para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs com interfaces graduais de espessura $w = 20 \text{ \AA}$ e largura do poço $L = 100 \text{ \AA}$, como função de z , considerando raios do fio $R = 40 \text{ \AA}$ (preto) e $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0 \text{ T}$ (preto), $B = 30 \text{ T}$ (vermelho) e $B = 40 \text{ T}$ (azul) para um fio de raio $R = 50 \text{ \AA}$ (b). 59
- 3.8 Funções de onda do buraco para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs com interfaces graduais de espessura $w = 20 \text{ \AA}$ e largura do poço $L = 100 \text{ \AA}$, como função de z , considerando raios do fio $R = 50 \text{ \AA}$ (preto) e $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0 \text{ T}$ (preto) e $B = 30 \text{ T}$ (vermelho) para um fio de raio $R = 85 \text{ \AA}$ (b). 60
- 3.9 Energia de confinamento de um elétron em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 \AA (a), 7.5 \AA (b) e 15 \AA (c), como função da largura L do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos três valores de raio do fio: 40 \AA (preto), 50 \AA (vermelho) e 75 \AA (azul). 62
- 3.10 Energia de confinamento de um buraco pesado em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 \AA (a), 7.5 \AA (b) e 15 \AA (c), como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos três valores de raio do fio: 40 \AA (preto), 50 \AA (vermelho) e 75 \AA (azul). 64

- 3.11 Energias de confinamento do elétron em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos), considerando $B = 0$ T (preto), 10 T (vermelho) e 20 T (azul). Consideramos três valores de raio do fio: (a), (d) 35 Å; (b), (e) 40 Å e (c), (f) 75 Å, para heteroestruturas com interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita). Os símbolos cheios na figura (e) são os resultados para $l = 1$ ilustrados em outra escala (à direita), para facilitar a visualização. 65
- 3.12 Energias de confinamento do buraco pesado em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos), considerando $B = 0$ T (preto), 10 T (vermelho) e 20 T (azul). Consideramos três valores de raio do fio: (a), (d) 35 Å; (b), (e) 40 Å e (c), (f) 75 Å, para heteroestruturas com interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita). 66
- 3.13 Funções de onda do elétron para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio GaP/GaAs com interfaces graduais de espessura $w = 20$ Å e largura do poço $L = 100$ Å, como função de z , considerando raios do fio $R = 35$ Å (preto) e $R = 75$ Å (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0$ T (preto) e $B = 20$ T (vermelho) para um fio de raio $R = 40$ Å (b). 68
- 3.14 Funções de onda do buraco pesado para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio GaP/GaAs com interfaces graduais de espessura $w = 20$ Å e largura do poço $L = 100$ Å, como função de z , considerando raios do fio $R = 35$ Å (preto) e $R = 75$ Å (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0$ T (preto) e $B = 20$ T (vermelho) para um fio de raio $R = 40$ Å (b). 69

Lista de Tabelas

1.1	Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade D_l e de direções de confinamento D_c	17
2.1	Parâmetros dos materiais Si e Ge, que são usados na obtenção de valores para a liga $Si_{1-x}Ge_x$ através de interpolação linear.	35
3.1	Raízes da função de Kummer com $l = 0$ para vários valores de R , calculadas considerando-se $B = 10T$	50
3.2	Parâmetros dos materiais GaAs, GaP, InAs e InP utilizados em nossos cálculos [12].	50
B.1	Comparação entre as energias dos três primeiros autoestados em um poço quadrado infinito de largura $L = 50 \text{ \AA}$, obtidas analítica e numericamente.	89
B.2	Comparação entre as energias dos três primeiros autoestados em um oscilador harmônico de frequência $\omega = 1fs^{-1}$, obtidas analítica e numericamente.	90
B.3	Comparação entre as energias dos autoestados em um fio quântico cilíndrico de potencial infinito, com raio $R = 50 \text{ \AA}$, obtidas analítica e numericamente.	92

1

Introdução

Nos últimos anos, uma enorme variedade de dispositivos e estruturas quânticas tem sido criada e fabricada, devido ao crescente desenvolvimento das técnicas de crescimento de materiais, e da ciência e tecnologia como um todo. Os progressos nesta área têm sido estimulados pela vasta quantidade de aplicações destas estruturas no nosso dia-a-dia, o que gera uma grande demanda por dispositivos mais eficientes, mais rápidos, etc. A procura por computadores cada vez mais sofisticados, mídias com maior capacidade de armazenamento, maior velocidade de transmissão de sinais, tudo isso incentiva o investimento em estudos, tanto teóricos como experimentais, para o desenvolvimento da microeletrônica e da opto-eletrônica, que compõem a base da indústria de dispositivos eletrônicos atual.

Neste contexto, o estudo das estruturas de baixa dimensionalidade, como poços, fios e pontos quânticos, tem atraído bastante atenção, uma vez que grande parte dos dispositivos opto-eletrônicos são compostos por heteroestruturas, que são junções formadas por camadas justapostas de materiais semicondutores diferentes, onde há um confinamento dos portadores de carga [1, 2, 3]. O conhecimento destas estruturas também é importante do ponto de vista da ciência, uma vez que elas apresentam características peculiares, que não são observadas em sistemas volumétricos (isto é, sem a presença de heteroestruturas), e possibilitam a observação de fenômenos quânticos. A idéia de fabricar as heteroestruturas semicondutoras surgiu em 1970, proposta por Tsu e Esaki [4]. Porém, somente em 1974 apareceram as primeiras observações experimentais rela-

cionadas a estas estruturas: Tsu, Esaki e Chang observaram o tunelamento ressonante em barreiras duplas [5], Esaki e Chang mediram as propriedades de transporte [6] e Dingle, Wiegman e Henry observaram a quantização no espectro de energia em poços quânticos [7].

Nesta dissertação, faremos um estudo das propriedades eletrônicas de fios quânticos semicondutores, analisando o confinamento dos portadores de carga nestas estruturas e o comportamento dos estados eletrônicos na presença de campos magnéticos aplicados externamente. Para isso, começaremos discutindo um pouco sobre alguns conceitos, como os de estrutura de bandas, massa efetiva e exciton, que são importantes para o entendimento da física que descreve estes sistemas.

1.1 A Estrutura de Bandas

O problema do átomo de um elétron é bastante conhecido na teoria quântica, onde encontram-se níveis de energia discretos para os estados eletrônicos, que são caracterizados por orbitais atômicos designados por 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d etc. No caso de um átomo de muitos elétrons, podemos obter o estado fundamental distribuindo os pares de elétrons de spins opostos nos níveis de menor energia, obedecendo ao princípio de exclusão de Pauli.

Já em um sólido, temos um grande número de átomos próximos uns dos outros, de maneira que os elétrons de um átomo estão sujeitos à interação com átomos vizinhos, o que torna bem mais complicado o cálculo exato dos estados eletrônicos nestes sistemas. Porém, podemos fazer algumas aproximações para tentar entender, ao menos qualitativamente, o que ocorre com os estados eletrônicos em cristais. A Fig. 1.1 ilustra estas aproximações: consideraremos que os núcleos atômicos são fixos, com posições conhecidas na rede cristalina, e observaremos o comportamento de um só elétron, sendo todos os outros considerados parte integrante dos íons que criam um potencial periódico [8].

Consideremos primeiro o problema como sendo composto por vários poços de po-

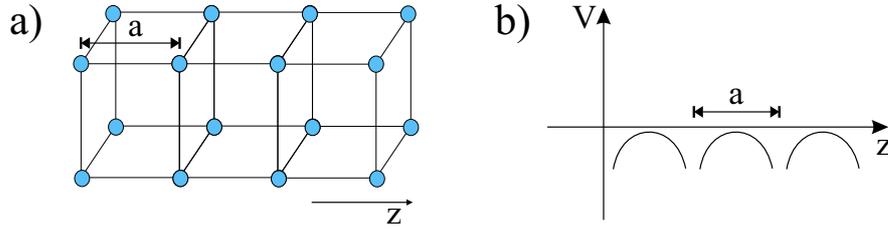


Figura 1.1: Ilustração que representa (a) um cristal de parâmetro de rede a e (b) seu respectivo potencial V periódico.

tencial infinito (sítios) igualmente espaçados na direção z . O estado fundamental desse sistema é composto por uma partícula completamente localizada em um dos sítios. Chamaremos $|n\rangle$ o estado localizado no n -ésimo sítio, e $H|n\rangle = E_0|n\rangle$. Como os poços de potencial são idênticos e não interagem entre si, E_0 possui infinitos estados degenerados, cada um localizado em um sítio diferente.

Podemos tratar a translação nos pontos da rede como uma operação de simetria discreta, representada pelo operador $\tau(a)$ [9], dado por

$$\tau(a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right) \quad (1.1)$$

De fato, podemos obter esta forma para o operador translação simplesmente expandindo-se em série de Taylor uma função de onda transladada $\psi(x+a)$ em torno do ponto inicial x :

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= \psi(x) + \frac{d}{dx}\psi(x)a + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)a^2 + \dots \\ &= \left[1 + \frac{i}{\hbar}a\hat{p} + \left(\frac{i}{\hbar}a\right)^2\hat{p}^2 + \dots\right]\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right)\psi(x). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Como devemos ter $\tau(a)\psi(x) = \psi(x+a)$, verifica-se que a forma da Eq. (1.1) para o operador translação é adequada.

Os estados $|n\rangle$ não são autoestados do operador de translação, uma vez que $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$. Porém, este operador comuta com o Hamiltoniano, logo, deve haver estados que sejam autoestados de $\tau(a)$ e H simultaneamente. Pode-se verificar facilmente que

os estados

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle, \quad (1.3)$$

onde θ é um parâmetro real com $-\pi \leq \theta \leq \pi$, satisfazem esta condição.

Consideremos agora uma situação onde temos potenciais de confinamento finitos nos sítios. Neste caso, permanece a relação $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ e os elementos da diagonal do Hamiltoniano na base dos $|n\rangle$, isto é, $\langle n|H|n\rangle = E_0$, são todos iguais, uma vez que os sítios ainda são todos iguais. Porém, não devemos esperar agora que $|n\rangle$ seja autoestado de H , já que neste caso as barreiras de potencial são finitas e as partículas em um sítio podem acessar sítios vizinhos por tunelamento. Assim, o Hamiltoniano na base $|n\rangle$ deve apresentar termos não-nulos fora da diagonal.

Consideremos então a aproximação conhecida como *tight-binding*, onde os únicos termos do Hamiltoniano que interessam são aqueles que envolvem sítios vizinho, e os elementos que envolvem sítios distantes são desprezados. Definindo $\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta$ e aplicando o operador H em uma função $|\theta\rangle$ como a da Eq. (1.3), levando em conta a interação apenas com primeiros vizinhos, temos

$$\begin{aligned} H|\theta\rangle &= E_0 \sum e^{in\theta} |n\rangle - \Delta \sum e^{in\theta} |n+1\rangle - \Delta \sum e^{in\theta} |n-1\rangle \\ &= (E_0 - 2\Delta \cos\theta)|\theta\rangle, \end{aligned} \quad (1.4)$$

onde encontramos que os autovalores do Hamiltoniano (que não devem depender da escolha da base) neste caso formam uma banda contínua de energia entre $E_0 - 2\Delta$ (quando $\theta = 0$) e $E_0 + 2\Delta$ (quando $\theta = \pm\pi$). O significado físico do parâmetro θ pode ser obtido se analisarmos a projeção de $|\theta\rangle$ no espaço das posições, onde encontramos este parâmetro como $\theta = ka$, sendo k o vetor de onda do elétron e a o parâmetro de rede [9]. Com isso, temos

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos(ka). \quad (1.5)$$

Como θ varia de $-\pi$ a π , temos k variando de $-\pi/a$ a π/a . Esta região de k é conhecida como "primeira zona de Brillouin". A Fig. 1.2(a) mostra qualitativamente

o comportamento de E como função do parâmetro Δ , que está relacionado com a interação entre um sítio e seus primeiros vizinhos. Podemos observar que, à medida que Δ aumenta, a degenerescência do estado E_0 é levantada, levando à formação de uma banda de energia, representada pela região cinza no gráfico. Na Fig. 1.2(b), mostramos a forma da curva de dispersão definida pela Eq. (1.5), na primeira zona de Brillouin.

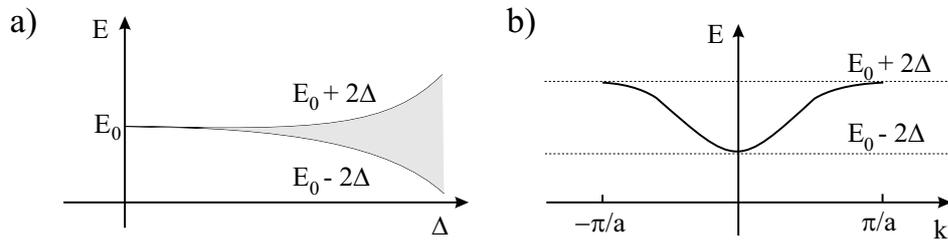


Figura 1.2: Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de E como função (a) do parâmetro Δ e (b) do vetor de onda k , na primeira zona de Brillouin.

Com este tratamento bastante simples, pudemos observar uma característica bastante importante dos cristais: a presença do potencial periódico gerado pela rede cristalina é responsável pelo aparecimento de bandas de energias contínuas e finitas. O aparecimento das bandas de energia, o qual demonstramos para E_0 , não ocorre apenas no estado fundamental, mas em todos os níveis de energia do sistema [8]. De fato, o cálculo exato da estrutura de bandas de um material requer um modelo mais detalhado, além de uma matemática bem mais sofisticada.

Em materiais semicondutores a $T = 0$ K, os elétrons preenchem todas as bandas de energia, até a última, que é chamada "banda de valência". Quando a temperatura aumenta, os elétrons podem ser excitados e ganhar energia suficiente para passar para a banda seguinte, chamada "banda de condução", o que contribui para a condutividade do material. A região entre o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência, onde não existem estados de energia permitidos, é conhecida como "gap". Um elétron na banda de valência precisa ser excitado, no mínimo, com a energia do *gap*

para que haja uma transição desta banda para a de condução. Em semicondutores, o *gap* de energia deve assumir valores relativamente pequenos, o que faz com que estes materiais apresentem condutividade significativa à temperatura ambiente. O esquema da Fig. 1.3(a) ilustra as bandas de energia em um semicondutor, onde mostramos as bandas de valência e de condução, assim como o *gap* que as separa. Quando um elétron passa para a banda de condução, ele deixa um estado desocupado na banda de valência, chamado buraco, como ilustrado na Fig. 1.3(b). Este estado vazio se comporta como uma partícula de carga positiva, como será discutido na próxima Seção.

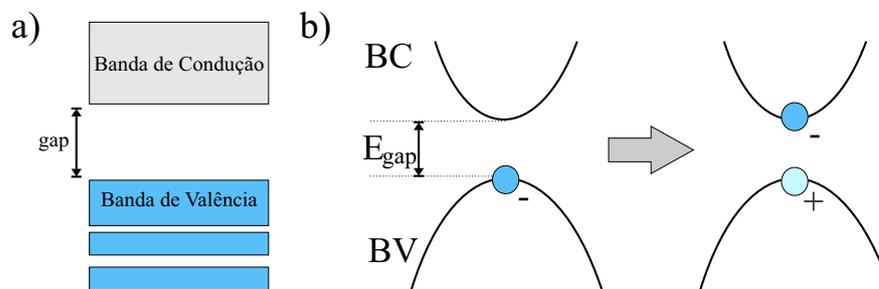


Figura 1.3: (a) Esquema ilustrativo das bandas de energia e do *gap* em um semicondutor, mostrando em azul as bandas preenchidas a $T = 0$ K, incluindo a de valência, e em cinza as que não estão ocupadas a esta temperatura, como a banda de condução. (b) Ilustração mostrando a excitação de um elétron (-), que passa da banda de valência (BV) para a de condução (BC), deixando assim um estado desocupado (+) na primeira.

Desde 1970, as técnicas de crescimento epitaxial de filmes finos têm apresentado grandes avanços. Os métodos de crescimento mais antigos possibilitavam o crescimento de cristais de alta qualidade, porém era bastante difícil, com estes métodos, mudar abruptamente de material durante o processo de crescimento. As técnicas mais atuais, como a epitaxia de feixe molecular (MBE, do inglês *molecular beam epitaxy*) e a deposição de vapor químico (CVD, do inglês *chemical vapor deposition*), permitem o crescimento de estruturas compostas por dois ou mais materiais semicondutores diferentes, formando o que chamamos de heteroestruturas [10]. Uma vez que os *gaps* de energia entre os materiais que compõem estas junções são geralmente diferentes, as ban-

das de condução e valência nestes sistemas geram degraus de potencial para elétrons e buracos. A Fig. 1.4 apresenta um esquema que mostra estas bandas em uma junção entre dois materiais semicondutores intrinsecamente diferentes (heterojunção), formando degraus de potencial de altura V_e , para o elétron na banda de condução, e V_h , para o buraco na banda de valência. As alturas destes potenciais são também conhecidas como *band offsets* [11, 12, 13].

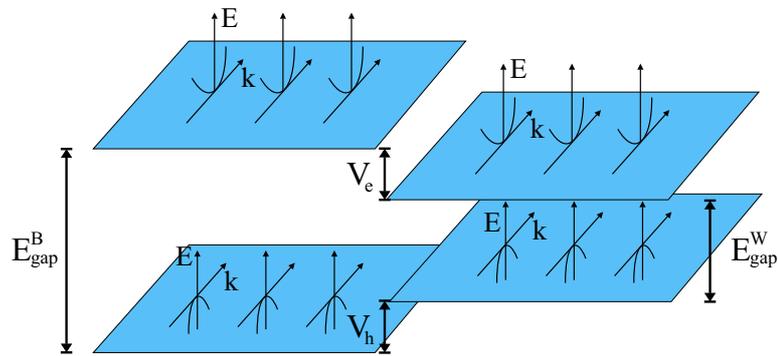


Figura 1.4: Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* E_{gap}^B e E_{gap}^W diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas V_e e V_h , respectivamente.

Observando o esquema da Fig. 1.4, é fácil perceber que em uma heteroestrutura formada por uma camada de um material de *gap* menor E_{gap}^W , crescida entre duas camadas de outro material de *gap* maior E_{gap}^B , teremos a formação de poços ou barreiras de potencial para os portadores. Quando o alinhamento das bandas ocorre de maneira que haja um poço de potencial tanto para elétrons como para buracos, esta estrutura é chamada tipo-I. Porém, em alguns casos específicos, como o de algumas heteroestruturas Si/SiGe [14] e AlAs/GaAs [15], o alinhamento pode ser tal que haja uma barreira de potencial para um portador e um poço de potencial para o outro, de forma que elétrons e buracos ficam localizados em regiões diferentes do espaço. Chamamos tipo-II este caso de alinhamento de bandas. A Fig. 1.5 ilustra qualitativamente os alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II em heteroestruturas Si/Si_{1-x}Ge_x.

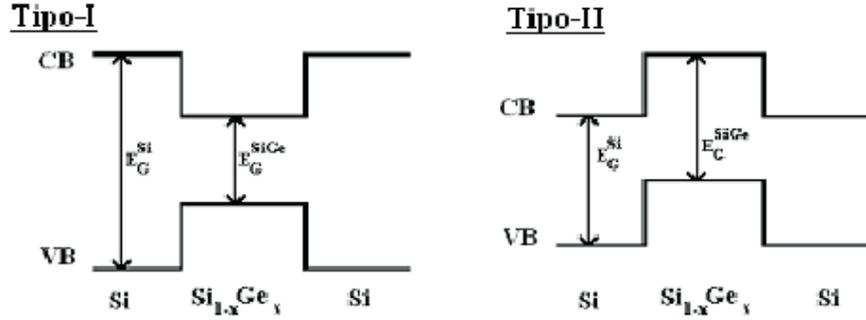


Figura 1.5: Gráfico qualitativo dos alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II, mostrando as bandas de condução (CB) e valência (VB) em heteroestruturas Si/Si_{1-x}Ge_x.

1.2 Massa Efetiva

O conceito de massa efetiva é bastante importante para o estudo das propriedades eletrônicas em estruturas semicondutoras. Para uma boa descrição destas estruturas, precisamos primeiro entender como se dá o comportamento de elétrons e buracos sob forças externas, causadas eventualmente por campos eletromagnéticos aplicados [8].

Podemos partir da segunda lei de Newton $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = m\mathbf{a}$ para o movimento de um elétron de momentum $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ sob ação de uma força externa \mathbf{F} , causada pela aplicação de um campo elétrico, por exemplo, e tentar encontrar uma forma de identificar a massa do portador como função de parâmetros conhecidos do material. Isso talvez não seja tão trivial, uma vez que poderíamos esperar que a existência do potencial gerado pela rede cristalina pudesse ter um efeito mais drástico sobre o movimento do elétron. Porém, seguindo um raciocínio mais formal, partimos da velocidade de grupo $v_g = \partial\omega/\partial k$, e sendo $E = \hbar\omega$, encontramos

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \hbar v_g. \quad (1.6)$$

A força \mathbf{F} e a energia E estão relacionadas por $dE = Fdx$, e portanto $Fdx = \hbar v_g dk$. Da definição de velocidade temos também $dx = v_g dt$, e finalmente

$$F = \hbar \frac{\partial k}{\partial t}, \quad (1.7)$$

onde $\hbar k$ é identificado como o momentum da partícula, mostrando que a forma geral da segunda lei de Newton é preservada. Seguindo esse raciocínio, podemos encontrar a aceleração como $a = dv_g/dt$, ou ainda

$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial t \partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{\partial k}{\partial t}. \quad (1.8)$$

Assim, podemos encontrar uma relação entre $\partial k/\partial t$ e a aceleração a , a qual substituímos na Eq. (1.7) para chegarmos a

$$F = m^* a = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} a, \quad (1.9)$$

onde identificamos a massa efetiva como sendo

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

Portanto, apesar de a rede cristalina não alterar a forma da variação do momentum no tempo, ela muda a dependência da energia com o momentum, como vimos na Seção anterior, e agora mostramos que isso corresponde a mudar a massa efetiva do elétron. Nesta abordagem simples do problema, assumimos que E depende apenas do módulo de \mathbf{k} . Porém, em geral, o comportamento de $E(\mathbf{k})$ não é isotrópico e, em alguns casos, é fortemente dependente da direção k_α . Assim, numa abordagem mais exata, a massa efetiva deve ser tratada como uma grandeza tensorial dada por

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

onde $k_{\alpha(\beta)}$ é a componente de \mathbf{k} na direção $\alpha(\beta)$.

Este resultado é bem geral, e vale para elétrons tanto em semicondutores como em metais. De fato, usando-se a relação de dispersão $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ para a energia de um elétron livre, que nesse caso é claramente isotrópica, encontramos $\partial^2 E / \partial k^2 = \hbar / m$, de forma que a massa efetiva para um elétron livre é então dada pela própria massa do elétron $m^* = m$, o que é bastante razoável.

Por depender da curvatura da banda de energia $E(k)$, as massas efetivas do elétron nas bandas de condução e de valência são diferentes. Se um elétron é excitado e passa

da banda de valência para a de condução, ele deixa um estado vazio na primeira. Para ilustrar o comportamento deste estado, a Fig. 1.6 mostra um diagrama com um estado vazio no topo da banda de valência, primeiro (a) na ausência de campos externos, e depois, em (b) e (c), com um campo elétrico $\mathbf{E} = \varepsilon \hat{x}$, para dois instantes diferentes.

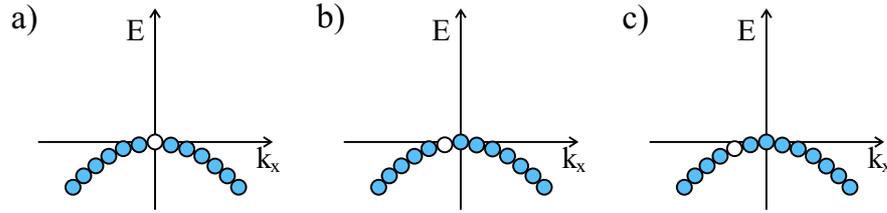


Figura 1.6: Elétron na banda de valência no espaço k : (a) na ausência de campo elétrico; (b), (c) na presença de um campo \mathbf{E} aplicado na direção \hat{x} , em dois instantes diferentes.

