

**Estados Excitados de Impurezas  
Hidrogenóides Rasas em Poços Quânticos  
de GaAs-GaAlAs**

Gleise das Neves Carneiro

Orientador: Luiz E. Oliveira

Co-Orientador: Gerald Weber

Este exemplar corresponde à redação final  
da Tese defendida pela aluna Gleise das Neves  
Carneiro e aprovada pela Comissão Julgadora.

8/7/94

*[Assinatura]*

*Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da  
Universidade Estadual de Campinas como parte dos requi-  
sitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.  
UNICAMP-1994*

## Agradecimentos

- ao Prof. Oliveira pela orientação e apoio,
- ao Prof. Gerald Weber pela co-orientação,
- à minha mãe e meu pai pelo apoio que me deram,
- à Edith, Ana, Paulo, Glauco, Talita e Sieghard,
- ao CNPq e CAPES pelo suporte financeiro,

meus agradecimentos.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Conceitos e Teoria Básica</b>	<b>6</b>
2.1	Do Átomo de Hidrogênio à Impureza Hidrogenóide . . . . .	6
2.1.1	Átomo de Hidrogênio . . . . .	6
2.1.2	Impureza Hidrogenóide . . . . .	9
2.1.3	Impureza na Interface . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Teoria da Impureza no Poço Quântico</b>	<b>14</b>
3.1	Energia de Ligação . . . . .	14
3.1.1	Estado Fundamental . . . . .	14
3.1.2	Estados Excitados . . . . .	17
3.2	Densidade de Estados . . . . .	20
3.3	Absorção Óptica . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussão</b>	<b>24</b>
4.1	Os Estados Tipo $s$ . . . . .	25
4.2	Os Estados Tipo $p_{x,y}$ . . . . .	30
4.3	Os Estados Tipo $p_z$ . . . . .	33
4.4	Densidade de Estados . . . . .	38
4.5	Coefficiente de Absorção . . . . .	41
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>46</b>



# Lista de Figuras

1.1	Perfil das bordas das bandas de um poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As. . . . .	2
2.1	Esquemática das funções de onda (orbitais) do átomo de hidrogênio. . . . .	8
2.2	Representação esquemática de uma impureza hidrogenóide. . . . .	10
2.3	Esquemática das bandas de valência, condução e níveis rasos de impureza. . . . .	12
4.1	Função de onda do estado fundamental tipo $1s$ em função de $z$ . . . . .	25
4.2	Energia de ligação para o estado fundamental tipo $1s$ . . . . .	27
4.3	Energia de ligação para o estado excitado tipo $2s$ . . . . .	28
4.4	Energia de ligação para o estado excitado tipo $3s$ . . . . .	29
4.5	Energia de ligação para o estado excitado tipo $2p_{x,y}$ . . . . .	31
4.6	Energia de ligação para o estado excitado tipo $3p_{x,y}$ . . . . .	32
4.7	Energia de ligação para o estado excitado tipo $2p_z$ . . . . .	34
4.8	Energia de ligação para o estado excitado tipo $3p_z$ . . . . .	35
4.9	Função de onda do estado excitado tipo $2p_z$ em função de $z$ . . . . .	36
4.10	Função de onda do estado tipo $2p_z$ para várias larguras de poço. . . . .	37
4.11	Densidade de estados de impureza para o estado fundamental. . . . .	39
4.12	Densidade de estados de impureza para o estado excitado tipo $2p_z$ . . . . .	40
4.13	Elementos de matriz $ \langle 1s x 2p_x\rangle ^2$ e $ \langle 1s x 3p_x\rangle ^2$ em função da posição da impureza. . . . .	42
4.14	Valores experimentais para transições $1s \rightarrow 2p_x$ obtido por Jarosik et al. . . . .	43
4.15	Forma do coeficiente de absorção para os estados $1s \rightarrow 2p_x$ e $1s \rightarrow 3p_x$ . . . . .	44
4.16	Forma do coeficiente de absorção obtido por Fraizzoli et al. . . . .	45

# Lista de Tabelas

2.1	Funções de onda do átomo de hidrogênio. . . . .	7
-----	---	---

## Resumo\*

O estudo de impurezas rasas em heteroestruturas, tais como poços quânticos e super-redes, tem sido de contínuo interesse nos últimos anos. Comparações bem sucedidas entre resultados experimentais [e.g. fotoluminescência: N. N. Ledentsov *et al.*, Appl. Phys. A **54**, 261 (1992)] e cálculos teóricos [L. E. Oliveira and G. D. Mahan, Phys. Rev. B **47**, 2406 (1993)] constituem uma forte motivação para um estudo teórico mais profundo.

Apresentamos um cálculo variacional das energias de ligação de doadores rasos em um poço quântico de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. As energias e funções de onda variacionais associadas ao estado fundamental (tipo 1s) bem como alguns estados excitados (tipo 2s, 2p<sub>x,y</sub>, 2p<sub>z</sub>, 3s, 3p<sub>x,y</sub> e 3p<sub>z</sub>) são obtidos em função da posição da impureza dentro do poço.

A densidade de estados de impureza, os elementos de matriz para a transição intradoadores e o espectro de absorção no infra-vermelho são calculados para alguns destes estados e comparados com trabalhos teóricos [ S. Fraizzoli, F. Bassani, and R. Buczko, Phys. Rev. B **41**, 5096 (1990)] e experimentais [N. C. Jarosik *et al.*, Phys. Rev. Lett. **54**, 1283 (1985)] anteriores.

---

\*Parte deste trabalho foi aceito para apresentação na "Sixth International Conference on Shallow Level Centers in Semiconductors", University of California (Berkeley), de 10 a 12 de agosto de 1994.

## Abstract

The study of shallow impurities in semiconductor heterostructures, such as quantum wells and superlattices, has been of continuous interest over the last years. Successful comparisons between experimental results [e.g. photoluminescence: N. N. Ledentsov *et al.*, Appl. Phys. A **54**, 261 (1992)] and theoretical calculations [L. E. Oliveira and G. D. Mahan, Phys. Rev. B **47**, 2406 (1993)] constitute a strong motivation for an in-depth theoretical study.

We present a variational calculation of the binding energies of shallow donors in a GaAs-AlGaAs quantum well. The energies and variational wave functions associated to the ground state ( $1s$ -like) as well as some excited states ( $2s$ ,  $2p_{x,y}$ ,  $2p_z$ ,  $3s$ ,  $3p_{x,y}$  and  $3p_z$ -like) are obtained as functions of the position of the impurity ( $z_i$ ) in the well.

The density of impurity states, intra-donor transition strengths and the infrared absorption spectra are calculated for some of these excited states and results compared with previous theoretical [S. Fraizzoli, F. Bassani, and R. Buczko, Phys. Rev. B **41**, 5096 (1990)] and experimental work [N. C. Jarosik *et al.*, Phys. Rev. Lett. **54**, 1283 (1985)].

# Capítulo 1

## Introdução

Nos últimos anos, uma das áreas de maior destaque na física de semicondutores tem sido o estudo de camadas crescidas por técnicas tais como epitaxia por feixe molecular (*molecular-beam epitaxy* ou *MBE*), deposição por vapor químico de compostos organometálicos (*metal organic chemical vapor deposition* ou *MOCVD*) e mais recentemente epitaxia por feixe químico (*chemical beam epitaxy* ou *CBE*). Com essas técnicas, é possível crescer sistemas com camadas alternadas de semicondutores diferentes (usualmente referidos como heteroestruturas) ou crescer uma camada de um único semicondutor com diferentes dopagens. Estas estruturas consistem em camadas semicondutoras com geometria de interface, nível de dopagem, e composição química definidos em escala atômica. Tais sistemas, unidimensionais e com grande periodicidade (50-500 Å) ao longo da direção de crescimento são conhecidos como *super-redes*. Esta é uma área muito interessante, não só por sua importância tecnológica evidente, mas também porque oferece a possibilidade de novos efeitos que não estão presentes no *bulk*.

Entre as super-redes, a de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As é a mais simples e amplamente estudada. Estes dois semicondutores têm parâmetros de rede muito próximos, de modo que interfaces de alta qualidade podem ser crescidas. O *gap* de energia do Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As aumenta com a concentração  $x$  de alumínio, onde  $x$  varia tipicamente entre 10 e 45%, garantindo que o *gap* seja direto. Portanto existe uma descontinuidade entre as bandas dos dois materiais na interface GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Como resultado, os elétrons e buracos na camada de GaAs

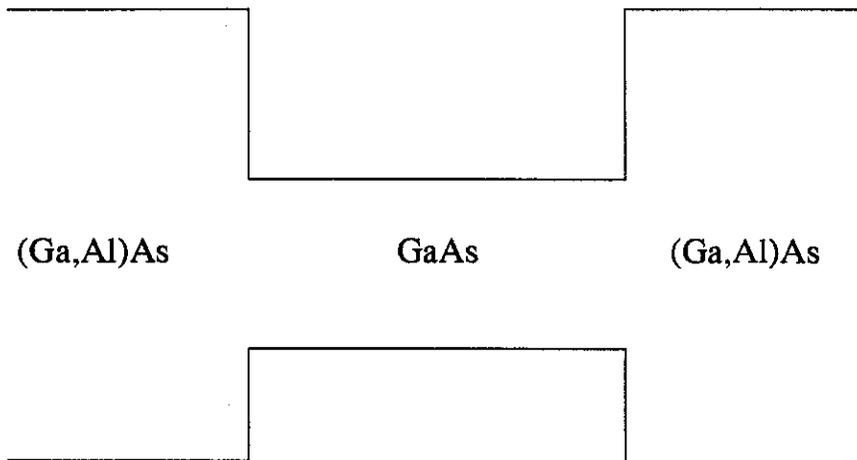


Figura 1.1: Perfil das bordas das bandas de um poço quântico de GaAs-(Ga,Al)As.

encontram-se aproximadamente em um poço quântico com interfaces bem definidas. Uma representação esquemática do poço é apresentada na figura 1.1.

Nosso objetivo é estudar impurezas hidrogenóides rasas nestes poços quânticos, onde a impureza hidrogenóide é aquela que não deforma a rede cristalina e que pode ser descrita como se fosse um átomo de hidrogênio, mas com parâmetros (raio de Bohr, energias, etc.) diferentes.

O primeiro cálculo da energia de ligação de uma impureza hidrogenóide rasa em um poço quântico foi feito por Bastard [1]. Ele investigou a energia de ligação do estado fundamental de um doador associado com a primeira sub-banda em função da largura do poço e da posição da impureza. Uma vez que a descontinuidade das bandas de GaAs e  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  na interface é muito maior do que a energia de ligação do doador no GaAs, Bastard considerou as paredes do poço como sendo infinitamente altas e escolheu sua função de onda variacional baseado nesta premissa.

Priester et al. [2] mostraram que o uso da aproximação da massa efetiva para impurezas rasas é adequado no caso de super-redes e poços quânticos. Em seguida, Mailhot et al. [3] e Greene e Bajaj [4] estenderam o trabalho de Bastard para o caso de impurezas em poços quânticos de GaAs- $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  com barreiras finitas.

Através de um cálculo variacional muito similar ao de Bastard [1], Chaudhuri [5] obtém as energias de ligação de impurezas rasas em poços múltiplos e analisa a dependência da energia de ligação com a altura da barreira. Chen e Zhou [6] calcularam energias de ligação de impurezas rasas em poços quânticos duplos para o estudo de tunelamento.

Tanaka et al. [7] obtém a energia de ligação do estado fundamental para um doador em um poço quântico com barreiras assimétricas, considerando também o caso no qual o íon positivo do átomo da impureza está localizado nas vizinhanças da camada de  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ .

O efeito da não-parabolicidade da banda de condução nos níveis de energia de um doador hidrogenóide em um poço quântico foi investigado por Chaudhuri e Bajaj [8]. Masselink et al. [9] calcularam a energia de ligação do estado fundamental de um aceitador levando em conta a natureza complexa da estrutura da banda de valência.

Efeitos de descontinuidade da massa efetiva para poços quânticos com barreiras finitas foram calculados por Mailhot et al. [3] e Priester et al. [10]. As diferenças encontradas pelos autores foram pequenas.

Oliveira e Falicov [11] introduziram uma função dielétrica espacial e rediscutiram a importância do cálculo das densidades de estado de impurezas. Oliveira e Pérez-Alvarez [12, 13] recalcularam alguns resultados de Bastard [1] e apresentaram resultados para poços quânticos com barreiras finitas. Pouco depois, Oliveira e López-Gondar [14, 15] estudaram a fotoluminescência associada a impurezas no caso de poços quânticos de  $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ .

As energias de ligação de uma impureza hidrogenóide em um poço quântico podem ser modificadas pela presença de um campo magnético [16, 17], ou pela presença de um campo elétrico [18–24]. Impurezas hidrogenóides também podem ter suas energias de ligação calculadas em estruturas diferentes das do poço quântico, como por exemplo em fios quânticos de seção circular [25, 26] e quadrada [27–29]; e também em pontos quânticos [30].

Experimentalmente, Miller et al. [31, 32] fizeram as primeiras observações de estruturas associadas a recombinações entre as sub-banda de condução e a banda de aceitadores neutros no espectro de fotoluminescência em poços múltiplos de  $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  crescidos por epitaxia de feixe molecular. Meynadier et al. [33] também observaram efeitos asso-

ciados a aceitadores em medidas de fotoluminescência em poços quânticos não dopados de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Shanabrook et al. [34, 35] relatam vários resultados experimentais das propriedades doadoras em poços quânticos. Chen et al. [36] mostraram resultados de fotoluminescência associados a transições envolvendo a recombinação de aceitadores em função da temperatura.

Estados excitados e transições entre estados excitados podem ser observados experimentalmente por técnicas tais como fotoluminescência de excitação [37–39] e por magnetoespectroscopia no infra-vermelho longínquo [40]. Yoo et al. [41] através de magnetoespectroscopia observam a energia de transição entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados de uma impureza hidrogenóide rasa em um poço quântico na presença de campo elétrico e magnético.

Nos últimos anos o interesse teórico no cálculo das energias de ligação de estados excitados e suas respectivas transições foi muito grande. Entre os primeiros trabalhos que tratam de estados excitados de impureza destacamos Mailhiet et al. [3], Chaudhuri e Bajaj [8] e Greene e Bajaj [42]. Mais recentemente temos os trabalhos de Fraizzoli et al. [43] relacionado a doadores e Fraizzoli e Pasquarello [44] relacionado a aceitadores. Efeitos de compensação foram tratados por Emmel et al. [45, 46]. Latgé et al. [29] calcularam os elementos de matriz de transição entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados de um fio quântico.

