UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN"

# Fotoluminescência em Fios Quânticos Cilíndricos de GaAs-(Ga,Al)As

Servio Tulio Pérez Merchancano

Orientador: Luiz E. Oliveira

Co-orientador: M. de Dios-Leyva

3 de março de 1997

Este exemplar corresponde à redação final da tese de doutorado defendida pelo aluno Servio Tulio Pérez Merchancano e aprovada pela Comissão Julgadora.

3/3/97

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

UNIDADE IFGW
N.º CHAMADA: T/UNICAMP
P415f
V. Ex.
TOMBO BC/ 30522
PROC. 281/97
C D x
PREÇO R$ 11,00
DATA 23/05/97
Nº CPD

IF/1071

M

CM-00098504-8

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA**

**BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

P415f

Pérez Merchancano, Servio Tulio
Fotoluminescência em fios quânticos cilíndricos de GaAs-(Ga,Al)As / Servio Tulio Pérez Merchancano. -- Campinas, SP : [s.n.], 1997.

Orientador: Luiz E. Oliveira.
Co-orientador: M. de Dios-Leyva.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Poços quânticos. I. Oliveira, Luiz Eduardo. II. Dios-Leyva, Melquiades de. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". IV. Título.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA
GLEB WATAGHIN

# PARECER DE APROVAÇÃO
# DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DE
# SÉRVIO TÚLIO PEREZ MERCHANCANO

**Data: 18 / 02 / 97**

**BANCA EXAMINADORA:**

- Prof. Dr. Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira (Orientador)

- Prof. Dr. Gerald Weber

- Profa. Dra. Andréa Brito Latgé

- Prof. Dr. Alex Antonelli

- Prof. Dr. Mauro Monteiro Garcia de Carvalho

Secretaria de Pós-Graduação
C.P. 6165

Fones: (019) 239-7254 / 239-2424
Fax: (019) 239-3127

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos à obtenção do título de Doutor em Física.

**A meus Pais pelo apoio incondicional e pela permanente força e sentido que sempre deram a meu trabalho.**

**A meus Irmaõs Edith e Hernan pela sua amizade e pela fraternidade com que sempre me acolheram, a sua memoria.**

Meus agradecimento a

Prof. Dr. L. E. Oliveira, pela orientação , dedicação e apoio, que foram de fundamental importância para minha formação e além de tudo, pela colaboração que sempre teve no desenvolvimento de minha tese.

Prof. Dr. M. de Dios-Leyva, pela colaboração e atenção nas discussões continuas de meu trabalho de tese.

Aos professores do IFGW que me proporcionaram uma boa formação em Física.

Aos professores da Banca Examinadora, por suas excelentes críticas.

Luz Elena Bolivar pelo seu aopio e sua amizade incondicional.

A todos od funcionarios do IFGW que sempre me proporcionaram as condições para que este trabalho se completasse.

ao CNPq pela ajuda financiera e à Biblioteca do IFGW, pelo fornecimento dos dados bibilograficos sem os quais não teria sido possível realizar este trabalho.

A todos os meus companheiros e colegas do Instituto de Física, pela sua amizade e acolhimento.

Enfim, um muito obrigado a todos os que me ajudaram, direta ou indiretamente.

# Resumo*

Neste trabalho calculamos as energias de ligação de impurezas rasas aceitadoras num fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ em função do raio do fio e a posição da impureza. Estas energias de ligação foram estudadas usando a aproximação da massa efetiva e o método variacional. Aqui se usou um poço de confinamento finito com uma profundidade determinada pela descontinuidade da banda proibida no fio quântico e no meio que o rodeia. Encontrou-se que a energia de ligação se incrementa quando o raio do fio diminui indo para valores característicos do material em bloco quando o raio do fio é muito pequeno ou muito grande. Nossos resultados estão em boa concordância com os resultados teóricos obtidos em fios quânticos de seção transversal retangular.

Processos de recombinação radiativa em fios quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ excitados por um feixe laser de onda contínua num experimento de fotoluminescência em condições quase-estacioárias também são calculados. Trabalhamos na aproximação da massa efetiva e o modelo de banda parabólica com o fim de descrever elétrons e buracos. No estado estacionário, estudamos a absorção interbanda e alguns mecanismos de recombinação tais como a recombinação de elétrons com buracos livres e com buracos ligados a aceitadores, densidade de portadores e tempos de recombinação em função da intensidade do laser. No caso de um fio quântico dopado mostramos que a presença de aceitadores modifica substancialmente a dependência das quantidades

*Parte do trabalho de porcessos de recombinação que incluem impurezas rasas (capítulo 4) já foi publicada em Phys. Rev. B **53**, 12985 (1996) e parte do trabalho dos processos de recombinação com impurezas rasas e armadilhas foi apresentada na $10th$ International Conference on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter, Prague, 18-23 August 1996 (J. of Luminesc.- submetida para publicação ); uma descrição mais completa foi submetida para publicação no J. Appl. Phys.

anteriores em função da intensidade do laser.

Finalmente, consideramos os efeitos de armadilhas e impurezas rasas aceitadoras num processso de fotoluminescência " continuous wave" (*cw*) no estado estacionário de um fio quântico à temperatura ambiente. A análise se baseia num cálculo quântico das taxas de transição de recombinação radiativa e num tratamento fenomenológico das taxas de recombinação não radiativa. Estudamos também a dependência dos tempos de vida das recombinações , das eficiências de recombinação e a intensidade da fotoluminescência integrada em função da intensidade do feixe de laser.

Em conclusão, mostramos que os efeitos de impurezas e armadilhas são muito importantes no entendimento quantitativo da fotoluminescência à temperatura ambiente.

# Abstract

In this work we calculated the binding energies of shallow acceptor impurities in finite cylindrical $GaAs$-$(Ga, Al)As$ quantum-well wires as functions of the well radii and the impurity position using the effective-mass approximation and a variational procedure. We used a confinement potencial well with the depth depending on the discontinuity gap between the quantum-well wire and the cladding. The binding energies increase when the radii of the quantum-well wire decrease tending to characteristic values of the bulk material, when the radii are small or big. Our results for the binding energies are in good agreement with other theoretical results in quantum-well wires of rectangular cross-sectional area.

Radiative recombinations processes in quantum-well wires, excited by a continuous-wave laser in a photoluminescence experiment under quasistationary excitation conditions, are calculated. We work within the effective-mass approximation and the parabolic-band model for describing both electrons and holes, and consider, in the steady state, the interband absorption, and some radiative recombination mechanisms, such as recombination of electrons with free holes and with holes bound at acceptors, and carrier densities as functions of the laser intensity. For doped quantum-well wires, it is shown that the presence of acceptors susbstantially modifies the dependence of the above quantities on the laser intensity.

Finally, we have considered the effects of traps and shallow acceptors on the continuous-wave steady -state photoluminescence of quantum-well wires at room temperature. The analysis is based on a quantum-mechanical calculation of the transition rates of radiative recombinations, and on a phenomenological treatment of the nonradiative recombination rates. We have studied the laser-intensity dependence of recombination life times, of various recombination efficiences and of the integrated photoluminescence intensity.

In conclusion, trap and impurity effects are shown to be very important in a quantitative understanding of the steady-state photoluminescence of quantum-well wires.

# Conteúdo


**1 Introdução** **1**

**2 Fundamento Teórico: Sistemas de Baixa Dimensionalidade** **10**

2.1 Heteroestruturas Semicondutoras . . . . . 12

2.2 Estados de Impurezas . . . . . 14

**3 Energias de Ligação de Impurezas Rasas em Fios Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As** **19**

3.1 Modelo de Confinamento Finito . . . . . 21

3.1.1 Ausência de Impurezas . . . . . 21

3.1.2 Presença de Impurezas . . . . . 22

3.2 Resultados e discussão . . . . . 24

3.3 Conclusões . . . . . 27

**4 Fotoluminescência de Fios Quânticos Incluindo Impurezas Rasas†** **29**

4.1 Modelo teórico . . . . . 31

4.2 Resultados e discussão . . . . . 38

4.3 Conclusões . . . . . 51


†Parte do assunto abordado neste capítulo já foi publicada em Phys. Rev. B **53**, 12985 (1996).

**5 Fotoluminescência de Fios Quânticos Incluindo Impurezas Rasas e Armadilhas‡ 53**

5.1 Fenomenologia de Armadilhas . . . . . 55

5.2 Resultados e discussão . . . . . 60

5.3 Conclusões . . . . . 72

**6 Conclusões Gerais e Perspectivas Futuras 74**

**A Energias de Ligação 78**

‡Parte deste trabalho foi apresentada na 10*th* International Conference on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter, Prague, 18-23 August 1996 (J. of Luminesc.-submetida para publicação ); uma descrição mais completa foi submetida para publicação no J. Appl. Phys.

# Lista de Figuras

2.1 Gap fundamental à temperatura ambiente de alguns cristais semicondutores, em função da constante de rede. . . . . 11

2.2 Esquematização de uma interface, quando se tenta fazer uma formação de uma heterojunção de materiais $A$ e $B$, com uma rede de separação diferente. Se $B$ é crescido sobre $A$, esta rede se deve ligar no plano da interface, o que gera um aumento da tensão. . . . . 13

2.3 Esquematização das bandas de valência, condução e níveis de impurezas rasas. . . . . 15

2.4 (a) Representação esquemática de um doador raso substitucional, no caso de um átomo de arsênio (valência 5) num 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) A impureza ($As$) é tratada como um ponto de carga fixa $+e$, com um elétron $-e$ adicional. . 16

3.1 Energias de ligação de uma impureza aceitadora em função do raio do fio quântico ($a$) e da posição da impureza ($b$). . . . . 25

3.2 Energias de ligação de uma impureza doadora em função do raio do fio quântico (a) e posição da impureza (b). . . . . 26

4.1 Esquematização de um fio quântico e sua estrutura de bandas no estado fundamental. . . . . 30

4.2 Quase-níveis de Fermi para baixas ($T = 2\ K$) e altas temperaturas ($T = 300\ K$) em função da densidade de portadores (figuras $a$ e $b$, respectivamente). . . . . 39

4.3 Densidades de portadores em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à temperatura $T = 2\ K$ e $R = 5\ nm$. . . . 41

4.4 Densidades de portadores em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à temperatura $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$. . . 42

4.5 Quase-níveis de Fermi em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à temperatura $T = 2\ K$ e $R = 5,\ nm$. . . . . 44

4.6 Quase-níveis de Fermi em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ com temperatura $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$. 45

4.7 Tempo de vida radiativo em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 2\ K$ e $R = 5\ nm$. . . . . 46

4.8 Tempo de vida radiativo em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$. . . . . 47

4.9 Tempo de vida radiativo em função da densidade de portadores para um $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 2\ K$ e $R = 5\ nm$. . . . . 48

4.10 Tempo de vida radiativo em função da densidade de portadores em um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$. . . . . 49

4.11 *a*). Densidade de portadores em função da intensidade do laser à $T = 2\ K$, para $QWW's$ de raios $R = 5,\ 10\ nm$ (linha sólida e pontilhada) e um resultado experimental para um fio retangular com confinamento lateral de 65 $nm$. b) Quase-níveis de Fermi teórico para um $QWW$ de 8 $nm$ (linha sólida) e um fio quântico retangular experimental de área equivalente (pontos) à $T = 20\ K$. . . . . 50

5.1 Ilustração de armadilhas, centros de geração e recombinação em um fio quântico. . . . . 55

5.2 Densidades de elétrons de condução para um $QWW$ cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$ à $T = 300\ K$, em função da intensidade do laser $cw$, com densidade de impurezas rasas $N_A = 10^{16}/cm^3$, e duas densidades de armadilhas: $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$, curva 4: $r_T/r_R = 1000$. As linhas sólidas correspondem aos resultados na ausência de armadilhas. . . . . 61