Antes da aplicação do campo, o estado vazio (círculo branco) está localizado no topo da banda de valência, com $k_x = 0$, e os estados ocupados (círculos azuis) estão dispostos simetricamente, de forma que a soma de todos os momenta dos elétrons nesta banda é nula. Quando aplicamos o campo, a força $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ faz com que os elétrons se movam no sentido negativo de k_x , uma vez que

$$-e\varepsilon = \frac{dp_x}{dt} = \hbar \frac{dk_x}{dt}. \quad (1.12)$$

O movimento dos elétrons também leva o estado vazio a se mover neste mesmo sentido, como ilustrado nas Figs. 1.6(b) e 1.6(c). Podemos observar que, se o estado vazio em 1.6(b) apresenta momentum $-\hbar k_1$, então o momentum total do sistema será $+\hbar k_1$; se em 1.6(c) este estado apresenta momentum $-\hbar k_2$, o sistema apresentará um momentum total $+\hbar k_2$, e assim sucessivamente. Dessa forma, podemos perceber que este sistema se comporta como se fosse formado por apenas uma partícula, chamada buraco ou lacuna, movendo-se no sentido positivo de k_x . Seguindo este raciocínio, como a variação de k_x no tempo para o buraco é positiva, a força gerada pelo campo elétrico para este portador deve apontar no sentido positivo de k_x , contrário ao que observamos

para os elétrons, o que implica que os buracos apresentem carga positiva, de maneira que $\mathbf{F} = +e\mathbf{E}$.

A Eq. (1.10) mostra que a massa efetiva de um elétron na banda de valência é negativa, devido à curvatura de $E(k)$ nesta banda. Porém, vimos que o sistema todo pode ser tratado como se fosse composto por um buraco com momentum $k_b = -k_e$. Substituindo este momentum na Eq. (1.7) e fazendo um desenvolvimento análogo ao que foi feito para elétrons, encontramos que a massa efetiva para buracos deve ser dada por

$$m_b^* = -\frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}. \quad (1.13)$$

Com isso, vemos que a massa efetiva m_b^* para os buracos na banda de valência é realmente positiva, o que é consistente com o fato de que, ao aplicarmos um campo elétrico $\mathbf{E} = \varepsilon\hat{x}$, os buracos se movem no sentido positivo do eixo x , contrário ao que ocorre com os elétrons.

Como as curvaturas das bandas de condução e valência são diferentes, as massas efetivas de elétrons e buracos não são iguais. Além disso, alguns materiais apresentam bandas de valência degeneradas no ponto $k = 0$ (também conhecido como ponto Γ). Pela Eq. (1.13), vemos que os buracos na banda que apresenta menor curvatura e, conseqüentemente, menor módulo de $\partial^2 E / \partial k^2$, têm maior massa efetiva, sendo então chamados buracos pesados, enquanto os que estão na banda de maior curvatura são chamados buracos leves. Nos cálculos realizados neste trabalho, estudaremos somente sistemas de elétrons e buracos pesados, tratando estes dois portadores separadamente em suas respectivas bandas.

Para entendermos melhor o conceito de massa efetiva, seu caráter tensorial e sua relação com a estrutura de bandas dos materiais, faremos agora uma discussão mais formal sobre o comportamento dos portadores em uma rede cristalina. Os autoestados do Hamiltoniano de um sistema submetido a um potencial periódico, como o da rede cristalina, podem ser escritos na forma de Bloch como $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_k(\mathbf{r})$, onde $u_k(\mathbf{r})$ é uma função com a mesma periodicidade da rede [9]. Substituindo esta forma de $\psi(\mathbf{r})$

na equação de Schrödinger para um potencial periódico $V(\mathbf{r})$, encontramos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r})\right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.14)$$

que pode ser reescrita como

$$(H_0 + H_1 + H_2)u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.15)$$

onde

$$H_0 = \left[\frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r})\right], \quad (1.16)$$

$$H_1 = \frac{\hbar}{m}\mathbf{p} \cdot \mathbf{k} \quad (1.17)$$

e

$$H_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.18)$$

Seja H_0 o Hamiltoniano de um sistema não perturbado, que descreve nosso problema para $k = 0$, tratando os termos H_1 e H_2 como perturbações. Temos então uma base $u_0^n(\mathbf{r})$ formada pelos autoestados de H_0 , com autoenergias $E^n(0)$. Da teoria das perturbações, a energia do estado n , corrigida até a segunda ordem, é dada por

$$E^n(\mathbf{k}) = E^n(0) + \langle u_0^n | H_1 + H_2 | u_0^n \rangle + \sum_{l \neq n} \frac{|\langle u_0^l | (H_1 + H_2) | u_0^n \rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}, \quad (1.19)$$

onde a soma em l é sobre todas as bandas, exceto a banda de índice n .

Substituindo na Eq. (1.19) as expressões para H_1 e H_2 , dadas respectivamente pelas Eqs. (1.17) e (1.18), encontramos

$$E^n(\mathbf{k}) = E^n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{|\mathbf{k} \cdot \langle u_0^l | \mathbf{p} | u_0^n \rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}. \quad (1.20)$$

Podemos reescrever a Eq. (1.20) na forma

$$E^n(\mathbf{k}) = E^n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k} \cdot \left(\frac{1}{m_{\alpha,\beta}^*} \right) \cdot \mathbf{k}, \quad (1.21)$$

onde o tensor massa efetiva $m_{\alpha,\beta}^*$ para a banda de índice n , é definido como

$$m_{\alpha,\beta}^* = \left[\frac{\delta_{\alpha,\beta}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{\langle u_0^l | p_\alpha | u_0^n \rangle \langle u_0^l | p_\beta | u_0^n \rangle}{E^n(0) - E^l(0)} \right]^{-1}. \quad (1.22)$$

A relação entre o tensor massa efetiva e a derivada segunda da energia em relação a k , sugerida anteriormente pela Eq. (1.11), pode ser encontrada facilmente fazendo-se a expansão em série de Taylor da energia $E^n(\mathbf{k})$ em torno de $k = 0$

$$E^n(\mathbf{k}) = E^n(0) + \sum_{\alpha} \frac{\partial E^n}{\partial k_{\alpha}} k_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 E^n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} k_{\alpha} k_{\beta}, \quad (1.23)$$

e comparando-se o termo de segunda ordem desta expansão com o da Eq. (1.21),

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 E^n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} k_{\alpha} k_{\beta} = \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \left(\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \right) \cdot \mathbf{k} = \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{k} \cdot \left(\frac{1}{m_{\alpha,\beta}^*} \right) \cdot \mathbf{k}, \quad (1.24)$$

onde encontramos finalmente

$$\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} = \frac{\hbar^2}{m_{\alpha,\beta}^*}, \quad (1.25)$$

que, de fato, é exatamente a forma do tensor massa efetiva mostrada na Eq. (1.11).

O termo de segunda ordem na Eq. (1.21) pode ser identificado como a relação de dispersão encontrada a partir da equação de Schrödinger para um Hamiltoniano onde o potencial periódico não está explícito. Porém, a massa do portador nesta equação deve ser a massa efetiva definida pelas Eqs. (1.11) e (1.22). Com base nisto, para estudarmos o confinamento de elétrons e buracos em heteroestruturas semicondutoras, resolvemos a equação de Schrödinger separadamente para cada portador, sendo suas massas efetivas dadas pelas curvaturas das bandas de condução e valência, considerando explicitamente no Hamiltoniano apenas o potencial gerado pelo descasamento entre as bandas dos materiais (ver Seção 1.1). Esta aproximação é conhecida como "aproximação da massa efetiva", e a Eq. (1.22) é chamada de "teorema da massa efetiva"[16]. Os valores que utilizamos para as massas efetivas dos portadores no decorrer desta Dissertação são encontrados na literatura [12].

1.3 Reduzindo a Dimensionalidade

Para tratar da redução de dimensionalidade, começaremos discutindo um problema bastante conhecido, encontrado freqüentemente na descrição de heteroestruturas semicondutoras: o poço quântico quadrado unidimensional. A Fig. 1.7(a) mostra uma representação esquemática de uma heteroestrutura AlAs/GaAs. Como vimos anteriormente na Seção 1.1, a junção entre materiais com *gap* de energia diferentes faz com que apareçam poços de potenciais na direção de crescimento para elétrons e buracos nessas estruturas. A Fig. 1.7(b) mostra o poço de potencial na direção z para a banda de condução, gerado pela presença da heteroestrutura. A equação de Schrödinger, na aproximação da teoria da massa efetiva, para um elétron de massa m^* numa estrutura como esta pode ser aproximada por

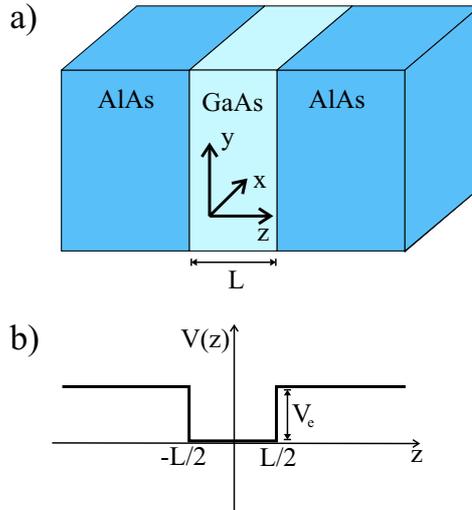


Figura 1.7: (a) Representação esquemática de uma heteroestrutura AlAs/GaAs crescida na direção z , sendo a espessura da camada de GaAs dada por L . (b) Banda de condução para esta heteroestrutura na direção de crescimento, que apresenta um poço de potencial com altura V_e .

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V(z)\Psi = E\Psi. \quad (1.26)$$

A partir da separação de variáveis $\Psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, obtemos as seguintes equações para cada direção:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_x(x) = E_x \psi_x(x), \quad (1.27)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_y(y) = E_y \psi_y(y), \quad (1.28)$$

e

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_z(z) + V(z)\psi_z(z) = E_z \psi_z(z). \quad (1.29)$$

Podemos obter as funções de onda nas direções x e y como $\psi_x(x) = e^{ik_x x}$ e $\psi_y(y) = e^{ik_y y}$, e as autoenergias relacionadas a estas direções são dadas respectivamente por $E_x = \hbar k_x^2 / 2m^*$ e $E_y = \hbar k_y^2 / 2m^*$, sem nenhuma restrição sobre os valores de k_x e k_y , ou seja, temos um espectro contínuo para estas energias.

Já para a direção z , onde temos a heteroestrutura, as funções de onda são dadas por

$$\psi_z(z) = \begin{cases} B e^{\kappa z}, & z \leq -L/2; \\ A \cos(k_z z), & -L/2 \leq z \leq L/2; \\ B e^{-\kappa z}, & L/2 \leq z, \end{cases}$$

para estados pares, onde $k_z = \sqrt{2m^* E_z} / \hbar$ e $\kappa = \sqrt{2m^*(V_e - E_z)} / \hbar$. Para estados ímpares, basta trocar $\cos(k_z z)$ por $\sin(k_z z)$ na expressão para $-L/2 \leq z \leq L/2$. Podemos observar que, diferente das funções ψ_x e ψ_y , que estão distribuídas por todo o plano xy , a função $\psi_z(z)$ é praticamente restrita apenas à região $|z| \leq L/2$, caindo exponencialmente na região das barreiras. O potencial de confinamento gerado pela heteroestrutura unidimensional reduz um grau de liberdade do sistema, por isso os poços quânticos também são conhecidos como sistemas bidimensionais ou quasi-bidimensionais [17, 18], onde o termo "dimensionalidade" refere-se ao número de graus de liberdade do sistema. As condições de contorno em $-L/2$ e $L/2$ levam às equações transcendentais [17]

$$k_z \tan(k_z \frac{L}{2}) = \kappa, \quad (1.30)$$

para estados pares, e

$$k_z \cot(k_z \frac{L}{2}) = -\kappa, \quad (1.31)$$

para estados ímpares. Apenas certos valores de E_z satisfazem alguma destas equações, portanto os níveis de energia em z são discretos.

Resumindo, a presença de uma heteroestrutura gera um poço quântico na direção de crescimento, o que, além de reduzir os graus de liberdade do sistema, discretiza o espectro de energia relacionado ao movimento do elétron na direção z . É fácil ver que, como a heteroestrutura também forma um poço de potencial em z na banda de valência, estes efeitos podem ser observados também para buracos. De fato, nesta aproximação que fizemos para o confinamento em heteroestruturas, não levamos em conta a variação da massa efetiva em z devido à mudança de material, porém, isto não afeta qualitativamente os resultados discutidos nesta Seção [19, 20].

Devido a tais características, os sistemas semicondutores de dimensionalidade reduzida têm atraído bastante interesse nos últimos anos, e muitos tipos de heteroestruturas têm sido crescidos experimentalmente, formando desde sistemas bidimensionais (poços quânticos) até zero-dimensionais (pontos quânticos). O número de graus de liberdade D_l e o número de direções de confinamento D_c nestes sistemas, por razões óbvias, devem obedecer à equação $D_l + D_c = 3$. A Tabela 1.1 mostra quatro tipos de sistemas de baixa dimensionalidade e seus respectivos D_l e D_c .

Tabela 1.1: Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade D_l e de direções de confinamento D_c .

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

Como vimos anteriormente, em sistemas bidimensionais temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) + E_z^{(n)}, \quad (1.32)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$, onde o espectro de energia é quantizado somente para o movimento na direção z , onde há confinamento. Já em um sistema unidimensional, como um fio quântico, onde os portadores estão livres apenas na direção x , temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}k_x^2 + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.33)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots$. Finalmente, quando os portadores estão confinados em todas as direções, como nos pontos quânticos, temos

$$E = E_x^{(l)} + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.34)$$

com $l = 1, 2, 3, \dots$ onde obtemos um espectro de energia completamente discreto. Neste trabalho, estudaremos o confinamento de elétrons e buracos em dois tipos de sistemas de fios quânticos semicondutores, que serão descritos a seguir.

1.4 Fios Quânticos

Nos últimos anos, muitos pesquisadores têm estudado estruturas semicondutoras unidimensionais em nanoescala, como fios quânticos, devido às suas aplicações em diversos dispositivos eletrônicos e em sensores biológicos, e também devido a sua química ser facilmente manipulável [21, 22, 23]. Muitos grupos têm usado várias técnicas de crescimento para sintetizar fios quânticos compostos de dois materiais semicondutores, formando vários tipos de fio: *core-shell* (isto é, um fio de um material coberto por uma camada de outro material), *core-multishell* (um fio de um material coberto por uma sequência de camadas de outros materiais), e fios com heteroestruturas longitudinais [24, 25, 26].

Em particular, artigos recentes têm mostrado o crescimento de fios quânticos *Si/SiGe* dos tipos *core-shell* e *core-multishell*, utilizando as técnicas de crescimento CVD (*chem-*

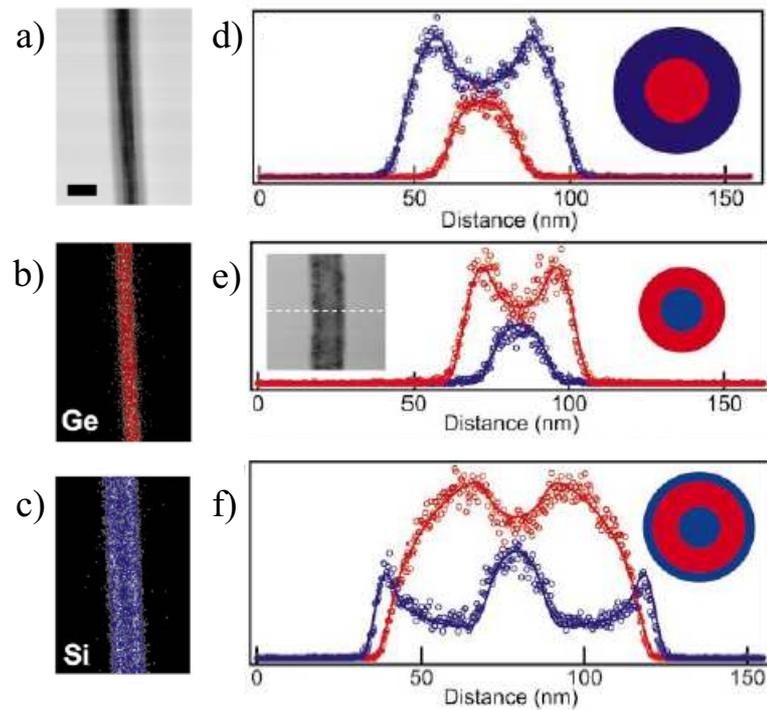


Figura 1.8: (a) Imagem de TEM de um fio *core-shell*, composto por SiGe envolto em uma casca de Si amorfo. A barra de escala é de 50 nm. (b), (c) Mapas das concentrações de Si (azul) e Ge (vermelho), respectivamente, no fio mostrado em (a). (d) Mapa das concentrações de Si (azul) e Ge (vermelho) numa seção transversal do fio mostrado em (a). (e) Mapa das concentrações numa seção transversal de uma estrutura composta por um fio de Si (azul) coberto por uma camada de Ge (vermelho), cuja imagem de TEM é mostrada no inset desta figura. (f) Mapa das concentrações numa seção transversal de uma estrutura *core-multishell*, composta por um fio de Si (azul) coberto por uma camada interna de Ge (vermelho) e envolto em outra camada de Si [24].

ical vapor deposition) e VLSD (*vapor liquid solid deposition*). Estas estruturas apresentaram excelentes propriedades de transporte, tornando possível sua aplicação em dispositivos de alta mobilidade [24, 27]. A Fig. 1.8 mostra imagens de microscopia de transmissão (TEM, do inglês "*transmission electron microscopy*") e análises das composições destes fios, onde podemos perceber a existência de interfaces graduais entre as camadas de Si e SiGe que compõem estas estruturas.

Estudos experimentais sobre poços, fios e pontos quânticos $Si_{1-x}Ge_x$ imersos em matrizes de Si têm indicado que estas heteroestruturas apresentam uma característica peculiar em sua estrutura de bandas: a banda de valência sempre forma um poço para os buracos, porém, existem dois tipos possíveis de alinhamento de bandas para elétrons, dependendo da concentração x de Ge da liga. Para baixas concentrações de Ge, a banda de condução forma um poço (tipo-I) para elétrons, enquanto para maiores concentrações ela pode formar uma barreira (tipo-II) [28, 29, 30, 31, 32].

O crescimento de fios quânticos semicondutores com heteroestruturas longitudinais tem sido também anunciado por muitos grupos de pesquisa [33, 34]. Estudos teóricos e experimentais têm sido feitos sobre estes fios, onde foram sugeridas diversas aplicações para estas estruturas como guias de onda, diodos de emissão de luz e lasers [35, 36, 37]. Um trabalho teórico sobre fios com heteroestruturas compostas por PbS, PbSe e PbTe, feito por Y.-M. Lin *et al.* [38], mostrou que estes sistemas são também promissores para aplicações termoelétricas. Um processo híbrido *pulse laser ablation/chemical vapor deposition* (PLA-CVD) foi desenvolvido por Y. Wu *et al.* [39] para a síntese de fios com heteroestruturas Si/SiGe periódicas, e sugeriu-se que estes fios poderiam ser usados como blocos para a construção de circuitos e dispositivos eletrônicos em nanoescala.

A fabricação de fios InP/InAs de alta qualidade foi anunciada recentemente pelo grupo de pesquisa de L. Samuelson [33, 40], onde atingiu-se um alto grau de controle sobre o tamanho e o número de elétrons nestes sistemas. A Fig. 1.9 mostra imagens de TEM destes fios.

Gudiksen *et al.* [35] publicou recentemente um trabalho sobre o crescimento de

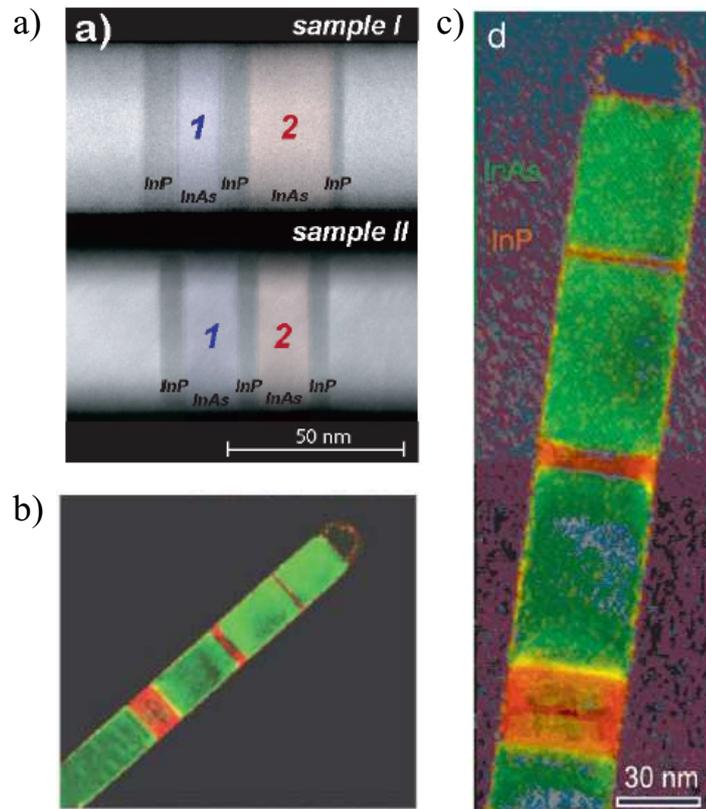


Figura 1.9: (a) Imagem de TEM de dois fios heteroestruturados InP/InAs de diâmetro 40 nm. O primeiro (*sample I*) apresenta duas camadas de InAs, de espessuras 11.5 nm (azul) e 22.5 nm (vermelho), separadas por três camadas de InP (9.5 nm, 7 nm e 4 nm). O segundo (*sample II*) apresenta duas camadas praticamente idênticas de InAs, de espessura 15 nm, e três barreiras praticamente idênticas de InP, com 5.8 nm de espessura [40]. (b), (c) Imagens de TEM de um fio heteroestruturado InP/InAs, mostrando sua composição a partir de uma colorização dependente dos parâmetros de rede da estrutura, obtidos numa análise de transformada de Fourier das imagens: identifica-se como verde o parâmetro de rede do InAs e, como vermelho, o do InP [33].

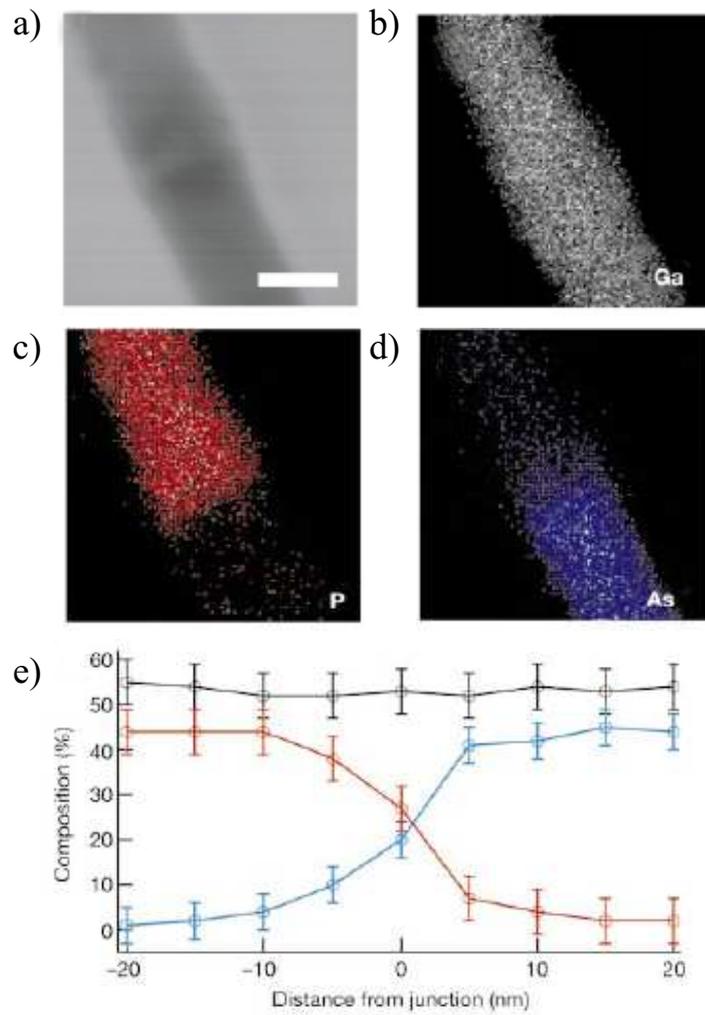


Figura 1.10: (a) Imagem de TEM de um fio heteroestruturado GaP/GaAs. A barra de escala é de 20 nm. (b), (c) e (d) Mapas das concentrações de Ga (cinza), P (vermelho) e As (azul), respectivamente, da junção mostrada em (a). (e) Perfil das concentrações de Ga (preto), P (vermelho) e As (azul) ao longo do eixo do fio [35].

nanofios compostos por super-redes de 2 até 21 camadas de GaAs e GaP, mostrando imagens de TEM de alta resolução e uma análise da composição dos fios. Estas imagens, assim como a análise da composição, estão mostradas na Fig. 1.10. Nesta análise, observa-se que a transição entre as camadas GaAs e GaP não é abrupta, mas apresenta uma interface gradual de 15-20 nm de espessura, quando usado um catalizador de Au de diâmetro ~ 20 nm. Mostrou-se também que, para menores raios do fio, estas interfaces podem ser reduzidas, e para um fio de diâmetro 5 nm, por exemplo, espera-se que hajam interfaces de menos de 5 nm.