Nos próximos capítulos apresentamos os conceitos básicos para o átomo de hidrogênio que nos serão úteis no estudo dos limites da impureza quando a largura do poço é tal (muito grande ou muito pequena) que fisicamente não temos mais o confinamento quântico. Também é apresentada a teoria utilizada no cálculo variacional para obter a energia de ligação do estado fundamental tipo  $1s$  e os primeiros estados excitados  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_z$ ,  $3s$ ,  $3p_x$  e  $3p_z$  de uma impureza hidrogenóide rasa. A partir daí a densidade de estados é calculada para alguns estados assim como o coeficiente de absorção entre o estado fundamental  $1s$  e os estados excitados  $2p_{x,y}$  e  $3p_{x,y}$ .

Uma das motivações que nos leva a fazer este cálculo é podermos obter a curva de absorção no infravermelho longínquo, que é um resultado que pode ser comparado com

medidas experimentais. No nosso caso, comparamos os resultados com os obtidos por Jarosik et al. [40]. Nossos resultados também foram comparados com outros trabalhos teóricos, onde se utilizam funções de onda bem mais complicadas, como no trabalho de Fraizzoli [43] et al., onde a função envelope usada é uma soma de Gaussianas. Apesar de nossas funções envelopes serem mais simples, resultados muito semelhantes foram alcançados.

Esta tese está organizada na seguinte forma: no capítulo 2 apresentaremos os conceitos e a teoria básica do átomo de hidrogênio e a impureza no *bulk*, no capítulo 3 descrevemos a teoria para a impureza no poço, no capítulo 4 os nossos resultados são apresentados e discutidos e fazemos nossas conclusões no capítulo 5.

# Capítulo 2

## Conceitos e Teoria Básica

### 2.1 Do Átomo de Hidrogênio à Impureza Hidrogenóide

Esta seção tem por objetivo servir como referência para os resultados obtidos no cálculo da energia de ligação de impurezas hidrogenóides rasas no poço quântico, uma vez que os limites hidrogenóides devem ser alcançados, respeitadas as devidas escalas, quando a largura do poço tende a infinito ou a zero.

#### 2.1.1 Átomo de Hidrogênio

O átomo de um elétron é o sistema ligado (*bound system*) mais simples que ocorre na natureza. Os cálculos feitos para o átomo de hidrogênio são baseados no fato que o sistema em estudo é composto por duas partículas (um elétron e um próton) cuja energia de atração mútua é inversamente proporcional à distância entre elas. Existem vários sistemas que preenchem estas condições: deutério, trítio, múon, etc. Há outros sistemas que em primeira aproximação também podem ser descritos desta maneira, como por exemplo doadores, aceitadores e éxcitons. Portanto os resultados obtidos para o átomo de hidrogênio são diretamente aplicáveis a estes exemplos. O que precisamos fazer é trocar as constantes introduzidas nestas equações (massas e constantes dielétricas). A

função de onda associada aos estados estacionários e suas energias correspondentes serão obtidas substituindo o raio de Bohr e a energia por novos valores, que fornecem a ordem de magnitude da extensão espacial da função de onda e da energia de ligação destes sistemas.

O hamiltoniano do átomo de hidrogênio é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu^*} - \frac{Ze^2}{\epsilon_0 r}. \quad (2.1)$$

onde  $Z$  é a carga do núcleo e  $\mu^*$  é a massa reduzida do elétron e do próton. Uma vez que a massa do próton é muito mais pesada do que a do elétron, podemos considerar  $\mu^*$  como sendo aproximadamente a massa do elétron livre  $m_0$ .

As funções de onda, soluções desse hamiltoniano, estão dadas na tabela 2.1. É importante salientar que essas funções, multiplicadas pelas funções do poço, são as funções tentativa que usaremos no método variacional descrito na seção 3.1.

Autofunções do Átomo de Hidrogênio			
Números Quânticos			
$n$	$l$	$m_l$	Autofunções
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} (2 - \frac{r}{a_0}) e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} r e^{-r/2a_0} \cos \theta$
2	1	$\pm 1$	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} r e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi a_0^3}} (27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}) e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi a_0^3}} r (6 - \frac{r}{a_0}) \frac{e^{-r/3a_0}}{a_0^{3/2}} \cos \theta$
3	1	$\pm 1$	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi a_0^3}} r (6 - \frac{r}{a_0}) e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$

Tabela 2.1: Funções de onda do átomo de hidrogênio.

A figura 2.1 mostra as funções de onda do átomo de hidrogênio, também chamadas orbitais atômicos, que nos fornecem uma idéia espacial do comportamento das funções

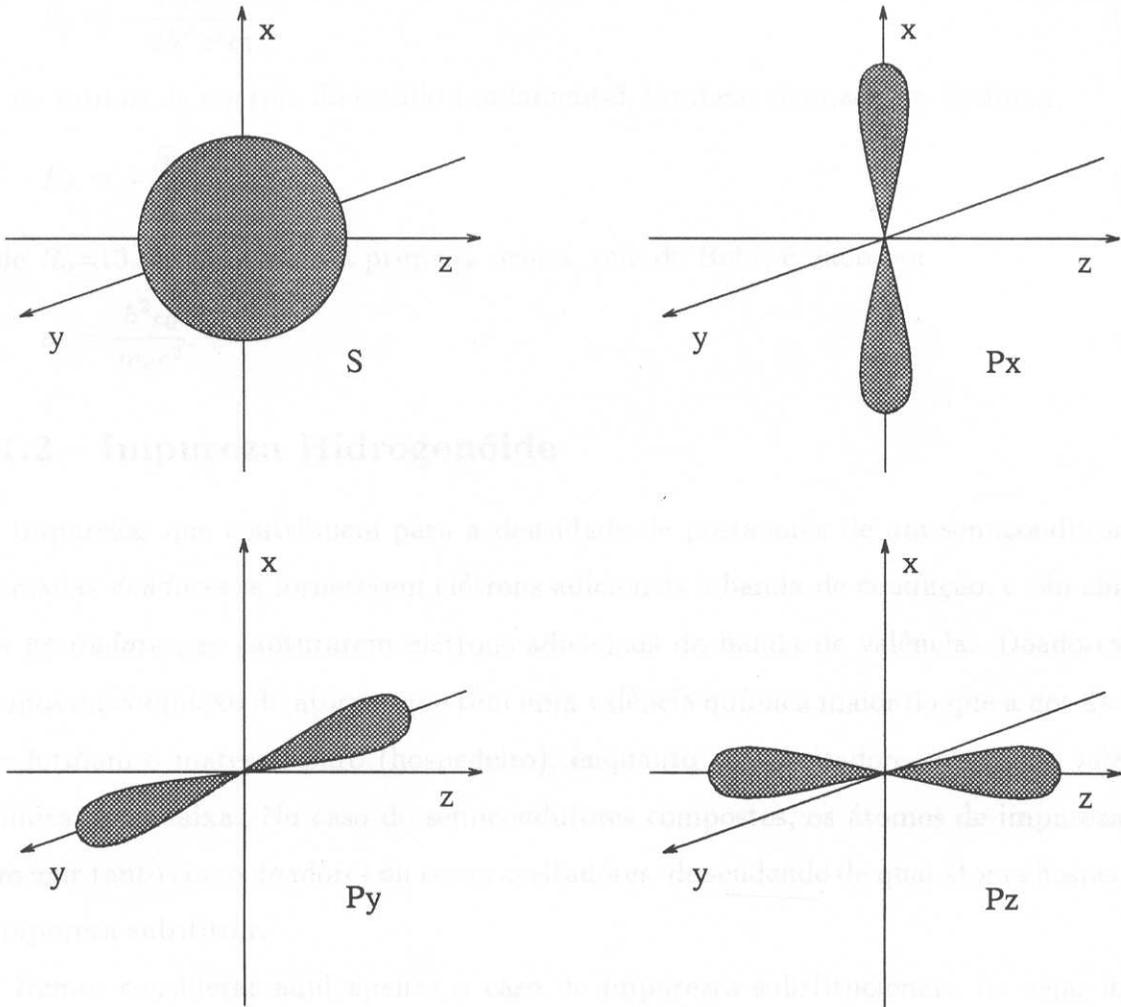


Figura 2.1: Esquematização das funções de onda (orbitais) do átomo de hidrogênio.

de onda do elétron. Essa noção é importante porque ajudará a visualizar o que acontece com as funções de onda hidrogenóides quando temos um confinamento quântico em uma dada direção.

A energia  $E_n$  do átomo de hidrogênio é dada pela expressão

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2 \epsilon_0^2}, \quad (2.2)$$

ou em termos da energia do estado fundamental, também chamada de Rydberg,

$$E_n = -\frac{R_0}{n^2}, \quad (2.3)$$

onde  $R_0=13.6$  eV. O raio da primeira órbita, raio de Bohr, é dado por

$$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m_0 e^2}. \quad (2.4)$$

## 2.1.2 Impureza Hidrogenóide

Impurezas que contribuem para a densidade de portadores de um semiconductor são chamadas *doadores* se fornecerem elétrons adicionais à banda de condução, e são chamadas *aceitadores*, se capturarem elétrons adicionais da banda de valência. Doadores são átomos ou complexo de átomos que têm uma valência química maior do que a dos átomos que formam o material puro (hospedeiro), enquanto que aceitadores têm uma valência química mais baixa. No caso de semicondutores compostos, os átomos de impureza podem agir tanto como doadores ou como aceitadores, dependendo de qual átomo hospedeiro a impureza substituir.

Iremos considerar aqui apenas o caso de impurezas substitucionais, ou seja, impurezas que ocupam o lugar que normalmente o átomo do material hospedeiro ocuparia. Por exemplo, consideremos o caso de impurezas substitucionais do grupo V da tabela periódica. Tomemos um cristal puro de germânio e substituimos ocasionalmente um átomo de germânio pelo seu vizinho à direita da tabela periódica, ou seja, um átomo de arsênio. O íon de germânio tem carga  $4e$  e contribui com 4 elétrons para a banda de valência, enquanto que o íon de arsênio tem carga  $5e$  e contribui com 5 elétrons para a banda de valência. Se, em primeira aproximação, ignorarmos a diferença entre as massas

nucleares do arsênio e germânio, podemos representar a substituição de um átomo de germânio de uma maneira muito menos drástica, na qual o átomo de germânio não é removido, mas apenas uma carga positiva adicional é colocada ao seu redor. A figura 2.2 mostra a representação esquemática de uma impureza hidrogenóide.

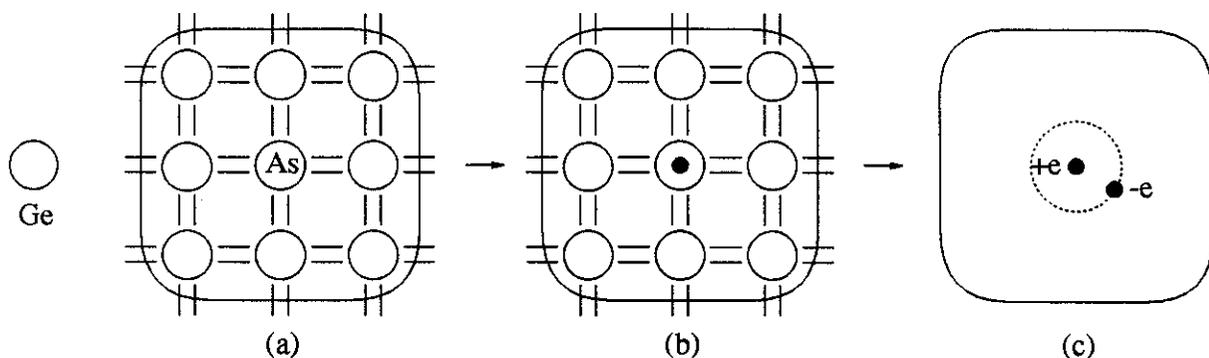


Figura 2.2: (a) Representação esquemática de um doador raso substitucional, no caso um átomo de arsênio (valência 5) em um cristal de germânio (valência 4). (b) O átomo de arsênio (As) pode ser representado como um átomo de germânio mais uma carga positiva adicional. (c) Na aproximação semiclássica, onde o semicondutor é tratado como um meio homogêneo, a impureza (arsênio) é tratada como um ponto de carga fixa  $+e$ , com um elétron  $-e$  adicional.

Este é o modelo geral para um semicondutor dopado com uma impureza doadora. Distribuídos aleatoriamente através do cristal puro, estão  $N_p$  centros de carga  $+e$  e, conseqüentemente o mesmo número de elétrons adicionais. Como esperado, cada centro de carga  $+e$  pode atrair um elétron adicional de carga  $-e$ . Se a impureza não estivesse situada no meio semicondutor, mas no espaço livre, a energia de ligação deste elétron seria a energia do primeiro potencial de ionização (9.81 eV no caso do arsênico [47]). Contudo, e este é um ponto crucial na teoria dos semicondutores, uma vez que a impureza está no meio semicondutor, a energia de ligação do elétron é enormemente reduzida (para

0.013 eV no caso do arsênico [47]). Isso acontece por duas razões: uma delas é que o potencial da impureza é reduzido pela constante dielétrica estática  $\epsilon$  do semicondutor. A constante dielétrica é bem alta ( $\epsilon \simeq 16$  para o germânio), sendo tipicamente cerca de 10 a 20, mas podendo chegar em alguns casos a mais de 100. Constantes dielétricas altas são conseqüência de pequenos *gaps* de energia. Se não houvesse *gap*, o cristal seria um metal, ao invés de um semicondutor e a constante dielétrica seria infinita. Em segundo lugar, um elétron em um meio semicondutor não pode ser descrito através da relação energia-momento do espaço livre, mas pela relação semi-clássica  $E(k) = E_c(k)$ , onde  $\hbar k$  é o momento eletrônico do cristal e  $E_c(k)$  é a relação energia-momento da banda de condução, isto é, os elétrons adicionais introduzidos pela impureza devem ser pensados como estando na superposição dos níveis da banda de condução do *bulk*. O elétron pode minimizar sua energia usando apenas os níveis próximos ao fundo da banda de condução. Se o mínimo da banda de condução está no ponto de simetria cúbica, o elétron então terá um comportamento muito próximo ao do elétron livre, mas com uma massa efetiva  $m^*$ , ao invés da massa do elétron livre. Em geral essa massa será menor do que a do elétron livre, freqüentemente por um fator de 0.1 ou menor.