5.3 Quase-níveis de Fermi (ou potenciais químicos) de condução $(e)$ e valência $(h)$ a $T = 300\ K$ para um fio quântico cilíndrico $QWW$ de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, com $R = 5\ nm$ para uma concentração de impurezas rasas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$ e razão $r_T/r_R = 2$ das taxas de captura e recombinação não radiativa em função da intensidade do laser $cw$. As concentrações de armadilhas são: $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$ e $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. As linhas sólidas correspondem aos resultados na ausência de armadilhas. . . . . 62

5.4 Tempos de vida de elétrons de condução para um fio quântico cilíndrico $QWW$ de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, à $T = 300\ K$, para uma concentração de impurezas rasas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$ e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$ em função da intensidade do laser $cw$. Resultados teóricos são apresentados para uma razão $r_T/r_R = 2$ das taxas de captura e recombinação não radiativa. As curvas sólidas correspondem aos resultados na ausência de armadilhas. . . . . 64

5.5 Tempos efetivos de decaimento não radiativo (em unidades reduzidas) em função da intensidade do laser $cw$ à $T = 300\ K$ para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$ para uma concentração de impurezas rasas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$ e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$, curva 4: $r_T/r_R = 1000$. Note as diferentes escalas no eixo horizontal. 65

5.6 Fração de armadilhas populadas por elétrons em função da intensidade do laser $(cw)$, à $T = 300\ K$ para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$. . . . . 67

5.7 Eficiências de captura em função da intensidade do laser $cw$, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$. . . . . 68

5.8 Fração da pupulação de elétrons na sub-banda de condução (com referência à concentração de buracos de valência gerada pela excitação do laser) em função da intensidade do laser $cw$, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$. . . . . 69

5.9 Concentração efetiva de aceitadores ionizados (com referência à população efetiva de buracos de valência gerada pela excitação do laser), em função da intensidade do laser $cw$, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com raio $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$. . . . . 70

5.10 Intensidade de fotoluminescência total integrada em função da intensidade do laser $cw$, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$. . . . . 71

# Capítulo 1

# Introdução

Heteroestruturas semicondutoras como poços quânticos ($QWs$) e fios quânticos ($QWWs$) são uma das áreas mais ativas da física de semicondutores. Um dos primeiros trabalhos teóricos em super-redes foi feito por Esaki e Tsu [1] que determinaram uma condutância diferencial negativa na direção de crescimento destes sistemas causada pelos efeitos de confinamento e a excitação de elétrons pelo campo elétrico moderado. Eles sugeriram que efeitos quânticos em uma nova escala física poderiam gerar uma nova área de pesquisa no campo de semicondutores. Motivados pela importância física e tecnológica deste trabalho, estudos teóricos e experimentais de heteroestruturas nestes últimos anos têm despertado muito interesse devido aos efeitos quânticos de tamanho que se apresentam como consequência do confinamento eletrônico.

Experimentalmente, heteroestruturas podem ser crescidas por diferentes técnicas, tais como "metal organic chemical vapor deposition" ($MOCVD$), "molecular beam epitaxy" ($M.B.E$) e "chemical beam epitaxy" ($C.B.E$), etc, que permitem crescer amostras de alta qualidade com camadas de materiais alternados onde se pode controlar a interface e a largura. Nestes novos sistemas, as energias de ligação e

as propriedades físicas como ópticas e de transporte apresentam um comportamento diferente dos materiais em " bulk".

Kohn e Luttinger [2] resolveram o problema do átomo de hidrogênio estritamente em duas dimensões e encontraram que a energia de ligação resultante é quatro vezes maior que a energia de ligação no estado fundamental para o caso em três dimensões.

O primeiro trabalho teórico em sistemas de baixa dimensionalidade incluindo impurezas e usando o método variacional foi feito por Bastard [3, 4] que calculou a energia de ligação de uma impureza hidrogenóide em um poço de confinamento infinito para uma estrutura bidimensional. Ele encontrou que esta energia muda tanto com a posição da impureza quanto com a largura do poço, observando que se a largura é muito pequena ou muito grande a energia vai para os valores característicos do átomo de hidrogênio em duas e três dimensões, respectivamente.

Chaudhuri e colaboradores [5] calcularam energias de ligação em poços quânticos múltiplos ($MQWs$) de $GaAsAl_xGa_{1-x}As$ mudando a largura de $GaAs$ e $Ga_{1-x}$ $Al_xAs$, encontrando valores que estão basicamente em concordância com os encontrados por Bastard [3] nos limites apropriados.

Greene e Bajaj [6], usando o método variacional, determinaram a energia de ligação do estado fundamental e estados excitados em função da largura do poço em $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$. Mailhot e colaboradores [7] calcularam o espectro de energia de uma impureza hidrogenóide no centro e na borda de um sistema de poços quânticos simples ($QWs$) de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$.

Estudos posteriores foram feitos para estados excitados em $QWs$ com impurezas aceitadoras [8–10], encontrando-se que o comportamento da energia de ligação é semelhante ao apresentado no estado fundamental com uma importante diferença em seu comportamento no estado $p_z$ onde o mínimo está localizado pouco antes da borda do poço e seu máximo é atingido antes do centro do mesmo [11]. Este

comportamento é atribuído ao fato de que o confinamento ocorre na direção $z$, que é a direção ao longo da qual o orbital $p_z$ se encontra.

Oliveira e Falicov [12] calcularam o espectro de energia em $QWs$ de $GaAs$ com impurezas doadoras e aceitadoras levando em conta a posição da impureza e o efeito da blindagem num poço de confinamento infinito. Este efeito faz que com as energias de ligação sejam maiores em comparação com os resultados onde se considera um valor consrante para a permitividade dielétrica $\varepsilon = \varepsilon_0$.

Posteriomente, se fizeram estudos que levam em conta a presença de campos elétrico e magnético. Os efeitos de campo elétrico [13] geram um perfil de polarização da distribuição de portadores, produzindo mudanças apreciáveis no espectro da energia de portadores a qual se usa para controlar e modular a resposta em mecanismos optoeletrônicos.

Este tipo de trabalho também foi desenvolvido em sistemas de uma dimensão ou fios quânticos cilíndricos e retangulares [14, 15], calculando-se energias de ligação que apresentam praticamente o mesmo comportamento que em $QWs$, mas são dominadas pelo efeito de confinamento. Nos fios quânticos retangulares estas energias atingem valores similares aos encontrados em fios quânticos cilíndricos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ $(QWW)$ quando ambbas areas têm dimensões comparáveis [14].

Porras-Montenegro e colaboradores [16] obtiveram energias de ligação em $QWWs$ em função da posição da impureza e do raio do fio, usando o método variacional e a aproximação da massa efetiva para poços de confinamento infinito e finito.

Cálculos dos elementos de matriz de transição entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados num fio quântico foram feitos por Latgé e colaboradores [17] levando em conta estados excitados de impurezas doadoras. Estes resultados apresentam um comportamento similar aos de $QWs$ [3, 8] e refeltem o confinamento maior nestes sistemas quasiunidimensionais.

Recentemente, processos de recombinação associados a experimentos de fotoluminescência em heteroestruturas têm sido amplamente estudados teórica e experimentalmente. Naturalmente, é de especial relevância na interpretação destes experimentos, a determinação dos canais de recombinação dominantes que dependem das condições específicas nas quais o experimento tem sido desenvolvido. Neste sentido, recombinações radiativas associadas a portadores livres, excitons, biexcitons, impurezas, etc, têm sido amplamente discutidos na literatura em diferentes condições experimentais.

Estudos de absorção óptica, perto do pico excitônico de buracos pesados em termos da intensidade do laser de onda contínua ($cw$) em $MQWs$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ à temperatura ambiente foram feitos por Miller e colaboradores [18], que observaram que a absorção excitônica de sistemas de $MQWs$ se pode saturar com potencias de milliwatt mais rapidamente que em amostras simples de $GaAs$. Eles sugeriram que um mecanismo semelhante para a saturação é a blindagem da interação elétron-buraco livres. Em experiências semelhantes observaram processos de recombinação de elétrons com aceitadores neutros em heteroestruturas de $GaAsAl_xGa_{1-x}As$ não dopadas e em $QWs$ de $GaAs$ dopados [19].

Fouquet e Siegman [20] fizeram medidas de fotoluminescência ($PL$) à temperatura ambiente para diferentes densidades de excitação em $MQWs$ de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ e observaram que a recombinação radiativa é dominada por portadores livres não excitônicos, para densidades de excitação de 3 a 100 $\mu J/cm^2$. Kamata e colaboradores [21] investigaram a dependência da densidade de excitação com o tempo de vida de emissão do $QW$ em $MQWs$ de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ dopados fortemente com $Si$ e encontraram que os processos de recombinação não radiativa ($NRR$) dominam os processos intrabanda. Ao mesmo tempo, mostraram que a contribuição relativa nestes processos decrescem com o aumento da densidade de excitação .

Haug e Koch [22] apresentaram um estudo teórico do plasma elétron-buraco num laser semicondutor incluindo efeitos de muitos corpos devido às interações coulombianas. Schlaad e colaboradores [23] estudaram sistemas bidimensionais de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ em estruturas de $MQWs$ em condições de estado quase-estacionário usando um laser de prova. Eles analisaram a renormalização do "gap" em função do plasma $e$-$h$ com evoluções sistemáticas de ganho no espectro de luminescência. Gurioli e colaboradores [24] estudaram o espectro de luminescência e o tempo de decaimento em estruturas de $QWs$ de $GaAsAl_xGa_{1-x}As$, comparando o tempo de decaimento com a intensidade de $PL$, o que permitiu encontrar a dependência dos tempos de vida radiativos e não radiativos com a temperatura . Eles encontraram que os processos não radiativos exercem um papel importante e são dominantes para temperaturas $T \geq 100\ K$.

Evidências qualitativas de excitons com densidades de buracos na ordem de $3\times10^{11}$ cm$^{-2}$ foram encontradas por Bishop e colaboradores [25] num trabalho experimental à temperatura ambiente das taxas de recombinação radiativa em amostras de $QW$ tipo-$p$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, usando fotoluminescência e técnicas de fotocondutividade. Cingolani e Ploog [26] fizeram uma revisão de processos de recombinação em $QWs$ semicondutores $III$-$V$ e super-redes em diferentes condições de excitação . Eles consideraram processos onde a eficiência depende da densidade fotogerada de excitações elementares e da frequência de excitação do campo, incluindo luminescência induzida por absorção multifotônica, decaimento radiativo de excitons e biexcitons gerando luminescência de espalhamento inelástico e recombinação do plasma $e$-$h$.

Recentemente, Ding e colaboradores [27, 28] usaram a técnica de $PL$ de onda contínua para investigar os efeitos de recombinação não radiativos nas armadilhas em processos de recombinação em $MQWs$ de $GaAs(Ga, Al)As$ à temperatura am-

biente. Eles mediram a dependência da intensidade da fotoluminescência com a intensidade do laser nestas estruturas, e encontraram que os resultados obtidos podem ser entendidos na base de um modelo simples onde a recombinação radiativa de portadores livres e a recombinação não radiativa em armadilhas saturáveis são os canais dominantes. Eles obtiveram também a eficiência de captura, a razão dos tempos de decaimento não radiativos de elétrons e buracos e a razão entre as taxas de recombinação não radiativa e captura em função da intensidade do laser. Bongiovanni e Staehli [29] analizaram o tempo de decaimento do plasma $e$-$h$ em $QWs$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ e mostraram que o decaimento é o mecanismo dominante da recombinação $e$-$h$ num plasma confinado de um $QW$. Os dados experimentais de Ding e colaboradores [27] em $GaAs$-$(Ga, Al)As$ e Bongiovanni e Staehli [29] foram explicados num trabalho recente feito por Oliveira e de Dios-Leyva [30] em $QWs$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ em um estado de fotoluminescência quase-estacionário.