1.5 Excitons em Fios Quânticos

Como vimos nas Seções anteriores, quando um elétron é excitado e passa da banda de valência para a banda de condução em estruturas semicondutoras, o estado vazio deixado por ele na banda de valência comporta-se como uma partícula de carga positiva, chamada buraco. Os *excitons* são os pares ligados elétron-buraco, que podem ser excitados, por exemplo, pela incidência de um campo de radiação (um *fóton*). A atração Coulombiana entre o elétron e o buraco faz com que seus movimentos sejam correlacionados. Os excitons podem então se mover pela rede cristalina transportando energia, porém, por serem compostos por uma partícula positiva (buraco) e outra negativa (elétron), eles são neutros e não transportam carga, e por isso não contribuem diretamente para a condutividade elétrica.

Estados excitônicos em cristais têm sido estudados desde 1931, quando J. Frenkel [41, 42] publicou os primeiros conceitos para a descrição de pares elétron-buraco fortemente ligados, como os que são encontrados em cristais iônicos. Posteriormente, G. H. Wannier [43] e N. F. Mott [44] publicaram trabalhos apresentando um estudo sobre um outro tipo de exciton, com uma interação mais fraca entre elétrons e buracos, o que é observado na maioria dos semicondutores, onde o potencial Coulombiano entre estes portadores é blindado pelos elétrons de valência por meio da alta constante dielétrica

destes materiais [45].

Dessa forma, classificam-se como "excitons de Frenkel" aqueles onde a interação elétron-buraco é forte, e a função envelope que descreve o exciton é confinada numa região de poucas células unitárias. Devido à sua extensão espacial restrita, o problema dos excitons de Frenkel deve ser tratado como um problema de duas partículas, e dessa forma, o estudo destes excitons deve envolver toda a estrutura de bandas do semiconductor. Por outro lado, quando o par elétron-buraco não está fortemente ligado e sua função envelope se estende por centenas de Angstroms, temos um "exciton de Wannier-Mott". Neste caso, as propriedades excitônicas podem ser calculadas a partir da aproximação da massa efetiva, onde elétrons e buracos são considerados como duas partículas espacialmente separadas na rede cristalina, cujas massas efetivas são dadas pelas curvaturas das bandas de condução e valência, respectivamente. O esquema da Fig. 1.11 representa uma rede cristalina, mostrando a extensão espacial dos excitons de Frenkel e de Wannier-Mott.

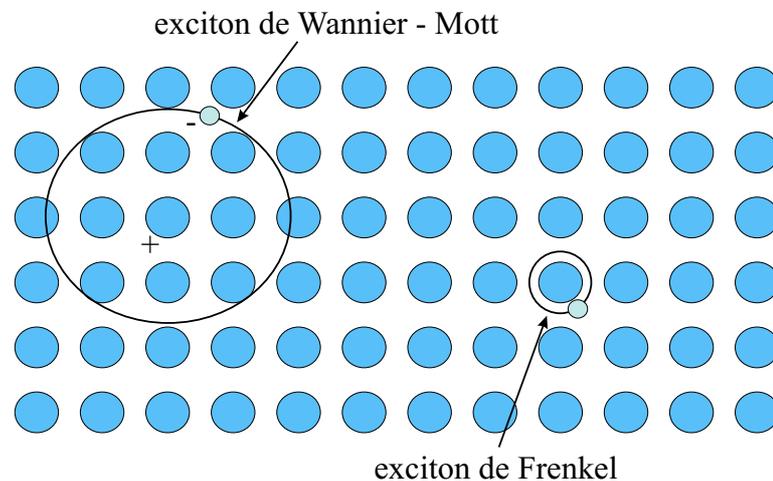


Figura 1.11: Representação esquemática mostrando a extensão da função envelope dos excitons de Frenkel e Wannier-Mott numa estrutura periódica [10].

Em semicondutores volumétricos, os excitons apresentam uma baixa energia de ligação, e por isso são normalmente observados apenas em amostras com alto grau de pureza. Porém, com o advento das heteroestruturas, o estudo das transições excitôni-

cas em poços [18, 46], fios [47, 48] e pontos quânticos [49, 50] tornou-se uma área de grande importância, tanto no ponto de vista da ciência como no da tecnologia: a presença de um potencial de confinamento para os portadores é responsável por um aumento considerável na energia de ligação dos excitons e na força do oscilador, o que proporciona ressonâncias extremamente acentuadas no espectro óptico destas estruturas. A energia e a intensidade destas ressonâncias são facilmente controláveis, o que permite o uso das transições excitônicas em heteroestruturas para diversas aplicações tecnológicas, como por exemplo, em dispositivos opto-eletrônicos [10].

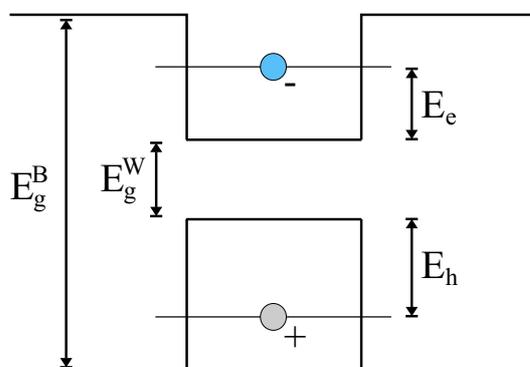


Figura 1.12: Esquema que representa um elétron (azul) e um buraco (cinza) em uma heteroestrutura, confinados nas bandas de condução e valência, respectivamente, formando um exciton.

O esquema da Fig. 1.12 representa um par elétron-buraco, formando um exciton, numa heteroestrutura com alinhamento de bandas tipo-I (ver Seção 1.1). O elétron (azul) e o buraco (cinza) estão, cada um, em um dos autestados discretos dos poços quânticos formados pelas bandas de energia, apresentando energias de confinamento E_e e E_h , respectivamente. Neste caso, fica claro que, se um elétron volta para a banda de valência, ele deve liberar uma quantidade de energia E_e relativa ao seu confinamento na banda de condução, uma energia E_h relativa ao confinamento do buraco na banda de valência, e mais a energia E_g^W do *gap* do material que compõe o poço. Além disso, existe ainda a energia de ligação E_b relacionada à interação Coulombiana entre o elétron

e o buraco no exciton. Sendo assim, a energia total E_{exc} armazenada no exciton é dada por

$$E_{exc} = E_g^W + E_e + E_h - |E_b|, \quad (1.35)$$

e pode ser estimada, na aproximação da massa efetiva, resolvendo-se a equação de Schrödinger para o confinamento dos portadores separadamente (no caso de um exciton de Wannier-Mott).

No caso de um alinhamento de bandas tipo-II, uma das bandas de energia forma uma barreira. Em uma heteroestrutura Si/Ge, por exemplo, a barreira está na banda de condução. Assim, o elétron nesta estrutura não está confinado pelo descasamento entre as bandas dos materiais ($E_e = 0$), ficando preso apenas pela ligação com o buraco no exciton. A energia do exciton, neste caso, é dada apenas por $E_{exc} = E_g^W + E_h - |E_b|$.

Quando um elétron sai da banda de condução para voltar a ocupar um estado na banda de valência, a energia E_{exc} do exciton é liberada, podendo ser emitida na forma de luz. A expressão que relaciona a energia e o comprimento de onda da luz, $E = hc/\lambda$, nos dá uma pista de uma aplicação tecnológica do conhecimento da energia do exciton em semicondutores: conhecendo-se a energia liberada pelo exciton, podemos prever qual o comprimento de onda da luz emitida em uma heteroestrutura semicondutora, sendo possível então ajustar os parâmetros da estrutura para obter emissores de luz, como LED's (diodo de emissão de luz, do inglês "*light emitting diode*"), por exemplo, em uma certa frequência (ou cor) desejada.

1.6 Sumário

No Capítulo 2 deste trabalho, usaremos a aproximação da massa efetiva para fazer um estudo sobre os excitons de Wannier-Mott em fios quânticos *core-shell* cilíndricos, considerando alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II. Existem muitos artigos na literatura relacionados a excitons em poços e pontos quânticos tipo-II. Apesar do confinamento de excitons em fios quânticos tipo-II ser também um problema bastante inter-

essante, poucos trabalhos teóricos sobre estas estruturas têm sido feitos. J. M. Rorison [51] foi um dos primeiros a apresentar estudos teóricos sobre as propriedades excitônicas de fios quânticos do tipo-II, onde foram calculadas a energia de ligação e a força do oscilador para um fio quântico $GaAs/AlAs$, considerando barreiras de potencial finitas ou infinitas, usando uma aproximação variacional e um método autoconsistente. Esse trabalho, porém, não apresentou um estudo de como as propriedades excitônicas destes sistemas podem ser afetadas pela presença de um campo magnético externo. Recentemente, um estudo sobre o confinamento de excitons em pontos quânticos planos do tipo-II, sob um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do ponto, foi apresentado por K. L. Janssens *et al* [52], onde foram encontrados resultados interessantes relacionados ao momento angular dos portadores no estado fundamental para campos magnéticos mais intensos. A influência de campos magnéticos nos estados dos excitons em fios quânticos também tem sido bastante estudada [48, 53, 54, 55, 56], mas a maioria dos trabalhos está relacionada a sistemas do tipo-I.

Um outro assunto importante a ser discutido é a influência da existência de uma camada interfacial entre os materiais que compõem a heteroestrutura no cálculo das energias de confinamento e dos excitons, já que em quase todos os trabalhos experimentais publicados recentemente, uma análise da composição dos fios indica a presença de interfaces não-abruptas entre os materiais. O problema das interfaces graduais em sistemas de baixa dimensionalidade, como poços e pontos quânticos, tem sido bastante estudado, onde foram encontradas alterações significativas no espectro de energia dos excitons devido à existência destas interfaces [57, 58, 59].

No Capítulo 3, estudaremos o confinamento de elétrons e buracos em fios quânticos *free-standing* (isto é, fios que não estão imersos em uma matriz) com heteroestruturas longitudinais, analisando a influência das interfaces graduais entre os materiais sobre os estados destes portadores. Recentemente, cálculos baseados na teoria da massa efetiva para uma banda foram feitos por Yan Voon *et al.* [60] para estudar os estados eletrônicos em fios *free-standing* com heteroestruturas $AlAs/GaAs$ e $InP/InAs$ longitudinais.

Os resultados mostraram a possibilidade de uma localização das funções de onda longitudinais nas barreiras, como num potencial de confinamento tipo-II [61], induzida pelo aumento da energia de confinamento radial para fios mais finos. Além disso, os resultados publicados neste trabalho indicaram que, quando considerado um certo valor crítico para o raio do fio, estas estruturas poderiam apresentar um comportamento de portadores livres ao longo do eixo do fio, apesar da existência da heteroestrutura. Isto foi confirmado mais tarde por M. Willatzen *et al.* [62], e mostrou-se também que a existência desses raios críticos para a inversão da localização dos estados é bem mais geral, podendo ser encontrada também a partir de cálculos considerando-se muitas bandas [63]. Apesar de alguns trabalhos experimentais na literatura mostrarem transições graduais entre os materiais da heteroestrutura [35], todos estes trabalhos teóricos sobre fios heteroestruturados citados aqui têm tratado apenas de modelos com interfaces abruptas, sem levar em conta a existência de interfaces graduais.

Em seguida, o Capítulo 4 apresenta as conclusões desta Dissertação, assim como as perspectivas para trabalhos futuros. Após este Capítulo, a lista das referências bibliográficas citadas no decorrer desta Dissertação é apresentada, seguida de três Apêndices. No Apêndice A, desenvolvemos o Hamiltoniano do exciton na presença de campos magnéticos, que será utilizado nos modelos teóricos que descrevem os fios *core-shell*, no Capítulo 2, e os fios heteroestruturados, no Capítulo 3. Já no Apêndice B, apresentamos com detalhes o esquema de diferenças finitas que utilizamos para resolver algumas equações diferenciais encontradas no decorrer deste trabalho. No Apêndice C, apresentamos nossos trabalhos publicados em periódicos, finalizando então o conteúdo desta Dissertação.

2

Fios Quânticos *Core-Shell*

Neste Capítulo, estudaremos as propriedades excitônicas de fios quânticos cilíndricos $Si_{1-x}Ge_x$ envoltos por uma camada de Si . Consideramos as duas possibilidades conhecidas para o alinhamento de bandas destes sistemas, tipo-I e tipo-II, para as composições apropriadas de Ge . A aproximação de massa efetiva é usada para calcular a energia do exciton, levando-se em conta a existência de interfaces graduais. O comportamento de elétrons e buracos sob campos magnéticos aplicados também será estudado, e uma análise do raio médio do elétron em sistemas tipo-II será feita para ilustrar melhor as variações de momento angular, que são responsáveis pelo aparecimento de oscilações de energia com o aumento da intensidade do campo nestes sistemas [64].

2.1 Modelo Teórico

O Hamiltoniano que descreve um sistema de partículas sujeitas a um campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ é dado por

$$H = (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \frac{1}{2m_i^{\parallel}} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) + V(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Devido à simetria do problema, usaremos coordenadas cilíndricas circulares, sendo ρ a direção de confinamento e z a direção de liberdade. Usando o gauge simétrico para

o potencial vetor, $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\theta$, o Hamiltoniano da Eq. (2.1) se torna (ver Apêndice A)

$$H_{exc} = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^\parallel(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{1}{m_i^\parallel(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\mu_\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} m_i^\parallel \rho_i^2 \omega_c^2 + V_i(\rho_i), \quad (2.2)$$

onde $i = e, h$, m_i^\parallel é a massa efetiva no plano para cada portador, que depende de ρ , μ_\perp é a massa reduzida do sistema elétron-buraco na direção z (ver Apêndice A), e $\omega_c = eB/m_i^\parallel$ é a frequência ciclotrônica. Usamos as coordenadas relativas $z = |z_e - z_h|$ e $\theta = \theta_e - \theta_h$. O potencial $V_i(\rho_i)$ inclui o potencial da heteroestrutura $V_i^{het}(\rho_i)$ e a interação coulombiana entre elétrons e buracos.

Para levar em conta a existência de uma interface gradual entre os materiais, a concentração χ de Ge da liga é considerada dependente de ρ , como descrito no modelo de Freire *et al.* [65]. Para um $\chi(\rho_i)$ crescendo linearmente na região interfacial, temos

$$\chi(\rho_i) = \begin{cases} x, & 0 \leq \rho_i < \rho_1; \\ x - (\rho_i - \rho_1)x/w, & \rho_1 \leq \rho_i < \rho_2; \\ 0, & \rho_i \geq \rho_2, \end{cases}$$

onde ρ_1 e ρ_2 são os limites da região interfacial, e $w = \rho_2 - \rho_1$ é a espessura da interface. Podemos expressar $V_i^{het}(\rho_i)$ e $m_i^\parallel(\rho_i)$ como funções de $\chi(\rho_i)$: $V_i^{het}(\rho_i) = Q_i [\epsilon_1 \chi(\rho_i) + \epsilon_2 \chi^2(\rho_i)]$ e $m_i^\parallel(\rho_i) = \{m_{i,Ge} \chi(\rho_i) + m_{i,Si} [1 - \chi(\rho_i)]\}$, onde ϵ_1 e ϵ_2 são os parâmetros de interpolação e Q_i é o band offset [28].

Tomamos a autofunção $(1/\sqrt{2\pi})e^{il\theta}$ como solução para a coordenada θ , onde $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o número quântico relacionado ao momento angular. Usando uma aproximação variacional, escolhemos uma função de onda do tipo gaussiana [66] para a solução em z

$$\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{\eta}} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{z^2}{\eta^2} \right), \quad (2.3)$$

onde η é o parâmetro variacional que minimiza a energia de ligação do exciton.

Para sistemas do tipo-I, usamos uma função de onda do exciton $\Psi(\rho_e, \rho_h, \theta, z) = (1/\sqrt{2\pi})e^{i\theta}\psi_e(\rho_e)\psi_h(\rho_h)\phi(z)$, onde ψ_e e ψ_h são as funções de onda normalizadas para elétrons e buracos, respetivamente. Fazendo $\langle \Psi | H_{exc} | \Psi \rangle = E_x \langle \Psi | \Psi \rangle$, temos

$$E_x = \langle \psi_e | H_e | \psi_e \rangle + \langle \psi_h | H_h | \psi_h \rangle + \langle \Psi | H_{e-h} | \Psi \rangle, \quad (2.4)$$

onde o Hamiltoniano H_i para uma partícula é dado por

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^\parallel(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m_i^\parallel(\rho_i)\rho_i^2} + \frac{l}{2}\hbar\omega_c + \frac{1}{8}m_i^\parallel(\rho_i)\omega_c^2\rho_i^2 + V_i^{het}(\rho_i), \quad (2.5)$$

e H_{e-h} é o Hamiltoniano da interação elétron - buraco

$$H_{e-h} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}. \quad (2.6)$$

Este processo leva a uma equação diferencial em ρ para cada portador $[H_i - E_i]\psi_i(\rho_i) = 0$, que é resolvida por um método de discretização [67] usando um grid uniforme. A energia de ligação é então encontrada a partir de $E_b = \langle \Psi | H_{e-h} | \Psi \rangle$, o que leva a

$$E_b = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi(z) dz - \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int_V \frac{|\psi_e(\rho_e)|^2 |\psi_h(\rho_h)|^2 |\phi(z)|^2}{(z^2 + |\rho_e - \rho_h|^2)^{1/2}} dV, \quad (2.7)$$

onde $dV = \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h d\theta dz$ e a integral do termo Coulombiano é feita sobre um cilindro de comprimento infinito ao longo do eixo z . Sendo $\phi(z)$ uma função variacional dada pela Eq. (2.3), a integral do primeiro termo pode ser resolvida analiticamente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi(z) dz = -\frac{1}{\eta^2}, \quad (2.8)$$

e o segundo termo assume a forma

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon\eta} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_V \frac{|\psi_e(\rho_e)|^2 |\psi_h(\rho_h)|^2 \exp(-2z^2/\eta^2)}{(z^2 + \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos\theta)^{1/2}} dV, \quad (2.9)$$

que pode ser simplificada, levando à expressão final para a energia de ligação

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2\mu_\perp\eta^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\eta} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\psi_e(\rho_e)|^2 \rho_e$$

$$\times \int_0^{+\infty} |\psi_h(\rho_h)|^2 \rho_h \int_0^{2\pi} \exp(a) K_0(a/2) d\rho_e d\rho_h d\theta, \quad (2.10)$$

onde $a = -2|\rho_e - \rho_h|^2/\eta$ e $K_0(x)$ é a função de Bessel modificada do segundo tipo de ordem zero [68]. Estas integrais são calculadas numericamente, e a energia do exciton é obtida fazendo-se $E_{exc} = E_{gap} + E_e + E_h - E_b$.

Em sistemas do tipo-II, como o potencial para o elétron tem a forma de um degrau, este portador não é mais confinado pelo descasamento entre as bandas dos materiais que compõem o fio, e permanece ligado apenas pela interação Coulombiana com o buraco. Isto implica que, ao resolver a equação de Schrödinger para o elétron na ausência do termo de interação Coulombiana, encontraremos uma energia $E_e = 0$ para o confinamento do elétron. Assim, para resolver o problema num sistema do tipo-II, devemos aplicar a mesma forma de $\Psi(\rho_e, \rho_h, \theta, z)$ usada anteriormente para o caso tipo-I em $H_{exc}|\Psi\rangle = E_x|\Psi\rangle$ e multiplicar isto pelo complexo conjugado apenas das partes dependentes de ρ_h e z da função de onda do exciton [69]. Com isso, a equação de Schrödinger com o Hamiltoniano de uma partícula, dado pela Eq. (2.5), é resolvida primeiro para o buraco, de forma que

$$E_x|\psi_e\rangle = (H_e + E_h + \langle\psi_h\phi|H_{e-h}|\psi_h\phi\rangle)|\psi_e\rangle. \quad (2.11)$$

Uma vez encontrada a função de onda do buraco ψ_h , o potencial Coulombiano efetivo para o elétron devido à presença do buraco é calculado. Assim, chegamos à seguinte equação diferencial para $\psi_e(\rho_e)$

$$[H_e + E_h + I(\rho_e)]\psi_e(\rho_e) = E_x\psi_e(\rho_e), \quad (2.12)$$

onde $I(\rho_e) = \langle\psi_h\phi|H_{e-h}|\psi_h\phi\rangle$ é o potencial Coulombiano efetivo, dado por

$$I(\rho_e) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi(z) dz - \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{|\psi_h(\rho_h)|^2 |\phi(z)|^2}{(z^2 + |\rho_e - \rho_h|^2)^{1/2}} d\rho_h d\theta dz, \quad (2.13)$$

que é simplificado da mesma maneira que fizemos no caso tipo-I [68], onde encontramos

$$I(\rho_e) = \frac{\hbar^2}{2\mu_\perp\eta^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\eta} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\psi_h(\rho_h)|^2 \rho_h \int_0^{2\pi} \exp(a) K_0(a/2) d\rho_h d\theta. \quad (2.14)$$

O parâmetro η é ajustado de maneira a minimizar a energia do exciton E_x , assim como no método variacional desenvolvido para fios do tipo-I, sendo a energia de ligação do exciton dada por $E_b = E_h - E_x$.

2.2 Efeito Aharonov-Bohm

Como iremos estudar o problema de um elétron em um fio quântico sob um campo magnético aplicado, é interessante fazermos primeiramente uma discussão sobre o efeito Aharonov-Bohm, que têm sido amplamente estudado nos últimos anos em diversos sistemas com simetria cilíndrica [70, 71, 72].

A Fig. 2.1 mostra um esquema de um experimento de fenda dupla, onde feixes de elétrons passam pelas fendas e geram um padrão de interferência sobre um anteparo. Entre as duas fendas, posiciona-se um solenóide cilíndrico longo, o qual gera um campo magnético \mathbf{B} em seu interior, porém, sem gerar campo magnético na região externa a ele, de forma que os elétrons que passam ao redor do solenóide estão em uma região de campo magnético nulo.

Apesar da ausência de campo magnético na região pela qual os elétrons passam, existe ainda um potencial vetor \mathbf{A} nesta região, tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$, o que faz com que o momento do elétron neste sistema assumira a forma $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$. Se temos um campo magnético no solenóide na forma $\mathbf{B} = B\hat{k}$, o potencial vetor pode ser escrito como $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\theta$ (gauge simétrico), como já foi dito anteriormente. Este potencial vetor está representado na Fig. 2.1 pelas setas sólidas ao redor do solenóide. Observa-se que, para o feixe que percorre o caminho 1, o potencial vetor \mathbf{A} aponta na mesma direção que o momento \mathbf{p} dos elétrons, enquanto para o caminho 2, estes vetores têm direções contrárias. Com isso, os elétrons que passam pelo caminho 1 possuem um momento final diferente daqueles que passam pelo caminho 2, e isso faz com que ocorra uma variação no padrão de interferência gerado no anteparo. A esta diferença de momento entre os feixes que passam pelos dois caminhos distintos, que

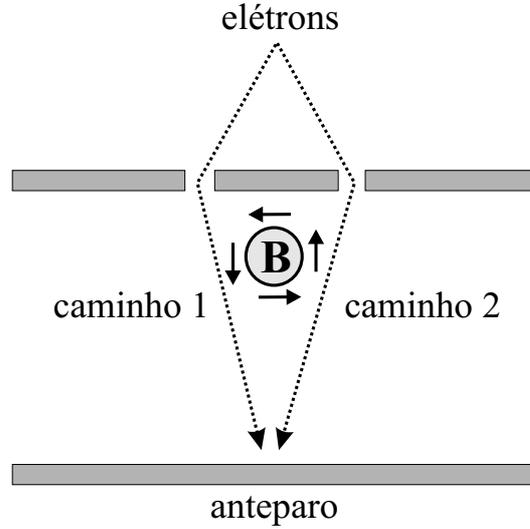


Figura 2.1: Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide longo (círculo cinza), que gera um campo magnético \mathbf{B} em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas sólidas mostram a direção do potencial vetor \mathbf{A} .

ocorre devido à presença de um potencial vetor e é responsável por uma variação no padrão de interferência observado no anteparo, dá-se o nome de efeito Aharonov-Bohm.