Portanto, podemos representar um elétron na presença de uma impureza doadora de carga  $e$  em um meio semicondutor como uma partícula de massa  $m^*$ , movendo-se no espaço livre na presença de um centro atrativo de carga  $-e^2/\epsilon$ . Esse é precisamente o problema do átomo de hidrogênio, que tratamos na seção anterior, exceto que a constante dielétrica do vácuo  $\epsilon_0$  deve ser substituída pela constante do semicondutor  $\epsilon$  e a massa do elétron livre  $m_0$ , pela massa efetiva  $m^*$ . Portanto o raio da primeira órbita de Bohr (equação 2.4) torna-se

$$a_0^* = \frac{m_0 \epsilon}{m^* \epsilon_0} a_0, \quad (2.5)$$

e a energia de ligação do estado fundamental (equação 2.2) torna-se

$$R_0^* = \frac{m^*}{m_0} \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right)^2 R_0. \quad (2.6)$$

onde  $R_0^*$  é chamado de Rydberg efetivo e  $a_0^*$  raio de Bohr efetivo.

Note que, para um semiconductor, a constante dielétrica  $\epsilon$  é grande, o que de acordo com a equação (2.5) aumenta o raio de Bohr. Uma impureza doadora hidrogenóide é portanto muito similar a um átomo de hidrogênio com raio grande, cujas funções de onda estão espalhadas por distâncias muito maiores do que o comprimento da célula unitária, e portanto tem uma energia de ligação menor.

Para o GaAs, com massa efetiva na banda de condução  $m^* = 0.0665m_0$  e  $\epsilon = 12.58$ , o raio  $a_0^*$  é de 100 Å. O Rydberg efetivo é dado por  $R_0^* = 5.72$  meV, que é o nível doador de GaAs no *bulk*. Para o aceitador temos que  $m^* \simeq 0.30m_0$ , para a banda de buracos pesados, o raio de Bohr é 22 Å e a energia de ligação do aceitador é de 26 meV.

A impureza é dita rasa pois a energia do nível doador (aceitador) assim obtido é muito menor que a energia do *gap* proibido  $E_{cv}$  (vide figura 2.3).

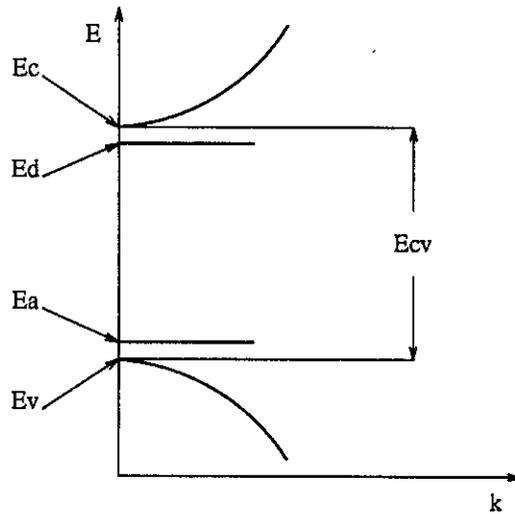


Figura 2.3: Esquemática das bandas de valência, condução e níveis rasos de impureza.

Todos os resultados apresentados nesta tese utilizam unidades atômicas reduzidas. A unidade de comprimento corresponde ao raio de Bohr efetivo e a unidade de energia corresponde ao Rydberg efetivo.

A vantagem da utilização de unidades reduzidas é que utilizando estas unidades, mantêm-se as grandezas na ordem de unidade, além de permitir comparações diretas

com os limites hidrogenóides apresentados nesta seção.

É importante salientar que neste modelo hidrogenóide o átomo de impureza considerado não tem nenhuma relevância. Para satisfazer este modelo, o átomo da impureza tem que ser do tipo substitucional e acrescentar um elétron à banda de condução ou um buraco à banda de valência. Como se pode notar pelas equações (2.5) e (2.6), os parâmetros que definem a energia de ligação são os do material hospedeiro.

### 2.1.3 Impureza na Interface

Um doador hidrogenóide localizado na superfície de um semicondutor terá propriedades consideravelmente diferentes daquelas de um doador localizado no *bulk*. Consideremos um doador localizado na superfície de um semicondutor com um potencial  $V$  dado por

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & z \leq 0 \\ -\frac{e^2}{\epsilon r} & z > 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

De acordo com Levine [48], a solução para este problema tem as seguintes conseqüências:

- Todas as funções de onda esfericamente simétricas  $s$  são proibidas para doadores na superfície.
- O estado fundamental de um doador é formado a partir de um lóbulo da função de onda  $2p$ .

Portanto a energia de uma impureza doadora localizada na interface de um meio semi-infinito é dada por

$$E_n = -\frac{R_0^*}{(n+1)^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.8)$$

Em nosso problema, quando a impureza está localizada em uma das interfaces e a largura do poço tende a infinito, como a barreira de potencial é alta, então em primeira aproximação podemos pensar que a função do elétron vai a zero nas interfaces e podemos utilizar os resultados da impureza localizada na interface de um meio semi-infinito como limites esperados dos nossos resultados.

# Capítulo 3

## Teoria da Impureza no Poço Quântico

### 3.1 Energia de Ligação

#### 3.1.1 Estado Fundamental

A maioria dos cálculos feitos até hoje assumem a aproximação da massa efetiva no poço quântico como sendo válida. O requisito básico para a validade da aproximação da massa efetiva é que o potencial aplicado varie suavemente no espaço. Isso certamente não é verdade nas interfaces entre os dois semicondutores, onde o potencial pode mudar centenas de meV em poucas camadas atômicas. Contudo, o potencial da impureza varia suavemente tanto dentro do poço como na região das barreiras. Portanto funções de onda usando massa efetiva podem ser escritas para o elétron dentro dos dois semicondutores e unidas na interface por condições de contorno apropriadas.

Em todos os cálculos de doadores em poços quânticos, assume-se que as funções de onda devem ser contínuas na interface. A outra condição de contorno é obtida exigindo-se que a derivada ou a derivada dividida pela massa efetiva seja contínua na interface.

Usando a aproximação da massa efetiva, o hamiltoniano de um doador hidrogenóide

em um poço quântico é dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V(z), \quad (3.1)$$

onde a barreira de potencial  $V(z)$  representa o potencial do poço quadrado finito de altura  $V_b$  e largura  $L$ :

$$V(z) = \begin{cases} 0 & , |z| < L/2 \\ V_b & , |z| > L/2. \end{cases} \quad (3.2)$$

A posição da impureza é dada por  $z_i$  com respeito à origem do sistema de coordenadas  $z = 0$ , escolhido no centro do poço. A distância do portador (elétron ou buraco) até a impureza é dada por  $r = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$ , com  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  e  $m^*$  é a massa efetiva.

O hamiltoniano (3.1) é essencialmente o do átomo de hidrogênio dado pela equação (2.1), com o potencial dependente da posição da impureza  $z_i$  e um poço de potencial.

Assumiremos que a descontinuidade do *gap* do GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As [49, 50] está distribuída cerca de 40% na banda de valência e cerca de 60% na banda de condução, com uma diferença total,  $\Delta E_g$ , entre GaAs e Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As dada como função da concentração  $x$  de Al. Para uma concentração  $x < 0.45$  [51], temos:

$$\Delta E_g (eV) = 1.247x. \quad (3.3)$$

Vários autores têm tratado a massa efetiva do elétron e a constante dielétrica de maneiras diferentes. Por exemplo, Mailhot et al. [3] assumiram valores do GaAs para essas duas variáveis dentro do poço e valores linearmente interpolados entre o GaAs e o AlAs para o Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Greene and Bajaj [4] tomaram valores do GaAs tanto para o poço como para as barreiras e em outros trabalhos usaram diferentes massas efetivas para as duas regiões. A energia de ligação não é muito sensível a que escolha é feita, exceto para poços muito finos ( $L \leq 25\text{\AA}$ ). Embora a massa efetiva  $m^*$  e a constante dielétrica  $\epsilon$  variem na fronteira entre os dois materiais GaAs e Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As assumiremos, como Bajaj e Greene [4], valores do GaAs para  $m^*$  e  $\epsilon$  iguais para todas as regiões da heteroestrutura. Isso é uma aproximação bastante razoável, já que as massas e constantes dielétricas dos dois materiais não são muito diferentes.

Os trabalhos teóricos mencionados até agora têm seguido o mesmo modelo variacional geral para resolver o problema do doador raso. A função de onda envelope é escrita na forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = \Gamma(\rho, z, z_i, \lambda)f(z), \quad (3.4)$$

onde  $f(z)$  é a solução do estado fundamental para um elétron com massa efetiva  $m^*$  movendo-se em um potencial unidimensional  $V_b$  (poço quadrado finito), ou seja, a solução do hamiltoniano (3.1) sem o potencial da impureza. A função variacional  $\Gamma(\rho, z, z_i, \lambda)$  assume diferentes formas segundo vários autores, mas em todos os casos ela é definida como sendo uma função esfericamente simétrica das coordenadas relativas entre o elétron e o átomo de impureza. Por conveniência, vamos nos referir ao estado fundamental e aos estados excitados de uma impureza hidrogenóide rasa pelos seus limites hidrogenóides.

Segundo o cálculo variacional de Bastard [1] a função tentativa pode ser uma função hidrogenóide tipo  $1s$  com parâmetro variacional  $\lambda_{1s}$  e é razoável supor que esta função represente apropriadamente os estados reais de impurezas rasas no poço quântico de GaAs-Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As.

Seguindo-se o cálculo variacional de Bastard [1], a função tentativa para o estado tipo  $1s$  é escrita na forma:

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = \Gamma_{1s}(\rho, z, z_i, \lambda_{1s}) \begin{cases} e^{k_1(z+L/2)} & , z \leq L/2 \\ \alpha \cos(k_2 z) & , -L/2 \leq z \leq L/2, \\ e^{-k_1(z-L/2)} & , z \geq L/2 \end{cases} \quad (3.5)$$

onde  $\lambda_{1s}$  é o parâmetro variacional e

$$k_1 = \sqrt{2m^*(V_b - E_0)}/\hbar, \quad (3.6)$$

$$k_2 = \sqrt{2m^* E_0}/\hbar, \quad (3.7)$$

$$\alpha = 1/\cos(k_2 L/2), \quad (3.8)$$

$$\Gamma_{1s}(\rho, z, z_i, \lambda_{1s}) = \exp \{-[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}/\lambda_{1s}\}, \quad (3.9)$$

$E_0 = E_0(V_b, L)$  é a energia de ligação do estado fundamental do hamiltoniano (3.1) sem o termo do potencial de impureza, ou seja,  $E_0$  é a energia de ligação do estado fundamental do poço quadrado finito. Para calcularmos  $E_0$ , devemos resolver numericamente a equação transcendental,

$$\sqrt{\frac{V_b}{E_0}} - 1 = \tan \left[ \frac{(2m^* E_0)^{1/2} L}{2\hbar} \right]. \quad (3.10)$$

Para encontrarmos o melhor valor para a energia de ligação, o parâmetro variacional  $\lambda_{1s}$  em  $\Gamma(\rho, z, z_i, \lambda_{1s})$  varia de forma a minimizar a energia total (o que maximiza a energia de ligação).

A energia do estado fundamental,

$$\varepsilon_{1s}(L, z_i) = \frac{\langle \psi_{1s} | H | \psi_{1s} \rangle}{\langle \psi_{1s} | \psi_{1s} \rangle}, \quad (3.11)$$

é então minimizada em relação a  $\lambda_{1s}$ . Todas as integrais são feitas analiticamente e apenas a minimização requer cálculo numérico. A energia de ligação da impureza é então dada por

$$E_{1s}(L, z_i) = E_0 - \varepsilon_{1s}(L, z_i), \quad (3.12)$$

onde o primeiro termo corresponde à energia de um elétron no fundo da banda de condução.

### 3.1.2 Estados Excitados

Para o estado excitado tipo  $2s$ , um cálculo semelhante ao da subseção 3.1.1 foi feito. Como para o estado tipo  $1s$ , a função tentativa é dada por

$$\psi_{2s}(\mathbf{r}) = \Gamma_{2s}(\rho, z, z_i, \lambda_{2s}) \begin{cases} e^{k_1(z+L/2)} & , z \leq L/2 \\ \alpha \cos(k_2 z) & , -L/2 \leq z, \leq L/2, \\ e^{-k_1(z-L/2)} & , z \geq L/2 \end{cases} \quad (3.13)$$

onde  $\lambda_{2s}$  e  $\beta_{2s}$  são parâmetros variacionais. A função tentativa hidrogenóide tipo  $2s$  usada é

$$\Gamma_{2s}(\rho, z, z_i, \lambda_{2s}) = (1 - \beta_{2s} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}) \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{2s} \}. \quad (3.14)$$

Para determinar  $\beta_{2s}$ , procedemos como no trabalho de Chaudhuri e Bajaj [8], exigindo que  $\Gamma_{1s}(\rho, z, z_i, \lambda_{1s})$  e  $\Gamma_{2s}(\rho, z, z_i, \lambda_{2s})$  formem um conjunto de funções ortogonais

$$\langle \Gamma_{1s}(\rho, z, z_i, \lambda_{1s}) | \Gamma_{2s}(\rho, z, z_i, \lambda_{2s}) \rangle = 0, \quad (3.15)$$

portanto  $\beta_{2s}$  é dado por

$$\beta_{2s} = \left( \frac{1}{\lambda_{1s}} + \frac{1}{\lambda_{2s}} \right) \frac{1}{3}. \quad (3.16)$$

A energia de ligação

$$\varepsilon_{2s}(L, z_i) = \frac{\langle \psi_{2s} | H | \psi_{2s} \rangle}{\langle \psi_{2s} | \psi_{2s} \rangle}, \quad (3.17)$$