No que concerne a sistemas semicondutores quase-unidimensionais, Citrin [31] realizou um estudo téorico de tempos de vida radiativo de excitons encontrando tempos da ordem de 150 $ps$. Por outro lado, experimentos recentes usando fotoluminescência de onda contínua ($cw$) e resolvida no tempo sugerem que a recombinação não radiativa em armadilhas podem ter um papel importante na determinação das propriedades da fotoluminescência em poços de $GaAs$-$(Ga, Al)As$. Por exemplo, Ryan e colaboradores [32] estudaram a dependência da luminescência em heteroestruturas de $GaAs(Ga, Al)As$ com respeito ao tempo em picosegundos, e determinaram os tempos de vida radiativos de elétrons-buracos, sugerindo a existência de armadilhas para explicar a diminuição dos tempos de vida em sistemas com baixas densidades de portadores. Eles sugeriram também que as armadilhas estão localizadas perto da interface e que para altas densidades estas armadilhas se saturam. Outras medidas de fotoluminescência que levam em conta a presença de armadilhas

em poços quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, onde se observa saturação em altas densidades foram reportadas por Fouquet e colaboradores [20], Kamata e colaboradores [21], e Oberhauser e colaboradores [33]. Atualmente, a influência da recombinação não radiativa com armadilhas na intensidade de fotoluminescência de poços quânticos também tem sido discutida por Brandt e colaboradores [34], e Fujiwara e colaboradores [35].

Com respeito a fios quânticos, o uso de diferentes técnicas torna possível a realização destas estruturas com uma qualidade que permite o estudo dos processos de recombinação . Recentemente foram reportados estudos experimentais da recombinação radiativa de portadores. Schweizer e colaboradores [36] desenvolveram investigações de fotoluminescência em fios quânticos implantados e intermisturados, e encontraram uma forte dependência do tamanho nos efeitos de relaxação de portadores nestas estruturas. Do trabalho anterior, e dos trabalhos feitos por Ridley [37] e Pickin e David [38] é evidente que a recombinação não radiativa é apreciável à temperatura ambiente em poços quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$. Efeitos semelhantes esperam-se para fios quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, devido à baixa qualidade da interface destas estruturas ao fato de que a razão da área da interface com o volume é muito maior que nos poços quânticos.

Neste trabalho, em primeiro lugar, calculamos as energias de ligação de impurezas hidrogenóides rasas em fios quânticos cilíndricos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ em função do raio do fio e posição da impureza. Estas energias são estudadas usando o método variacional e a aproximação da massa efetiva. Aqui consideramos o potencial de confinamento finito com uma profundidade determinada pela descontinuidade do "gap" no $QWW$ e o meio que o rodeia. Encontramos que o efeito do confinamento nestes sistemas mostra que as energias de ligação são maiores que as encontradas em $QWs$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ [12].

Na segunda parte, fazemos um estudo quântico das recombinações radiativas num $QWW$ excitado por um feixe de laser *cw* numa experiência de fotoluminescência em condições quase-estacionárias. Adotamos a aproximação da massa efetiva e o modelo parabólico para descrever elétrons e buracos. Consideramos o estado estacionário para descrever a absorção interbanda e alguns mecanismos de recombinação radiativa, tais como a recombinação de elétrons com buracos livres e com buracos ligados às impurezas aceitadoras. As densidades de portadores, potenciais químicos e tempos de recombinação radiativa são calculados a diferentes temperaturas ( $T = 300$ $K$ e $T = 2$ $K$) em função da intensidade do laser. Para fios quânticos dopados se mostra que a presênça de aceitadores modifica substancialmente a dependência da intensidade do laser com as quantidades anteriormente mencionadas.

Na terceira parte nos propomos fazer um tratamento teórico dos efeitos associados à presença de aceitadores rasos e recombinação radiativa em $QWWs$ à temperatura ambiente. A análise é baseada no cálculo quântico das taxas de transição de recombinação radiativa de elétrons que se recombinam da banda de condução com buracos livres e buracos ligados às impurezas aceitadoras, e o tratamento fenomenológico das taxas não radiativas associadas com transições que envolvem elétrons caindo em armadilhas, e elétrons presos recombinando-se com buracos livres. São obtidos também os diferentes tempos de recombinação radiativa e não radiativa elétron-buraco no estado estacionário, a dependência dos quase-níveis de Fermi de elétrons de condução e a densidade de portadores com respeito à intensidade do laser. Estudamos também as diversas eficiências de recombinação e de intensidade de fotoluminescência integrada em função da intensidade do laser. Finalmente, mostramos que os efeitos de armadilhas e de impurezas rasas são muito importantes no entendimento quantitativo da fotoluminescência de fios quânticos à temperatura ambiente no estado estacionário.

Este trabalho de tese é apresentado da forma seguinte: no segundo capítulo se faz um estudo teórico dos sistemas de baixa dimensionalidade, no terceiro capítulo se desenvolvem os cálculos das energias de ligação para fios quânticos cilíndricos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$. Um tratamento teórico de alguns mecanismos de recombinação radiativa e não radiativa, tais como recombinação de elétrons com buracos livres, com buracos ligados a impurezas aceitadores e com armadilhas é desenvolvido nos capítulos quatro e cinco. Finalmente, no capítulo seis apresentamos nossas conclusões finais e perspectivas futuras de trabalhos relacionados com a presente tese.

# Capítulo 2

# Fundamento Teórico: Sistemas de Baixa Dimensionalidade

Como se mencionou no capítulo anterior, o intenso progresso na fabricação de estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade desde poços quânticos até os pontos quânticos tem gerado uma análise das mudanças nas propriedades físicas destes sistemas causadas por efeitos do confinamento. Especialmente, mudanças na estrutura eletrônica e propriedades ópticas fazem com que estes sistemas semicondutores tenham uma ampla aplicação tecnológica em microeletrônica, óptica não linear e outros campos [39, 40].

Atualmente, grande parte dos materiais usados para a construção de sistemas de baixa dimensionalidade como fios quânticos e super-redes são materiais $III-V$ tais como $GaAs$, $InP$, chamados também compostos binários, junto com ligas ternárias como $Al_xGa_{1-x}As$ ou $Ga_xT_{1-x}As_yP_{1-y}$, onde as faixas de bandas proibidas destas ligas estão situadas entre aquelas dos compostos binários correspondentes. Podemos desta forma controlar a mudança na concentração $x$ em ligas como $Al_xGa_{1-x}As$ e por sua vez, ajustar continuamente o comportamento da estrutura eletrônica entre as camadas de $GaAs$ e $AlAs$.

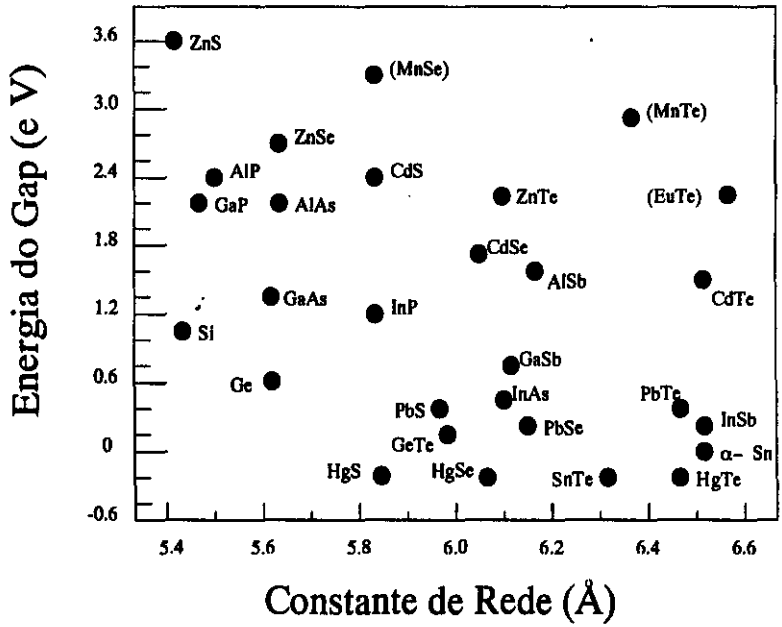



Fig. 2.1: Gap fundamental à temperatura ambiente de alguns cristais semicondutores, em função da constante de rede.

O comportamento da constante de rede cristalina com os "gaps" de energia para diferentes semicondutores elementares e binários mais importantes à temperatura ambiente pode ser observado na Figura 2.1 [40]. Aqui se mostra a possibilidade de construir camadas epitaxiais de boa qualidade para semicondutores onde suas constantes de rede não são muito diferentes. Um exemplo que cobre estas características é a epitaxia de $AlAs$ e $GaAs$ os quais podem produzir uma rede de excelente qualidade, devido ao fato de ter uma boa semelhança em suas estruturas de rede.

A representação teórica geral dos estados eletrônicos em fios quânticos consiste fundamentalmente numa extensão dos conceitos que são aplicados a poços quânticos, aos quais fazemos referência a seguir.

Os modelos mais conhecidos de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade são as estruturas de poços quânticos fabricados com camadas alternadas de diferentes materiais semicondutores. Um exemplo importante, que por sua vez serve

de exercício para nosso estudo, é a excitação externa destas estruturas por meio de um laser num regime apropriado de frequência, a qual gera pares elétron-buraco nas camadas dos materiais permitindo fazer estudos de absorção óptica e fotoluminescência.

Incentivados pelos resultados obtidos em poços quânticos [3, 41, 42], pesquisadores tem intensificado o trabalho em energias de ligação em sistemas de mais baixa dimensionalidade, especificamente em fios quânticos onde os elétrons estão confinados em duas dimensões[16].

Alguns autores tem realizado trabalhos experimentais e teóricos em propriedades ópticas e de transporte eletrônico em super-redes formadas por $QWWs$, os quais tem gerado ampla informação tanto no estudo destes fenômenos quanto aqueles nos quais se leva em conta a presença de campos externos[26, 29].

## 2.1 Heteroestruturas Semicondutoras

As heteroestruturas semicondutoras são formadas quando dois materiais semicondutores diferentes são unidos por meio de uma técnica de crescimento. Esta união faz com que a periodicidade da rede seja interrompida deixando o cristal sem sua repetição regular infinita de seus átomos constitutivos. Aqui assumimos que o potencial cristalino e consequentemente a estrutura eletrônica de cada material semicondutor não são alterados no plano da interface.

Ademais, é importante fazer menção que uma combinação arbitrária de semicondutores ou semicondutores e isolantes não necessariamente gera uma interface que seja de utilidade para a construção de mecanismos e dispositivos. A Figura 2.2 mostra esquemáticamente duas redes de materiais em bloco que se estão juntando e ajustando, um exemplo de interesse prático é a super-rede de $Si$ e $Ge$ onde suas

constantes de rede são pouco diferentes. Para o caso do presente trabalho, as estruturas de interface são aquelas nas que os materiais que a conformam são semelhantes, ou seja, aqueles onde a rede cristalina e sua estrutura são pouco diferentes. Particularmente, fazemos referência ao caso da deposição de camadas de $Ga_{1-x}Al_xAs$ no substrato de $GaAs$ que gera uma estrutura modulada com uma descontinuidade tipo degrau nas energias das bandas de valência e condução . A altura deste degrau depende da estrutura de bandas no material em bloco que conformam a heterojunção . Encontramos que os semicondutores que seguem a descrição anterior são mais simples de estudar.

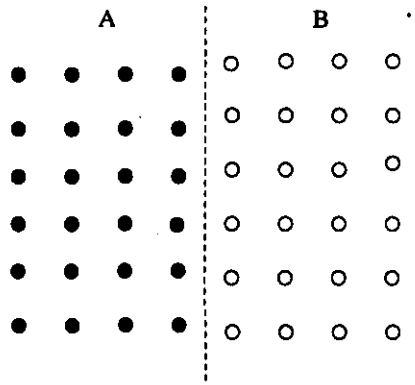



Fig. 2.2: Esquematização de uma interface, quando se tenta fazer uma formação de uma heterojunção de materiais $A$ e $B$, com uma rede de separação diferente. Se $B$ é crescido sobre $A$, esta rede se deve ligar no plano da interface, o que gera um aumento da tensão.