Nesta descrição simples que fizemos do efeito Aharonov-Bohm, escolhemos um gauge específico para o potencial vetor \mathbf{A} . Porém, descrições mais formais deste problema podem ser facilmente encontradas na literatura [10], onde é mostrado que este efeito não depende da escolha do gauge para o potencial vetor.

2.3 Resultados e Discussões

Calculamos a energia de ligação e a energia total do exciton em fios quânticos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ para vários valores do raio do fio e da espessura da interface, com $x = 0.15$ (tipo-I) e $x = 0.30$ (tipo-II). Os parâmetros do material da liga foram obtidos a partir de uma interpolação entre os parâmetros dos materiais Si e Ge puros, que estão listados na Tabela 2.1 [28].

Tabela 2.1: Parâmetros dos materiais Si e Ge, que são usados na obtenção de valores para a liga $Si_{1-x}Ge_x$ através de interpolação linear.

	a (Å)	E_g (eV)	$\epsilon(\epsilon_0)$	$m_e(m_0)$	$m_{hh}^\perp(m_0)$	$m_{hh}^\parallel(m_0)$
Si	5.43	1.12	12.1	0.191	0.277	0.216
Ge	5.65	0.66	16.0	0.081	0.208	0.057

2.3.1 Fios Quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ (Tipo-I)

A Fig. 2.2 mostra a energia de ligação (a) e a energia do estado fundamental (b) do exciton $e-hh$ como funções do raio do fio, em uma heteroestrutura $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ (alinhamento de banda do tipo-I) para vários valores de espessura da interface. Podemos observar que E_b aumenta quando aumentamos o raio do fio, até atingir um valor máximo de energia em $R \sim 50 \text{ \AA}$, após o qual a energia decresce. Para raios do fio abaixo deste valor crítico, a inclusão de interfaces graduais diminui a energia de ligação, e o contrário ocorre para valores maiores de raio. Este comportamento pode ser explicado considerando que, ao reduzir o raio do fio, fazemos com que este sistema se pareça cada vez mais com um Si volumétrico, onde as energias de ligação são naturalmente mais baixas [73]. Para um fio de raio 30 \AA com espessura da interface $w = 15 \text{ \AA}$, a energia de ligação é reduzida em $\sim 25\%$, enquanto para raios de fio maiores que 50 \AA temos um aumento médio de cerca de 5.5% nesta energia em relação ao caso abrupto.

Por outro lado, a energia do exciton sempre diminui com o aumento do raio do fio, e a inclusão de uma interface gradual aumenta o valor desta energia, especialmente para fios mais finos, onde estes aumentos podem atingir cerca de 30 meV . Para um fio $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ de raio 50 \AA com espessura da interface de $w = 15 \text{ \AA}$, o aumento na energia total do exciton é de cerca de 10 meV em relação ao caso abrupto.

A influência de um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo de cresci-

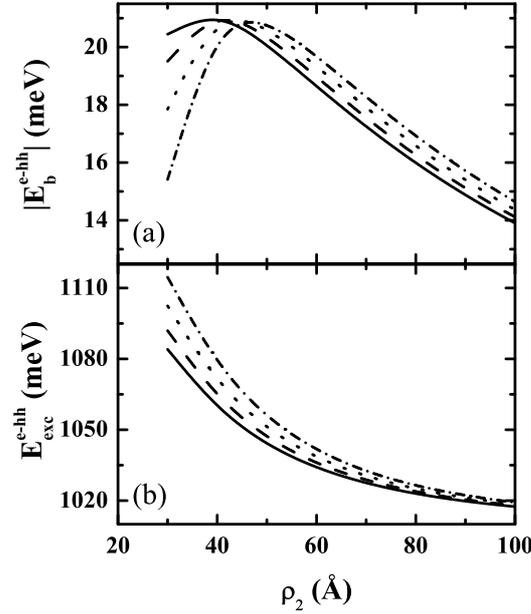


Figura 2.2: Energias de ligação (a) e do estado fundamental (b) dos excitons $e-hh$ em fios quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I como função do raio do fio, para espessuras da interface w de 0 Å (sólida), 5 Å (tracejada), 10 Å (pontilhada) e 15 Å (tracejada-pontilhada).

mento do fio, nas energias de ligação (a) e total (b) do exciton no estado fundamental, é apresentada na Fig. 2.3 para vários valores de raio do fio, considerando uma interface abrupta (curvas) e uma espessura de interface $w = 15$ Å (símbolos). O campo magnético não afeta consideravelmente estas energias, dando a elas apenas pequenos blueshifts da ordem de 2 meV, para todos os valores de raio do fio considerados. Fios com raio maior são mais afetados por este campo externo. Estes resultados estão de acordo com os obtidos na literatura em estudos anteriores sobre sistemas de fios quânticos formados por outros materiais [53, 74].

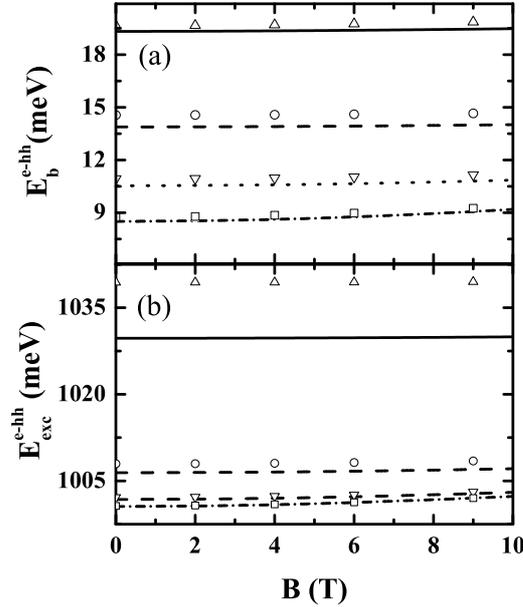


Figura 2.3: Energias de ligação (a) e do estado fundamental dos excitons (b) $e-hh$ em fios quânticos $Si/Si_{0.85}Ge_{0.15}$ tipo-I como função do campo magnético, com $w = 0$ Å (curvas) e $w = 15$ Å (símbolos), para vários valores do raio do fio ρ_2 : 50 Å (pontilhada, Δ), 100 Å (tracejada, \circ), 150 Å (sólida, ∇) e 200 Å (tracejada-pontilhada, \square).

2.3.2 Fios Quânticos $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ (Tipo-II)

A Fig. 2.4 (a) mostra o potencial efetivo $V_{eff}(\rho_e) = V_e^{het}(\rho_e) + I(\rho_e)$ para elétrons em fios quânticos tipo-II. Um gráfico deste potencial como função de ρ é mostrado na Fig. 2.4 (b), onde podemos ver claramente o aparecimento de uma depressão no potencial devido à interação Coulombiana elétron-buraco, que é responsável pela existência de um estado ligado do elétron na camada de silício próxima ao fio de $Si_{0.70}Ge_{0.30}$, apesar da heteroestrutura em si formar uma barreira para este portador.

Na Fig. 2.5, a energia de ligação (a) e a energia do estado fundamental (b) do exciton $e-hh$ são mostradas como funções do raio para um fio de $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ (alinhamento de banda tipo-II) com vários valores de espessura da interface. As energias de ligação em

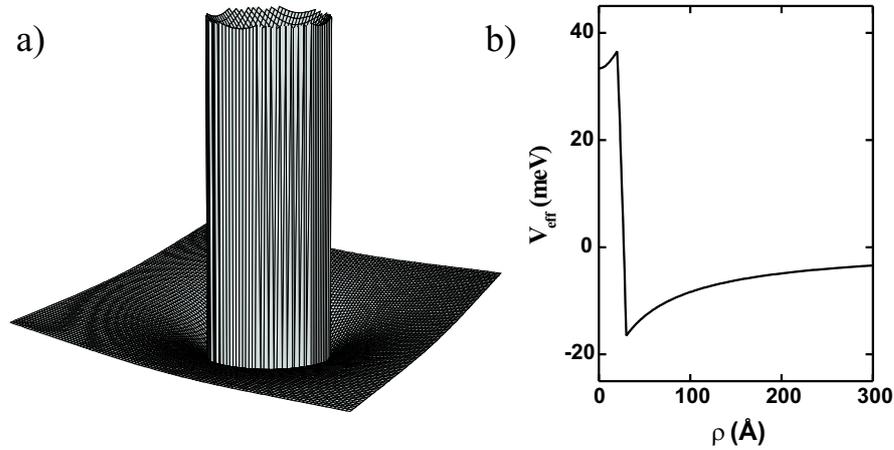


Figura 2.4: (a) Potencial Coulombiano efetivo para elétrons em um fio quântico $Si/Si_{1-x}Ge_x$ tipo-II com raio de 50 Å. (b) O gráfico deste potencial como função de ρ , mostrando uma região de depressão próxima à interface entre os materiais.

fios tipo-II são mais baixas que as do tipo-I, o que é esperado, já que em sistemas tipo-II o elétron e o buraco estão localizados em regiões diferentes do espaço. Além disso, estas energias sempre diminuem quando o raio do fio aumenta, diferente do que encontramos para o tipo-I. Isto ocorre porque agora, no limite de fios muito finos, o sistema não se parece mais apenas com um Si volumétrico, e sim com um sistema volumétrico com uma impureza localizada, já que o buraco permanece confinado dentro de um fio fino, enquanto o elétron é ligado a ele na camada de Si . Para um fio de $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ com raio de 40 Å e espessura da interface $w = 15$ Å, o aumento na energia de ligação é em torno de 12% em relação ao caso abrupto, enquanto a energia total do exciton é aumentada em cerca de 20 meV.

A Fig. 2.6 mostra a influência de um campo magnético, aplicado paralelamente ao eixo do fio, no comportamento dos excitons em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$, para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado. A separação entre estes dois estados é maior para o fio mais fino, e se reduz à medida que o raio do fio aumenta, tornando-se muito pequena para um fio de raio 150 Å, principalmente quando estamos observando a energia total do exciton (b). Também vemos nesta figura que a energia

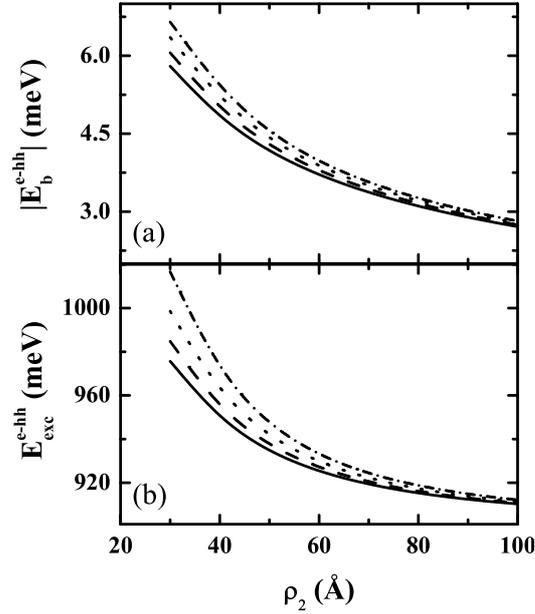


Figura 2.5: Energias de ligação (a) e do estado fundamental (b) dos excitons $e-hh$ em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-I como função do raio do fio, para espessuras da interface w de 0 Å (sólida), 5 Å (tracejada), 10 Å (pontilhada) e 15 Å (tracejada-pontilhada).

de ligação e a energia total do exciton em fios tipo-II oscilam quase periodicamente à medida que o campo magnético aumenta, devido a trocas de momento angular dos elétrons. A periodicidade destas trocas de momento angular depende do raio do fio. Isto pode ser explicado pelo fato de que, nestes sistemas, o elétron está localizado ao redor do fio. O campo magnético empurra o elétron em direção a uma barreira de potencial, o que faz com que uma troca de l para cada estado do elétron seja energeticamente mais favorável. Uma vez que os buracos já estão localizados dentro do fio, o campo magnético apenas comprime os estados de buraco na direção do eixo do fio. Dessa forma, não é necessária uma mudança no momento angular do buraco. Estas trocas de l induzidas pelo aumento na intensidade do campo magnético são análogas

ao efeito Aharonov-Bohm, que tem sido amplamente estudado, considerando-se várias estruturas onde os portadores estão localizados ao redor de uma barreira de potencial, como no caso dos anéis quânticos [70, 71, 72].

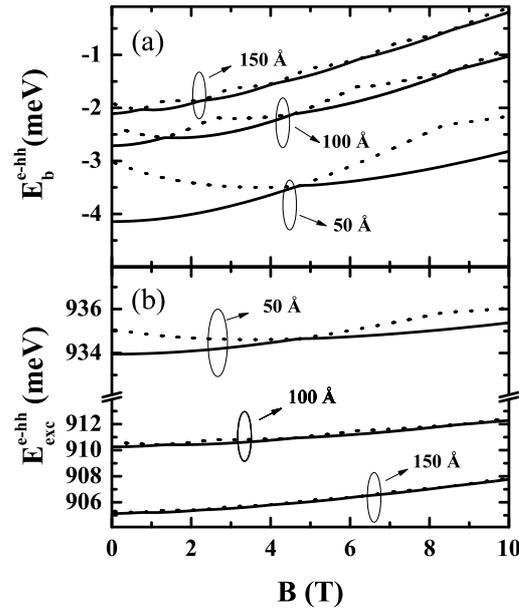


Figura 2.6: Energia de ligação (a) e energia total do exciton (b) $e-hh$ em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II como função do campo magnético para raios de 50 Å, 100 Å, e 150 Å, considerando uma interface abrupta. As linhas sólidas e pontilhadas representam o estado fundamental e o primeiro estado excitado, respectivamente.

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 autoestados de energia de anéis quânticos, onde esta periodicidade é constante e bem definida [70, 71, 75]. 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.

Este comportamento oscilatório dos elétrons em fios tipo-II sob campos magnéticos aplicados é ilustrado na Fig. 2.7, que mostra o raio médio $\langle \rho_e \rangle$ do estado fundamental do elétron como função da intensidade do campo magnético, para três valores de raios de fio, com espessuras de interface de $w = 0 \text{ \AA}$ e $w = 15 \text{ \AA}$. O inset mostra as energias de ligação do exciton relacionadas ao fio quântico de raio 50 \AA sob estes campos, para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado, considerando interfaces abruptas e não-abruptas. Aumentos na intensidade do campo magnético também geram oscilações no raio médio dos elétrons, o que é de se esperar, já que o momento angular deste portador está mudando quase periodicamente, e as funções de onda para estados com maior valor em módulo do número quântico de momento angular costumam ser mais extensas que as funções de onda para $l = 0$. Dessa forma, quando o campo magnético empurra o elétron em direção à camada de $Si_{1-x}Ge_x$, seu raio médio diminui até que uma troca de momento angular ocorra, que é quando l assume um maior valor em módulo, o que implica em uma função de onda do elétron mais extensa. Considerando campos magnéticos variando de 0 T até 10 T , podemos observar que para um fio de raio 50 \AA existe apenas uma transição, enquanto que para fios de raio 150 \AA existem cinco transições. Podemos ver também na Fig. 2.7 que a existência de uma interface gradual afeta os pontos de transição do momento angular das oscilações AB, o que é esperado, uma vez que estas interfaces reduzem o raio efetivo do potencial do fio quântico. De fato, a influência das interfaces nos pontos

de transição das oscilações AB pode ser observada até mesmo para maiores valores de raio do fio (ver Fig. 2.7). Para um fio de raio 150 Å com interface abrupta, a quinta transição de momento angular do elétron ocorre para um campo magnético B de aproximadamente 8.75 T, enquanto para um fio com espessura de interface de $w = 15$ Å esta transição ocorre em $B \simeq 9.4$ T. Considerando um raio menor, de 50 Å, por exemplo, este efeito é mais visível: a primeira transição ocorre em $B \simeq 5$ T para uma interface abrupta, enquanto para $w = 15$ Å este valor é alterado para $B \simeq 6.4$ T.

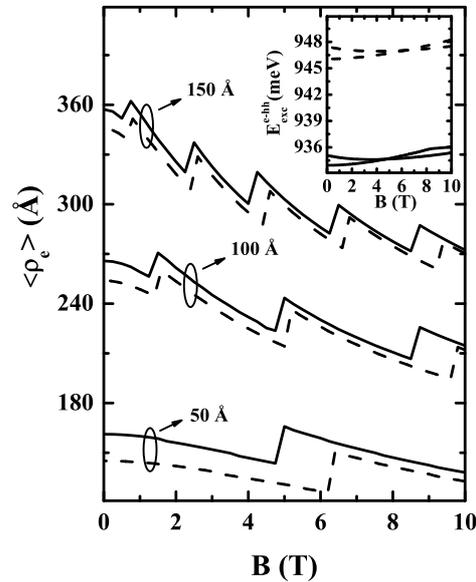


Figura 2.7: Raio médio dos elétrons em um fio quântico $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ tipo-II como função do campo magnético, para raios do fio de 50 Å, 100 Å e 150 Å, considerando $w = 0$ Å (sólida) e $w = 15$ Å (tracejada). Inset: comportamento da energia do exciton no estado fundamental e no primeiro estado excitado para o fio de raio 50 Å, sob um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo do fio, considerando estas duas espessuras de interface.

Como podemos observar no inset da Fig. 2.7, a inclusão de interfaces graduais é responsável por variações na energia do exciton, o que é consistente com os resul-

tados anteriores da Fig. 2.5 (b). A periodicidade destas energias também é afetada pela inclusão de uma camada interfacial, o que está de acordo com o comportamento encontrado para o raio médio dos elétrons, conforme discutido anteriormente.

3

Fios Quânticos Heteroestruturados

Estudaremos agora o confinamento de elétrons e buracos em um fio quântico composto por uma heteroestrutura, formando um poço quântico em sua direção de crescimento, submetido a um campo magnético aplicado paralelamente ao seu eixo. Resolvemos a equação de Schrödinger que descreve o confinamento neste sistema, considerando que as massas efetivas dependem das variáveis espaciais [76]. Aplicaremos nosso modelo para o caso de heteroestruturas InP/InAs e GaP/GaAs com interfaces não-abruptas entre os materiais.

3.1 Modelo Teórico

Nosso sistema consiste de um fio quântico cilíndrico circular, imerso numa região de potencial infinito, com uma heteroestrutura em sua direção de crescimento. Em coordenadas cilíndricas, a inclusão do potencial devido à existência de um campo magnético externo no Hamiltoniano, para um campo $\mathbf{B} = B\hat{z}$, é feita através do potencial vetor, escolhido como $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\theta}$, da mesma maneira que fizemos no Capítulo anterior. Assim, a equação de Schrödinger que descreve o confinamento dos portadores neste sistema, dentro da aproximação da massa efetiva, é dada por (ver Apêndice A)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_i^{\parallel}(z)} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_i^{\perp}(z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} \right. \\ \left. + \frac{1}{8} m_i^{\parallel}(z) \omega_c^2 \rho^2 + V(\rho, z) \right\} \Psi(\rho, z) = E_i \Psi(\rho, z), \quad (3.1)$$

onde $i = e$ (elétron), h (buraco pesado) e $\omega_c = eB/m_i^{\parallel}(z)$ é a frequência ciclotrônica. As massas efetivas na direção longitudinal e no plano são m_i^{\perp} e m_i^{\parallel} , respectivamente, que dependem de z , já que existe uma heteroestrutura ao longo deste eixo. Para o fio heteroestruturado de raio R , consideramos a função que define o potencial como

$$V(\rho, z) = \begin{cases} V_i^{het}(z), & 0 \leq \rho < R; \\ +\infty, & \rho \geq R, \end{cases}$$

onde $V_i^{het}(z)$ é um potencial do tipo poço quântico, formado pela heteroestrutura longitudinal. Para uma melhor descrição da região das interfaces entre os materiais, a existência de uma interface gradual de espessura w é levada em conta em nosso modelo, assumindo que a composição x dos materiais varia linearmente com a coordenada z nestas regiões, similar ao modelo proposto por C. L. N. Oliveira *et al* [59]:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z < z_1; \\ (z - z_1)/w, & z_1 \geq z \leq z_2; \\ 1, & z_2 < z < z_3; \\ 1 - (z - z_3)/w, & z_3 \geq z \leq z_4; \\ 0, & z_4 < z; \end{cases}$$

onde z_1, z_2, z_3 e z_4 são os limites das regiões interfaciais. A massa dos portadores e o potencial da heteroestrutura são então expressos de maneira análoga à que foi feita para os fios *core-shell* no Capítulo 2, porém, as massas efetivas m_i^{\parallel} e m_i^{\perp} agora são ambas funções de z , que é a direção de crescimento da heteroestrutura: $m_i^{\parallel(\perp)}(z) = m_{i,2}^{\parallel(\perp)}[1 - \chi(z)] + m_{i,1}^{\parallel(\perp)}\chi(z)$ e $V_i^{het}(z) = Q_i[\varepsilon_1\chi(z) + \varepsilon_2\chi^2(z)]$. As massas efetivas $m_{i,1}$ e $m_{i,2}$ dos materiais puros que compõem o poço e a barreira, respectivamente, assim como os parâmetros de interpolação ε_1 e ε_2 e os band offsets Q_i podem ser encontrados na literatura [12].

Para resolver a Eq. (3.1), partimos de uma separação de variáveis. Como no Capítulo anterior, a solução para a coordenada θ é escolhida como $(1/\sqrt{2\pi})e^{il\theta}$, onde

$l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o momento angular. Isso leva à equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i^{\parallel}(z)} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m_i^{\parallel}(z) \rho^2} + \frac{l}{2} \hbar \omega_c + \frac{1}{8} m_i^{\parallel}(z) \omega_c^2 \rho^2 \right] R(\rho) = E_i^{(\rho)} R(\rho) \quad (3.2)$$

para o confinamento radial, que pode ser resolvida analiticamente.

Primeiramente vamos estudar a solução analítica para o confinamento radial na ausência de campos magnéticos, que pode ser facilmente obtida em termos das funções de Bessel. Nesse caso, a Eq. (3.2) assume a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i^{\parallel}(z)} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m_i^{\parallel}(z) \rho^2} \right] R(\rho) = E_i^{(\rho)} R(\rho), \quad (3.3)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left(k^2 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) R(\rho) = 0, \quad (3.4)$$

onde $k = \sqrt{2m_i^{\parallel}(z)E_i^{(\rho)}/\hbar^2}$. Esta equação diferencial tem como solução as funções de Bessel do primeiro tipo $J_l(k\rho)$, que são finitas na origem. As condições de contorno na superfície lateral do fio levam a $J_l(kR) = 0$, o que implica que $k = x_{n,l}/R$, onde $x_{n,l}$ é a n -ésima raiz da função de Bessel de ordem l . Com esta condição de quantização, as energias agora são dadas por $E_{n,l}^{(\rho)} = \hbar^2 x_{n,l}^2 / 2m_i^{\parallel}(z) R^2$.

Na presença de campos magnéticos, podemos resolver a Eq. (3.2) em termos de funções de Kummer [74]. Para isso, primeiro propomos a transformação $\xi = \rho^2/2a_c$ para a coordenada ρ , onde $a_c = (\hbar/eB)^{1/2}$ é o raio ciclotrônico. Assim, a Eq. (3.2) se torna

$$\xi \frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dR(\xi)}{d\xi} - \left(\frac{l}{2} + \frac{l^2}{4\xi} + \frac{\xi}{4} - \frac{E}{\hbar \omega_c} \right) R(\xi) = 0. \quad (3.5)$$

Levando em conta que a solução desta equação deve cair exponencialmente em $\xi \rightarrow \infty$, e explicitando o seu caráter polinomial, tentamos uma solução do tipo $R(\xi) = \xi^{|l|/2} \exp[-\xi/2] F(\xi)$. Após substituir esta forma de $R(\xi)$ na Eq. (3.5), chegamos a uma equação diferencial para $F(\xi)$

$$\xi \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + [(|l| + 1) - \xi] \frac{dF(\xi)}{d\xi} - \left(\frac{l}{2} + \frac{|l|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar \omega_c} \right) F(\xi) = 0, \quad (3.6)$$

facilmente identificável com a equação diferencial hipergeométrica confluyente, $xy'' + (c-x)y' - ay = 0$, que tem como solução as funções de Kummer $F_1(a, c, x)$ e $U(a, c, x)$.