é então minimizada em relação a  $\lambda_{2s}$ . A energia de ligação do primeiro estado excitado da impureza é dada por

$$E_{2s}(L, z_i) = E_0 - \varepsilon_{2s}(L, z_i). \quad (3.18)$$

Do mesmo modo que para o estado fundamental tipo 1s e para o primeiro estado excitado tipo 2s, a energia de ligação dos outros estados excitados são calculadas. As funções envelope são tipo hidrogenóides e dadas abaixo:

$$\Gamma_{1s} = \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{1s} \}, \quad (3.19)$$

$$\Gamma_{2s} = \left( 1 - \beta_{2s} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \right) \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{2s} \}, \quad (3.20)$$

$$\Gamma_{2p_x} = \rho \cos \phi \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{2p_x} \}, \quad (3.21)$$

$$\Gamma_{2p_z} = (z - z_i) \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{2p_z} \}, \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{3s} = & \left( 3 - 6 \beta_{3s} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} + 2 \alpha_{3s}^2 [\rho^2 + (z - z_i)^2] \right) \\ & \times \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{3s} \}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\Gamma_{3p_x} = \left( 2 - \beta_{3p_x} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \right) \rho \cos \phi \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{3p_x} \}, \quad (3.24)$$

$$\Gamma_{3p_z} = \left( 2 - \beta_{3p_z} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2} \right) (z - z_i) \exp \{ -[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2} / \lambda_{3p_z} \}. \quad (3.25)$$

Os parâmetros variacionais dos estados excitados são calculados exigindo-se que as funções envelope sejam ortogonais entre si. Portanto, os resultados abaixo são obtidos:

$$\alpha_{3s}^2 = \left( 3 \beta_{2s} - \lambda_{23} + \lambda_{13} - \frac{4 \lambda_{13} \beta_{2s}}{\lambda_{23}} \right) \left[ \frac{-40 \beta_{2s}}{\lambda_{23}^2} + \frac{8}{\lambda_{23}} + \frac{32 \beta_{2s}}{\lambda_{23} \lambda_{13}} - \frac{8}{\lambda_{13}} \right]^{-1}, \quad (3.26)$$

$$\beta_{3s} = \frac{\lambda_{13}}{6} + \frac{8\alpha_{3s}^2}{6\lambda_{13}}, \quad (3.27)$$

$$\beta_{3p_x} = \left( \frac{1}{\lambda_{2p_x}} + \frac{1}{\lambda_{3p_x}} \right) \frac{2}{5}, \quad (3.28)$$

$$\beta_{3p_z} = \left( \frac{1}{\lambda_{1s}} + \frac{1}{\lambda_{3p_z}} \right) \frac{2}{3}, \quad (3.29)$$

onde

$$\lambda_{23} = \left( \frac{1}{\lambda_{2s}} + \frac{1}{\lambda_{3s}} \right), \quad (3.30)$$

$$\lambda_{13} = \left( \frac{1}{\lambda_{1s}} + \frac{1}{\lambda_{3s}} \right). \quad (3.31)$$

A energia de ligação de cada estado é minimizada apenas em relação ao seu próprio parâmetro variacional. Quando a energia de ligação depender de outros parâmetros variacionais, esses devem ser encontrados primeiro.

## 3.2 Densidade de Estados

A densidade de níveis de energia disponíveis para uma dada energia  $E$  em três dimensões é dada pela expressão [47]

$$g(E) = \int_{S(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla E(\mathbf{k})|}. \quad (3.32)$$

onde  $S(E)$  é uma superfície de energia constante  $E$ .

Em duas dimensões, não teríamos mais uma integral de superfície, mas sim uma integral de linha. Para o confinamento em apenas uma dimensão, a integração na equação (3.32) não existe mais.

Se o poço quântico não é muito estreito, pode-se tratar a posição da impureza  $z_i$  como uma variável aleatória contínua e uma vez que a dopagem seja aleatória (não intencional), podemos definir uma densidade de estados por unidade de energia de ligação,  $g(E_i)$ , como:

$$g(E_i) = (2/L) |dE_i/dz_i|^{-1}, \quad (3.33)$$

e com

$$E_i = E(L, z_i), \quad z_i \geq 0. \quad (3.34)$$

### 3.3 Absorção Óptica

Aqui trataremos do coeficiente de absorção óptica devido a transições entre estados de impureza (intra-impureza), que corresponde ao infravermelho longínquo.

Assumiremos que os nossos doadores são suficientemente bem separados e que eles não interagem entre si. Também assumiremos que os experimentos serão feitos a temperaturas muito baixas, de modo que todos os doadores estejam no estado fundamental. Escolhemos nosso sistema de coordenadas de modo que o eixo  $z$  esteja ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura e que a luz esteja polarizada na direção  $x$  com uma intensidade  $I_0$ . A probabilidade para uma transição de um dipolo elétrico por unidade de tempo de um estado inicial  $i$  para um estado final  $f$  é dada pela regra de ouro de Fermi:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar^2}{m_0^2 E_{if}^2 c} I_0 |\langle f | \nabla_x | i \rangle|^2 \delta(E_{if} - \hbar\omega), \quad (3.35)$$

onde  $\omega$  é a frequência angular da luz incidente e  $E_{if}$  é a diferença de energia entre o estado inicial e o estado final  $E_{if} = (E_i - E_f)$ . Na teoria da aproximação da massa efetiva,  $m^*$  é a massa efetiva do elétron doador.

Se multiplicarmos esta expressão por  $E_{if}$  e somarmos sobre todos os estados finais, obteremos a taxa de energia perdida pelo campo causada pela absorção quando um elétron doador é excitado de um estado inicial  $i$  para qualquer outro estado final  $f$ . Então, se multiplicarmos a expressão resultante por  $p_i$ , que é a probabilidade do elétron doador estar inicialmente no estado inicial  $i$ , e somarmos sobre todos os estados iniciais, obteremos a seguinte expressão para a potência absorvida a partir da radiação incidente:

$$P(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 I_0}{m^{*2} \omega c} \sum_{if} |\langle f | \nabla_x | i \rangle|^2 p_i \delta\left(\frac{E_{if}}{\hbar} - \omega\right). \quad (3.36)$$

Kohn [52] mostrou que de acordo com a teoria da aproximação da massa efetiva:

$$|\langle f | \nabla_x | i \rangle|^2 = \frac{m^{*2} E_{if}^2}{\hbar^4} |\langle f | x | i \rangle|^2. \quad (3.37)$$

Substituindo-se a equação acima na equação (3.36), temos a seguinte expressão:

$$P(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \omega I_0}{\hbar^2 c} \sum_{i,f} |\langle f | x | i \rangle|^2 p_i \delta\left(\frac{E_{if}}{\hbar} - \omega\right). \quad (3.38)$$

No *bulk* a soma em  $i$  se reduz a um único termo, uma vez que as energias de todos os doadores é a mesma. Contudo, para um poço quântico, a energia do estado fundamental de um doador depende de sua localização dentro do poço. A soma sobre  $i$  é na verdade a soma sobre todas as possíveis posições da impureza no poço.

Como estamos interessados na forma do coeficiente de absorção, ao invés de seu valor absoluto, vamos definir uma função  $I(\omega)$  como se segue:

$$I(\omega) = \omega \sum_{if} |\langle f | x | i \rangle|^2 p_i \delta\left(\frac{E_{if}}{\hbar} - \omega\right). \quad (3.39)$$

$I(\omega)$  é usualmente chamado de forma da linha de absorção (*absorption line shape*) porque contém a maior parte da dependência do espectro de potências dada pela equação (3.38). A energia dos doadores é dependente apenas da coordenada  $z_i$ . A probabilidade  $p_i$  neste caso, torna-se a distribuição de densidade de doadores por unidade de comprimento,  $P(z_i)$ .

Como foi dito anteriormente, a energia de transição  $E_{if}$  é uma função da posição da impureza  $z_i$ . Podemos formalmente inverter a relação para obter  $z_i$  em função da frequência angular  $\omega_{if} = E_{if}/\hbar$ . Isso nos permite fazer a integração e obter:

$$I(\omega) = \omega \sum_f \int_{-\infty}^{\infty} dz_i |\langle f | x | i \rangle|^2 P(z_i) \delta(\omega_{if} - \omega). \quad (3.40)$$

Considerando-se uma distribuição Gaussiana para as impurezas centrada em  $z = 0$

$$P(z_i) = \frac{1}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{z_i^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.41)$$

Dada a distribuição de impurezas dentro do poço, o coeficiente de absorção pode ser calculado para diferentes polarizações. Para calcular a forma da linha de absorção, substituímos a função  $\delta(\omega_{if} - \omega)$  por uma lorentziana [43]

$$\delta(\omega_{if} - \omega) = \frac{1}{(\omega_{if} - \omega)^2 + \eta^2}, \quad (3.42)$$

onde

$$\eta = 0.35 \text{ meV}, \quad (3.43)$$

$$\sigma = \frac{\eta}{\sqrt{2 \ln 2}}. \quad (3.44)$$

Como as impurezas estão localizadas apenas dentro do poço, temos:

$$I(\omega) = 2\omega \sum_f \int_0^{L/2} dz_i |\langle f | x | i \rangle|^2 P(z_i) \delta(\omega_{if} - \omega). \quad (3.45)$$

Devido a simetria cilíndrica do problema, o estado fundamental é um estado com momento angular zero projetado ao longo da direção  $z$  ( $m = 0$ ). Os elementos de matriz do operador  $x$  são nulos para todos os estados, exceto aqueles para os quais  $m = \pm 1$ .

Portanto vamos calcular  $I(\omega)$  do estado inicial  $1s$  para o estado final  $2p_x$  e também para o estado  $3p_x$ . Temos assim:

$$I(\omega) = I(\omega)_{1s \rightarrow 2p_x} + I(\omega)_{1s \rightarrow 3p_x}. \quad (3.46)$$

# Capítulo 4

## Resultados e Discussão

As energias dos estados tipo  $ns$ ,  $np_{x,y}$  e  $np_z$  que são degeneradas no *bulk*, têm sua degenerescência levantada pela barreira de potencial do poço quântico. Essencialmente, a diferença nas energias de ligação entre estes estados será governada pela deformação das funções de onda causada pela barreira de potencial. Nesta seção, os resultados obtidos para a energia de ligação do estado fundamental  $1s$  e dos estados excitados  $2s$ ,  $2p_{x,y}$ ,  $2p_z$ ,  $3s$ ,  $3p_x$  e  $3p_y$  em função da largura do poço e em função da posição da impureza são apresentados.

Mostraremos também as densidades de estado de impureza para alguns estados, e a forma da linha de absorção para algumas transições, comparando com resultados teóricos e experimentais.

Os cálculos apresentados nas seções seguintes foram feitos para uma concentração de Al de 30%, que corresponde a uma altura de barreira de 224 meV.

## 4.1 Os Estados Tipo $s$

As funções de onda dos estados tipo  $s$  no *bulk* têm simetria esférica. Quando temos um confinamento na direção  $z$ , o formato dessas funções de onda se modifica, mantendo apenas uma simetria cilíndrica. A figura 4.1 mostra como a função de onda do estado tipo  $1s$  se modifica à medida que a impureza se desloca do centro do poço à interface.

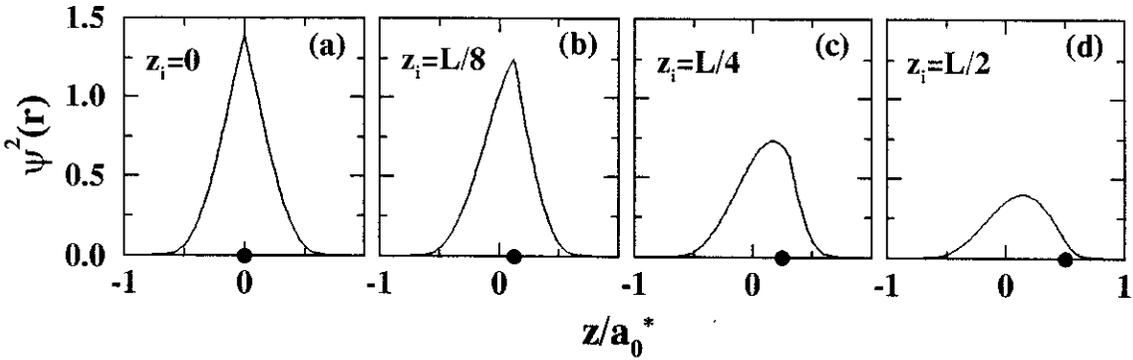


Figura 4.1: O quadrado da função de onda do estado fundamental tipo  $1s$  em função de  $z$ , com  $x = y = 0$  em um poço de  $1a_0^*$  para várias posições da impureza. O círculo negro indica a posição do núcleo da impureza.

As figuras 4.2a, 4.3a e 4.4a mostram as variações das energias de ligação  $E_{n,s}$  dos estados  $1s$ ,  $2s$  e  $3s$ , respectivamente em função da largura do poço  $L$  para a impureza localizada no centro do poço ( $z_i = 0$ ) e para a impureza localizada na borda do poço ( $z_i = \pm L/2$ ). A energia de ligação nestas três figuras apresenta um máximo, cuja razão é simples: a medida que a largura do poço diminui, a função de onda torna-se cada vez mais confinada no poço de GaAs, causando uma maior localização do elétron. Contudo, abaixo de um certo valor de largura de poço, que depende da altura da barreira, a função de onda do doador cada vez mais penetra na barreira de  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ . Quando a largura do poço tende a zero, a função de onda do doador está inteiramente no  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ , o que faz com que o valor da energia de ligação seja a do *bulk* de  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ . Lembramos, no entanto, que devido ao fato de estarmos considerando massas efetiva iguais na barreira e no poço,

obtemos na verdade a energia de ligação do GaAs *bulk*, que é  $R_0^*/n^2$ . Para a largura do poço tendendo a infinito e a impureza na borda, para barreiras altas, novamente temos que alcançar limites conhecidos, ou seja, valores de energia de ligação de um doador hidrogenóide em um meio semi-infinito (vide subseção 2.1.3). Portanto, se a largura do poço é muito grande ou muito pequena, caímos em limites esperados, ou seja, não temos mais um poço e sim o *bulk* novamente. Tanto para a impureza localizada na borda do poço quanto para a impureza localizada no centro do poço os limites esperados são conhecidos (vide seção 2.1). Em comparação, para o caso de uma barreira de potencial infinita, a função de onda não penetra no  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  e o valor da energia de ligação aumenta monotonicamente quando a largura do poço tende a zero até atingir o limite bidimensional, que no caso do estado fundamental tipo 1s é de  $4R_0^*$ , como foi demonstrado por Bastard [1].

As figuras 4.2b, 4.3b e 4.4b ilustram a energia de ligação em função da posição da impureza para várias larguras de poço. O cálculo da energia de ligação para o estado fundamental tipo 1s foi obtido para a impureza tanto no centro como na borda do poço [3, 53]. A energia de ligação tem seu valor máximo se a impureza está localizada no centro do poço e atinge seu menor valor nas bordas do poço. Portanto a energia de ligação de um doador em um poço depende de sua localização, o que evidentemente não ocorre no doador no *bulk* GaAs. Passamos a ter no poço uma banda de energia de ligação (“banda de impureza”), que tem uma densidade de estados a ela associada.