Um dos fatos mais importantes em heteroestruturas e super-redes é que o comportamento da energia de ligação , a condutividade elétrica e a absorção óptica podem ser controladas na construção das mesmas. Estas propriedades, como se estudará mais adiante, surgem como consequência dos efeitos quânticos da dimensionalidade da estrutura, específicamente quando a largura das camadas são comparáveis com o comprimento de onda de de Broglie do elétron.

## 2.2 Estados de Impurezas

Em materiais semicondutores, a maioria das propriedades eletrônicas mudam quando as temperaturas são baixas, sendo estas em alguns casos controladas por impurezas presentes nestes materiais. Uma das características mais importantes de uma impureza é sua energia de ionização . Ou seja, a energia necessária para movimentar um elétron de um nível doador para o fundo da banda de condu- - ção . Existem dois tipos de impurezas, doadoras e aceitadoras. Uma impureza é chamada doadora se ela fornece elétrons à banda de condução , o que facilita sua ionização no cristal, esta possue uma energia de magnitude $E_d$ localizada abaixo do fundo da energia da banda de condução $E_c$, que é pequena comparada com a magnitude do"gap", pelo qual chama-se impureza rasa. Por outro lado, uma impureza é aceitadora se possue a propriedade de capturar um elétron, virando assim um centro de carga negativa enquanto um buraco aparece na banda de valência. Estes níves aceitadores estão localizados no"gap" perto do máximo da banda de valência com uma energia $E_a$.

Estas impurezas nos semicondutores são responsáveis pela condutividade tipo-$p$, ou seja, feita por buracos. Estes dois tipos de impurezas são apresentadas na Figura 2.3. O fato de que estas impurezas sejam rasas faz que elas possam ser estudadas pelo modelo hidrogenóide. Ademais, a determinação de que uma impureza seja doadora ou aceitadora é feita em muitos casos só pela posição na tabela periódica [43]. Assim, semicondutores que geralmente são doadores como $Ge$ e $Si$ que estão no grupo $IV$ ou $P$, $Sb$ e $As$ que estão no grupo $V$ podem ser aceitadores ou doadores, dependendo do material que ocasionalmente for substití-lo.

Consideremos, por exemplo, um cristal puro de germânio e substituimos ocasionalmente um átomo de germânio por arsênio, então o íon de germânio de carga

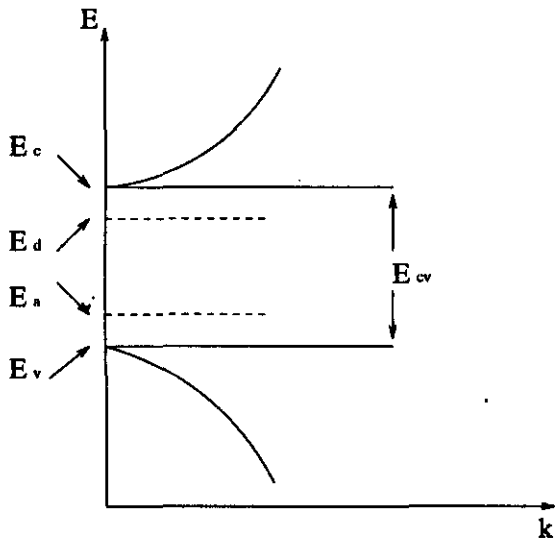



Fig. 2.3: Esquematização das bandas de valência, condução e níveis de impurezas rasas.

4e contribui com 4 elétrons para a banda de valência; por sua vez, o íon de arsênio tem carga 5e e contribui com 5 elétrons para a banda de valência. Se, em primeira aproximação , ignoramos a diferença entre as massas nucleares dos dois materiais, podemos agora representar a situação de um átomo de germânio de uma maneira muito menos drástica, na qual este átomo não é removido, mas apenas uma carga positiva adicional é colocada em seu redor (vide Fig. 2.4).

Também é importante analisar a proximidade dos níveis doador e aceitador, com relação ao fundo da banda de condução e ao máximo da banda de valência, respectivamente. Por exemplo, a proximidade do nível doador do fundo da banda de condução implica um excesso de elétrons fracamente ligados ao centro doador localizado longe do meio, o que significa que a estrutura atômica do centro de impureza tem uma pequena influência no estado do elétron extra que está ligado ao centro devido a que a carga positiva está localizada no centro. Podemos tratar o centro de impureza como uma carga pontual e assumir que o potencial central para o elétron em movimento é

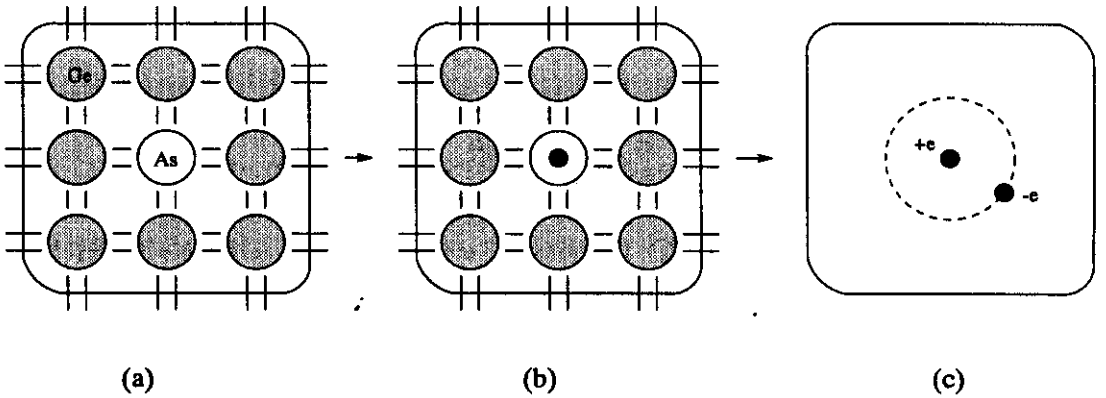



Fig. 2.4: (a) Representação esquemática de um doador raso substitucional, no caso de um átomo de arsênio (valência 5) num cristal de germânio (valência 4); (b) O átomo de arsênio ($As$) pode ser representado como um átomo de germânio mais uma carga positiva adicional; (c) A impureza ($As$) é tratada como um ponto de carga fixa $+e$, com um elétron $-e$ adicional.

$$U(r) = \frac{-e^2}{\varepsilon r}, \tag{2.1}$$

onde $r$ é a distância ao centro, $e$ é a carga do próton e $\varepsilon$ a constante dielétrica do material. A variação da permitividade dieletrica produz por exemplo, efeitos importantes na energia de ligação e nas propriedades ópticas e de transporte. Em outras palavras, o problema de ter uma impureza que seja afetada por este tipo de potencial pode ser estudado como o problema do "átomo de hidrogênio" só que aqui se substitui a constante dielétrica do vácuo por $\varepsilon$ e a massa $m_0$ por $m^*$ chamada de massa efetiva.

Note que num semicondutor a constante dielétrica é grande, o que de acordo com a definição do raio de Bohr faria que este aumente devido a que estes dois parámetros possuem uma relação direta. Isto implica que uma impureza hidrogenóide é 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.

As unidades nas que se trabalham são unidades reduzidas, que estão expressas

em termos do raio de Bohr e do Rydberg efetivo, os quais se definem como

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon_0}{m^* e^2}, \tag{2.2}$$

e

$$R_0^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \varepsilon_0^2}. \tag{2.3}$$

Para nosso trabalho, no caso do $GaAs$, as unidades são: massa efetiva para a banda de condução m* = 0.0665 $m_0$, $\varepsilon_0 = 12.58$ e o raio de Bohr correspondente é $R_0^* \approx 100$ Å.

A vantagem da utilização de unidades reduzidas é que utilizando estas unidades, mantên-se as grandezas na ordem da unidade, além de permitir comparações diretas com os limites hidrogenóides apresentados nesta seção .

Por outro lado, no que concerne a estrutura eletrônica em sistemas de baixa dimensionalidade, é importante fazer referência à relação que existe entre a magnitude do "gap" e as propriedades ópticas de tais sistemas. Consideramos por exemplo processos de absorção e emissão óptica que se sucedem e que estão caracterizados pela energia, comprimento de onda dos fótons emitidos, tempos de vida dos elétrons na banda de condução e pelo valor da transição óptica que é uma medida da probabilidade com que estas transições acontecem.

Assumiremos ao longo deste trabalho que as impurezas aceitadoras desempenham um papel importante de forma tal que elas mostram a diferença da resposta do sistema quando temos um sistema não dopado e um altamente dopado.

Nos capítulos 4 e 5 vamos utilizar alguns destes parâmetros para descrever o comportamento de um fio quântico submetido à presença de um laser de onda continua ($c\omega$) tendo em conta mudanças na densidade de portadores, tempos de vida

em função da temperatura, dopagem e largura do poço de confinamento. Também assumiremos que nossos cálculos não levam em processos excitônicos.

# Capítulo 3

# Energias de Ligação de Impurezas Rasas em Fios Quânticos de GaAs-(Ga,Al)As

Como comentamos na introdução , os rápidos progressos tecnológicos em dispositivos semicondutores nas duas décadas passadas têm trazido como consequência desenvolvimentos experimentais e teóricos surpreendentes em todas as áreas da física do estado sólido. Especificamente no estudo de propriedades físicas tais como ópticas, de transporte, e energias de ligação em sistemas de baixa dimensionalidade, consideram-se os mais diversos efeitos físicos como campos elétricos e magnéticos, variação da constante dielétrica, confinamento quântico, etc. Isto tem revelado que tais sistemas apresentam mudanças fundamentais das observadas nos materiais em bloco. De forma semelhante, a presença de impurezas e defeitos em semicondutores têm contribuído com uma série de efeitos significativos nas propriedades físicas destes materiais. Desta forma, o avanço tecnológico de semicondutores tem sido preliminarmente determinado pela habilidade em controlar as impurezas ou defeitos. Atualmente, o estudo de defeitos nestes sistemas é considerado um tema de pesquisa bastante importante.

Neste trabalho se apresenta o cálculo da energia de ligação para impurezas hidro-

genóides doadoras e aceitadoras em fios quânticos cilíndricos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ ($QWW$). O cálculo destas energias se faz em função do raio do fio quântico e das diferentes posições da impureza ao longo do raio do fio. Aqui, se usa o método variacional e a aproximação da massa efetiva. Neste capítulo, reproduzimos todos os cálculos analíticos e numéricos ja realizados por Porras-Montenegro [16], e que serão largamente utilizados no decorrer deste trabalho de tese.

O método variacional é adotado para se determinar a energia do estado fundamental já que o hamiltoniano do sistema leva em conta a interação coulombiana da impureza com o elétron e não apresenta solução exata. Esta dependência coulombiana, permite observar o comportamento destas energias quando a posição da impureza muda ao longo da direçao de crescimiento. A função de onda variacional ou função tentativa é tal que minimiza o valor esperado da energia, e inclue o termo da parte hidrogenóide [3] que resolve a equação de Bessel que se apresenta.

A aproximação da massa efetiva que é incluída no hamiltoniano foi desenvolvida na decada de 50 e é amplamente usada para descrever a formação de níveis rasos introduzidos pelas impuresas. Esta aproximação assume que a função de onda da partícula pode ser escrita como o produto da função envelope é a função de onda de Bloch [3, 44]. Esta aproximação só é valida se a função envelope varia suavemente na célula unitária.

Neste capítulo, estudamos a dependência da energia de ligação em função da posição da impureza e o raio do fio usando um poço de confinamento finito. Os cálculos são feitos em unidades reduzidas que se expressam em termos do raio de Bohr, os quais já foram descritos no capítulo 2 . As unidades usadas são $a_0^* = 100$ Å, $R_0^* = 5.72\ meV$ para doadores e $a_0^* = 22.4$ Å, $R_0^* = 26\ meV$ para aceitadores.

Na primeira seção apresentamos a descrição teórica do problema das energias de ligação , na segunda os resultados e discussão e na terceira as conclusões.