Finalmente, temos então as autofunções para o confinamento radial como sendo

$$R_{n,l}(\xi) = N\xi^{|l|/2} \exp[-\xi/2] F_1(\alpha, |l| + 1, \xi), \quad (3.7)$$

onde $\alpha = l/2 + |l|/2 + 1/2 - E/\hbar\omega_c$, N é um parâmetro de normalização e F_1 é a função de Kummer do primeiro tipo, que não diverge em $\xi = 0$. Pelas condições de contorno, devemos ter $\Psi(R, z) = 0$, logo $F(\alpha, |l| + 1, \xi_R) = 0$, o que implica que $\alpha = x_{n,|l|}$ deve ser a n -ésima raiz de $F_1(x_{n,|l|}, |l| + 1, R^2/2a_c)$, que podemos encontrar utilizando métodos numéricos. Esta é a condição de quantização para a energia do confinamento radial, que é então dada por

$$E_{n,l}^{(\rho)} = \hbar\omega_c(z) \left(x_{n,|l|} + \frac{l}{2} + \frac{|l|}{2} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.8)$$

Em ambas as expressões encontradas para a energia $E_{n,l}^{(\rho)}$ do confinamento radial, podemos ver claramente que ela depende de z . Desta forma, esta energia deve ser adicionada como um potencial dependente de z na equação de Schrödinger para esta coordenada, criando um novo potencial efetivo para o confinamento dos portadores nesta direção, isto é,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_i^\perp(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_i^{het}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}(z) \right] Z_m(z) = E_{n,l,m} Z_m(z). \quad (3.9)$$

Esta equação, que descreve o confinamento na heteroestrutura ao longo do eixo do fio, é resolvida através um método de diferenças finitas.

A Fig. 3.1(a) mostra um esquema que representa bem o nosso modelo para um fio quântico heteroestruturado. As regiões mais escuras representam o material que compõe a barreira, e a região mais clara, o material do poço. Há uma mudança suave entre estas regiões, representando a existência de interfaces graduais entre os materiais. Na Fig. 1(b), vemos um esquema qualitativo que mostra um potencial $V_i^{het}(z)$ devido ao descasamento de bandas entre os materiais da heteroestrutura, e um

potencial $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$, ambos em função da coordenada z . Nota-se que, considerando que as massas efetivas no material que compõe o poço são menores que aquelas no material da barreira, temos uma energia $E_{n,l}^{(\rho)}$ maior na região do poço, uma vez que esta energia depende do inverso da massa. Além disso, uma redução no raio do fio pode acentuar ainda mais esta diferença entre energias, já que $E_{n,l}^{(\rho)}$ também depende do inverso do quadrado do raio. Estes dois potenciais são somados para compor um potencial efetivo $V_{eff}(z) = V_i^{het}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}$ para o confinamento do portador, que pode adquirir uma forma bastante peculiar, onde aparecem poços de menor potencial na região interfacial, como pode ser visto na Fig. 1(b). Após somar os potenciais, ajustamos $V_{eff}(z)$ de forma que o ponto de menor potencial seja o referencial.

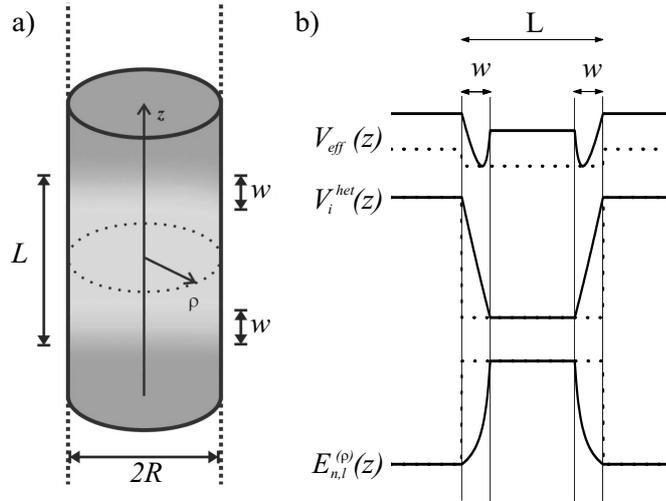


Figura 3.1: (a) Esquema que representa um fio heteroestruturado com interfaces graduais. (b) Perfil qualitativo do potencial $V_i^{het}(z)$ da heteroestrutura, de $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ e da soma dos potenciais $V_{eff}(z) = V_i^{het}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ como função de z , considerando interfaces abruptas (pontilhado) e não-abruptas (sólido)

3.2 Resultados e Discussões

Antes de mostrar os resultados obtidos para os fios heteroestruturados, faremos primeiro um estudo sobre as partes radiais das funções de onda em fios quânticos cilíndricos, analisando seu comportamento sob campos magnéticos e verificando, através de alguns limites, a consistência entre as soluções obtidas analiticamente na seção anterior.

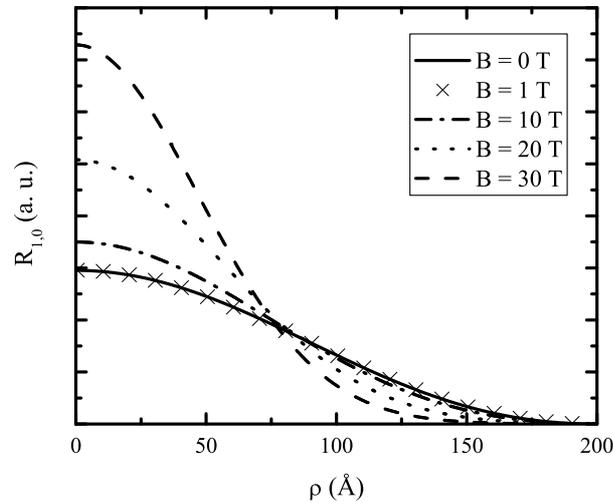


Figura 3.2: Funções de onda do estado fundamental de um elétron em um fio quântico circular de raio $R = 200$ Å com potencial infinito, para campos magnéticos $B = 0$ T (sólido), 10 T (tracejado-pontilhado), 20 T (pontilhado) e 30 T (tracejado)

A Fig. 3.2 mostra uma comparação entre as partes radiais das funções de onda para um elétron em um fio de raio 200 Å: a função de onda para $B = 0$ T (sólido), obtida em termos das funções de Bessel, é quase idêntica à função para $B = 1$ T (símbolos), obtida em termos das funções de Kummer, mostrando então a consistência da solução analítica que obtivemos há pouco para o caso $B \neq 0$, dada pela Eq. (3.7). As outras curvas mostram as funções de onda para $B = 10$ T (tracejado-pontilhado), 20 T (pontilhado) e 30 T (tracejado), onde podemos ver que o aumento da intensidade do campo magnético faz com que o elétron esteja mais confinado na direção radial,

comprimindo sua função de onda.

Um outro limite interessante a ser estudado é o de $R \rightarrow \infty$. Nesse caso, nos aproximamos de um sistema de uma partícula confinada apenas pelo potencial parabólico gerado pelo campo magnético e, conseqüentemente, os níveis de energia devem se aproximar dos níveis de Landau. De fato, considerando $l = 0$, temos os níveis de energia do confinamento radial dados por $E_{n,0} = \hbar\omega_c(x_{n,0} + 1/2)$, e para $R \rightarrow \infty$ as raízes da função de Kummer $x_{n,0}$ realmente se aproximam de números inteiros, como mostra a Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Raízes da função de Kummer com $l = 0$ para vários valores de R , calculadas considerando-se $B = 10\text{T}$.

R	100Å	150Å	200Å	300Å	400Å
$x_{1,0}$	1.444	0.437	0.133	0.006	0
$x_{2,0}$	9.587	4.090	2.245	1.156	1.006
$x_{3,0}$	24.207	10.592	5.909	2.809	2.084

Tabela 3.2: Parâmetros dos materiais GaAs, GaP, InAs e InP utilizados em nossos cálculos [12].

	E_g (eV)	$m_e(m_0)$	$m_{hh}^\perp(m_0)$	$m_{hh}^\parallel(m_0)$
GaAs	1.423	0.063	0.5	0.11
GaP	2.78	0.33	0.54	0.19
InAs	0.354	0.027	0.5172	0.0315
InP	1.35	0.077	0.56	0.1493

Calculamos as energia de confinamento de elétrons e buracos em fios quânticos cilíndricos com heteroestruturas InP/InAs e GaP/GaAs longitudinais para vários valores de

raio do fio, largura do poço, espessura da interface e intensidade do campo magnético. Os parâmetros utilizados para nossos cálculos estão na Tabela 3.2. Escolhemos estas heteroestruturas devido ao fato de que elas já foram crescidas experimentalmente (ver Seção 1.4) e, além disso, por elas apresentarem uma diferença bastante significativa entre as massas efetivas nos materiais que as compõem. Como vimos na discussão sobre a Fig. 3.1(b) na Seção anterior, a diferença entre as massas efetivas é responsável pelo aparecimento de uma barreira de potencial $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$, sendo assim, uma maior diferença entre massas efetivas é importante para intensificar os efeitos gerados pelo confinamento radial.

3.2.1 Heteroestruturas InP/InAs

As Figs. 3.3 e 3.4 mostram as energias de confinamento $E_{n,l,m}$ do elétron e do buraco, respectivamente, para estados $E_{1,0,1}$ (curvas) e $E_{1,1,1}$ (símbolos) em um fio InP/InAs, como função da largura L do poço quântico formado por esta heteroestrutura. Consideramos interfaces de espessura $w = 0 \text{ \AA}$ (a), 7.5 \AA (b) e 15 \AA (c) entre os materiais, e vários valores para o raio R do fio: 40 \AA (preto), 50 \AA (vermelho), 75 \AA (azul) e 100 \AA (verde). Note que, considerando interfaces abruptas, os estados com $l = 1$ apresentam menor energia que aqueles com $l = 0$, principalmente para menores raios de fio e menores larguras de poço. Isto é explicado pelo fato de que estados com $l = 1$ apresentam uma maior energia de confinamento radial $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$, que aumenta ainda mais para raios menores, fazendo com que o potencial efetivo $V_{eff}(z)$ de confinamento em z apresente barreiras de potencial menores (ver Fig. 3.1(b), pontilhado). Quando consideramos interfaces graduais em um fio de raio $R = 50 \text{ \AA}$, a nova forma adquirida pelo potencial efetivo $V_{eff}(z)$ faz com que a energia do estado $l = 1$ dependa mais fracamente da largura do poço: para L variando de 30 \AA a 200 \AA considerando $w = 0 \text{ \AA}$, $E_{1,1,1}$ varia cerca de 77 meV , enquanto para $w = 15 \text{ \AA}$, esta energia diminui cerca de 50 meV . Este efeito não é observado para maiores valores de raio, uma vez que a

existência de interfaces graduais nesses casos pouco varia o perfil do potencial efetivo.

Para um fio de raio $R = 40 \text{ \AA}$ com interfaces abruptas, o estado do elétron com $l = 1$ apresenta energia nula, o que mostra que ele não está confinado em z , apesar da presença de uma heteroestrutura. Isso indica que, neste sistema, a energia do confinamento radial $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ é grande o suficiente para anular a contribuição do potencial da heteroestrutura em $V_{eff}(z)$, levando a um potencial efetivo do tipo-II [61, 60]. Quando consideramos interfaces graduais, $V_{eff}(z)$ adquire uma nova forma, que apresenta pequenos poços de potencial nas interfaces (ver Fig. 3.1(b), sólido), o que faz com que a energia de confinamento deste estado aumente. Para uma interface $w = 15 \text{ \AA}$, vemos que a energia deste estado passa a crescer com o aumento da largura do poço, para pequenos valores de L . Isso indica que o estado está confinado na região interfacial e, dessa forma, um aumento em L faz com que as interfaces se afastem, levando a um aumento na energia do estado $n = 1$, comportamento análogo ao caso do confinamento em dois poços quânticos [77].

O comportamento descrito para o estado $l = 1$ do elétron é também observado para o estado $l = 0$ do buraco neste sistema. Já o estado $l = 1$ do buraco apresenta energia nula para fios de raio $R = 40 \text{ \AA}$ e $R = 50 \text{ \AA}$ com interfaces abruptas. Quando consideramos interfaces graduais, as energias de confinamento deste estado também sofrem um aumento, e para $R = 50 \text{ \AA}$ e $w = 15 \text{ \AA}$, observamos que estas energias passam a crescer com o aumento da largura do poço para pequenos valores de L , indicando um confinamento deste portador na região interfacial, assim como no caso do elétron descrito anteriormente. No caso $R = 40 \text{ \AA}$ e $w = 15 \text{ \AA}$ este efeito é reduzido, uma vez que, para esta configuração do sistema, o estado $l = 1$ do buraco é apenas fracamente confinado na interface.

No caso $l = 0$ em um fio com interfaces abruptas com $R = 40 \text{ \AA}$, o elétron está confinado na camada InAs, espacialmente separado do buraco, que está no InP, como numa estrutura tipo-II. Esta separação faz diminuir a superposição entre as funções de onda do estado fundamental de elétrons e buracos, reduzindo assim a probabilidade de

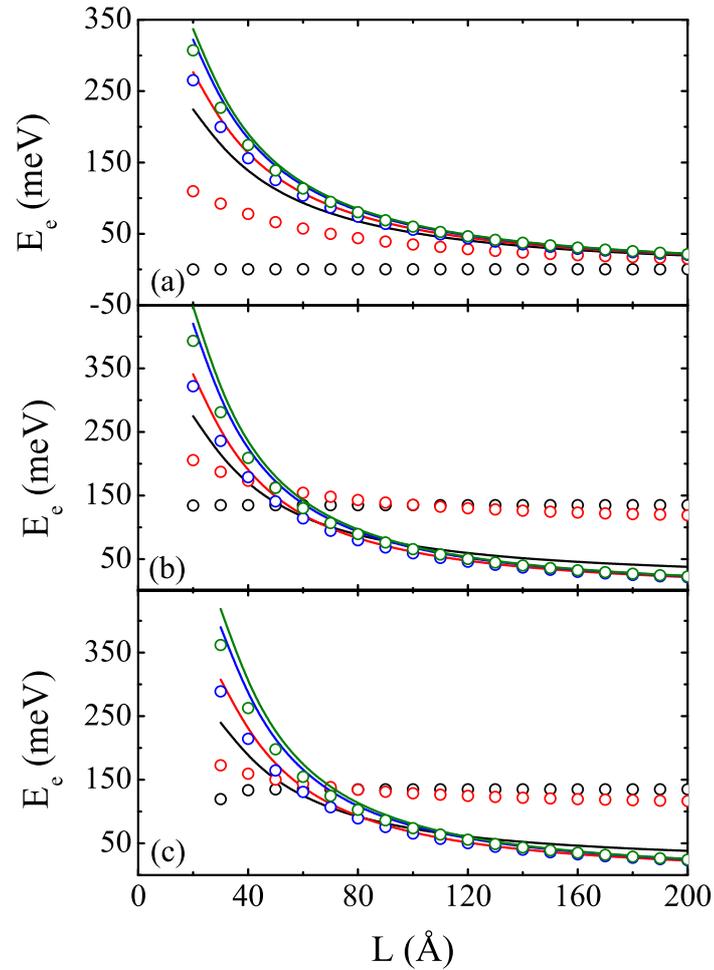


Figura 3.3: Energia de confinamento de um elétron em um fio quântico com uma heteroestrutura InP/InAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 Å (a), 7.5 Å (b) e 15 Å (c), como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos vários valores de raio do fio: 40 Å (preto), 50 Å (vermelho), 75 Å (azul) e 100 Å (verde).

uma transição interbandas para estes estados, uma característica comum de sistemas tipo-II [60]. Uma separação elétron-buraco também pode ser observada nesta estrutura considerando interfaces graduais: o elétron permanece no InAs, mas agora os buracos estão confinados nas interfaces.

Nas Figs. 3.5 e 3.6 fazemos um estudo da influência de um campo magnético, aplicado paralelamente ao eixo do fio, nas energias de confinamento de elétrons e buracos, respectivamente. As energias dos estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) são mostradas como função da largura do poço L , considerando interfaces $w = 0 \text{ \AA}$ (painéis da esquerda) e $w = 20 \text{ \AA}$ (painéis da direita) e raios do fio (a), (d) 50 \AA ; (b), (e) 70 \AA e (c), (f) 85 \AA . Consideramos três valores para o campo magnético: $B = 0 \text{ T}$ (preto), 15 T (vermelho) e 30 T (azul). No inset da Fig. 3.5(d), mostramos uma ampliação dos resultados para $l = 1$, para uma melhor visualização, e as energias destes estados como função de L para $B = 40 \text{ T}$ (verde). Em cada caso, tanto para elétrons como para buracos, as curvas dos estados $l = 0$ para diferentes campos B são praticamente coincidentes, mostrando que a dependência das energias destes estados com o campo magnético é desprezível. Os estados $l = 1$ são mais afetados pelo aumento da intensidade do campo, o que é esperado, já que no Hamiltoniano da Eq. (3.2) há um termo envolvendo a frequência ciclotrônica ω_c e o momento angular l .

Para buracos em um fio de raio $R = 70 \text{ \AA}$ com interfaces abruptas, sob um campo $B = 30 \text{ T}$, a energia dos estados $l = 1$ praticamente não depende da largura do poço L . Isto é consistente com um confinamento nas camadas InP, que ocorre devido a um aumento da barreira de potencial em $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ quando a intensidade do campo magnético aumenta, levando a uma transição de tipo-I para tipo-II no potencial $V_{eff}(z)$. Podemos também observar que, para $R = 85 \text{ \AA}$ e $w = 20 \text{ \AA}$, existe uma mudança de comportamento dos estados $l = 1$ do buraco como função de L quando um campo magnético é aplicado: para $B = 0 \text{ T}$, a energia deles diminui à medida que a largura do poço aumenta, enquanto para $B = 15 \text{ T}$ e 30 T observamos um comportamento contrário. Isto ocorre devido às mudanças na forma de $V_{eff}(z)$ ocasionadas pela pre-

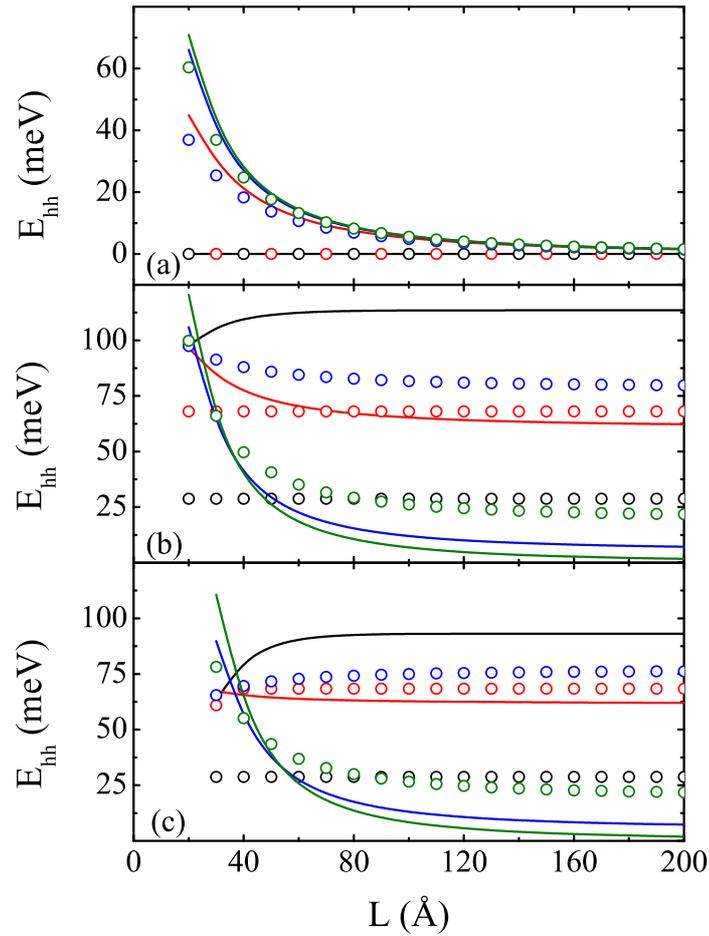


Figura 3.4: Energia de confinamento de um buraco pesado em um fio quântico com uma heteroestrutura InP/InAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 Å (a), 7.5 Å (b) e 15 Å (c), como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos vários valores de raio do fio: 40 Å (preto), 50 Å (vermelho), 75 Å (azul) e 100 Å (verde).

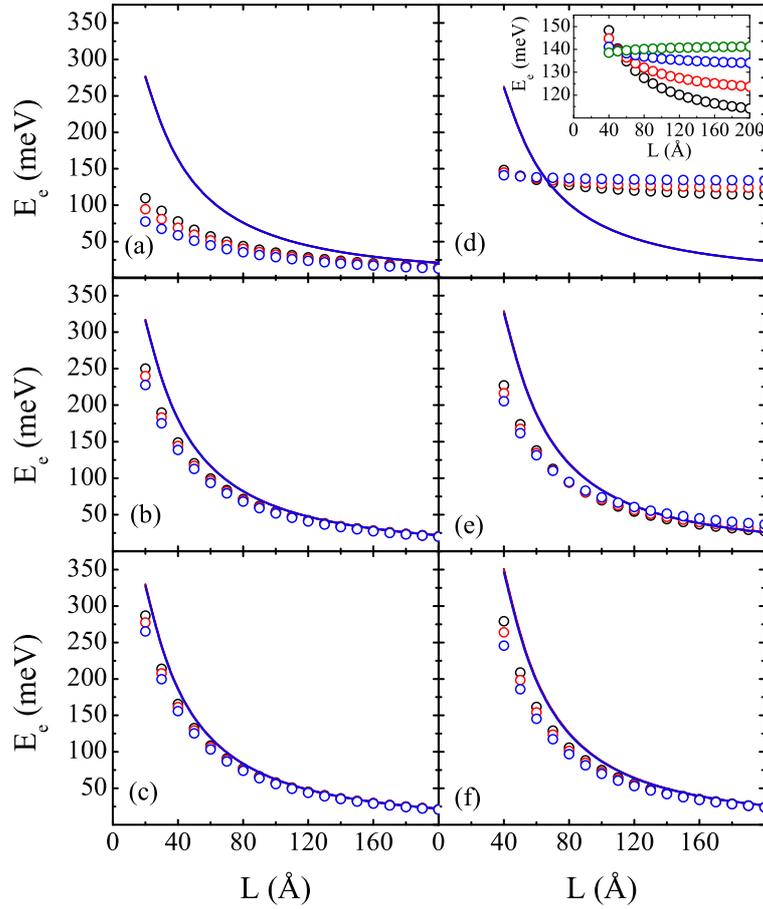


Figura 3.5: Energias de confinamento do elétron para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs, sob campos magnéticos $B = 0$ T (preto), 15 T (vermelho) e 30 T (azul), como função da largura do poço L . Consideramos três valores para o raio R do fio: (a), (d) 50 Å; (b), (e) 70 Å e (c), (f) 85 Å, assumindo interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita). Inset: ampliação dos resultados para $l = 1$ em (d), e os resultados para $B = 40$ T (verde).

sença do campo magnético, que induz o confinamento destes estados nas interfaces. Este efeito pode ser observado também para o estado $l = 1$ do elétron em um fio com $R = 50 \text{ \AA}$ e $w = 20 \text{ \AA}$ sob um campo $B = 40 \text{ T}$ (ver inset da Fig. 3.5(d)). De fato, se um campo magnético é aplicado na direção z , as funções de onda tendem a se comprimir na direção do eixo do fio, o mesmo efeito que ocorre quando reduzimos o raio do fio. Dessa forma, é razoável que transições de tipo-I para tipo-II e confinamentos de portadores nas interfaces, que antes foram encontrados reduzindo-se o raio do fio, sejam também encontrados aumentando-se a intensidade do campo magnético.

Para verificar o confinamento interfacial dos estados em fios InP/GaAs, analisamos as funções de onda dos portadores como função de z nestes sistemas, que estão ilustradas nas Figs. 3.7 e 3.8 para elétrons e buracos, respectivamente, considerando estados $E_{1,0,1}$ (curvas) e $E_{1,1,1}$ (símbolos). Em 3.7(a) e 3.8(a), dois valores de raio do fio são considerados, na ausência de campos magnéticos. Já em 3.7(b) e 3.8(b), o raio do fio é mantido e alguns valores diferentes de B são considerados. Para elétrons, podemos observar na Fig. 3.7(a) que o confinamento de estados $l = 1$ nas interfaces é induzido quando o raio do fio é reduzido de $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) para $R = 40 \text{ \AA}$ (preto). Quando aplicamos o campo magnético, na Fig. 3.7(b), a função de onda destes estados se altera, e para $B = 40 \text{ T}$ (azul) em um fio de raio $R = 50 \text{ \AA}$ já podemos ver dois picos nas regiões interfaciais. Os estados $l = 0$ do elétron permanecem confinados no poço para ambos os valores de raio do fio analisados, e suas funções de onda são praticamente coincidentes para ambos os valores de B , mostrando que esses estados não são afetados significativamente pela presença de campos magnéticos externos. Para buracos, as funções de onda de estados $l = 0$ na Fig. 3.8(a) mostram que, reduzindo-se o raio do fio de $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) para $R = 50 \text{ \AA}$ (preto) induz-se um confinamento destes estados nas interfaces, enquanto os estados $l = 1$ já estão nas interfaces em ambos os casos. Assim como no caso dos elétrons, a presença de um campo magnético não muda significativamente as funções de onda para $l = 0$, mas para $l = 1$ um confinamento interfacial pode ser claramente visto para um campo magnético $B = 30 \text{ T}$ (vermelho).