# Estado tipo 1s

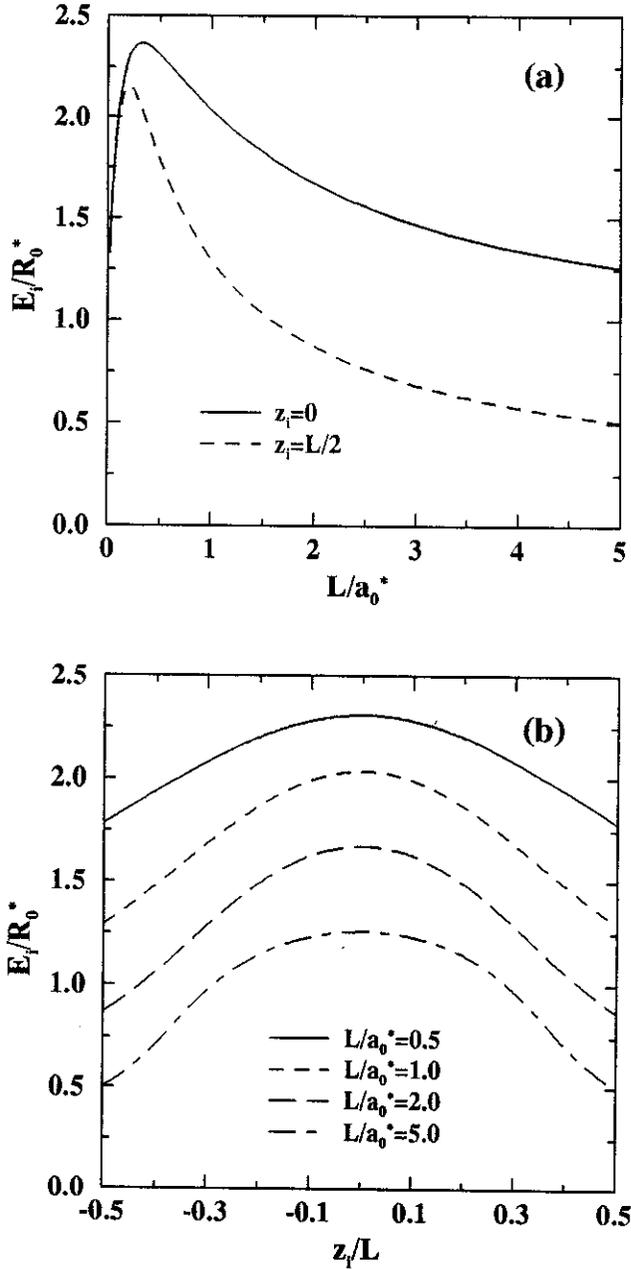


Figura 4.2: Energia de ligação do estado fundamental tipo 1s de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

# Estado tipo 2s

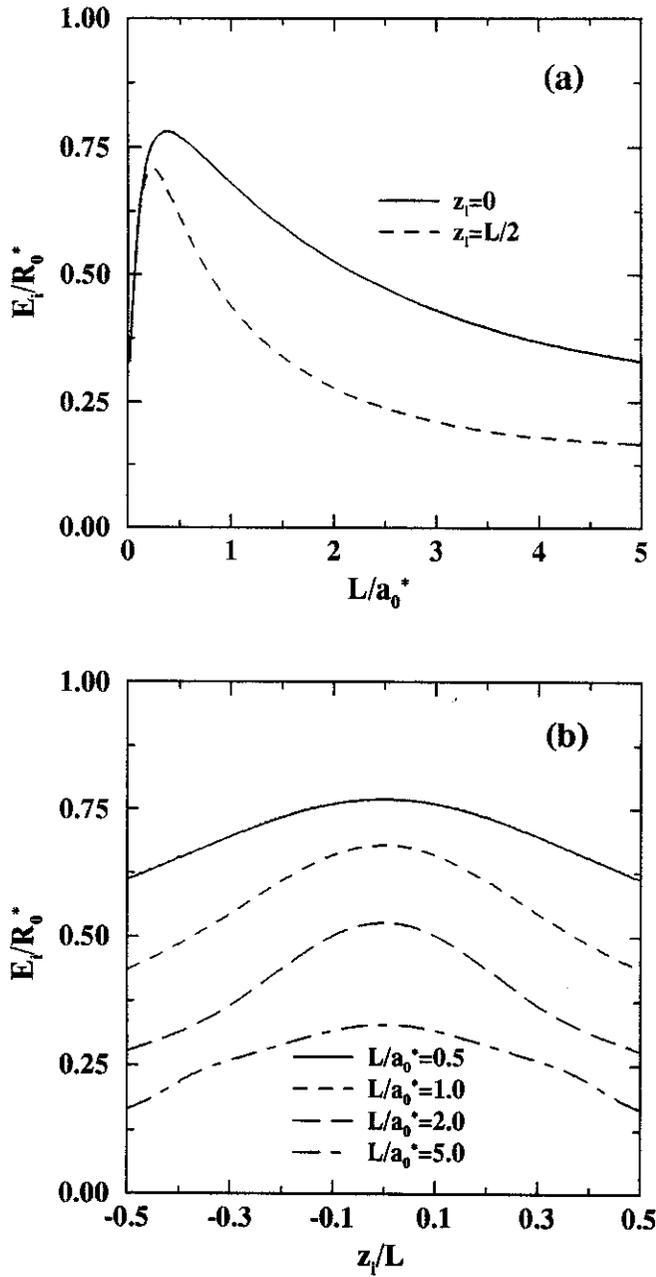


Figura 4.3: Energia de ligação do estado tipo 2s de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

# Estado tipo 3s

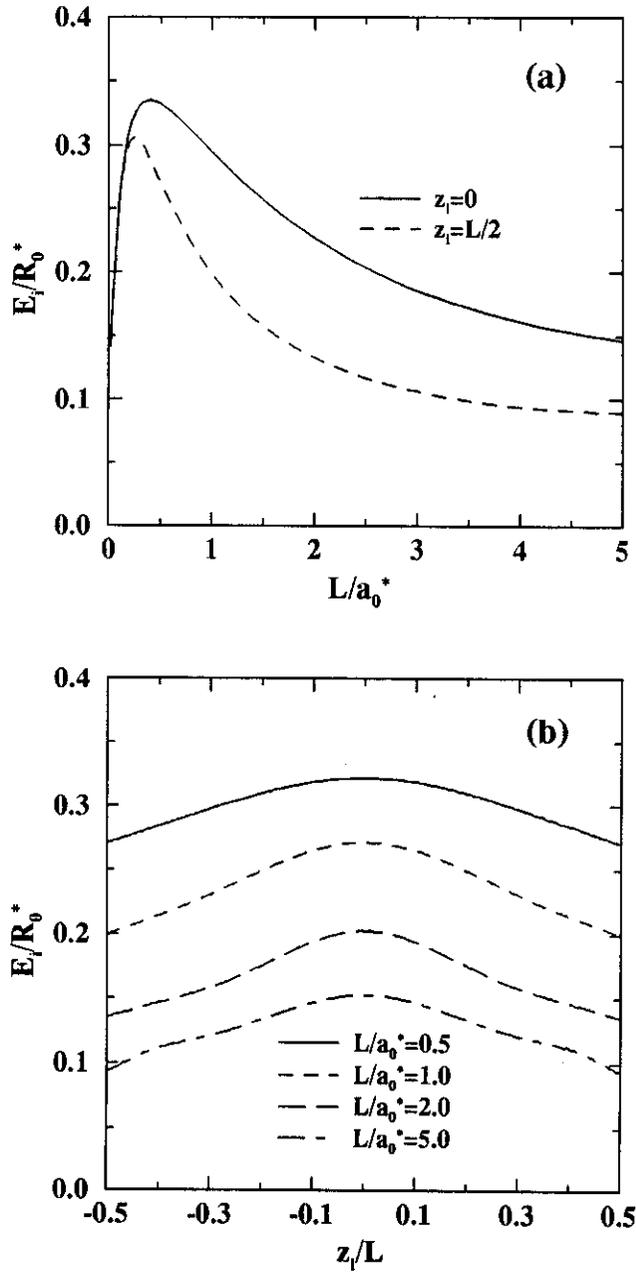


Figura 4.4: Energia de ligação do estado tipo 3s de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

## 4.2 Os Estados Tipo $p_{x,y}$

Devido ao fato dos orbitais tipo  $p_{x,y}$  estarem distribuídos ao longo do eixo  $x$  e  $y$ , eles não são modificados muito fortemente pela barreira de potencial, uma vez que a direção de confinamento está em  $z$ . Portanto a energia de ligação não varia muito com a largura do poço, e nem com a posição da impureza, uma vez que estes orbitais são os que menos sofrem mudanças devido à barreira. As figuras 4.5a e 4.6a mostram a energia de ligação em função da largura do poço e as figuras 4.5b e 4.6b mostram a energia de ligação em função da posição da impureza  $z_i$ , para os estados excitados tipo  $2p_x$  e  $3p_x$  respectivamente.

Outro fato digno de nota é que a energia de ligação da impureza localizada na borda do poço e a energia de ligação localizada no centro do poço se separam rapidamente uma da outra.

# Estado tipo $2p_x$

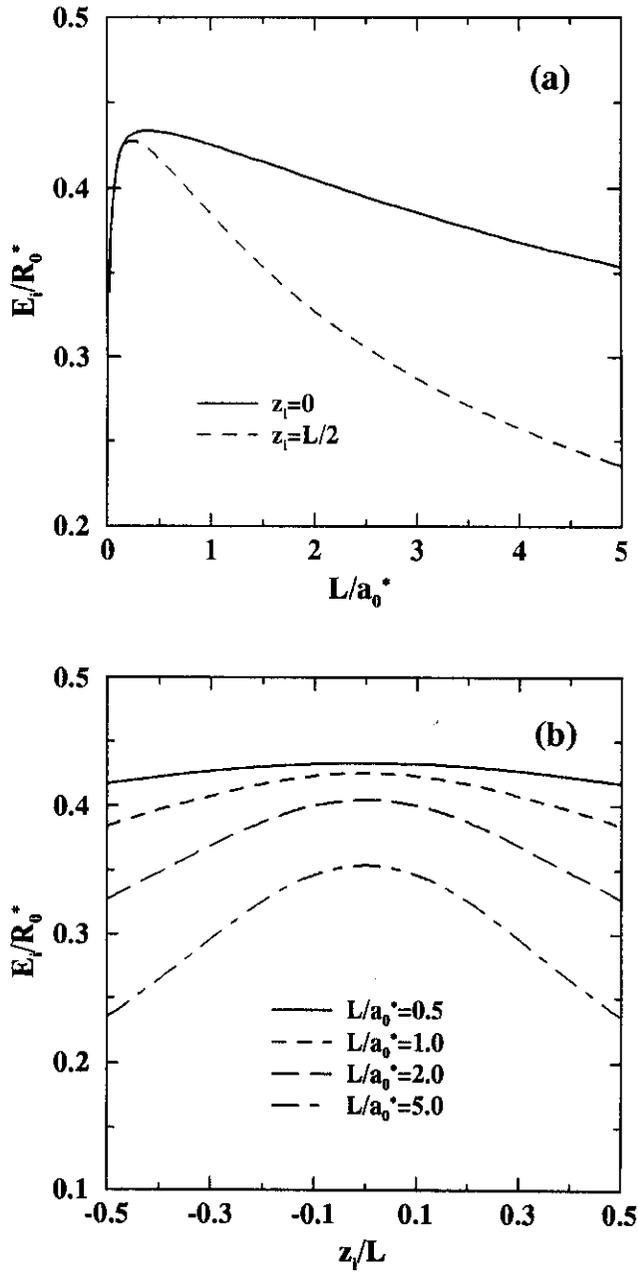


Figura 4.5: Energia de ligação do estado tipo  $2p_{x,y}$  de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

# Estado tipo $3p_x$

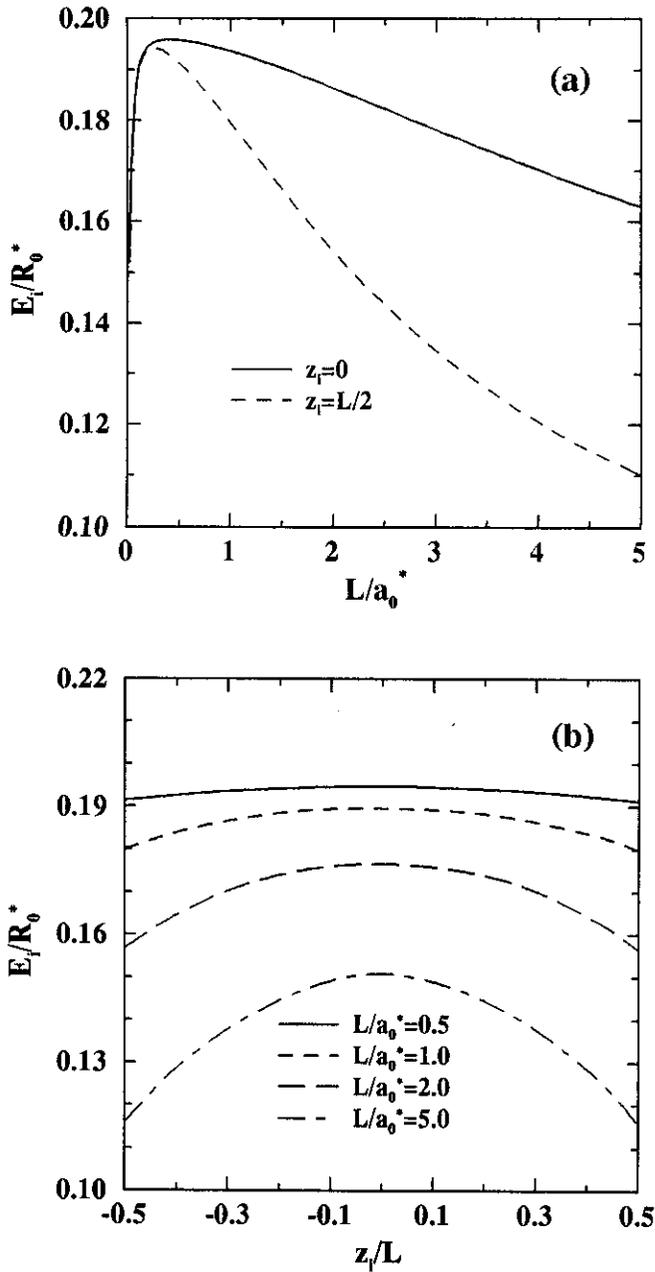


Figura 4.6: Energia de ligação do estado tipo  $3p_{x,y}$  de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

### 4.3 Os Estados Tipo $p_z$

O comportamento dos estados tipo  $p_z$  é bem diferente dos demais. Uma das razões é sem dúvida nenhuma que o confinamento ocorre na direção  $z$ , que é a direção ao longo da qual o orbital  $p_z$  se encontra (vide figura 2.1). Como já discutimos no início do capítulo, a variação na energia de ligação vai depender de como a função de onda é modificada pela presença da barreira de potencial.