## 3.1 Modelo de Confinamento Finito

O hamiltoniano na aproximação da massa efetiva que descreve o comportamento das impurezas rasas hidrogenóides para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ é

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\varepsilon_0[(\rho - \rho_i)^2 + z^2]^{1/2}} + V(\rho), \tag{3.1}$$

onde $m^*$ é a massa efetiva do elétron, $\varepsilon_0$ a constante dielétrica do material do fio, $z$ é a separação relativa do portador à impureza ao longo do eixo do fio, $\rho_i$ a posição da impureza ao longo da direção $\widehat{\rho}_i$ perpendicular ao eixo do fio e $V(\rho)$ o potencial de confinamento finito que se expressa assim:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq R \\ \\ V_0, & \rho \geq R. \end{cases} \tag{3.2}$$

### 3.1.1 Ausência de Impurezas

Na ausência de impureza, não há interação coulombiana desta com o elétron o que faz com que o hamiltoniano da eq. 3.1 se reduza à forma do hamiltoniano

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(\rho), \tag{3.3}$$

que pode ser resolvido de forma exata com uma auto função de onda que se expressa por (vide apêndice $A$)

$$\psi(r) = N_2 \begin{cases} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} e^{il\theta} J_l(r_{nl}\rho), & \rho \leq R \\ \\ \frac{J_l(r_{nl}R)}{K_l(b_{nl}R)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} K_l(r_{nl}\rho), & \rho \geq R. \end{cases} \tag{3.4}$$

Neste caso assume-se que a função de onda e sua derivada normal são contínuas nas interfaces, e encontra-se

$$r_{nl} = \sqrt{\frac{2mE_{nlk}}{\hbar^2} - k^2} \tag{3.5}$$

e

$$b_{nl} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E_{nlk})}{\hbar^2} + k^2} \cdot \tag{3.6}$$

A constante de normalização se expressa por

$$N_2^{-2} = \pi L R^2 \left( \frac{K_{l-1}(b_{nl}R)K_{l+1}(b_{nl}R)J_l^2(r_{nl}R)}{K_l^2} - J_{l-1}(r_{nl}R)J_{l+1}(r_{nl}R) \right), \tag{3.7}$$

onde

$$r_{nl} \left. \frac{dJ_l(r_{nl}\rho)}{d(r_{nl}\rho)} \right|_{\rho=R} = b_{nl} \frac{J_l(r_{nl}R)}{K_l(b_{nl}R)} \left. \frac{dK_l(b_{nl}\rho)}{d(b_{nl}\rho)} \right|_{\rho=R} \cdot \tag{3.8}$$

As funções especiais $J_l$, $I_l$ e $K_l$ são funções de Bessel ordinárias que se transformam em $J_0$, e $I_0$, $K_0$ quando $n = 0$ (estado fundamental) e são chamadas de funções de Bessel ordinárias de ordem zero e modificadas de ordem zero de primeira e segunda classe, que são as funções com que vamos trabalhar neste capítulo.

Os autovalores de energia correspondentes à função de onda eq. 3.4 são dados por

$$E_{nlk} = \frac{\hbar^2}{2m}(r_{nl}^2 + k^2) \cdot \tag{3.9}$$

### 3.1.2 Presença de Impurezas

A inclusão do potencial de confinamento da impureza no hamiltoniano implica o uso do método variacional para encontrar as funções próprias aproximadas do novo hamiltoniano e os valores próprios correspondentes.

A função de onda correspondente para o fio quântico cilíndrico com este potencial é

$$\psi(r) = N_3(\rho_i, \lambda, R) \begin{cases} J_0(r_{10}\rho) exp\{-\lambda[(\rho-\rho_0)^2 + z^2]^{1/2}\}, & \rho \leq R \\ \\ \frac{J_0(r_{10}R)}{K_0(b_{10}R)} K_0(b_{10}\rho) exp\{-\lambda[(\rho-\rho_0)^2 + z^2]^{1/2}\}, & \rho \geq R. \end{cases} \tag{3.10}$$

Observamos que esta função está em termos de um parâmetro variacional $\lambda$ e além disso possui uma constante de normalização $N_3$ que por sua vez depende dos parâmetros de confinamento do sistema.

A constante de normalização neste caso é (vide apêndice $A$)

$$N_3(\rho_i, \lambda, R) = -2\pi \frac{d}{d\lambda}(H + M), \tag{3.11}$$

com

$$H = \int_0^R \rho J_0^2(r_{10}\rho) I_0(2\lambda\rho_<) K_0(2\lambda\rho_>) d\rho, \tag{3.12}$$

e

$$M = \frac{J_0^2(r_{10}R)}{K_0(b_{10}R)} \int_0^R \rho K_0^2(b_{10}\rho) I_0(2\lambda\rho_<) K_0(2\lambda\rho_>) d\rho \cdot \tag{3.13}$$

A energia de ligação $E_b(R, \rho_0)$ da impureza hidrogenóide se define como a diferença das energias do estado fundamental sem a presença da impureza e com a impureza $\varepsilon(R, \rho_i)$, ou seja,

$$E_b(R, \rho_i) = \frac{\hbar^2 k_{10}^2}{2m} - \varepsilon(R, \rho_i) \cdot \tag{3.14}$$

A energia em presença da impureza é $\varepsilon(R, \rho_i) = \langle T \rangle + \langle V \rangle$, e os valores esperados da energia cinética e potencial são:

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} - \frac{\pi \hbar^2 N_3^2(R, \rho_i, \lambda)}{m} \frac{d}{d\lambda}(r_{10}^2 H - b_{10}^2 M) \tag{3.15}$$

e

$$\langle V \rangle = -\frac{4\pi e^2 N_3^2(R, \rho_i, \lambda)}{\varepsilon}(H + M) - 2\pi V_0 N_3^2(R, \rho_i, \lambda)\frac{dM}{d\lambda} \cdot \tag{3.16}$$

Desta forma, a energia de ligação pode ser escrita como

$$E_b(y, t_0) = -(\lambda a_0^*)^2 - \frac{4a_0^*(Q + P)}{(d/d\lambda)(Q + P)}, \tag{3.17}$$

onde

$$Q = \int_0^1 t J_0^2(xt) I_0(2\lambda a^* y t_<) K_0(2\lambda a^* y t_>) dt \tag{3.18}$$

e

$$P = \frac{J_0^2(x)}{K_0^2(cx)} \int_1^\infty t K_0^2(ctx) I_0(2\lambda a^* y t_<) K_0(2\lambda a^* y t_>) dt \cdot \tag{3.19}$$

Aqui usamos $t = \rho/R$ e $t_i = \rho_i/R$ com $x = r_{10}R$ e $c$ é dado por

$$c = \sqrt{\frac{2mV_0}{r_{10}^2 \hbar^2} - 1} \cdot \tag{3.20}$$

## 3.2 Resultados e discussão

Nestes cálculos, ignoram-se mudanças tanto na massa efetiva quanto na constante dielétrica e se considera unicamente os valores correspondentes ao $GaAs$ em toda a heteroestrutura. Assumimos que a descontinuidade da banda proibida na interface da heteroestrutura de $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$ está distribuída aproximadamente 40% na banda de valência e 60% na banda de condução com $\Delta\ E_g(eV) = 1.247x$, para $x <$ 45% [16, 45]. Aqui não se leva em conta o acoplamento das bandas de valência em $GaAs$ [16, 46].

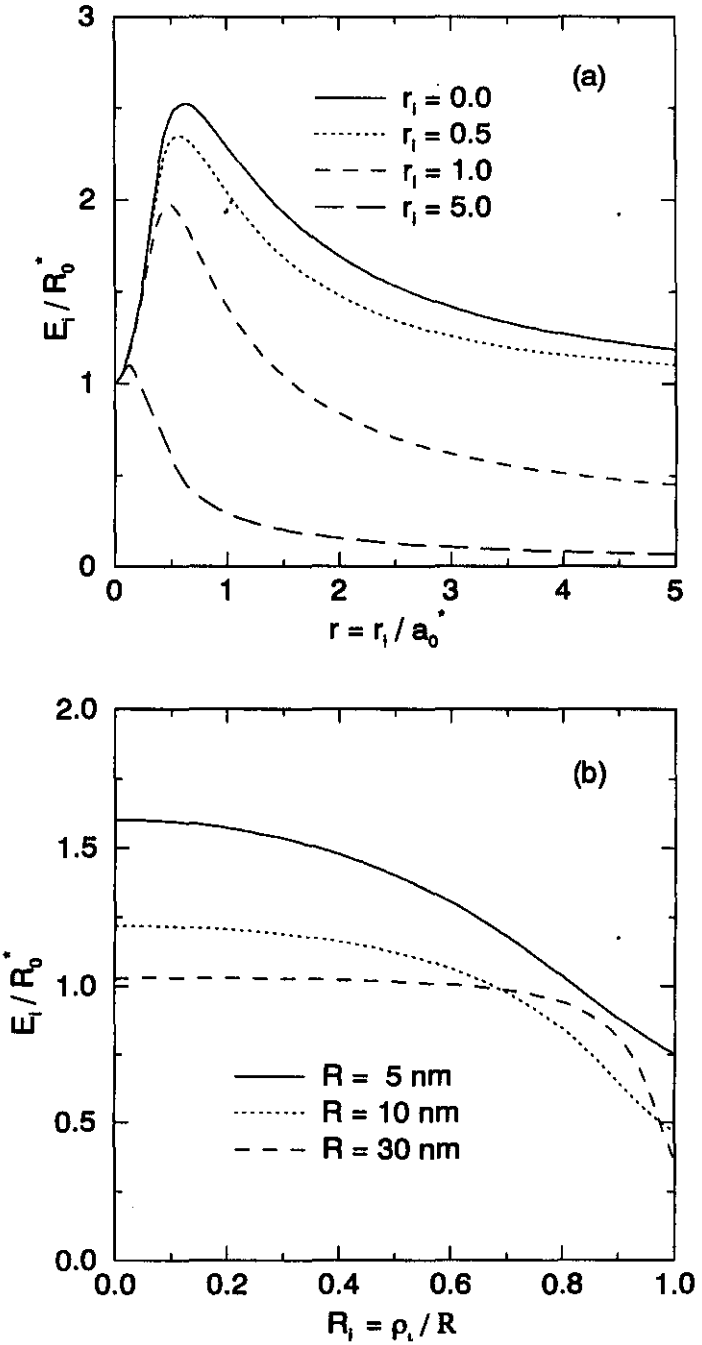



Fig. 3.1: Energias de ligação de uma impureza aceitadora em função do raio do fio quântico (*a*) e da posição da impureza (*b*).