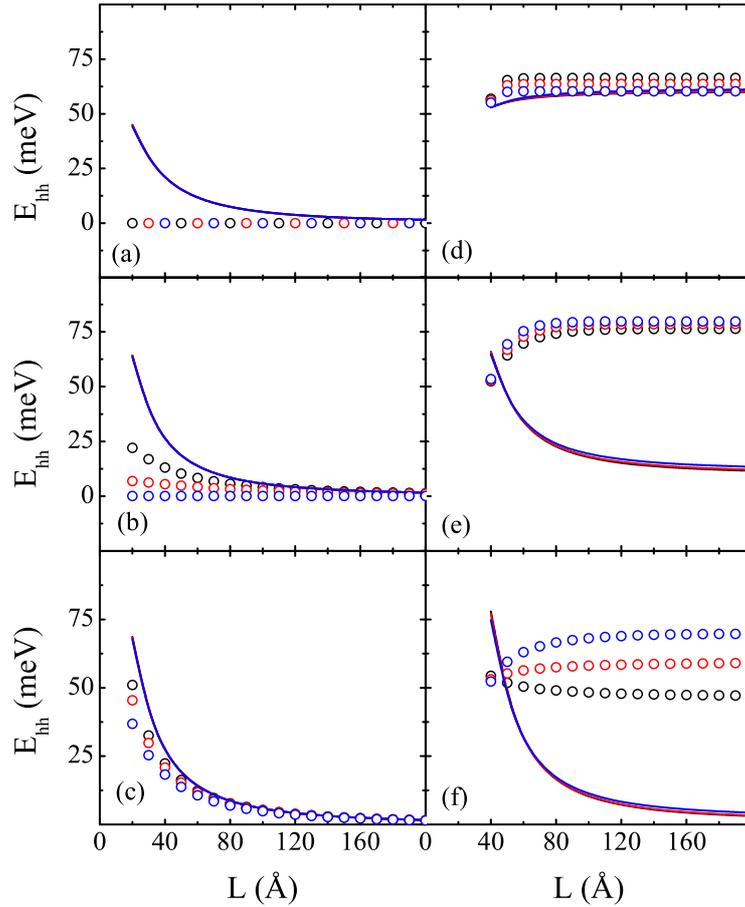


Figura 3.6: Energias de confinamento do buraco pesado para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs, sob campos magnéticos $B = 0$ T (preto), 15 T (vermelho) and 30 T (azul), como função da largura do poço L . Consideramos três valores para o raio R do fio: (a), (d) 50 Å; (b), (e) 70 Å e (c), (f) 85 Å, assumindo interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita).

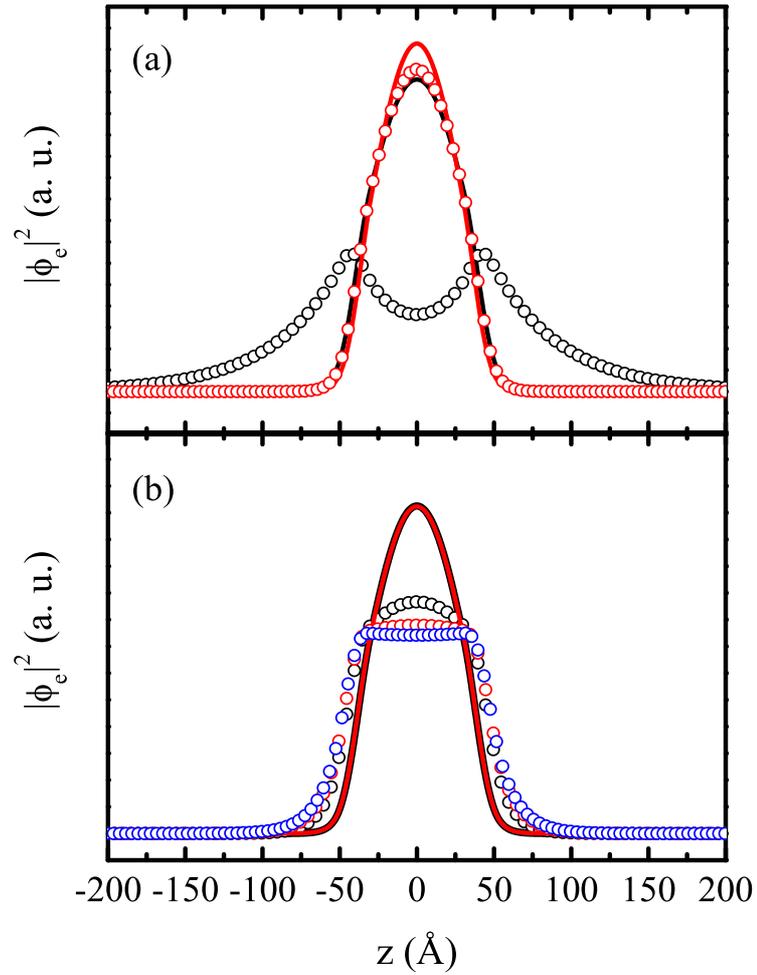


Figura 3.7: Funções de onda do elétron para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs com interfaces graduais de espessura $w = 20$ Å e largura do poço $L = 100$ Å, como função de z , considerando raios do fio $R = 40$ Å (preto) e $R = 75$ Å (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0$ T (preto), $B = 30$ T (vermelho) e $B = 40$ T (azul) para um fio de raio $R = 50$ Å (b).

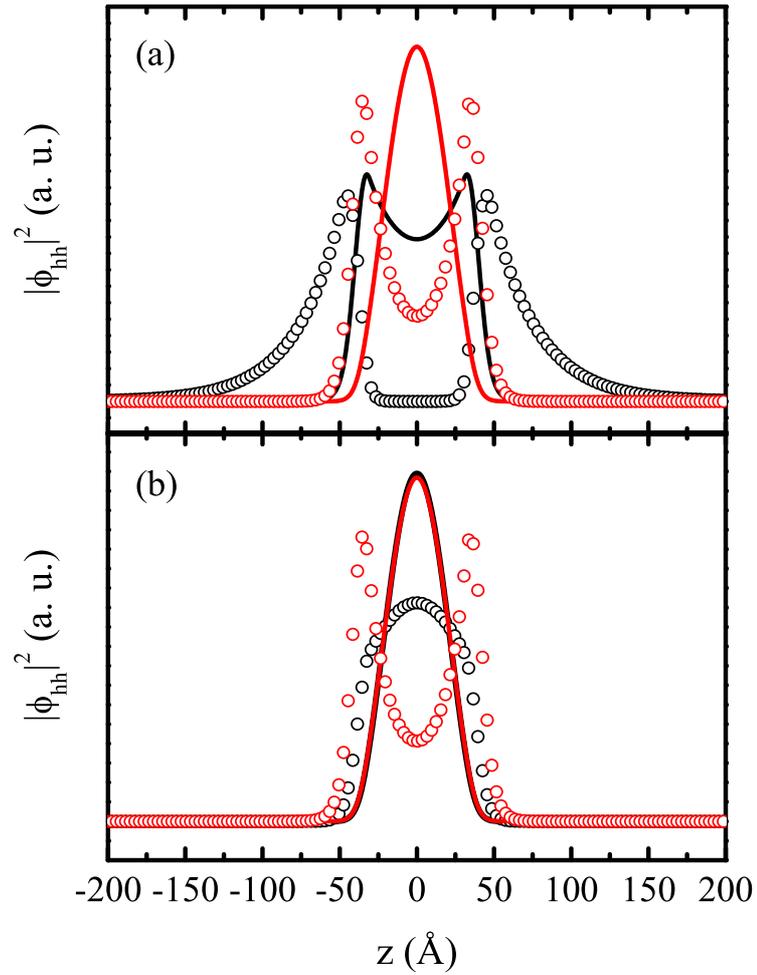


Figura 3.8: Funções de onda do buraco para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio InP/InAs com interfaces graduais de espessura $w = 20 \text{ \AA}$ e largura do poço $L = 100 \text{ \AA}$, como função de z , considerando raios do fio $R = 50 \text{ \AA}$ (preto) e $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0 \text{ T}$ (preto) e $B = 30 \text{ T}$ (vermelho) para um fio de raio $R = 85 \text{ \AA}$ (b).

Na descrição dos estados da banda de valência (buracos), utilizamos a massa efetiva do buraco pesado. De fato, como temos um sistema onde as dimensões de confinamento radial e ao longo do eixo z são da mesma ordem, isto é, $L \sim 2R$, o correto seria trabalharmos com um Hamiltoniano 4x4 para a banda de valência, considerando-se estados de buraco leve e buraco pesado. Porém, resultados teóricos na literatura [63] têm mostrado que os efeitos gerados pelo confinamento radial, como a mudança na localização dos estados devido à redução do raio do fio, também aparecem quando o Hamiltoniano 4x4 é usado para a banda de valência, e que os raios críticos obtidos com esta abordagem e aqueles obtidos com a aproximação da massa efetiva, a qual utilizamos neste trabalho, apresentam valores parecidos. Desta forma, mostra-se que para os estados da banda de valência, o modelo de massa efetiva que utilizamos representa uma boa aproximação e nos leva a resultados qualitativamente corretos, porém, os valores obtidos neste trabalho para os raios críticos onde ocorrem as mudanças na localização dos estados dos buracos não estão totalmente corretos, sendo necessária uma abordagem mais formal (um modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, por exemplo) para obtê-los.

3.2.2 Heteroestruturas GaP/GaAs

As Figs. 3.9 e 3.10 mostram as energias de confinamento $E_{n,l,m}$ do elétron e do buraco, respectivamente, para estados $E_{1,0,1}$ (curvas) e $E_{1,1,1}$ (símbolos) em um fio GaP/GaAs, como função da largura L do poço quântico formado por esta heteroestrutura. Consideramos interfaces de espessura $w = 0 \text{ \AA}$ (a), 7.5 \AA (b) e 15 \AA (c) entre os materiais, e vários valores para o raio R do fio: 40 \AA (preto), 50 \AA (vermelho) e 75 \AA (azul). Assim como no caso do InP/InAs, aqui também observa-se que estados $l = 1$ em fios com interface abrupta apresentam menor energia de confinamento quando comparados com os estados $l = 0$. Quando consideramos interfaces graduais em um fio de raio $R = 40 \text{ \AA}$, a energia do estado $l = 1$ passa a depender mais fracamente do tamanho do poço, devido à nova forma adquirida por $V_{eff}(z)$: para L variando de 30 \AA a 200 \AA con-

siderando $w = 0 \text{ \AA}$, $E_{1,1,1}$ diminui $\sim 70 \text{ meV}$, enquanto para $w = 15 \text{ \AA}$, esta energia varia em apenas $\sim 30 \text{ meV}$.

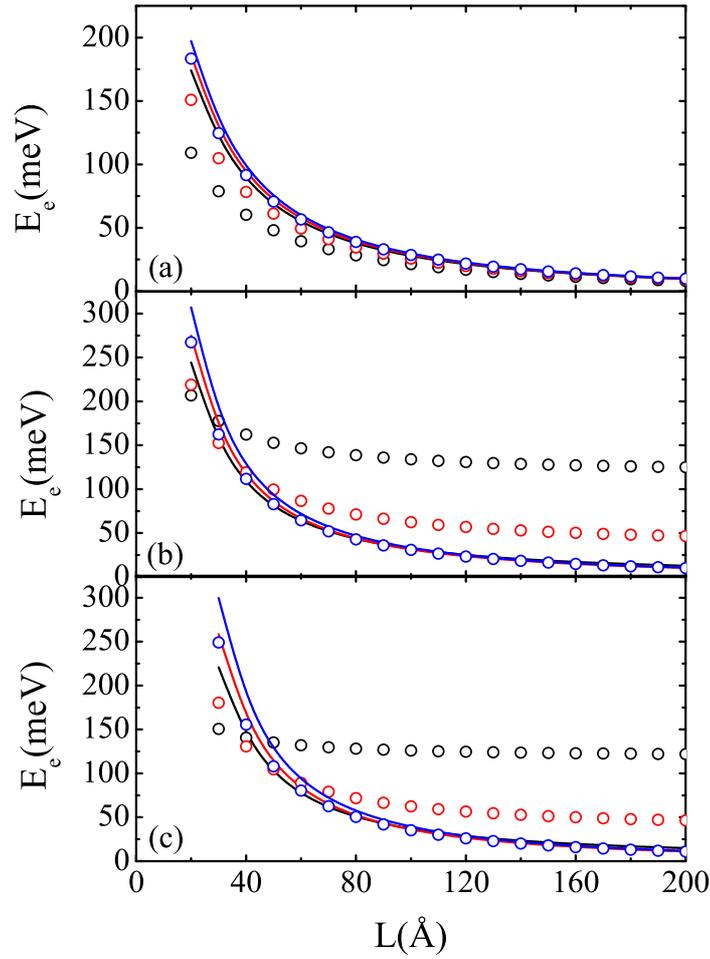


Figura 3.9: Energia de confinamento de um elétron em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 \AA (a), 7.5 \AA (b) e 15 \AA (c), como função da largura L do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos três valores de raio do fio: 40 \AA (preto), 50 \AA (vermelho) e 75 \AA (azul).

Como podemos ver na Fig. 3.10, diferente do que ocorreu para elétrons, os níveis

de energia do buraco pesado neste sistema são fracamente afetados por variações no raio do fio, ou por uma mudança em l . Isso é explicado devido ao fato de ser pequena a diferença entre as massas efetivas do buraco no GaAs e no GaP, o que faz com que a barreira de potencial gerada pelo confinamento radial $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ seja também pequena, tendo pouca influência sobre o potencial efetivo $V_{eff}(z)$. A existência de interfaces graduais também não muda o comportamento das curvas de energia como função de L , como no caso dos elétrons, sendo porém responsável por um aumento bastante considerável nas energias de confinamento: uma variação de 15 \AA na espessura da interface, para um fio de raio $R = 100 \text{ \AA}$ e largura do poço $L = 40 \text{ \AA}$, leva a um aumento de cerca de 75 meV na energia do estado $E_{1,0,1}$ do buraco pesado.

A influência de um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo do fio, nas energias de confinamento de elétrons e buracos, é mostrada respectivamente nas Figs. 3.11 e 3.12, onde temos as energias dos estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) como função da largura do poço L , para três valores de intensidade do campo magnético: $B = 0 \text{ T}$ (preto), 15 T (vermelho) e 30 T (azul). Consideramos raios do fio (a), (d) 35 \AA ; (b), (e) 40 \AA e (c), (f) 75 \AA , assumindo espessuras $w = 0 \text{ \AA}$ (painéis da esquerda) e $w = 20 \text{ \AA}$ (painéis da direita) para as interfaces. Na Fig. 3.11(e), mostramos uma ampliação dos resultados para $l = 1$, para uma melhor visualização (símbolos cheios, escala da direita). Da mesma forma que ocorreu no InP/InAs, os estados $l = 1$ são mais afetados pelo aumento da intensidade do campo, e a dependência das energias dos estados $l = 0$ com o campo magnético é desprezível, tanto para elétrons como para buracos.

Os resultados da Fig. 3.11(d), para elétrons em um fio de raio $R = 35 \text{ \AA}$ com interfaces graduais de espessura $w = 20$, mostram que a energia do estado $l = 1$ do elétron aumenta com a largura do poço L , o que indica que este estado está confinado nas interfaces, devido ao raio R nesse sistema ser muito pequeno (ver Figs. 3.3(c) e 3.4(c)). Já na Fig. 3.11(e), para $R = 40 \text{ \AA}$ e $w = 20 \text{ \AA}$, observamos uma mudança de comportamento na energia do estado $l = 1$ do elétron como função da largura do

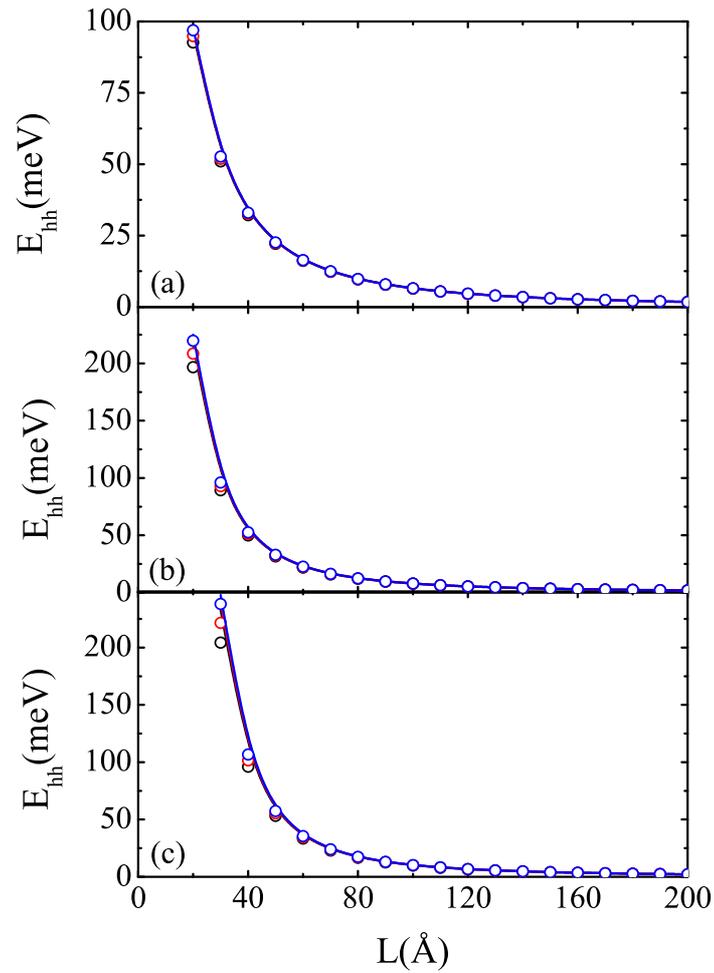


Figura 3.10: Energia de confinamento de um buraco pesado em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, com interfaces de espessura 0 Å (a), 7.5 Å (b) e 15 Å (c), como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos). Consideramos três valores de raio do fio: 40 Å (preto), 50 Å (vermelho) e 75 Å (azul).

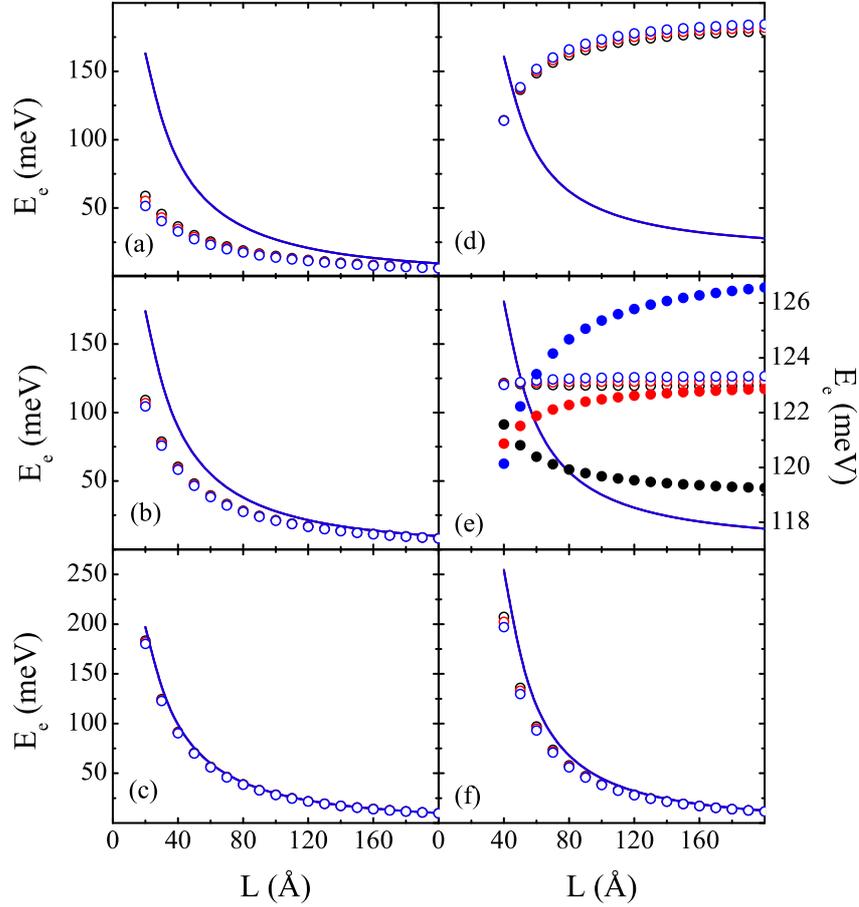


Figura 3.11: Energias de confinamento do elétron em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos), considerando $B = 0$ T (preto), 10 T (vermelho) e 20 T (azul). Consideramos três valores de raio do fio: (a), (d) 35 Å; (b), (e) 40 Å e (c), (f) 75 Å, para heteroestruturas com interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita). Os símbolos cheios na figura (e) são os resultados para $l = 1$ ilustrados em outra escala (à direita), para facilitar a visualização.

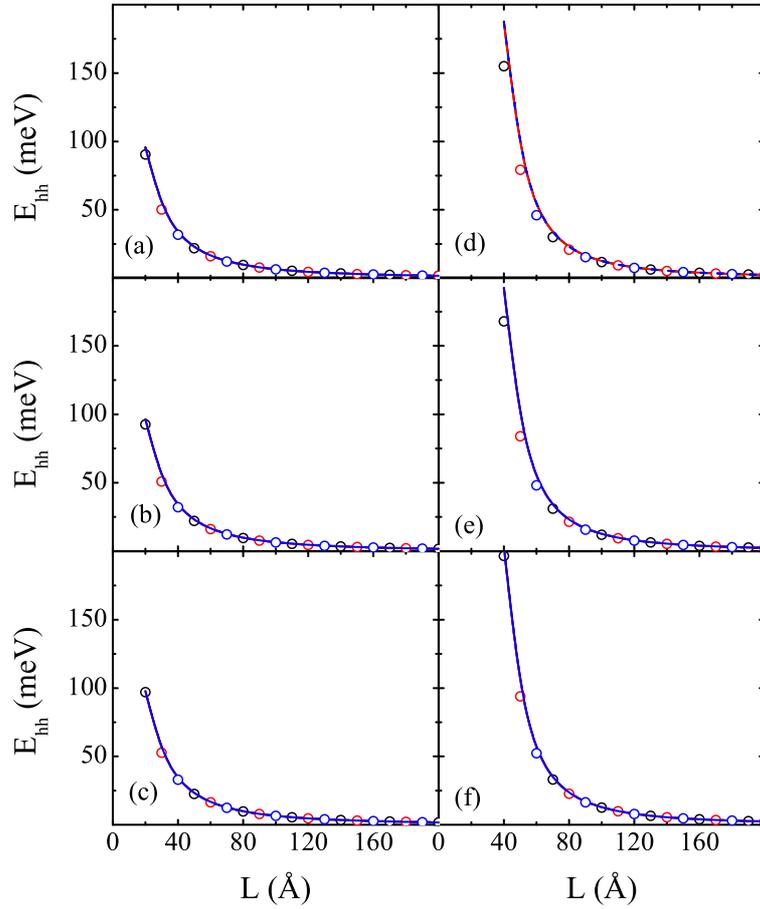


Figura 3.12: Energias de confinamento do buraco pesado em um fio quântico com uma heteroestrutura GaP/GaAs longitudinal, como função da largura do poço, para $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos), considerando $B = 0$ T (preto), 10 T (vermelho) e 20 T (azul). Consideramos três valores de raio do fio: (a), (d) 35 Å; (b), (e) 40 Å e (c), (f) 75 Å, para heteroestruturas com interfaces $w = 0$ Å (painéis da esquerda) e $w = 20$ Å (painéis da direita).

poço L quando aplicamos um campo magnético paralelamente ao eixo do fio: a campo nulo, estas energias diminuem com o aumento de L , já para $B = 10$ T e $B = 20$ T, elas aumentam. Este efeito, que também é observado em fios InP/InAs, como foi mostrado nas Figs. 3.5(d) e 3.6(f), está relacionado com um confinamento destes estados na região interfacial, induzido pela presença do campo magnético. Para buracos, a Fig. 3.12 mostra que nem a presença do campo magnético, e nem mesmo uma variação no momento angular de $l = 0$ para $l = 1$, alteram significativamente o comportamento das energias destes portadores como função de L , estando as curvas e símbolos quase coincidentes para todos os valores de B ou l considerados em cada sistema. Mais uma vez, isto se deve ao fato de que a barreira de potencial $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ gerada pelo confinamento radial, para buracos em GaP/GaAs, é pequena quando comparada ao poço de potencial desta heteroestrutura. Com isso, variações em B ou l , que só alteram $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ (ver Eq. (3.8)), exercem pouca influência sobre o potencial efetivo $V_{eff}(z)$.