Uma das características dos estados tipo  $p_z$  é que só vamos ter estados ligados a partir de determinada largura de poço. Para o estado tipo  $2p_z$ , começamos a ter estados ligados para uma largura de poço  $L = 1.6a_0^*$  para a impureza localizada na borda do poço, e  $L = 6.5a_0^*$  para a impureza localizada no centro do poço. Já para o estado excitado tipo  $3p_z$  os valores de largura de poço a partir dos quais começamos a ter energia de ligação positiva são ainda mais altos:  $L = 4.6a_0^*$  para a impureza localizada na borda do poço e  $L = 10.4a_0^*$  para a impureza localizada no centro. As figuras 4.7a e 4.8a mostram este comportamento.

A energia de ligação para a impureza no centro do poço para os estados tipo  $2s$ ,  $2p_{x,y}$  e  $2p_z$  foi calculada por Chaudhuri e Bajaj [8]. Os nossos resultados estão em acordo quantitativo com este trabalho (exceto para o estado tipo  $2s^*$ ). Chaudhuri e Bajaj também encontraram o valor de largura de poço de  $L = 6.5a_0^*$  para o qual o estado  $2p_z$  começa a ser ligado.

A impureza localizada na borda além de começar a ter estados ligados com uma largura de poço menor do que a impureza localizada no centro, também é mais ligada do que a impureza no centro. Na figura 4.9 mostramos a função de onda do estado excitado tipo  $2p_z$  na direção de confinamento  $z$ , para  $x$  e  $y$  iguais à zero. Como se pode notar, esta função tem dois lóbulos iguais quando localizada no centro do poço, mas à medida que a impureza se aproxima da barreira, o lóbulo próximo a ela vai se tornando cada vez menor até desaparecer quando o núcleo da impureza está localizado na borda do poço, o que é um resultado esperado.

---

\*R. B. Santiago (tese de doutorado CBPF-1994)

# Estado tipo $2p_z$

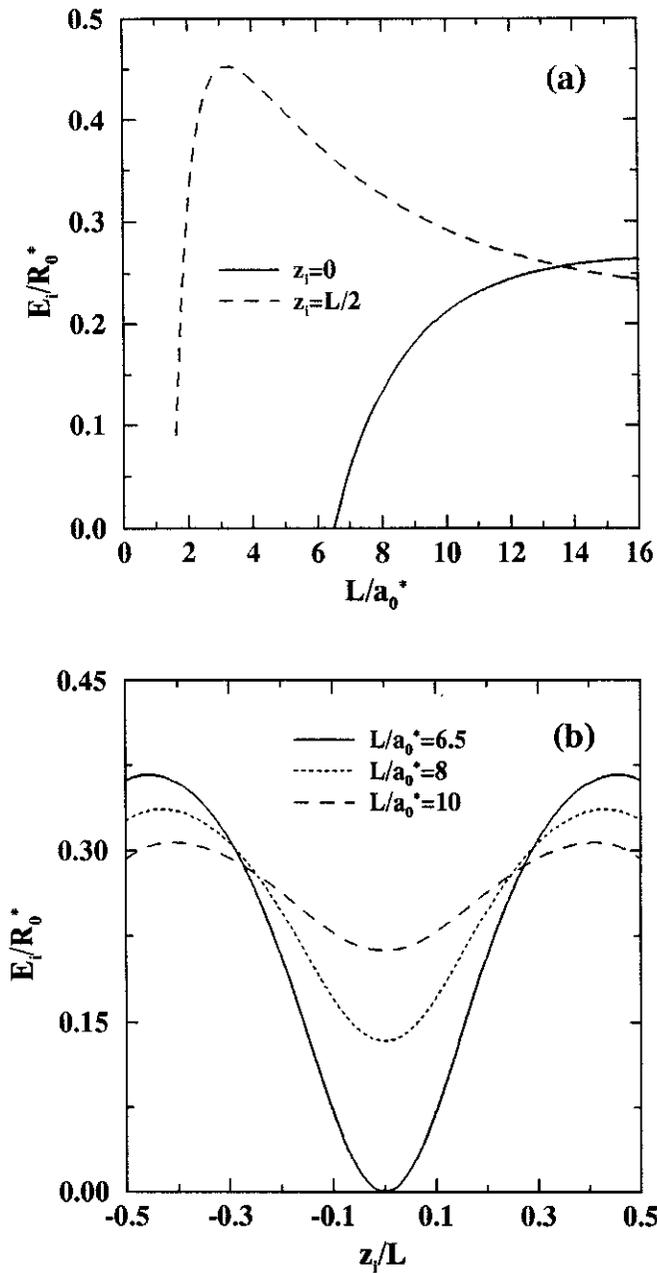


Figura 4.7: Energia de ligação do estado tipo  $2p_z$  de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

# Estado tipo $3p_z$

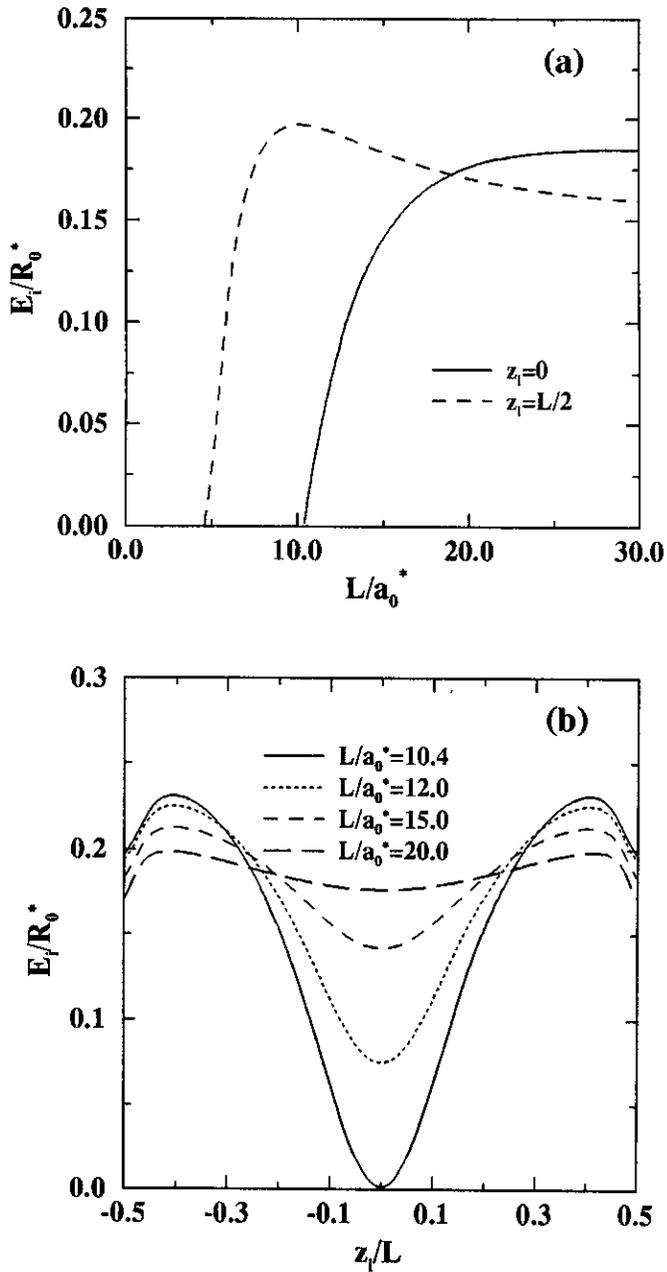


Figura 4.8: Energia de ligação do estado tipo  $3p_z$  de um doador (a) em função da largura do poço para a impureza situada no centro do poço (curva cheia) e na borda do poço (curva tracejada); (b) em função da posição da impureza para várias larguras de poço.

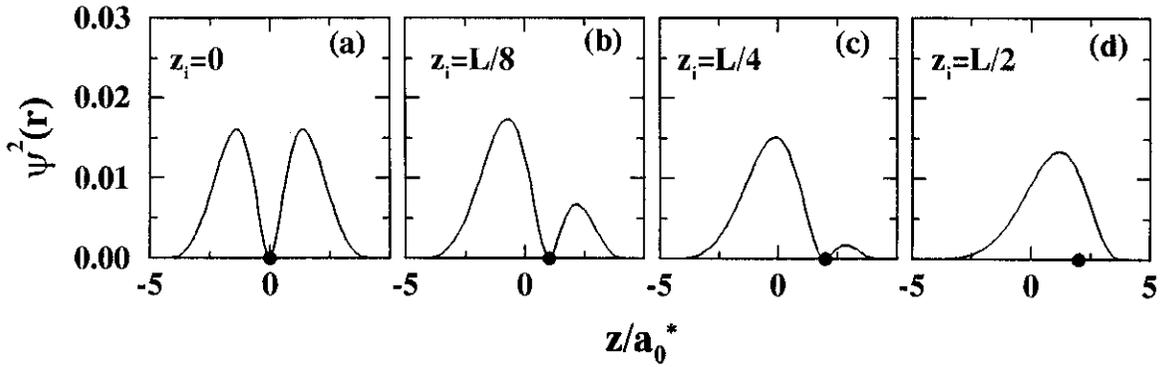


Figura 4.9: O quadrado da função de onda do estado excitado tipo  $2p_z$  em função de  $z$ , com  $x = y = 0$  em um poço de  $8a_0^*$  para várias posições da impureza. O círculo negro indica a posição do núcleo da impureza.

A figura 4.10 mostra a função de onda do estado  $2p_z$  para várias larguras de poço e também a função de onda no *bulk*. Notamos que à medida que o tamanho do poço aumenta, a função de onda tende para o valor do *bulk*, o que era esperado.

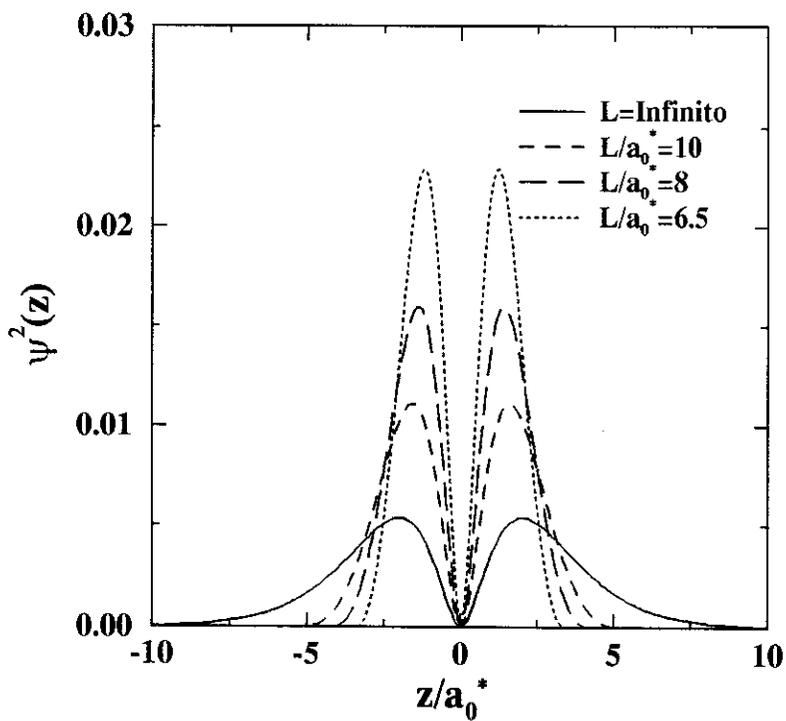


Figura 4.10: Função de onda do estado tipo  $2p_z$  em função de  $z$ , com  $x = y = 0$  para várias larguras de poços com a impureza localizada no centro do poço ( $z_i = 0$ ). Nota-se que a medida que a largura do poço aumenta, a função tende ao seu valor no *bulk*.

## 4.4 Densidade de Estados

À medida em que a largura do poço aumenta, a densidade de estados do estado fundamental se desloca no eixo de energia para energias menores, como mostra a figura 4.11a. As duas singularidades que aparecem para cada largura de poço são singularidades de Van Hove [47]. Elas são associadas à impureza localizada no centro e na borda do poço, que são os pontos onde o inverso da derivada da energia vai a zero (centro) ou é muito grande (borda). Os resultados obtidos estão de acordo com os obtidos por Oliveira e Falicov [11].

A densidade de estados para o estado tipo  $2p_z$  tem um comportamento bem diferente do que o do estado fundamental. À medida que a largura do poço aumenta, a densidade de estados vai se estreitando no eixo da energia, como apresentado na figura 4.12. Novamente, as singularidades de Van Hove estão associadas à impureza localizada no centro do poço e à impureza localizada nas proximidades da borda do poço. À medida que a largura do poço aumenta, a posição da impureza em que esta singularidade aparece se desloca em direção ao centro do poço.