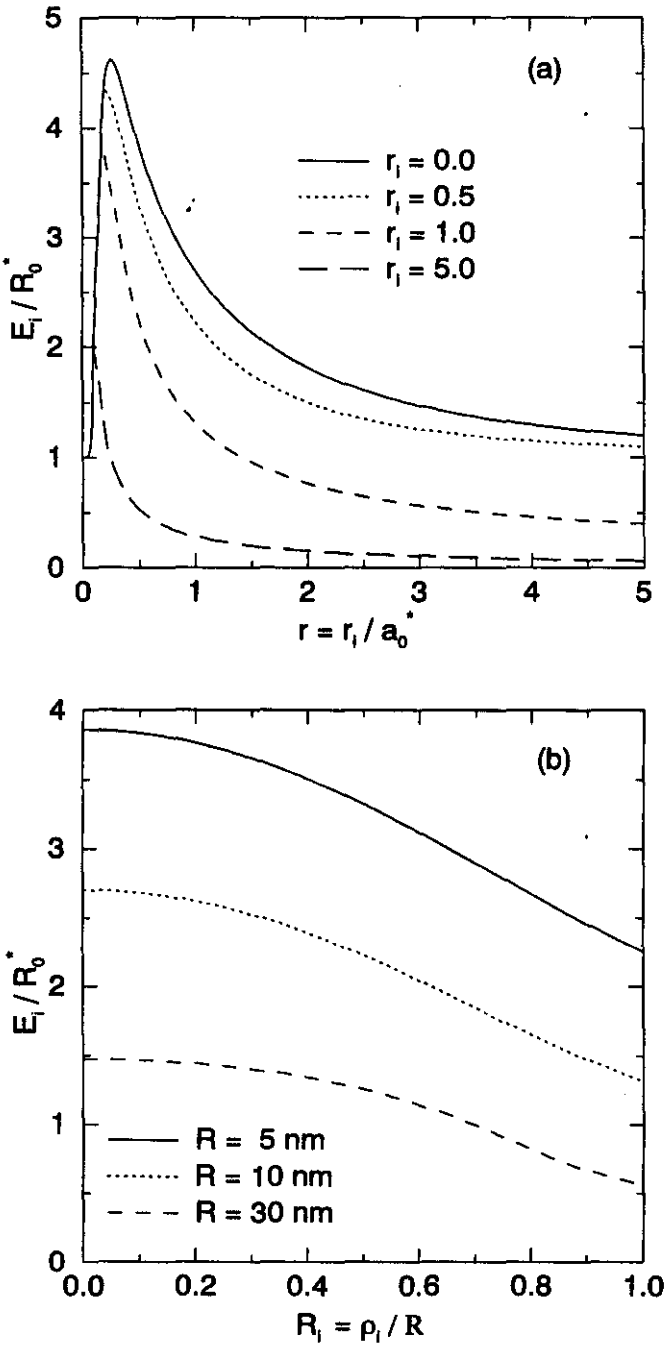



Fig. 3.2: Energias de ligação de uma impureza doadora em função do raio do fio quântico (a) e posição da impureza (b).

As figuras 3.1 e 3.2 mostram as energias de ligação de impurezas aceitadoras e doadoras para fios quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$. Estas figuras apresentam resultados das energias tanto para diferentes posições da impureza com mudança contínua do raio do poço de confinamento ( Fig 3.1$a$), quanto para uma mudança da posição da impureza e um valor único do raio do poço de confinamento ( Fig 3.2$a$).

Nas Figuras 3.1$a$ e 3.2$a$ observamos que, para uma posição fixa da impureza, a energia de ligação aumenta quando o raio do poço diminui atingindo um valor máximo para um raio determinado. Por outro lado, encontramos que os valores das energias de ligação das impurezas aceitadoras são maiores que os da impureza doadora. Esta diferença é causada pela diferença nos raios de Bohr e nos valores do Rydberg efetivo para cada caso ($\approx$ 100Å e $\approx$ 5.7 $meV$ para doadores; $\approx$ 22 Å e $\approx$ 26 $meV$ para aceitadores).

Nas figuras 3.1$b$ e 3.2$b$ as energias de ligação para o caso de um raio do fio quântico fixo em função da posição da impureza. Observamos que estas energias são maiores quando o raio do poço de confinamento é menor. Para um raio do potencial de confinamento fixo, esta energia de ligação aumenta se a impureza se movimenta para o centro do poço, adquirindo um valor máximo quando a impureza está no centro do mesmo. O caso inverso acontece se a impureza se afasta do centro para as bordas do poço.

## 3.3 Conclusões

Foram feitos os cálculos da energias de ligação para impurezas rasas num fio quântico de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, tanto para uma impureza localizada no raio do fio quanto ao longo dele. Estes cálculos foram feitos seguindo o método variacional na aproximação da massa efetiva.

Para um poço de confinamento finito se encontrou que a energia de ligação aumenta quando o raio do fio ($QWW$) diminue atingindo um valor máximo para um determinado valor do raio.

Encontramos que o forte confinamento eletrônico em $QWWs$ faz com que a energia de ligação destas impurezas sejam consideravelmente maiores que as encontradas em um poço quântico ($QW$) de $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$ de dimensões compáraveis.

Nossos resultados indicam que o conhecimento do comportamento das energias de ligação pode ser importante no estudo de propriedades ópticas tal como fotoluminescência. Parâmetros como a densidade de portadores e os tempos de recombinação desempenham um papel inportante nestes resultados.

# Capítulo 4

# Fotoluminescência de Fios Quânticos Incluindo Impurezas Rasas†

A interação da radiação eletromagnética com a matéria condensada é um dos campos mais estudados na física do estado sólido. Esta denominação geral inclui a classe de processos quânticos que envolvem partículas carregadas num potencial periódico perturbado por um campo eletromagnético externo.

Em física de semicondutores os campos externos são usados como uma prova sensível para induzir transições eletrônicas entre diferentes estados do cristal [26]. Desta forma quando um sistema físico é irradiado por luz a um estado de não equilíbrio, a radiação óptica emitida é chamada fotoluminescência [47]. Neste caso, três processos tem que ser levados em conta: a criação de pares elétron-buraco ($e$-$h$) pela absorção da luz excitante, a recombinação radiativa de pares elétron-buraco e a recombinação não radiativa.

Nós trabalhamos com um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ ($QWW$) isolado, de raio $R = 5\ nm$ que é excitado por um laser de onda contínua ($cw$) em uma experiência

†Parte do assunto abordado neste capítulo já foi publicada em Phys. Rev. B **53**, 12985 (1996).

de fotoluminescência (vide Fig. 4.1). Levamos em conta diferentes concentrações de impurezas aceitadoras $N_A = 0$, $10^{16}$ e $10^{17}/cm^3$ como canais de recombinação radiativa. Usamos a aproximação da massa efetiva e o modelo de banda parabólica para descrever elétrons e buracos. Consideramos a banda de buracos pesados com massa efetiva esférica $m_v \approx 0.3 \times m_0$, onde $m_0$ é a massa do elétron livre, o que corresponde a uma energia de ligação de impureza aceitadora no "bulk" de 26 $meV$.

Neste estudo teórico desprezamos o efeito de acoplamentos das bandas de valência [25] tanto para o $GaAs$ quanto para o $(Ga, Al)As$, não levamos em conta processos Auger e efeitos excitônicos e de difusão que podem ser importantes a baixas temperaturas [27].

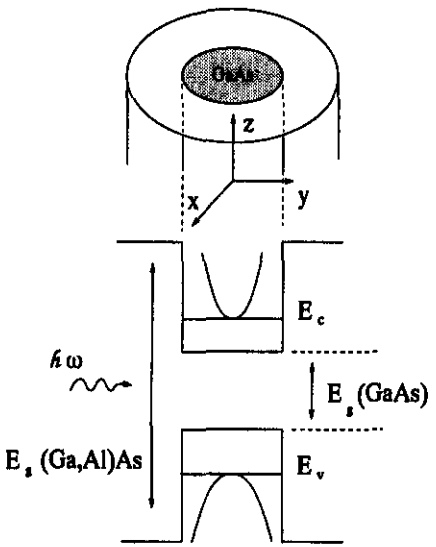



Fig. 4.1: Esquematização de um fio quântico e sua estrutura de bandas no estado fundamental.

A proposta deste estudo é fazer um desenvolvimento teórico de alguns mecanismos de recombinação radiativos tais como a recombinação de elétrons com buracos livres e buracos ligados às impurezas aceitadoras em condições de estado estacionário levando em conta a intensidade do laser de *cw*, o raio do fio quântico, a distribuição de impurezas aceitadoras e diferentes temperaturas. Da mesma forma, descrevemos

o comportamento dos quase-níveis de Fermi e dos tempos de recombinação .

Na primeira parte apresentamos o modelo téorico que descreve os processos de absorção e fotoluminescência no $QWW$ em condições de quase-equilíbrio. Na segunda parte temos os resultados e discussões e na terceira as conclusões.

## 4.1 Modelo teórico

Devido à excitação feita pelo laser de onda contínua ($cw$) se obtém como resultado uma distribuição não homogênea e não equilibrada de pares $e$-$h$.

A equação que descreve a mudança na densidade de elétrons por unidade de tempo por unidade de comprimento $n - e$ levando em conta a absorção da luz excitadora é

$$\frac{dn_e}{dt} = \omega_A - \omega_{cv} - \omega_{cA}, \tag{4.1}$$

onde $\omega_A$, $\omega_{cv}$ e $\omega_{cA}$ são as taxas por unidade de comprimento e de tempo da absorção e da recombinação radiativa com buracos livres e buracos ligados às impurezas rasas, respectivamente.

No estado estacionário a situação de equilíbrio para a densidade de elétrons na banda de condução ocorre quando a taxa de criação de pares $e$-$h$ fotoexcitados é igual à taxa de recombinação radiativa e não radiativa de $e$-$h$

$$\omega_A = \omega_{cv} + \omega_{cA} \cdot \tag{4.2}$$

A solução desta equação (eq. 4.2) gera uma equação transcendental da densidade de elétrons com intensidade do laser ($I$), a qual se resolve numericamente.

Para calcular as diferentes taxas de transição expressas anteriormente, usamos a regra de ouro de Fermi [47, 39]

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} |< f \mid H_{int} \mid i >|^2 \, \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \tag{4.3}$$

onde $i$ e $f$ representam os estados inicial e final que podem ser, por exemplo, as bandas de valência e condução , respectivamente. O termo $H_{int} = \frac{eA_0}{m_0 c}\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}$, envolve o campo elétrico da onda eletromagnética que está caracterizada por uma frequência angular $\omega$, o vetor de propagação $\mathbf{q}$, a energia do fóton $\hbar\omega$, a carga do elétron livre $e$, a massa do elétron livre $m_0$, $A_0$ que é a amplidude do vetor potencial, $\hat{\varepsilon}$ que é o vetor de polarização na direção do campo elétrico da radiação e $\mathbf{p}$ o momentum do elétron.

As transições da primeira sub-banda de valência ($n = 1$) à primeira sub-banda de condução ($n = 1$), são feitas levando em conta a soma dos efeitos de spin com o campo perpendicular ao eixo de simetria do $QWW$.

A taxa de absorção interbanda de elétrons por unidade de comprimento e de tempo é (vide apêndice $B$)

$$\omega_A = \frac{4\pi\hbar\alpha_f\sqrt{2\mu_{c,v}}(\frac{P_{cv}^2}{2})}{\eta(\omega)m_0^2(\hbar\omega)^2} I|\langle f_c(\rho)|f_v(\rho)\rangle|^2 \frac{\theta(\hbar\omega - \varepsilon_{eff})}{\sqrt{\hbar\omega - \varepsilon_{eff}}}, \tag{4.4}$$

onde $\alpha_f$ é a constante de estrutura fina, $\mu_{cv}$ é a massa reduzida das banda de valência e condução , $\eta(\omega)$ é o índice de refração , $P_{cv} = \langle$ s $|\mathrm{p}_x|$ x $\rangle$ é o elemento de matriz interbanda, $\theta(x)$ é a função degrau, $I$ é a intensidade do laser, $|\langle f_c(\rho)|f_v(\rho)\rangle|^2$ é o overlap entre as funções de onda envelope do elétron e buraco no $QWW$, $\varepsilon_{eff} = E_c + E_v + E_g$ é o "gap" efetivo, onde $E_c$, $E_v$ e $E_g$ são respectivamente o mínimo da banda de condução , o máximo da banda de valência e a energia do "gap" (vide apêndice $B$).