As funções de onda de elétrons e buracos em fios GaP/GaAs com $L = 100$ Å estão ilustradas como função de z nas Figs. 3.13 e 3.14, respectivamente, considerando estados $E_{1,0,1}$ (curvas) e $E_{1,1,1}$ (símbolos), para (a) dois valores de R , na ausência de campos magnéticos, e para (b) dois valores de B , mantendo o raio R constante. Na Fig. 3.13(a), podemos verificar que, de fato, quando o raio do fio é reduzido de $R = 75$ Å (vermelho) para $R = 35$ Å (preto), induz-se o confinamento interfacial do estado $l = 1$ do elétron, como havia sido indicado na Fig. 3.11(d). Verificamos também, através das funções de onda na Fig. 3.13(b), que o confinamento deste estado nas interfaces pode ser induzido quando aumentamos a intensidade do campo magnético de $B = 0$ T (preto) para $B = 20$ T (vermelho), o que também está consistente com o comportamento observado na Fig. 3.11(e). Para ambos os valores de raio do fio considerados, os estados $l = 0$ do elétron estão confinados no poço, e a presença de campos magnéticos externos não os altera significativamente. Para buracos, os resultados da Fig. 3.14 apenas confirmam o que observamos anteriormente nas Figs. 3.10 e 3.12: os autoestados deste portador em fios GaP/GaAs são fracamente afetados por variações no raio do fio e no

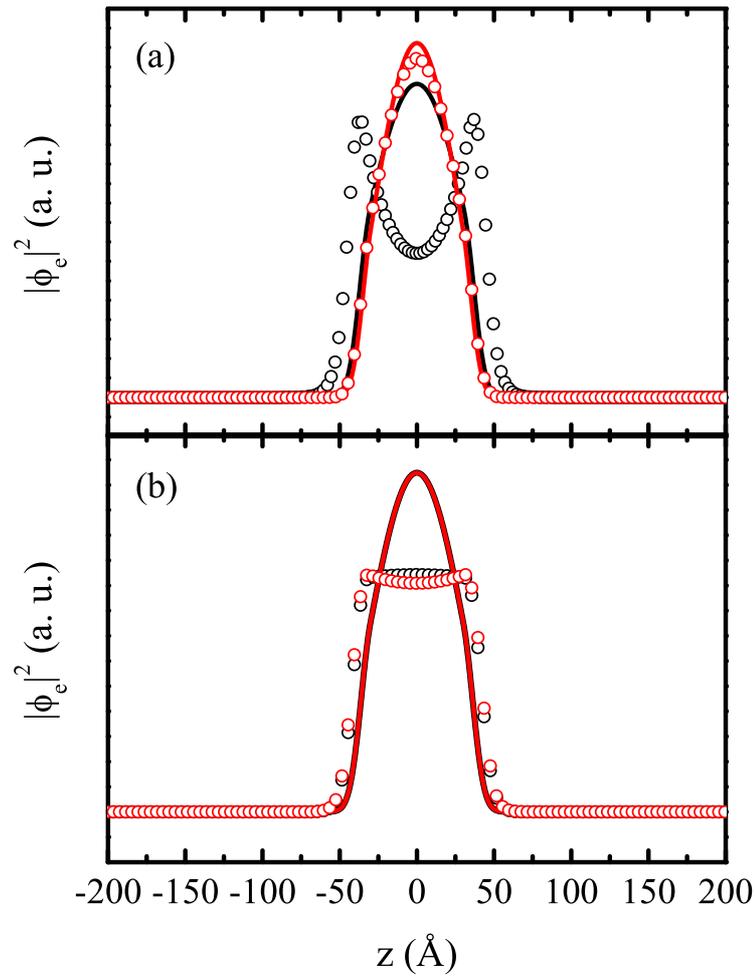


Figura 3.13: Funções de onda do elétron para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio GaP/GaAs com interfaces graduais de espessura $w = 20 \text{ \AA}$ e largura do poço $L = 100 \text{ \AA}$, como função de z , considerando raios do fio $R = 35 \text{ \AA}$ (preto) e $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0 \text{ T}$ (preto) e $B = 20 \text{ T}$ (vermelho) para um fio de raio $R = 40 \text{ \AA}$ (b).

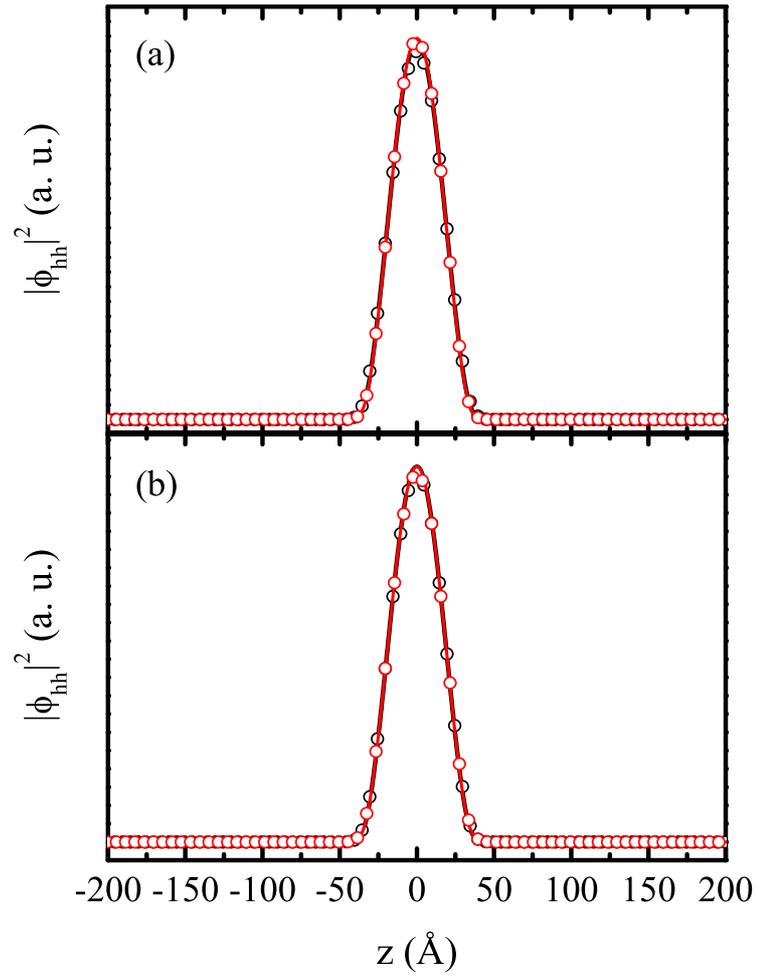


Figura 3.14: Funções de onda do buraco pesado para estados $l = 0$ (curvas) e $l = 1$ (símbolos) em um fio GaP/GaAs com interfaces graduais de espessura $w = 20 \text{ \AA}$ e largura do poço $L = 100 \text{ \AA}$, como função de z , considerando raios do fio $R = 35 \text{ \AA}$ (preto) e $R = 75 \text{ \AA}$ (vermelho) na ausência de campos magnéticos (a), e campos magnéticos $B = 0 \text{ T}$ (preto) e $B = 20 \text{ T}$ (vermelho) para um fio de raio $R = 40 \text{ \AA}$ (b).

campo magnético, sendo todas as funções de onda quase coincidentes, para todos os parâmetros do sistema considerados neste trabalho.

4

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, realizamos um estudo teórico sobre fios quânticos *core-shell* e fios com heteroestruturas longitudinais.

No Capítulo 2, investigamos as propriedades excitônicas de fios quânticos cilíndricos $Si/Si_{1-x}Ge_x$ com alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II. Nossos resultados mostram que a existência de interfaces graduais entre os materiais é responsável por um blueshift bastante significativo nas energias dos excitons para fios finos. A presença de um campo magnético paralelo ao eixo do fio não afeta consideravelmente os excitons no estado fundamental em fios quânticos do tipo-I, principalmente para fios com menor raio. Porém, o comportamento excitônico em fios tipo-II é drasticamente alterado por um campo magnético, uma vez que a forma anelar dos estados de elétrons nesses sistemas é responsável pelo aparecimento do efeito Aharonov-Bohm, onde o momento angular l de cada estado do elétron muda quase periodicamente com o aumento da intensidade do campo, enquanto o valor de l dos estados do buraco permanece o mesmo para qualquer valor de B . A periodicidade destas oscilações de energia depende da área cercada pelo potencial de confinamento efetivo do elétron. Isto explica a ausência de periodicidade nas oscilações Aharonov-Bohm encontradas para estes sistemas, uma vez que a área do potencial Coulombiano efetivo produzido pelo buraco é alterada pelo aumento da intensidade do campo magnético, que comprime a função de onda do buraco em direção ao eixo do fio. Para um fio $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ do tipo-II com raio de 40 \AA , por exemplo, se considerarmos uma interface com espessura $w = 15 \text{ \AA}$, as energias de ligação

aumentam em torno de 12% em relação ao caso abrupto, enquanto a energia total do exciton aumenta cerca de 20 meV. Analisando a periodicidade das oscilações AB destas estruturas, mostramos que a existência de interfaces graduais altera a periodicidade das transições de momento angular, até mesmo quando consideramos maiores valores para o raio do fio.

O Capítulo 3 foi dedicado ao estudo teórico de fios cilíndricos com heteroestruturas GaP/GaAs e InP/InAs longitudinais. Calculamos as energias de confinamento de elétrons e buracos pesados nessas estruturas, sob um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo do fio, para vários valores de raio do fio, largura do poço, espessura das interfaces e intensidade do campo magnético. A diferença entre as massas efetivas em cada material que compõe a heteroestrutura tem um papel importante no confinamento dos portadores ao longo do eixo do fio: ela é responsável por criar um novo potencial dependente de z , uma vez que a energia que provém do confinamento lateral depende dessas massas e, conseqüentemente, de z . Mostramos que para interfaces abruptas, quando reduzimos o raio do fio, o potencial efetivo de confinamento ao longo do eixo do fio diminui, e isso pode levar até mesmo a um comportamento de portadores livres ou a um potencial tipo-II em z , como já havia sido previsto em trabalhos anteriores. Além disso, as energias dos estados $l = 1$ são menores que aquelas para $l = 0$, o que se deve ao fato de que no primeiro caso a energia do confinamento radial é maior, e conseqüentemente o potencial efetivo ao longo do eixo do fio é reduzido. A existência de interfaces graduais entre os materiais muda bastante o perfil do potencial efetivo, podendo levar a um confinamento dos portadores na região interfacial, principalmente para fios mais finos. Em alguns casos específicos de fios heteroestruturados, as transições interbandas podem ser fortemente reduzidas devido à separação espacial entre elétrons e buracos na estrutura. As energias de confinamento são fracamente afetadas pela presença de campos magnéticos, principalmente para estados $l = 0$. Porém, em alguns casos especiais, um aumento na intensidade do campo magnético é também capaz de induzir uma transição de tipo-I para tipo-II no potencial efetivo em z no caso

de interfaces abruptas, ou a um confinamento dos portadores na região das interfaces. Estes resultados mostram que o controle dos parâmetros relacionados ao tamanho e à composição é essencial para a criação e a fabricação de novos dispositivos à base dessas estruturas.

Como trabalhos futuros, pretendemos:

- Estudar o comportamento dos excitons em fios $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ *core-multishell* (ver Seção 1.4) sob campos magnéticos aplicados;
- Calcular a energia dos excitons em fios heteroestruturados e estudar o confinamento dos portadores em fios compostos não só por uma heteroestrutura, mas por uma super-rede na direção longitudinal;
- Estudar os fenômenos de transporte em fios heteroestruturados com barreira dupla, analisando o tunelamento ressonante nestas estruturas.

Além dos trabalhos sobre fios quânticos apresentados nesta Dissertação, temos trabalhado também com outros tipos de heteroestruturas, como pontos e anéis quânticos. Sendo assim, temos também como perspectiva avançar no estudo das estruturas de baixa dimensionalidade, analisando, por exemplo, os efeitos da aplicação de campos eletromagnéticos externos sobre o confinamento dos portadores, a propagação das funções de onda no tempo e os estados de spin nestes sistemas.

Referências

- [1] G. Y. Xu, A. Z. Li, Y. Y. Li, L. Wei, Y. G. Zhang, C. Lin e H. Li, Appl. Phys. Lett. **89** 161102 (2006).
- [2] F. Suarez, D. Fuster, L. Gonzalez, Y. Gonzalez, J. M. Garcia e M. L. Dotor Appl. Phys. Lett. **89** 091123 (2006).
- [3] L. H. Li, M. Rossetti, G. Patriarche, A. Fiore, J. Crys. Growth **301**, 959 (2007).
- [4] L. Esaki e R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [5] L. L. Chang, L. Esaki e R. Tsu, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [6] L. Esaki e L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. **33**, 495 (1974).
- [7] R. Dingle, W. Wiegman, e C. H. Henry, Phys. Rev. Lett. **33**, 827 (1974).
- [8] Sergio M. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, 2a edição (2004).
- [9] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition (1994).
- [10] Jasprit Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, McGraw Hill (1993).
- [11] W. I. Wang e F. Stern, J. Vac. Sci. Technol. B **3**, 1280 (1985).
- [12] E. H. Li, Physica E **5**, 215 (2000).

-
- [13] L. Yang, J. R. Watling, R. C. W. Wilkins, M. Boriçi, J. R. Barker, A. Asenov e S. Roy, *Semicond. Sci. Tech.* **19**, 1174 (2004).
- [14] V. Y. Aleshkin e N. A. Bekin, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 4841 (1997).
- [15] T. Ando, M. Nakayama e M. Hosoda, *Phys. Rev. B* **69**, 165316 (2004).
- [16] *Solid State Physics*, Neil W. Ashcroft e N. David Mermin, Holt Rineheart and Winston (1976).
- [17] *Quantum Well, Wires and Dots - Theoretical and Computational Physics*, Paul Harrison, John Wiley e Sons, LTD. (1999).
- [18] P. Harrison, T. Piorek, W. E. Hagston e T. Stirner, *Superlattices and Microstructures* **20**, 45 (1996).
- [19] F. F. Maia Jr, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias e E. F. da Silva, *Appl. Surf. Sci.* **237**, 261 (2004).
- [20] M. G. Bezerra, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, F. M. S. Lima, A. L. A. Fonseca e O. A. C Nunes, *Microelect. J.* **36**, 359 (2005).
- [21] D. Appell, *Nature* **419**, 553 (2002).
- [22] Y. Cui, Q. Wei, H. Park and C. M. Lieber, *Science* **293**, 1289 (2001).
- [23] M. Law, J. Goldberger, and P. Yang, *Annu. Rev. Mater. Res.* **34**, 83 (2004).
- [24] L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, D. Wang, and C. M. Lieber, *Nature* **420**, 57 (2002).
- [25] H.-J. Choi, J. C. Johnson, R. He, S.-K. Lee, F. Kim, P. Pauzauskie, J. Goldberger, R. J. Saykally, and P. Yang, *J. Phys. Chem. B* **107**, 8721 (2003).
- [26] J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H.-J. Choi and P. Yang, *Nature* **422**, 599 (2003).

- [27] Y. Wu, R. Fan, and P. Yang, *Nano Lett.* **2**, 83 (2002).
- [28] C. Penn, F. Schäffler, and G. Bauer, *Phys. Rev. B* **59**, 13314 (1999).
- [29] M. L. W. Thewalt, D. A. Harisson, C. F. Reinhart, J. A. Wolk, and H. Lafontaine, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 269 (1997).
- [30] D. C. Houghton, G. C. Aers, S. -R. Eric Yang , E. Wang, and N. L. Rowell, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 866 (1995).
- [31] B. V. Kamenev, L. Tsybeskov, J.-M. Baribeau and D. J. Lockwood, *Phys. Rev. B* **72**, 193306 (2005).
- [32] S. Fukatsu and Y. Shiraki, *Semicond. Sci. Tech.* **9**, 2017 (1994).
- [33] M. T. Björk, B. J. Ohlsson, T. Sass, A. I. Persson, C. Thelander, M. H. Magnusson, K. Deppert, L. R. Wallenberg and L. Samuelson, *Nano Lett.* **2**, 87 (2002)
- [34] R. Solanki, J. Huo, J. L. Freeouf and B. Miner, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 3864 (2002).
- [35] M. S. Gudiksen, L. J. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith and C. M. Lieber, *Nature* **415**, 617 (2002).
- [36] C. L. N. Oliveira, A. Chaves, E. W. S. Caetano, M. H. Degani and J. A. K. Freire, *Microelectr. J.* **36** 1049 (2005)
- [37] D. Li, Y. Wu, R. Fan, P. Yang and A. Majumdar, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3186 (2003).
- [38] Y.-M. Lin and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **68** 075304 (2003).
- [39] Y. Wu, R. Fan and P. Yang, *Nano Lett.* **2**, 83 (2002).
- [40] A. Fuhrer, L. E. Fröberg, J. N. Pedersen, M. W. Larsson, A. Wacker, M.-E. Pistol and L. Samuelson, *Nano Lett.* **7**, 243 (2007).

-
- [41] J. Frenkel, Phys. Rev. **37**, 17 (1931).
- [42] J. Frenkel, Phys. Rev. **37**, 1276 (1931).
- [43] G. H. Wannier, Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- [44] N. F. Mott, Trans. Faraday Soc. **34**, 500 (1938).
- [45] *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*, Eudenilson L. Albuquerque e Michael G. Cottam, Elsevier B.V. (2004).
- [46] E. C. Ferreira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, J. A. P. da Costa, E. L. Albuquerque, P. W. Mauriz e G. A. Farias, Surf. Sci **532**, 774 (2003).
- [47] A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, M. H. Degani, V. N. Freire e G. A. Farias, J. Mater. Sci. **42**, 2314 (2007).
- [48] Y. Sidor, B. Partoens e F. M. Peeters, Phys. Rev. B **71**, 165323 (2005).
- [49] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G. A. Farias, Appl. Surf. Sci. **237**, 266 (2004).
- [50] V. Mlinar, M. Tadic e F. M. Peeters, Phys. Rev. B **73**, 235336 (2006).
- [51] J. M. Rorison Phys. Rev. B **50**, 8008 (1994).
- [52] K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **64**, 155324 (2001).
- [53] P. Villamil, C. Cabra, and N. P.-Montenegro, Microelectron. J. **36**, 383 (2005).
- [54] A. Struck, S. Mohammadi, S. Kettemann, and B. Kramer, Phys. Rev. B **72**, 245317 (2005)
- [55] J. Maes, M. Hayne, Y. Sidor, B. Partoens, F. M. Peeters, Y. González, L. González, D. Fuster, J. M. García, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. B **70**, 155311 (2004).

- [56] N. Miura, H. Kunimatsu, K. Uchida, Y. Matsuda, T. Yasuhira, H. Nakashima, Y. Sakuma, D. Fuster, Y. Awano, T. Futatsugi, and N. Yokoyama, *Physica B* **256**, 308 (1998).
- [57] J. S. de Sousa, E. W. S. Caetano, J. R. Gonçalves, G. A. Farias, V. N. Freire, E. F. da Silva Jr., *Appl. Surf. Sci.* **190**, 166 (2002).
- [58] E. W. Caetano, M. V. Mesquita, and V. N. Freire, *Physica. E* **17**, 22 (2003).
- [59] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire and G. A. Farias, *Appl. Surf. Sci.* **234**, 38 (2004).
- [60] L. C. L. Y. Voon and M. Willatzen, *J. Appl. Phys.* **93**, 9997 (2003).
- [61] H. Grüning, P.J. Klar, W. Heimbrodtt, S. Nau, B. Kunert, K. Volz, W. Stolz and G. Weiser, *Physica E* **21**, 666 (2004).
- [62] M. Willatzen, R. V. N. Melnik, C. Galeriu and L. C. L. Y. Voon, *Math. Comput. Simulat.* **65**, 385 (2004).
- [63] L. C. L. Y. Voon, B. Lassen, R. Melnik and M. Willatzen, *J. Appl. Phys.* **96**, 4660 (2004).
- [64] J. Costa e Silva, A. Chaves, J. A. K. Freire, V. N. Freire e G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **74**, 085317 (2006).
- [65] V. N. Freire, M. M. Auto e G. A. Farias, *Superlatt. Microstruct.* **11**, 17 (1992).
- [66] F. L. Masdarasz, F. Szmulowicz, F. K. Hopkins, and D. L. Dorsey, *Phys. Rev. B* **49**, 13528 (1994).
- [67] F. M. Peeters, V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [68] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, in *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, London, 1994).

-
- [69] A. Bellabchara, P. Lefebvre, P. Christol, and H. Mathieu, *Phys. Rev. B* **50**, 11840 (1994).
- [70] L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa, and A. O. Govorov, *Phys. Rev. B*. **70**, 155318 (2004).
- [71] B. Szafran, F. M. Peeters, and S. Bednarek, *Phys. Rev. B*. **70**, 125310 (2004).
- [72] J. Liu, A. Zaslavsky, and L. B. Freund, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 096804 (2002).
- [73] E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa, J. A. K. Freire, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Appl. Surf. Sci.* **190**, 191 (2002).
- [74] S. V. Branis, G. Li, and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **47**, 1316 (1993).
- [75] A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [76] E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa and J. A. K. Freire, *Physica E* **17**, 222 (2003).
- [77] R. Ferreira and G. Bastard, *Rep. Prog. Phys.* **60**, 345 (1997).

A

Hamiltoniano do Exciton

No Capítulo 2 deste trabalho, estudamos o caso de um par elétron-buraco confinado em um fio quântico *core-shell*, onde consideramos a interação Coulombiana entre estes portadores. Dentro da aproximação da massa efetiva, o Hamiltoniano que descreve o exciton neste sistema, em coordenadas cilíndricas, é dado por

$$H_{exc} = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_h^2}{2m_h} + V_e(\rho_e) + V_h(\rho_h) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (\text{A.1})$$

onde $V_{e(h)}(\rho_{e(h)})$ e $m_{e(h)}$ são respectivamente o potencial de confinamento na direção radial, gerado pela heteroestrutura, e a massa efetiva para elétrons (buracos). Escrevendo agora os operadores de momentum como $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, e levando-se em conta que as massas efetivas m^\parallel no plano xy podem ser diferentes das massas m^\perp na direção z do eixo do fio, podemos reescrever a Eq. (A.1) como

$$H_{exc} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^\parallel}\nabla_{e,2D}^2 + V_e(\rho_e) - \frac{\hbar^2}{2m_h^\parallel}\nabla_{h,2D}^2 + V_h(\rho_h) - \frac{\hbar^2}{2m_e^\perp}\frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^\perp}\frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{(z_e - z_h)^2 + |\rho_e - \rho_h|^2}}, \quad (\text{A.2})$$

onde $\nabla_{e(h),2D}^2$ é a parte de ∇^2 relacionada às coordenadas no plano $\rho_{e(h)}$ e $\theta_{e(h)}$ para o elétron (buraco).