# Estado tipo 1s

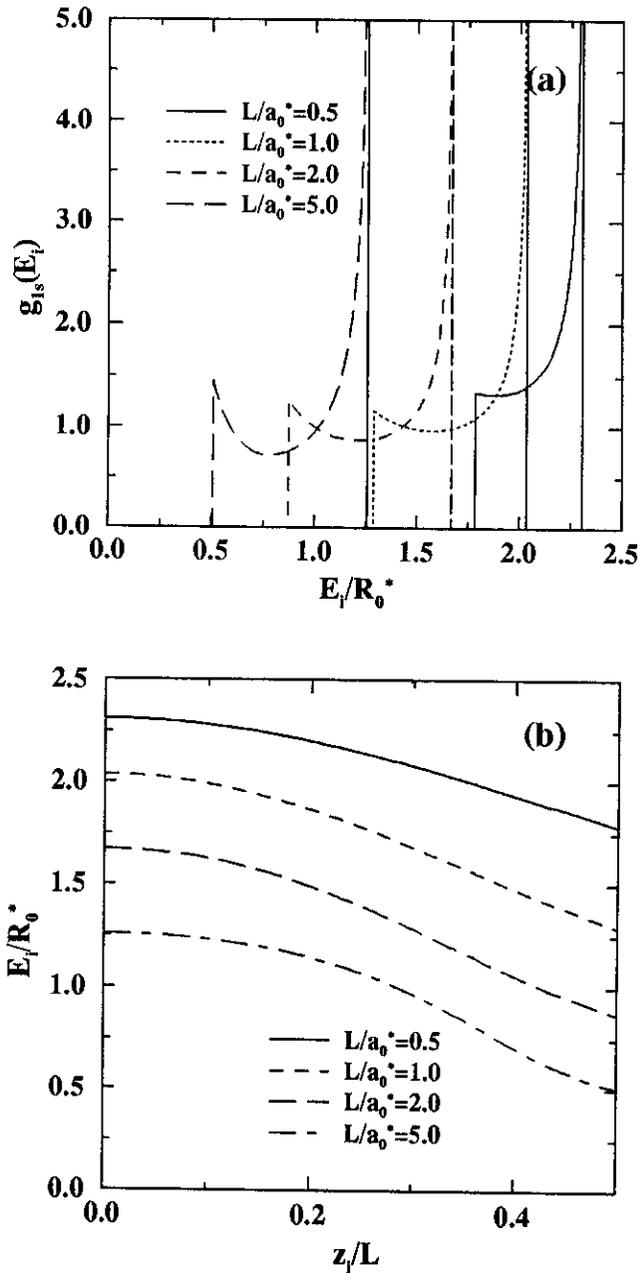


Figura 4.11: (a) Densidade de estados de impureza do estado tipo 1s para várias largura de poço. As energias de ligação correspondentes a essas densidades de estado estão na parte (b).

# Estado tipo $2p_z$

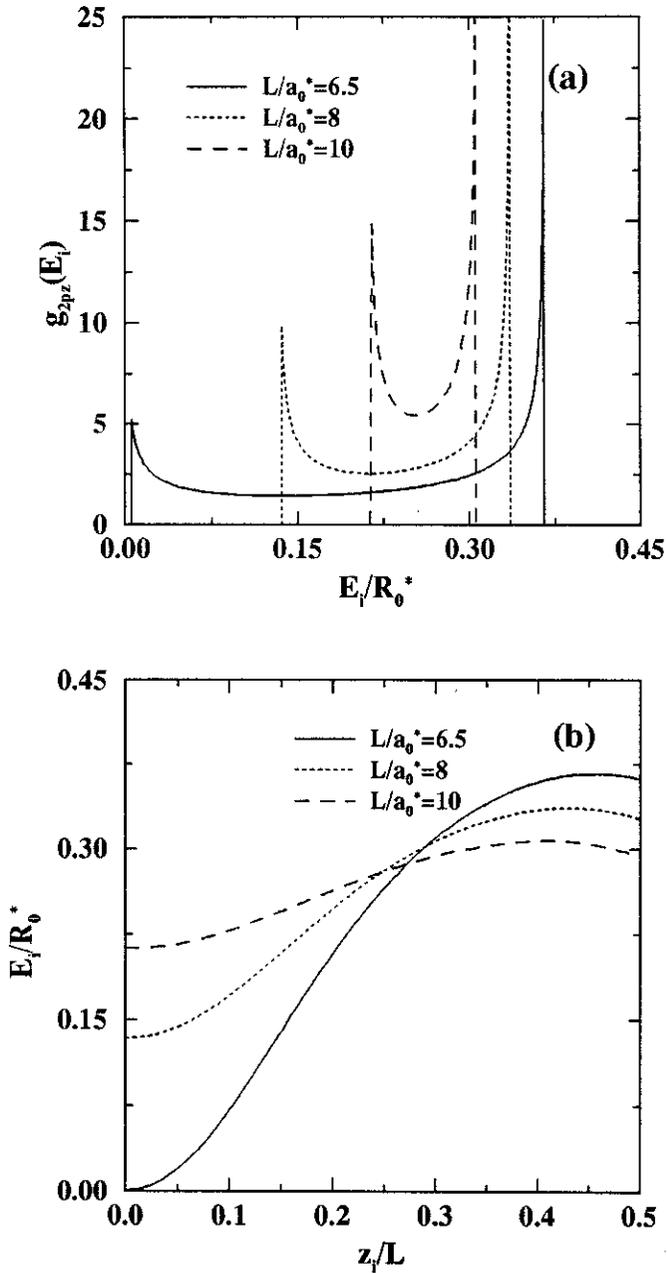


Figura 4.12: (a) Densidade de estados de impureza do estado tipo  $2p_z$  para várias largura de poço. As energias de ligação correspondentes a essas densidades de estado estão na parte (b).

## 4.5 Coeficiente de Absorção

Os resultados anteriores permitem o cálculo do coeficiente de absorção no infravermelho longínquo para doadores em poços quânticos. Vamos considerar aqui luz polarizada na direção  $x$ . A grandeza relevante para estes cálculos é o elemento de matriz  $x$  entre as funções de onda envelope.

A figura 4.13a ilustra o quadrado do elemento de matriz de dipolo da transição entre os estados  $1s \rightarrow 2p_x$  e a figura 4.13b o quadrado do elemento de matriz entre  $1s \rightarrow 3p_x$  para radiação polarizada na direção  $x$  em função da posição da impureza dentro do poço de largura  $2.1a_0^*$ . Estas são as transições opticamente ativas no caso de radiação polarizada na direção  $x$ . As duas curvas estão nas mesmas unidades.

Para uma dada distribuição de impureza, o coeficiente de absorção pode ser calculado para diferentes polarizações e para todas as transições entre os estados de impurezas. Para podermos comparar os nossos resultados com os resultados obtidos por Jarosik et al. [40] (vide figura 4.14), para campo magnético nulo, calculamos o coeficiente de absorção em função da energia do fóton para um poço de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As com largura 210 Å, e concentração de alumínio de 31% (232 meV) e para uma distribuição Gaussiana (centrada em  $z = 0$  com largura a meia altura  $1/6L$ ). A figura 4.15 mostra a forma da linha (*line shape*) devido às transições entre os estados  $1s \rightarrow 2p_x$  e  $1s \rightarrow 3p_x$  com polarização na direção  $x$ . Existe um pico centrado em 7.03 meV, que corresponde a transição  $1s \rightarrow 2p_x$ .

A assimetria entre os picos depende dos diferentes mecanismos de distribuição de impurezas. Quanto mais alto o número de impurezas dentro do poço, tanto a cauda da curva no lado de energias baixas vai ser mais longa. Os resultados experimentais não são suficientemente precisos para comparar a forma da linha, contudo, a posição do pico observado,  $E = 7.3$  meV coincide razoavelmente bem com o calculado e está dentro do erro experimental.

Os resultados obtidos também foram comparados com os resultados teóricos de Fraizoli et al. [43] (vide figura 4.16). A concordância encontrada é muito boa, apesar de utilizarem funções tentativa mais complexas (soma de Gaussianas) do que as nossas.

# Elementos de matriz

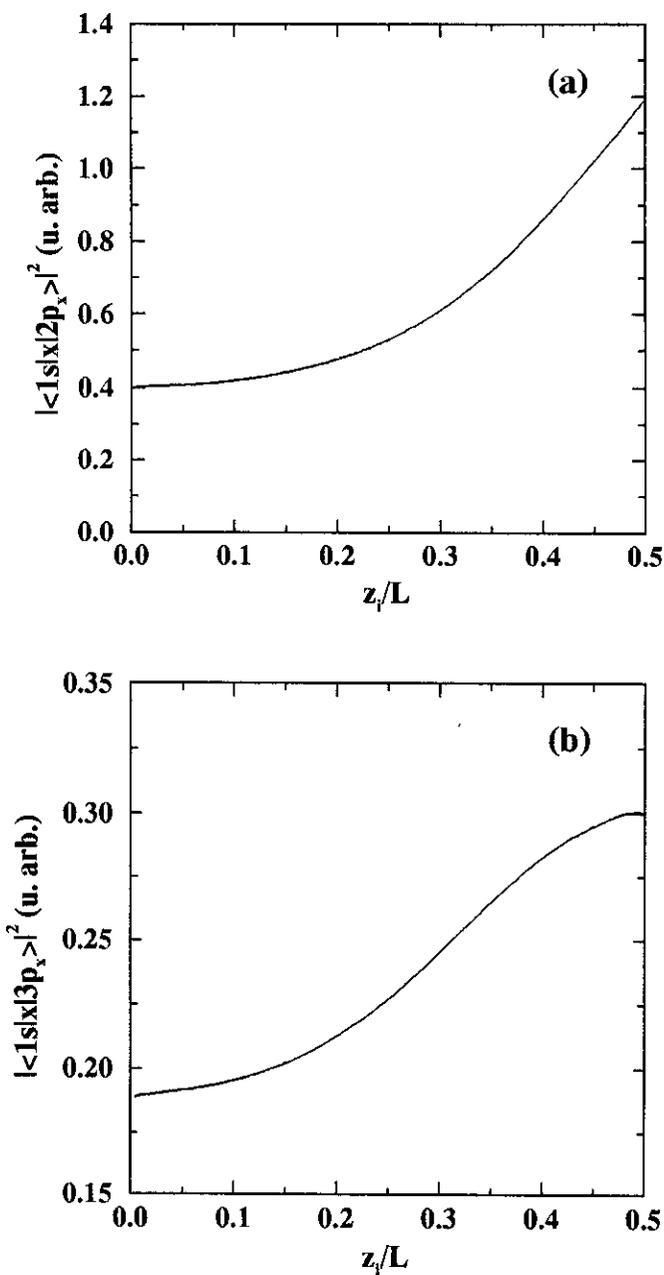


Figura 4.13: Elementos de matriz: (a)  $|\langle 1s|x|2p_x \rangle|^2$  e (b)  $|\langle 1s|x|3p_x \rangle|^2$  em função da posição da impureza em unidades arbitrárias para uma largura de poço de 210 Å e concentração de alumínio de 31% (para radiação polarizada na direção  $x$ ). O quadrado do elemento de matriz é a parte relevante nas transições  $1s \rightarrow 2p_x$  e  $1s \rightarrow 3p_x$  respectivamente.

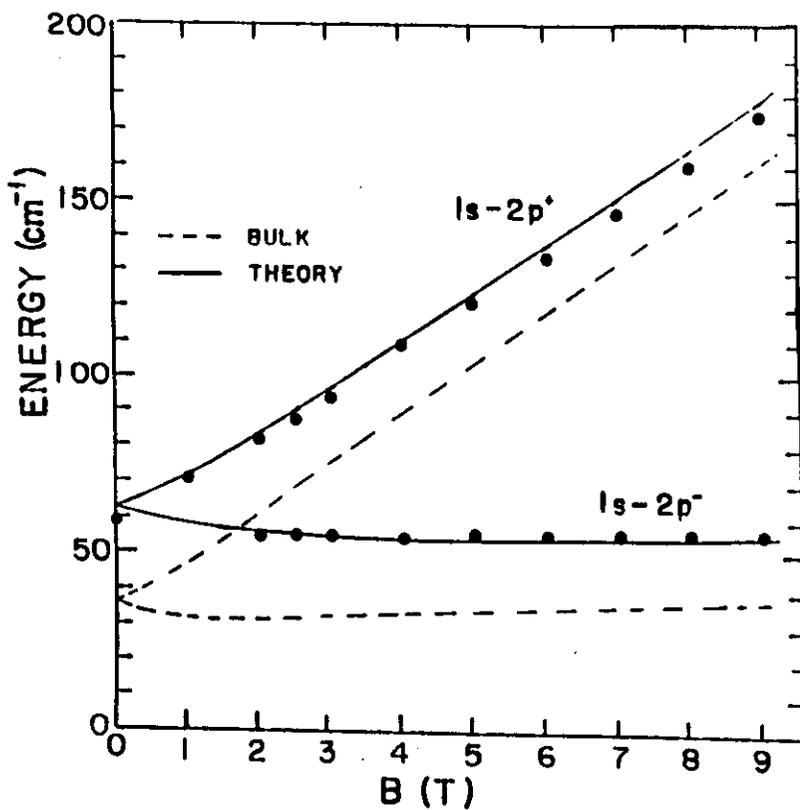


Figura 4.14: Valores experimentais para a transição  $1s \rightarrow 2p_x$ , para um poço quântico de  $210 \text{ \AA}$  e com campo magnético aplicado. A energia da transição em campo magnético nulo corresponde a  $7.3 \text{ meV}$ . Figura da referência [40].

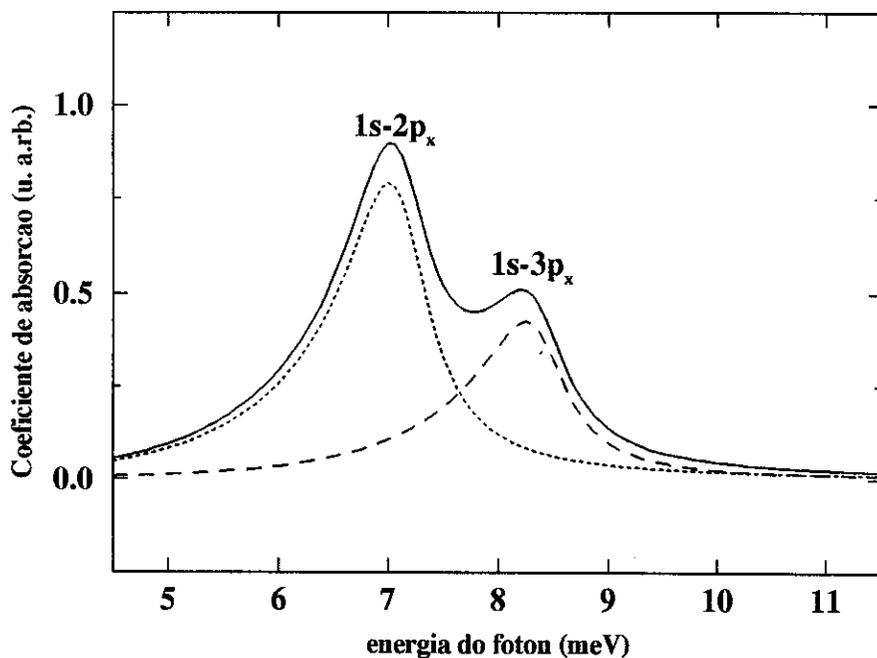


Figura 4.15: Forma do coeficiente de absorção (linha cheia) em unidades arbitrárias para a transição entre os estados  $1s \rightarrow 2p_x$  (linha pontilhada) e  $1s \rightarrow 3p_x$  (linha tracejada) para radiação polarizada na direção  $x$ . A largura do poço quântico é de  $210 \text{ \AA}$  e a concentração de alumínio de 31%.