A recombinação espontânea dos elétrons da sub-banda de condução ($n$=1) com os buracos da sub-banda de valência ($n = 1$) envolve fótons com vetores de onda $\mathbf{q}$

que se somam no espaço, nas duas direções de polarização . Desta forma, a taxa de recombinação de elétrons com buracos livres, ou seja, o coeficente de emissão espontânea se expressa por (vide apêndice $B$):

$$\omega_{cv} = \frac{4\pi e^2}{m_0^2} \sum_{\lambda} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{|\langle f_v(\rho)|f_c(\rho)\rangle|^2}{\eta(\omega)\omega} \frac{P_{cv}^2}{2} [\varepsilon_{\lambda x}^2 + \varepsilon_{\lambda y}^2] \times$$
$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dk\, n_c(k) n_v(k) \delta[\frac{\hbar^2}{2\mu_{c,v}} - (\hbar\omega - \varepsilon_{eff})], \tag{4.5}$$

onde $\lambda$ está associado com as duas direções de polarização $\varepsilon_{\lambda x}$ e $\varepsilon_{\lambda y}$ que são as componentes correspondentes do vetor unitário de polarização , $\omega = c\mathbf{q}/\eta$ que é a frequência do fóton emitido com $\mathbf{q}$ que é o vetor de onda (vide apêndice $B$), $n_c(k)$ é o número de ocupação dos elétrons na sub-banda de condução que se expressa como

$$n_c(k) = \frac{1}{e^{\beta[\varepsilon_c(k)-(\mu_e - E_c)]} + 1} \quad com \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \tag{4.6}$$

que inclue o potencial químico, $\mu_e$, a energia cinética associada ao elétron ao longo do eixo $z$ no $QWW$, $\varepsilon_c$(k), o mínimo da banda de condução $E_c$ e a temperatura $T$. Uma expressão semelhante pode ser obtida para o número de ocupação dos buracos na sub-banda de valência $[n_v(k)]$.

Para resolver o presente problema é preciso conhecer as densidades de elétrons e buracos no caso do $QWW$, as quais obedecem a estatística de Fermi-Dirac e não podem ser resolvidas analiticamente. Estas densidades se expressam em termos da integral de Fermi-Dirac ($F$-$D$) que é possível resolver em forma exata em alguns casos limites, não degenerado e degenerado.

A densidade de elétrons por unidade de comprimento é

$$n_e = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} n_c(k) dk \cdot \quad . \tag{4.7}$$

Introduzindo

$$x = \frac{\beta\hbar^2 k^2}{2m_c}, \; t = \beta\mu_e, \tag{4.8}$$

temos

$$\frac{n_e}{n_0} = \int_0^{\propto} dx \frac{x^{-1/2}}{e^{(x-t)}+1}, \tag{4.9}$$

onde a densidade de portadores em estado de equilíbrio, $n_0$, se expressa como

$$n_0 = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2m_c k_B T}{\hbar^2}} \approx 6.78 \times 10^5 \sqrt{k_B T} \cdot \tag{4.10}$$

Desta forma, os casos não degenerado e degenerado são

$$(1) \;\; |t| \gg 1, \;\; n_e = n_0\sqrt{\pi}e^t$$

$$(2) \;\; t \gg 1, \;\; n_e = 2n_0\sqrt{t} \cdot \tag{4.11}$$

No primeiro caso, a energia de Fermi toma valores pequenos de maneira que a estatística de Maxwell-Boltzmann é satisfeita e no segundo, os portadores se comportam de acordo com a estatística de Fermi-Dirac. Em nossos resultados poderemos observar estes comportamentos nos limites de baixas e altas intensidades do laser, respectivamente.

De forma semelhante para a densidade de buracos,

$$n_h = 2\int_{-\propto}^{\propto} \frac{1}{2\pi} n_v(k) dk, \tag{4.12}$$

com

$$y = \frac{\beta\hbar^2 k^2}{2m_v}, \; t' = \beta\mu_h, \tag{4.13}$$

$$\frac{n_h}{n_0} = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \int_0^\infty dy \frac{y^{-1/2}}{e^{(y-t')}+1}, \tag{4.14}$$

e

$$(1) \;\; |t|' \gg 1, \;\; n_v = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} n_0 e^{t'}$$

$$(2) \;\; t' \gg 1, \;\; n_v = \frac{2}{\sqrt{\gamma}} n_0 \sqrt{t'} \, . \tag{4.15}$$

Com estas novas expressões para as densidades de elétrons e buracos $n_e(k)$ e $n_v(k)$, podemos reescrever a taxa de recombinação com buracos livres como,

$$\omega_{cv} = \frac{16}{3} \alpha_f \frac{\varepsilon_{eff}}{\hbar} \frac{\eta(\varepsilon_{eff})(\frac{P_{cv}^2}{2})}{m_0^2 c^2} |\langle f_c(\rho)|f_v(\rho)\rangle|^2 n_0 Q(n_e, n_h) \tag{4.16}$$

onde a expressão

$$Q(n_e, n_h) = \int_0^\infty dx \frac{[1 + \frac{k_B T}{\varepsilon_{eff}}(1+\gamma)x^2]}{[\delta e^{x^2}+1][\sigma e^{\gamma x^2}+1]} \tag{4.17}$$

leva em conta o fator $\gamma = m_c/m_v$ que relaciona as massas efetivas e os parâmetros $\delta$ e $\sigma$ que dão uma medida do potencial químico de elétrons e buracos em unidades de $k_B T$ em termos das bordas das bandas de condução e de valência

$$\delta = e^{-(\beta\mu_e)}$$

$$\sigma = e^{-(\beta\mu_h)} \, . \tag{4.18}$$

Aqui os quase-níveis de Fermi $\mu_e$ e $\mu_h$, são medidos da borda da sub-banda de condução (valência) $n = 1$.

Por outro lado, podemos dizer que as quantidades $n_0$ e $n_0/\gamma$ definem essencialmente as condições do comportamento das densidades de elétrons e buracos nos regimes não degenerado ($n_e \ll n_0$, $n_h \ll n_0/\gamma$) e degenerado ($n_e \gg n_0$, $n_h \gg n_0/\gamma$).

O caso não degenerado $n_{e,h} \ll n_0$ é identificado quando temos intensidades do laser muito baixas, tais que $I \ll I_0$, onde $I_0$ se expressa por:

$$I_0 = \frac{2\eta^2(\varepsilon_{eff})\omega^2(\frac{\varepsilon_{eff}}{\hbar})}{3\pi^2 c^2}\sqrt{\hbar\omega - \varepsilon_{eff}}\sqrt{(1+\gamma)k_B T}, \tag{4.19}$$

expressão obtida quando a taxa de absorção é igual à taxa de recombinação com buracos livres, $\omega_A = \omega_{cv}$.

O segundo caso, $n_{e,h} \gg n_0$, se obtém para valores de intensidades do laser maiores que $I_0$.

Para baixas intensidades do laser é importante o processo de emissão de fótons já que existe recombinação dos elétrons com buracos ligados às impurezas aceitadoras.

Assumindo que temos uma certa distribuição de aceitadores no interior do fio de $GaAs$ e procedendo de forma semelhante como na recombinação com buracos livres, a taxa de recombinação radiativa por unidade de comprimento dos elétrons com buracos ligados às impurezas aceitadoras é (vide apêndice $B$)

$$\omega_{cA} = \frac{32}{3\hbar}N_A\alpha_f\frac{n(\varepsilon_{eff})(\frac{P_{cv}^2}{2})}{m_0^2c^2}\int_0^R \rho_i d\rho_i J_{cA}(\lambda,\rho_i)n_A[E_A(\rho_i)]P(\rho_i), \tag{4.20}$$

com

$$J_{cA}(\lambda,\rho_i) = \frac{N^2(\lambda,\rho_i)}{N_v^2}\int_{-\infty}^{\infty} dk n_c(k)|K(\rho_i,\lambda,k)|^2[\frac{\hbar^2k^2}{2m_c} + \varepsilon_{eff} - E_A(\rho_i)] \tag{4.21}$$

e

$$K(\rho_i, \lambda, k) = \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} f_v(\rho) e^{\frac{-|\mathbf{r}-\rho_i|}{\lambda}} f_c(\rho), \tag{4.22}$$

onde $N_A$ é a densidade de aceitadores, $P(\rho_i)$ é a probabilidade de distribuição de aceitadores que assumimos constante, $P(\rho_i) = 1$. Temos ainda que

$$n_A[E_A(\rho_i)] = \frac{2}{2 + \sigma e^{[-E_A(\rho_i)/k_B T]}} \tag{4.23}$$

é a probabilidade da distribuição de ter um buraco ligado a um aceitador na posição $\rho_i$, com uma energia de ligação $E_A(\rho_i)$. $N(\lambda, \rho_i)$ e $\lambda$ são a constante de normalização e o parâmetro variacional da função de onda envelope do aceitador. $N_v$ é o fator de normalização da função de onda envelope associada com a primeira sub-banda de valência.

Por outro lado, o número de buracos livres na sub-banda de valência pode ser obtido a partir da equação de conservação de carga

$$n_h = n_e + 2\pi N_A \int \rho_i d\rho_i \{1 - n_A[E_A(\rho_i)]\} P(\rho_i), \tag{4.24}$$

que relaciona a densidade de elétrons na sub-banda de condução e os aceitadores ionizados com a concentração total de buracos. Quando esta equação se resolve simultaneamente com a eq. 4.1 podemos obter informação do comportamento da densidade de portadores, dos quase-níveis de Fermi de elétrons e buracos e dos tempos de decaimento radiativos em função da intensidade do laser.

Denotamos $T_{cv} = n_e/\omega_{cv}$ e $T_{cA} = n_e/\omega_{cA}$ como os tempos de vida da recombinação do elétron com buracos livres e de recombinação com buracos ligados a impurezas aceitadoras, respectivamente e $T_{tot}$ como o tempo total de decaimento, que se expressa por

$$\frac{1}{T_{tot}} = \frac{1}{T_{cv}} + \frac{1}{T_{cA}}. \tag{4.25}$$

Estes tempos de vida radiativos correspondem a processos de recombinação da densidade de portadores da banda de condução com os níveis de impureza ou com a banda de valência que por sua vez dependem da intensidade do laser.

Existem evidências experimentais do comportamento da densidade de portadores e dos quase-níveis de Fermi em fios quânticos retangulares onde a área da seção retangular é grande comparada com a área de nossos $QWW$.

## 4.2 Resultados e discussão

Os resultados de fotoluminescência ($PL$) no estado estacionário foram feitos para um fio quântico de $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$, assumindo que a descontinuidade do "gap" na heteroestrutura é de 60% (40%) na banda de condução (valência) com uma diferença do "gap" $\Delta E_{eff}(eV)$=1.247$x$, onde $x$ representa a concentração de aluminio ($Al$). Usamos $\eta(\omega) \approx 3.5$ como índice de refração e um "gap" de energia

$$E_g(eV) = \frac{1.519 - 5.405 \times 10^{-4} T^2(K)}{T(K) + 204}, \tag{4.26}$$

sendo $T$ a temperatura absoluta e $E_g(eV)$ o "gap" do material em bloco de $GaAs$ [48].

Nossos cálculos foram feitos para o raio típico do fio, $R = 50$ Å, nas temperaturas $T = 2\ K$ e $T = 300\ K$, com uma concentração de aluminio $x = 0.3$, e uma energia do laser $\hbar\omega = 1.75\ eV$. As concentrações de impurezas por unidade de volume consideradas foram $N_A = 0, 10^{16}$ e $10^{17}/cm^3$. Definimos a concentração de impurezas aceitadoras por unidade de comprimento como $N_A^L = SN_A$, onde $S$ é a área da seção reta do fio.