Fazendo uma mudança de variáveis para as coordenadas do centro de massa e do movimento relativo do exciton em z , temos

$$Z_{cm} = \frac{z_e m_e^\perp + z_h m_h^\perp}{M},$$

$$z = z_e - z_h, \quad (\text{A.3})$$

sendo a massa total definida por $M = m_e^\perp + m_h^\perp$. Destas equações, vemos facilmente que $z_e = z + z_h$ e $z_h = z_e - z$. Substituindo estas expressões de z_e e z_h na relação para o centro de massa, temos

$$Z_{cm} = \frac{(z + z_h)m_e^\perp + z_h m_h^\perp}{M},$$

onde encontramos z_h como

$$z_h = Z_{cm} - \frac{m_e^\perp z}{M} \quad (\text{A.4})$$

e

$$Z_{cm} = \frac{z_e m_e^\perp + (z_e - z)m_h^\perp}{M},$$

com

$$z_e = Z_{cm} + \frac{m_h^\perp z}{M}. \quad (\text{A.5})$$

Com isso, podemos encontrar expressões para $\partial^2/\partial z_e^2$ e $\partial^2/\partial z_h^2$ em termos de z e Z_{cm} . Partindo da regra da cadeia,

$$\frac{\partial}{\partial z_e} = \frac{\partial z}{\partial z_e} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial Z_{cm}}{\partial z_e} \frac{\partial}{\partial Z_{cm}} = \frac{\partial}{\partial z} + \frac{m_e^\perp}{M} \frac{\partial}{\partial Z_{cm}}, \quad (\text{A.6})$$

logo,

$$\frac{\partial^2}{\partial z_e^2} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2m_e^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm} \partial z} + \left(\frac{m_e^\perp}{M}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm}^2}. \quad (\text{A.7})$$

Fazendo um desenvolvimento análogo a esse para buracos, encontramos

$$\frac{\partial^2}{\partial z_h^2} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2m_h^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm} \partial z} + \left(\frac{m_h^\perp}{M}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm}^2}. \quad (\text{A.8})$$

Substituindo agora as Eqs. (A.7) e (A.8) nos termos de energia cinética em z do Hamiltoniano da Eq. (A.2), encontramos a expressão

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^\perp} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2m_e^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm} \partial z} + \left(\frac{m_e^\perp}{M}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm}^2} \right\}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_h^\perp} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2m_h^\perp}{M} \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm} \partial z} + \left(\frac{m_h^\perp}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm}^2} \right\},$$

que pode ser reduzida a

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial Z_{cm}^2}, \quad (\text{A.9})$$

onde $1/\mu^\perp = 1/m_e^\perp + 1/m_h^\perp$ é a massa reduzida do sistema elétron-buraco. Os termos do lado direito desta expressão podem ser identificados como os operadores de energia cinética em z relacionados aos movimentos relativo (primeiro termo) e do centro de massa (segundo termo).

Podemos observar que no Hamiltoniano do exciton da Eq. (A.2), o potencial da interação Coulombiana entre o elétron e o buraco envolve a coordenada relativa $z = z_e - z_h$, porém, não há nenhum termo de potencial envolvendo a coordenada do centro de massa Z_{cm} . Assim, a energia relacionada ao movimento do centro de massa do exciton é puramente cinética, logo, pode ser escrita como $E_{cm} = \hbar^2 K^2 / 2M$, onde K é o vetor de onda associado ao centro de massa. Para as transições ópticas de interesse (fotoluminescência), temos $K = 0$, o que leva $E_{cm} = 0$. Com isso, o Hamiltoniano do exciton assume a forma

$$H_{exc} = H_e + H_h - \frac{\hbar^2}{2m^\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{z^2 + \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e\rho_h \cos(\theta)}}, \quad (\text{A.10})$$

sendo $\theta = \theta_e - \theta_h$ a coordenada do movimento relativo na direção angular e

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^\parallel(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_i^\parallel(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} + V_i(\rho_i), \quad (\text{A.11})$$

o Hamiltoniano de uma partícula, onde levamos em conta que as massas efetivas no plano dependem da coordenada ρ , devido à mudança de materiais na heteroestrutura.

No desenvolvimento que apresentamos até este ponto, não consideramos a presença de campos externos. A presença de um campo magnético altera o Hamiltoniano de um sistema através do potencial vetor \mathbf{A} , de acordo com

$$H = (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A}) + V(\mathbf{r}). \quad (\text{A.12})$$

Nos Capítulos 2 e 3 deste trabalho, consideramos campos magnéticos aplicados paralelamente ao eixo do fio $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Uma vez que o potencial vetor deve estar no plano perpendicular a \mathbf{B} , ele não deve alterar diretamente o potencial em z , tendo influência apenas sob os termos H_e e H_h do Hamiltoniano do exciton na Eq. (A.10).

O Hamiltoniano de uma partícula pode então ser reescrito como

$$\begin{aligned} H_i &= (\mathbf{p}_i + e\mathbf{A}) \frac{1}{2m_i} (\mathbf{p}_i + e\mathbf{A}) + V_i(\rho_i) \\ &= \frac{1}{2m_i} (\mathbf{p}_i^2 + 2e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i + e^2\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}) + V_i(\rho_i). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Escolhendo o *gauge* simétrico para o potencial vetor $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_\theta$, temos para cada termo

$$\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^\parallel(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_i^\parallel(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2}, \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{2e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i}{2m_i} = -i\hbar \frac{eB}{2m_i^\parallel} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \quad (\text{A.15})$$

e

$$\frac{e^2\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}{2m_i} = \frac{e^2B^2}{8m_i^\parallel} \rho_i^2, \quad (\text{A.16})$$

de maneira que o Hamiltoniano de uma partícula assume a forma final

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\frac{\rho_i}{m_i^\parallel(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_i^\parallel(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} - \frac{i}{2}\hbar\omega_c \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \frac{1}{8}m_i^\parallel\omega_c^2\rho_i^2 + V_i(\rho_i), \quad (\text{A.17})$$

onde identificamos a frequência ciclotrônica como $\omega_c = eB/m_i^\parallel$. Para encontrar o termo que envolve \mathbf{p} e \mathbf{A} na Eq. (A.13), assumimos que estes operadores comutam. É fácil verificar que, para o *gauge* escolhido, o potencial vetor de fato satisfaz esta condição.

Em resumo, o Hamiltoniano usado no Capítulo 2 deste trabalho, para o estudo dos excitons em fios quânticos sob campos magnéticos aplicados paralelamente ao seu eixo, é dado pela Eq. (A.10), sendo o Hamiltoniano de uma partícula H_i dado pela

Eq. (A.17). Já no Capítulo 3, onde discutimos apenas o confinamento de elétrons e buracos em fios quânticos com heteroestruturas longitudinais, sem levar em conta a interação Coulombiana entre os portadores, precisamos apenas do Hamiltoniano de uma partícula. Assim, no Capítulo 3, o Hamiltoniano que usamos é análogo ao da Eq. (A.17), porém agora as massas efetivas não dependem mais de ρ , e sim de z , que é a direção de crescimento da heteroestrutura neste tipo de fio.

B

Solução Numérica da Equação de Schrödinger

As descrições de problemas físicos, em geral, requerem modelos matemáticos bastante sofisticados, baseados na solução de equações diferenciais. Em alguns casos mais simples, é conveniente tentar-se uma solução analítica para estas equações. Porém, quando nos deparamos com problemas onde há uma forte quebra de simetria, por exemplo, torna-se muito complicado e restritivo resolvê-los analiticamente, e uma solução baseada em métodos numéricos passa a ser então a alternativa mais viável.

Em particular, os modelos matemáticos usados na descrição dos problemas abordados neste trabalho baseiam-se na solução da equação de Schrödinger dentro da aproximação da massa efetiva. Neste caso, o fato da massa efetiva ser tomada como função das variáveis espaciais, bem como a existência de potenciais de confinamento com interfaces graduais, fazem com que fique bastante complicado buscar-se uma solução analítica para o problema. Além disso, na descrição do confinamento dos elétrons nos sistemas tipo-II, temos um potencial de confinamento que depende da função de onda do buraco (ver Eq. (2.14)), o que tornaria ainda mais complicado um tratamento analítico. Recorremos então a um esquema de diferenças finitas para resolver as equações diferenciais que encontramos no decorrer deste trabalho. As soluções obtidas a partir desta técnica são bastante flexíveis, permitindo-nos estudar problemas com formas arbitrárias para as funções que descrevem a massa efetiva e o potencial de

confinamento.

Neste Apêndice, mostramos o método de diferenças finitas que empregamos para resolver as equações de Schrödinger para o confinamento dos portadores, em heteroestruturas unidimensionais e bidimensionais. As equações são discretizadas em um *grid* no espaço, e o Hamiltoniano do sistema é encontrado numa forma matricial bastante simples. Os autovalores e autovetores são encontrados a partir da diagonalização da matriz do Hamiltoniano. O esquema de diferenças finitas desenvolvido aqui é bastante geral, permitindo que haja um espaçamento variável entre os pontos que definem o *grid* computacional.

B.1 Equação de Schrödinger Unidimensional

Na aproximação da massa efetiva, para um potencial de confinamento unidimensional, a equação de Schrödinger é dada por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \right) + V(z) \right] \psi(z) = E\psi(z). \quad (\text{B.1})$$

Usando a massa de repouso do elétron m_0 , a constante de Rydberg $R_y = m_0 e^4 / 2\hbar^2$ e o raio de Bohr $a_0 = \hbar^2 / m_0 e^2$, fazemos as transformações $x = z/a_0$, $\mu(x) = m_0/m(z)$, $U(x) = V(z)/R_y$ e $\bar{E} = E/R_y$, e reescrevemos a Eq. (B.1) em termos das novas variáveis adimensionais:

$$\left[-\frac{d}{dx} \left(\mu(x) \frac{d}{dx} \right) + U(x) \right] \psi(x) = \bar{E}\psi(x). \quad (\text{B.2})$$

Seguindo um esquema de diferenças finitas, discretizamos a coordenada x e escrevemos $\psi(x)$ como uma função discreta de N passos $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_N$. Para obter a discretização da Eq. (B.2), começamos integrando ambos os lados no intervalo $x_{i-1/2} < x < x_{i+1/2}$, o que leva a

$$-\left[\mu_{i+1/2} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{i+1/2} - \mu_{i-1/2} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{i-1/2} \right] = (\bar{E} - U_i)(x_{i+1/2} - x_{i-1/2})\psi_i, \quad (\text{B.3})$$

onde U_i e μ_i são, respectivamente, o potencial e o inverso da massa no ponto x_i .

Considerando um *grid* variável, isto é, onde a distância entre os pontos x_i e x_{i+1} seja arbitrária, a derivada primeira, que no caso contínuo é definida como

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\psi(x + \Delta x) - \psi(x)}{\Delta x}, \quad (\text{B.4})$$

pode ser escrita como

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}}, \quad (\text{B.5})$$

no caso discreto. Definindo $h_i^2 = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ e usando a definição de derivada acima, podemos escrever a Eq. (B.3) na forma

$$\begin{aligned} & -\mu_{i+1/2} \left(\frac{h_{i+1}\psi_{i+1}}{h_{i+1}h_i(x_{i+1} - x_i)} - \frac{h_i\psi_i}{h_i^2(x_{i+1} - x_i)} \right) \\ & + \mu_{i-1/2} \left(\frac{h_i\psi_i}{h_i^2(x_i - x_{i-1})} - \frac{h_{i-1}\psi_{i-1}}{h_{i-1}h_i(x_i - x_{i-1})} \right) = (\bar{E} - U_i)h_i\psi_i. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Usando agora a notação $\xi_i = h_i\psi_i$ e $\bar{\mu}_i = \mu_{i-1/2}/(x_i - x_{i-1})$ e reagrupando os termos, encontramos a forma final para discretização da equação de Schrödinger unidimensional num *grid* variável:

$$-\frac{\bar{\mu}_i}{h_{i-1}h_i}\xi_{i-1} + \left(\frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i^2} + \frac{\bar{\mu}_i}{h_i^2} + U_i \right) \xi_i - \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i h_{i+1}} \xi_{i+1} = \bar{E}\xi_i, \quad (\text{B.7})$$

que pode ser escrita na forma matricial

$$\begin{pmatrix} A_1 & B_1 & 0 & \dots & 0 \\ B_1 & A_2 & B_2 & & 0 \\ 0 & B_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & B_{N-1} \\ 0 & 0 & \dots & B_{N-1} & A_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \xi_{i-1} \\ \xi_i \\ \xi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \bar{E} \begin{pmatrix} \vdots \\ \xi_{i-1} \\ \xi_i \\ \xi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

onde definimos

$$A_i = \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i^2} + \frac{\bar{\mu}_i}{h_i^2} + U_i \quad (\text{B.9})$$

e

$$B_i = \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i h_{i+1}}. \quad (\text{B.10})$$

O Hamiltoniano discretizado do sistema, nesta notação, é representado então por uma matriz $N \times N$ tridiagonal simétrica, e as autofunções são matrizes coluna de ordem N . Podemos ver facilmente que qualquer termo adicional na direção z como, por exemplo, os potenciais devido a campos elétricos externos, deve ser incluído na diagonal principal A_i da matriz. Os autovalores \bar{E} e autovetores ξ são então obtidos numericamente, usando a rotina DSTEVX da LAPACK, que diagonaliza matrizes tridiagonais simétricas.

Para o caso particular de um *grid* uniforme, isto é, em que a distância entre os pontos x_i e x_{i+1} seja constante, teremos então

$$x_i - x_{i-1} = x_{i+1/2} - x_{i-1/2} = h,$$

$$h_i = \sqrt{h}.$$

Além disso, considerando que não haja singularidades na massa, podemos fazer $\mu_{i+1/2} = (\mu_i + \mu_{i+1})/2$ e $\mu_{i-1/2} = (\mu_{i-1} + \mu_i)/2$, o que nos leva a

$$\bar{\mu}_i = \frac{\mu_{i-1/2}}{h} = \frac{1}{2h} (\mu_i + \mu_{i-1})$$

e

$$\bar{\mu}_{i+1} = \frac{\mu_{i+1/2}}{h} = \frac{1}{2h} (\mu_{i+1} + \mu_i).$$

Assim, os termos A_i e B_i da matriz tridiagonal da Eq. (B.8), neste novo *grid* de espaçamento constante, são escritos na forma

$$A_i = \frac{1}{2h^2} (\mu_{i-1} + 2\mu_i + \mu_{i+1}) + U_i$$

e

$$B_i = -\frac{1}{2h^2} (\mu_{i+1} + \mu_i),$$

que está de acordo com os trabalhos publicados recentemente sobre estes sistemas.

Para verificar a eficiência deste método de discretização, resolvemos a equação de Schrödinger para elétrons em sistemas simples, onde as soluções analíticas são facilmente obtidas para comparação. Considerando um poço quântico de largura L com barreiras de potencial infinitas, as energias dos autoestados são encontradas analiticamente através da relação $E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2m_0 L^2$. A Tabela B.1 mostra uma comparação entre estas energias e as energias obtidas numericamente, para os três primeiros autoestados em um poço de largura $L = 50 \text{ \AA}$. No esquema de diferenças finitas, consideramos três tamanhos diferentes para um *grid* de espaçamento constante: $h = 0.5 \text{ \AA}$, $h = 0.1 \text{ \AA}$ e $h = 0.05 \text{ \AA}$. Para um oscilador harmônico de frequência ω , as energias são obtidas

Tabela B.1: Comparação entre as energias dos três primeiros autoestados em um poço quadrado infinito de largura $L = 50 \text{ \AA}$, obtidas analítica e numericamente.

	Solução Analítica	Solução Numérica		
		$h = 0.5 \text{ \AA}$	$h = 0.1 \text{ \AA}$	$h = 0.05 \text{ \AA}$
E_1 (meV)	15.0412	14.7436	14.9807	15.0103
E_2 (meV)	60.1647	58.9510	59.9223	60.0409
E_3 (meV)	135.3709	132.6065	134.8229	135.0915

analiticamente pela relação $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. A Tabela B.2 mostra uma comparação entre os resultados encontrados a partir desta relação e a partir do esquema de diferenças finitas, considerando $\omega = 1 \text{ fs}^{-1}$. Em ambos os sistemas, vemos que as energias encontradas a partir do esquema de diferenças finitas aproximam-se bastante daquelas encontradas analiticamente, em especial quando consideramos um *grid* com espaçamento menor.

Tabela B.2: Comparação entre as energias dos três primeiros autoestados em um oscilador harmônico de frequência $\omega = 1\text{fs}^{-1}$, obtidas analítica e numericamente.

	Solução Analítica	Solução Numérica		
		$h = 0.5 \text{ \AA}$	$h = 0.1 \text{ \AA}$	$h = 0.05 \text{ \AA}$
E_1 (meV)	329.1061	328.6613	329.0883	329.1016
E_2 (meV)	987.3183	985.0919	987.2294	987.2961
E_3 (meV)	1645.5305	1639.7348	1645.2995	1645.4727

B.2 Equação de Schrödinger Bidimensional

Em um fio quântico cilíndrico, a equação de Schrödinger para o confinamento na direção radial, considerando a massa efetiva como função de ρ , é escrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{m(\rho)} \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m(\rho)\rho^2} + V(\rho) \right] \psi(\rho) = E\psi(\rho). \quad (\text{B.11})$$

Esta equação pode ser adimensionalizada usando-se transformações análogas às feitas no caso unidimensional:

$$r = \frac{\rho}{a_0} \quad ,$$

$$\mu(r) = \frac{m_0}{m(\rho)} \quad ,$$

$$U(r) = \frac{1}{R_y} \left(\frac{\hbar^2 l^2}{2m(\rho)\rho^2} + V(\rho) \right) \quad e$$

$$\bar{E} = \frac{E}{R_y} \quad ,$$

que levam a

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r\mu(r) \frac{d}{dr} \right) + U(r) \right] \psi(r) = \bar{E}\psi(r). \quad (\text{B.12})$$

Seguindo novamente um esquema de diferenças finitas, definimos um *grid* de espaçamento variável na direção radial, r_i ($i = 1, \dots, N$). Para discretizar a Eq. (B.12) neste *grid*, como fizemos para o caso unidimensional, integramos ambos os lados desta equação no intervalo $i - 1/2 < r < i + 1/2$:

$$-\int_{i-1/2}^{i+1/2} r dr \left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\mu(r) \frac{d}{dr} \right) + U(r) \right] \psi(r) = \int_{i-1/2}^{i+1/2} r dr \bar{E} \psi(r), \quad (\text{B.13})$$

e usamos a definição de derivada discreta, dada pela Eq. (B.5), para encontrar

$$\begin{aligned} & -r_{i+1/2} \mu_{i+1/2} \left(\frac{h_{i+1} \psi_{i+1}}{h_{i+1} h_i (r_{i+1} - r_i)} - \frac{h_i \psi_i}{h_i^2 (r_{i+1} - r_i)} \right) \\ & + r_{i-1/2} \mu_{i-1/2} \left(\frac{h_i \psi_i}{h_i^2 (r_i - r_{i-1})} - \frac{h_{i-1} \psi_{i-1}}{h_i h_{i-1} (r_i - r_{i-1})} \right) = (\bar{E} - U_i) h_i \psi_i, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

onde definimos $h_i^2 = (r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2)/2$.

Por fim, fazendo agora $\xi_i = h_i \psi_i$ e

$$\bar{\mu}_i = \frac{1}{2(r_i - r_{i-1})} (r_i \mu_i + r_{i-1} \mu_{i-1}), \quad (\text{B.15})$$

e reagrupando os termos, encontramos uma forma idêntica à da Eq. (B.7) para a equação de Schrödinger que descreve confinamento radial em coordenadas cilíndricas:

$$-\frac{\bar{\mu}_i}{h_{i-1} h_i} \xi_{i-1} + \left(\frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i^2} + \frac{\bar{\mu}_i}{h_i^2} + U_i \right) \xi_i - \frac{\bar{\mu}_{i+1}}{h_i h_{i+1}} \xi_{i+1} = \bar{E} \xi_i. \quad (\text{B.16})$$

Novamente, usamos uma notação matricial $\mathbf{H}\xi = \bar{\mathbf{E}}\xi$ para escrever o Hamiltoniano discretizado do sistema como uma matriz $N \times N$ tridiagonal simétrica, onde os termos A_i da diagonal principal e B_i das subdiagonais são dados pelas Eqs. (B.9) e (B.10), respectivamente, e os autovetores ξ são representados por uma matriz coluna de ordem N . Os autovalores e autovetores são então encontrados diagonalizando-se numericamente a matriz \mathbf{H} , usando a mesma rotina computacional que usamos para o caso unidimensional.

Verificamos a eficiência deste esquema de diferenças finitas resolvendo a equação de Schrödinger para um elétron em um fio quântico cilíndrico de raio $R = 50 \text{ \AA}$,

com um potencial de confinamento infinito. A solução analítica para esse problema é facilmente obtida, e podemos encontrar as energias dos autoestados a partir da relação $E_n = \hbar^2 x_{n,l}^2 / 2m_0 R^2$, onde $x_{n,l}$ é a n -ésima raiz da função de Bessel de ordem l . Uma comparação entre as energias obtidas a partir desta relação e a partir do método numérico é mostrada na Tabela B.3, onde consideramos um *grid* de espaçamento h constante.

Tabela B.3: Comparação entre as energias dos autoestados em um fio quântico cilíndrico de potencial infinito, com raio $R = 50 \text{ \AA}$, obtidas analítica e numericamente.

	Solução Analítica	Solução Numérica		
		$h = 0.5 \text{ \AA}$	$h = 0.1 \text{ \AA}$	$h = 0.05 \text{ \AA}$
$E_{1,0}$ (meV)	8.8135	8.8179	8.8136	8.8135
$E_{2,0}$ (meV)	46.4380	46.4854	46.4392	46.4379
$E_{3,0}$ (meV)	114.1273	114.2835	114.1320	114.1284
$E_{1,1}$ (meV)	22.3752	22.3577	22.3742	22.3744
$E_{2,2}$ (meV)	75.0086	74.8904	75.0027	75.0052
$E_{3,3}$ (meV)	157.7325	157.3336	157.7141	157.7240

Vemos que as energias obtidas numericamente estão de acordo com os resultados analíticos, principalmente quando consideramos um *grid* com menor espaçamento.

C

Artigos Publicados

- *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).
- *Quantum Confinement of Carriers in Heterostructured GaAs/GaP quantum wires*
C. L. N. Oliveira, A. Chaves, E. W. S. Caetano, M. H. Degani e J. A. K. Freire,
Microelectronics Journal **36**, 1049 (2005).
- *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).

- *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, 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



Quantum confinement of carriers in heterostructured GaAs/GaP quantum wires

C.L.N. Oliveira, A. Chaves, E.W.S. Caetano, M.H. Degani, J.A.K. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa postal 6030, 60455-900 Fortaleza-CE, Brazil

Available online 27 June 2005

Abstract

We present theoretical calculations on the confinement of electrons and holes in a heterostructured GaAs/GaP quantum wires within the effective mass approximation. Energy levels (ground state and excited states), as well as electron–hole recombination energies for some transitions, are calculated for different combinations of wire radius, well widths, and interface thickness.

© 2005 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Quantum wires; Recombination energy; Interfacial layer

1. Introduction

The success of semiconductor integrated circuits has been largely hinged upon the capability of heterostructure formation through carefully controlled doping and interfacial [1–3]. Gudiksen et al. [1] have grown compositionally modulated nanowire superlattices consisting of 2–21 layers of GaAs and GaP. Yiyang et al. [3] have synthesized Si/SiGe nanowires based on longitudinal ordered heterostructures with a well-defined compositional profile along the wire axis, obtaining a sort of superlattice along the wire with graded interfaces 50 nm thick. Single-nanowire photoluminescence, electrical transport and electroluminescence measurements show the unique photonic and electronic properties of these nanowire superlattices, and suggest potential applications ranging from nano-barcodes to polarized nanoscale light emitting diodes (LEDs) [4,5]. The nanowires have several applications in electronic devices like transistor, diodes, or in lasers or biological sensors. Other possibility is the nanowire advantage over carbon nanotubes, due to their capability of manipulation and tailoring of their chemistry properties [6]. In this work, we calculate the carrier energy levels and recombination energy of electron–light hole and electron–heavy hole in a

inhomogeneous GaP/GaAs/GaP quantum well (QW) nanowires.

2. Theoretical model

The Hamiltonian of this system can be expressed by

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \frac{1}{m^*(z)} \nabla^2 + V(\rho, z) - E\right) \Psi(\rho, \varphi, z) = 0, \quad (1)$$

with the following carrier wave function

$$\Psi_i(\rho, \varphi, z) = A e^{i\ell\varphi} J_l\left(\frac{x_{lm}\rho}{a}\right) \phi_{lmj}(z), \quad (2)$$

where A is a constant; J_l is the Bessel function of order l ; m is the m th root of J_l ; and j is the quantum number of the confined state inside the quantum well (along the growth direction z), with $l, m, j = 0, 1, 2, \dots$

The equation in the ρ direction can be solved analytically in terms of the Bessel functions:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_i^* \rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + V(\rho) - E_{lm}\right] A e^{i\ell\varphi} J_l\left(\frac{x_{lm}\rho}{a}\right) = 0. \quad (3)$$

The confinement potential profile for the i th carrier ($i = e$, electron; lh, light hole; hh, heavy hole) is

$$V_i(\rho, z) = \begin{cases} \infty, & \text{if } \rho > a \\ Q_i[E_g^{\text{GaP}} - E_g^{\text{GaAs}}], & \text{if } \rho < a \end{cases}, \quad (4)$$

where a is the wire radius and Q_i is the band-off-set [7].

* Corresponding author. Tel.: +55 85 40089915; fax: +55 85 4008950.
E-mail address: alking@fisica.ufc.br (J.A.K. Freire).

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 germanium 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-

gies are significantly higher than in type-I systems.

^{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

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).