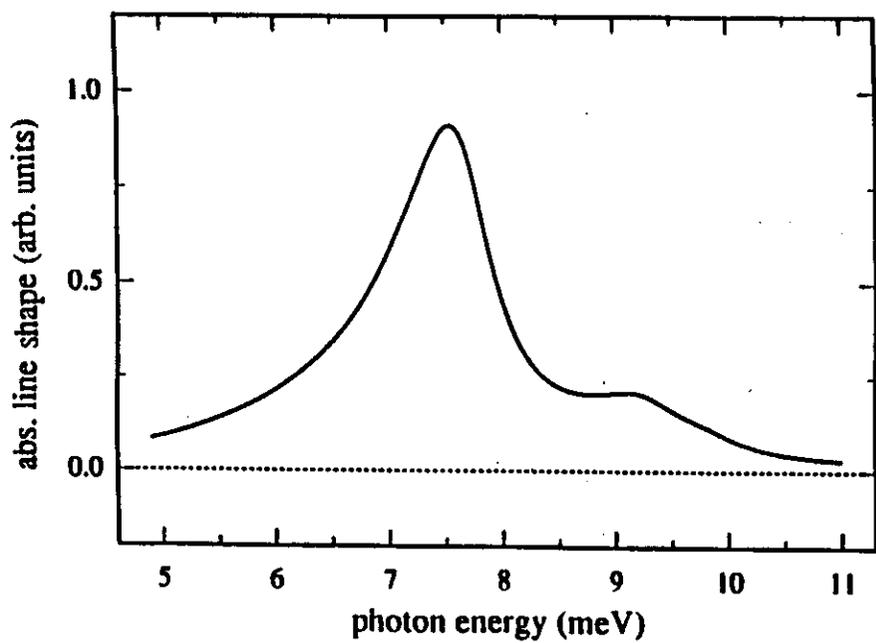


Figura 4.16: Forma do coeficiente de absorção para radiação polarizada na direção  $x$ , da referência [43].

# Capítulo 5

## Conclusão

Realizamos o cálculo da energia de ligação para o estado fundamental e para os primeiros estados excitados de um doador hidrogenóide raso em um poço quântico quadrado finito de GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. A energia de ligação foi calculada em função da largura do poço e em função da posição da impureza. Utilizamos um método variacional dentro da aproximação da massa efetiva. Para verificar a coerência dos nossos resultados, efetuamos uma série de comparações com limites da impureza no *bulk* e na interface. A partir da energia de ligação obtivemos as densidades de estados de impureza e a forma da linha de absorção para algumas transições assim como os seus respectivos elementos de matriz. Nossos resultados comparam bem com resultados teóricos anteriores e com resultados experimentais disponíveis.

Entre os nossos resultados destacamos, para este modelo, o comportamento da energia de ligação do estado excitado tipo  $p_z$  em função da posição da impureza e também da energia em função da largura do poço quando a impureza está localizada na interface. A energia em função da posição da impureza tem seu mínimo no centro do poço atinge seu máximo pouco antes da borda do poço, que é um comportamento bem diferente dos demais estados excitados. Para energia em função da largura quando a impureza está localizada na interface, a energia é maior do que a da impureza no centro. Tais resultados não haviam sido relatados ainda.

No nosso modelo utilizamos funções tentativa derivadas do átomo de hidrogênio, que

além de serem mais simples do que funções tentativa propostas por outros autores, têm a vantagem de serem fisicamente mais intuitivas. Mostramos neste trabalho que este modelo é perfeitamente adequado para o cálculo dos coeficientes de absorção, fazendo-se desnecessária a utilização de funções tentativa mais sofisticadas e de difícil tratamento teórico.

Uma extensão para o estudo desenvolvido aqui seria por exemplo a inclusão do campo magnético, uma vez que as transições entre os níveis de uma mesma impureza são medidas experimentalmente por magnetoespectroscopia [40] e portanto resultados teóricos e experimentais podem ser comparados, o que é de bastante interesse.

# Bibliografia

- [1] G Bastard. Hydrogenic impurity states in a quantum well: a simple model. *Phys. Rev. B*, 24:4714–4722, 1981.
- [2] C Priester, G Allan, and M Lannoo. Validity of the effective-mass approximation for shallow impurity states in narrow superlattices. *Phys. Rev. B*, 28:7194–7200, 1983.
- [3] C Mailhot, Y-C Chang, and T C McGill. Energy spectra of donors in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum well structures in the effective-mass approximation. *Phys. Rev. B*, 26:4449–4457, 1982.
- [4] R L Greene and K K Bajaj. Energy levels of hydrogenic impurity states in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum well structures. *Solid State Commun.*, 45:825–829, 1983.
- [5] S Chaudhuri. Hydrogenic-impurity ground state in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As multiple-quantum well structures. *Phys. Rev. B*, 28:4480–4488, 1983.
- [6] H Chen and S Zhou. Effect of a finite-width barrier on binding energy in modulation-doped quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 36:9581–9586, 1987.
- [7] K Tanaka, M Nagaoka, and T Yamabe. Binding energy of the impurity level in the Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As:GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As superlattice. *Phys. Rev. B*, 28:7068–7074, 1983.
- [8] S Chaudhuri and K K Bajaj. Effect of nonparabolicity on the energy levels of hydrogenic donors in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 29:1803–1806, 1984.

- [9] W T Masselink, Y-C Chang, and H Morkoç. Binding energies of acceptors in GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum wells. *Phys. Rev. B*, 28:7373–7376, 1983.
- [10] C Priester, G Bastard, G Allan, and M Lannoo. Binding energies of hydrogenic impurities in finite-quantum-well structures with effective-mass mismatch: simple and accurate variational treatments. *Phys. Rev. B*, 30:6029–6032, 1984.
- [11] L E Oliveira and L M Falicov. Energy spectra of donors and acceptors in quantum-well structures: Effect of spatially dependent screening. *Phys. Rev. B*, 34:8676, 1986.
- [12] L E Oliveira and R Pérez-Alvarez. On the optical absorption properties of a homogeneously doped GaAs- $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  quantum well. *Solid State Commun.*, 70:523–528, 1989.
- [13] L E Oliveira and R Pérez-Alvarez. Optical-absorption spectra associated with impurities in a GaAs-(Ga,Al)As quantum well. *Phys. Rev. B*, 40:10460, 1989.
- [14] L E Oliveira and J López-Gondar. Photoluminescence spectra of shallow acceptors in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 55:2751, 1989.
- [15] L E Oliveira and J López-Gondar. Acceptor-related photoluminescence study in GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  quantum wells. *Phys. Rev. B*, 41:3719–3727, 1990.
- [16] R L Greene and K K Bajaj. Effect of magnetic field on the energy levels of a hydrogenic impurity center in GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 31:913–918, 1985.
- [17] W T Masselink, Y-C Chang, and H Morkoç. Acceptor spectra of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs quantum wells in external fields: Electric, magnetic, and uniaxial stress. *Phys. Rev. B*, 32:5190–5201, 1985.
- [18] J A Brum. Electric field dependence of the binding energy of shallow donors in GaAs- $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  quantum wells. *Phys. Rev. B*, 32:2378–2381, 1985.

- [19] L Vinña, R T Collins, E E Mendez, W I Wang L L Chang, and L Esaki. Optical spectroscopy of GaAs/GaAlAs quantum wells under an external electric field. *Superlat. Microstruct.*, 3:9–12, 1987.
- [20] G Weber. Density of states and optical absorption spectra of shallow impurities in quantum wells under the influence of a longitudinal electric field. *Phys. Rev. B*, 41:10043–10048, 1990.
- [21] G Weber. Electric field dependence of the density of states and energy spectra of shallow impurities in quantum-wells. In A S Chaves, A G Oliveira, and C E T Gonçalves da Silva, editors, *Proceedings of the Fourth Brazilian School on Semiconductor Physics*, World Scientific, page 408, 1990.
- [22] C S Han and Y C Hsieh. The binding energy of hydrogenic impurities in quantum well structures under electric field. *Physica B*, 179:355–368, 1992.
- [23] R B Santiago, L E Oliveira, and J d’Albuquerque e Castro. Impurity-related optical absorption from GaAs-(Ga,Al)As quantum wells under an applied electric field. *Phys. Rev. B*, 46:4041–4045, 1992.
- [24] R B Santiago, J d’Albuquerque e Castro, and L E Oliveira. Photoluminescence line shape associated with the  $e - A^0$  acceptor-related recombination in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells under applied electric field. *Phys. Rev. B*, 48:4498–4502, 1993.
- [25] G W Bryant. Hydrogenic impurity states in quantum-well wires. *Phys. Rev. B*, 29:6632–6639, 1984.
- [26] J Lee and H N Spector. Hydrogenic impurity states in a quantum well wire. *J. Vac. Sci. Technol.*, B2:16–20, 1984.
- [27] J A Brum. Position-dependence of the impurity binding energy in quantum well wires. *Solid State Commun.*, 54:179–181, 1985.

- [28] G Weber, P A Schulz, and L E Oliveira. Density of states and energy spectra of hydrogenic impurities in quantum-well wires. *Phys. Rev. B*, 38:2179–2182, 1988.
- [29] A Latgé, M de Dios-Leyva, and L E Oliveira. Donor-excited states and infrared-transition strengths in cylindrical GaAs-(Ga,Al)As quantum-well wires. *Phys. Rev. B*, 49:10450–10455, 1994.
- [30] N Porrás-Montenegro and S T Pérez-Merchancano. Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots. *Phys. Rev. B*, 46:9780–9783, 1992.
- [31] R C Miller, A C Gossard, W T Tsang, and O Munteanu. Extrinsic photoluminescence from GaAs quantum wells. *Phys. Rev. B*, 25:3871–3877, 1982.
- [32] R C Miller, A C Gossard, W T Tsang, and O Munteanu. Bound excitons in *p*-doped GaAs quantum wells. *Solid State Commun.*, 43:519–522, 1982.
- [33] M H Meynadier, J A Brum, C Delalande, M Voos, F Alexandre, and J L Liévin. Optical studies of impurity trapping at the GaAlAs/GaAs interface in quantum well structures. *J. Appl. Phys.*, 58:4307–4312, 1985.
- [34] B V Shanabrook and J Comas. Photoluminescence from “spike doped” hydrogenic donors in Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As-GaAs quantum wells. *Surf. Sci.*, 142:504–508, 1984.
- [35] B V Shanabrook, J Comas, T A Perry, and R Merlin. Raman scattering from electrons bound to shallow donors in GaAs-Al<sub>*x*</sub>Ga<sub>1-*x*</sub>As quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 29:7096–7098, 1984.
- [36] Y Chen, A Hameury, J Massies, and C Neri. Thermal quenching of extrinsic photoluminescence of GaAs-Ga<sub>1-*x*</sub>Al<sub>*x*</sub>As single quantum well. *Nuovo Cimento*, 10D:1243–1248, 1988.
- [37] P O Holtz, B Monemar, M Sundaram, J L Merz, and A C Gossard. Excited 2*s* state of a donor confined in a GaAs/Al<sub>*x*</sub>Ga<sub>1-*x*</sub>As quantum well. *Phys. Rev. B*, 47:10596–10600, 1993.

- [38] P O Holtz, Q X Zhao, B Monemar, M Sundaram, J L Merz, and A C Gossard. Electronic structure of a shallow acceptor confined in a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well. *Phys. Rev. B*, 47:15675–15678, 1993.
- [39] P O Holtz, Q X Zhao, A C Ferreira, B Monemar, M Sundaram, J L Merz, and A C Gossard. Excited states of shallow acceptors confined in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells. *Phys. Rev. B*, 48:8872–8877, 1993.
- [40] N C Jarosik, B D McCombe, B V Shanabrook, J Comas, J Ralston, and G Wicks. Binding of shallow donor impurities in quantum-well structures. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1283–1286, 1985.
- [41] Byungsu Yoo, B D McCombe, and W Schaff. Electric-field effects on confined hydrogenic impurities in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 44:13152–13155, 1991.
- [42] R L Greene and K K Bajaj. Binding energy of the 2p<sub>0</sub>-like level of a hydrogenic donor in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 31:4006–4008, 1985.
- [43] S Fraizzoli, F Bassani, and R Buczko. Shallow donor impurities in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum-well structures: role of the dielectric-constant mismatch. *Phys. Rev. B*, 41:5096–5103, 1990.
- [44] S Fraizzoli and A Pasquarello. Binding energies of ground and excited states of shallow acceptors in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells. *Phys. Rev. B*, 42:5349–5352, 1990.
- [45] P D Emmel and I C da Cunha Lima. Effect of compensation on the absorption coefficient for shallow donors in a quantum well. *Solid State Commun.*, 79:431–434, 1991.
- [46] P D Emmel, J R Leite, and I C da Cunha Lima. Infrared-absorption coefficient for shallow donors in a quantum well. *Phys. Rev. B*, 43:9265–9268, 1991.

- [47] N David Aschroft and Neil W Mermin. *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [48] J D Levine. Nodal hydrogenic wave functions of donors on semiconductor surfaces. *Phys. Rev. A*, 2:586–589, 1965.
- [49] R C Miller, D A Kleinman, and A C Gossard. Energy-gap discontinuities and effective masses for GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 29:7085–7087, 1984.
- [50] W Wang, E E Mendez, and F Stern. High mobility gas and valence-band offset in modulation-doped *p*-AlGaAs/GaAs heterojunctions. *Phys. Rev. B*, 29:639–641, 1984.
- [51] H C Casey, Jr. Room-temperature threshold-current dependence of GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As double-heterostructure lasers on *x* and active-layer thickness. *J. Appl. Phys.*, 49:3684–3693, 1978.
- [52] W Kohn. *in Solid State Physics*. Academic, New York, 1957.
- [53] L E Oliveira. Spatially dependent screening calculation of binding energies of hydrogenic impurity states in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells. *Phys. Rev. B*, 38:10641, 1988.