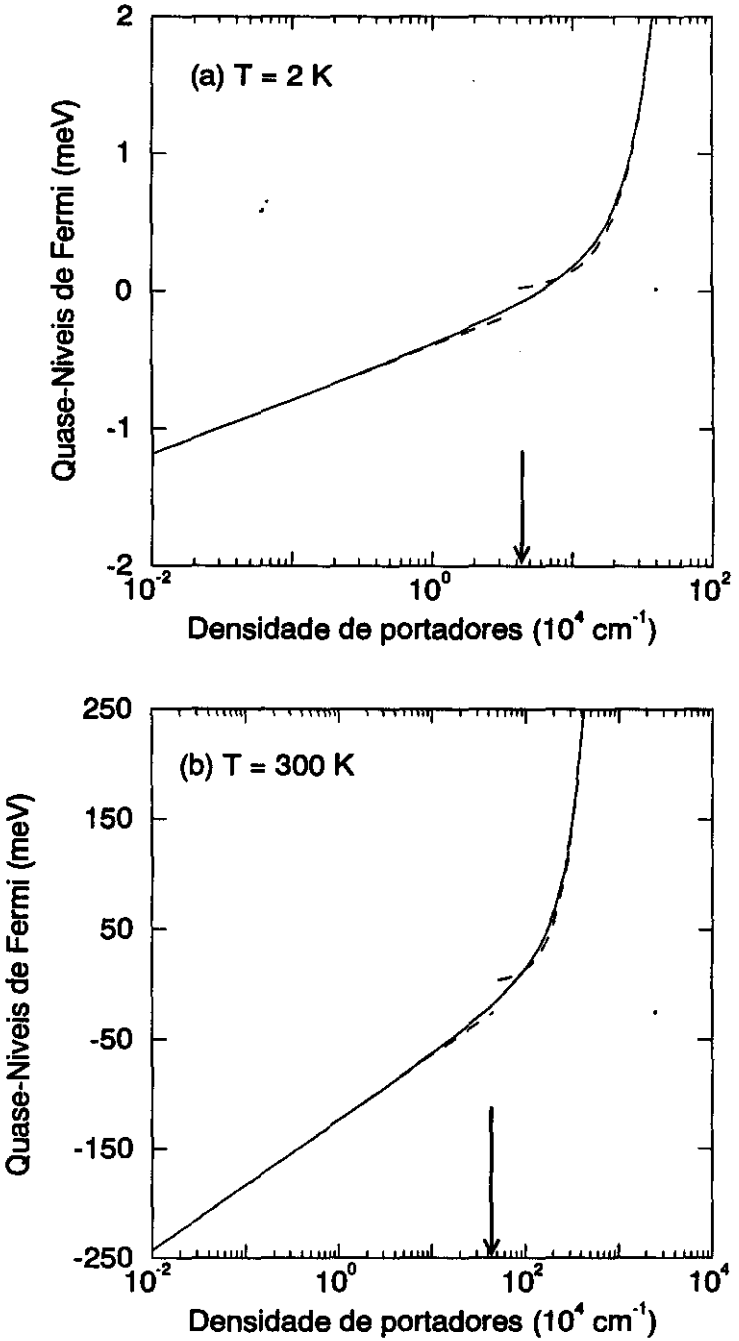



Fig. 4.2: Quase-níveis de Fermi para baixas ($T = 2\ K$) e altas temperaturas ($T = 300\ K$) em função da densidade de portadores (figuras *a* e *b*, respectivamente).

Na Figura. 4.2 apresentamos o quase-nível de Fermi (potencial químico) de elétrons em função da densidade de elétrons para diferentes temperaturas, $T = 2\ K$ e $T = 300\ K$ e para $R = 50$ Å. A linha cheia mostra a solução geral da integral de Fermi-Dirac (eq. 4.9) e as linhas tracejadas as soluções analíticas nos casos limites (eq. 4.11). Nesta figura se observa que o comportamento do quase-nível de Fermi é afetado tanto pela temperatura quanto pela densidade de portadores. Notamos que o comportamento do potencial químico muda drasticamente na faixa de densidades intermediárias devido ao fato dos valores da concentração de portadores excede o valor caraterístico $n_0$, passando do limite não degenerado ao degenerado. À temperatura ambiente (Fig 4.2*b*), o quase-nível de Fermi praticamente têm o mesmo comportamento do caso anterior, só que este adquire valores inferiores quando a densidade de portadores é a mesma que no caso de baixas temperaturas. Por outro lado, encontramos também, que o número característico $n_0 = 7\times10^5 cm^{-1}$ (eq. 4.10) à temperatura ambiente é maior, necessitando-se densidades de portadores maiores para passar do estado não degenerado ao degenerado.

As densidades de elétrons ($n_e$) e buracos ($n_h$) nas sub-bandas de condução e valência, respectivamente, são apresentadas nas figuras 4.3 e 4.4 em função da intensidade do laser para diferentes temperaturas, concentrações de impurezas, $N_A$ e para um raio do fio de 5 $nm$.

A baixas temperaturas (vide Fig. 4.3) praticamente a densidade de elétrons é igual à densidade de buracos, $n_e = n_h$, devido ao fato das impurezas aceitadoras não estarem ionizadas (eq. 4.23 e eq. 4.24). Para diferentes densidades de aceitadores $N_A \approx 10^{16}/cm^3$ e $N_A = 10^{17}/cm^3$, encontramos que a concentração de portadores muda com a intensidade do laser indo de linear no regime de baixas intensidades, para raiz quadrada em intensidades intermediárias, e linear novamente para intensidades altas do laser. Este comportamento linear a baixa temperatura foi reportado por Mahan

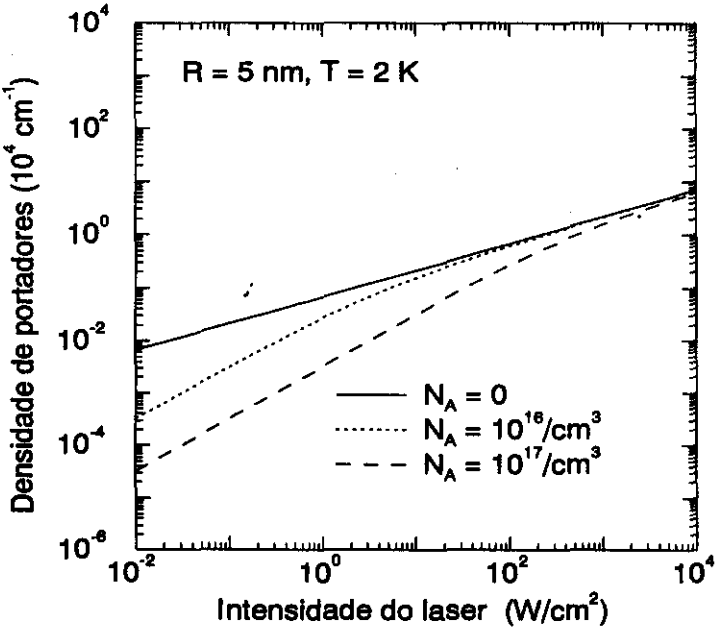



Fig. 4.3: Densidades de portadores em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à temperatura $T = 2\ K$ e $R = 5\ nm$.

e Oliveira [49] em poços quânticos. Eles observaram que no caso não degenerado a taxa de recombinação com buracos ligados às impurezas aceitadoras é proporcional à intensidade do laser, devido ao fato da densidade de elétrons ser muito pequena em comparação com a densidade de portadores em equilíbrio. Neste caso, os elétrons se recombinam essencialmente com buracos ligados às impurezas aceitadoras de forma tal que $\omega_A = \omega_{cA} \approx n_e$. Neste re- gime, alguns aceitadores que são ionizados pela recombinação com elétrons de condução , são rapidamente neutralizados pela captura de buracos livres.

Por outro lado, observamos que se aumentamos a concentração de impurezas aceitadoras a densidade de portadores diminui, já que os elétrons se recombinam com uma concentração maior de buracos ligados a estas impurezas, gerando como resultado que uma quantidade menor de elétrons participem do processo de emissão banda-banda. O comportamento da densidade de portadores na faixa de baixas para

intensidades intermediárias é dominado pelo processo de recombinação com buracos livres, onde se nota que $n_e > N_A$ e a densidade de portadores obedece à estatística de Maxwell-Boltzmann, de forma tal que $\omega = \omega_{cv} \approx n_e n_h / n_0^2$, com $n_e = n_h$. No regime de altas intensidades do laser, os elétrons se recombinam com buracos livres obedecendo a estatística de Fermi-Dirac, onde $\omega_{cv} \approx n_e$.

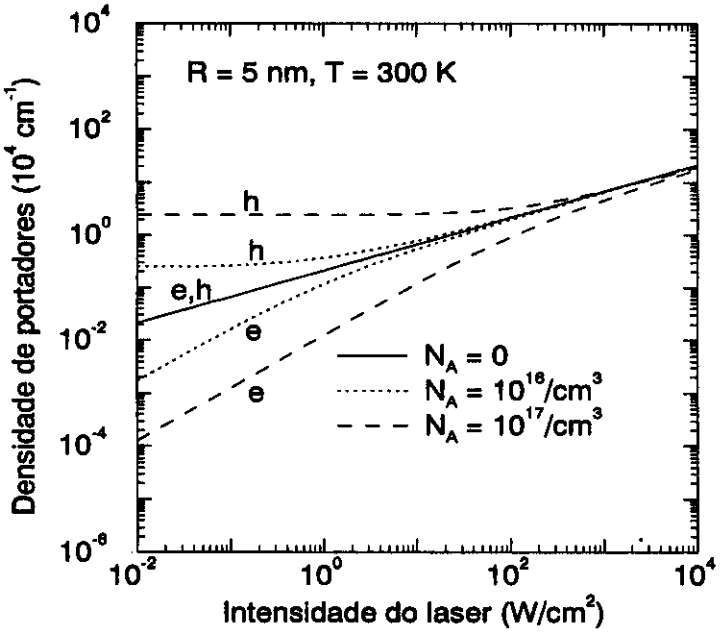



Fig. 4.4: Densidades de portadores em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à temperatura $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$.

Na figura 4.4, apresentamos a densidade de portadores em função da intensidade do laser à temperatura ambiente ($T = 300\ K$). Nesta temperatura e no limite não degenerado a densidade de elétrons é muito pequena, devido a que praticamente todas as impurezas aceitadoras estão ionizadas (para uma dada concentração de impurezas aceitadoras) e alem disso, a densidade de buracos $n_h$ é essencialmente igual à concentração de impurezas rasas por unidade de comprimento, $n_h \approx N_A^L$, ou seja, a densidade de buracos neste regime não muda com a intensidade do feixe laser. Neste caso, os elétrons se recombinam com buracos livres obedecendo a estatística

de Maxwell-Boltzmann e a taxa de recombinação com buracos livres é dada por $\omega_A = \omega_{cv} \approx n_e(N_A^L/n_0)$. Observamos que a densidade de elétrons apresenta uma dependência linear com a intensidade do feixe laser. Por outro lado, é importante notar que mesmo neste caso em que o comportamento da densidade de portadores é linear como no caso de baixas temperaturas, o processo de recombinação é diferente.

Para temperatura ambiente, e levando em conta que $n_0 \approx 7 \times 10^5 cm^{-1}$ é muito maior que para baixas temperaturas, o comportamento em intensidades intermediárias é praticamente o mesmo que no caso de baixas temperaturas, com uma transição de linear para raiz quadrada na dependência com a intensidade do laser. Para altas intensidades do laser, as impurezas aceitadoras estão praticamente ionizadas (regime degenerado) e a concentração de buracos ligados a estas impurezas equilibra-se com a densidade de buracos livres. Os elétrons se recombinam com buracos livres mesmo que alguns aceitadores que são ionizados pela recombinação com os elétrons de condução rapidamente sejam neutralizados pela captura de buracos livres. Neste caso, a densidade de portadores é muito maior que a densidade de impurezas aceitadoras, mas o mecanismo de recombinação é por buracos livres obedecendo a estatística de Fermi-Dirac.

O comportamento dos quase-níveis de Fermi de elétrons e buracos em função da intensidade do laser para diferentes temperaturas e comprimentos do raio do $QWW$ é apresentado nas figuras 4.5 e 4.6. Estes quase-níveis de Fermi são calculados por meio das eqs. 4.11 e 4.15, levando em conta os casos não degenerado (1) e degenerado (2) para elétrons

$$(1) \quad t = \ln \frac{n_e}{n_0} + \ln \frac{1}{\sqrt{\pi}},$$

$$(2)\quad t = \frac{1}{4}(\frac{n_e}{n_0})^2, \tag{4.27}$$

e buracos

$$(1)\quad t' = \ln\frac{n_v}{n_0}$$

$$(2)\quad t' = \frac{\gamma}{4}(\frac{n_v}{n_0})^2 \cdot \tag{4.28}$$

A mudança com a intensidade do laser pode ser obtida rapidamente tendo como base a análise feita anteriormente para a densidade de portadores.

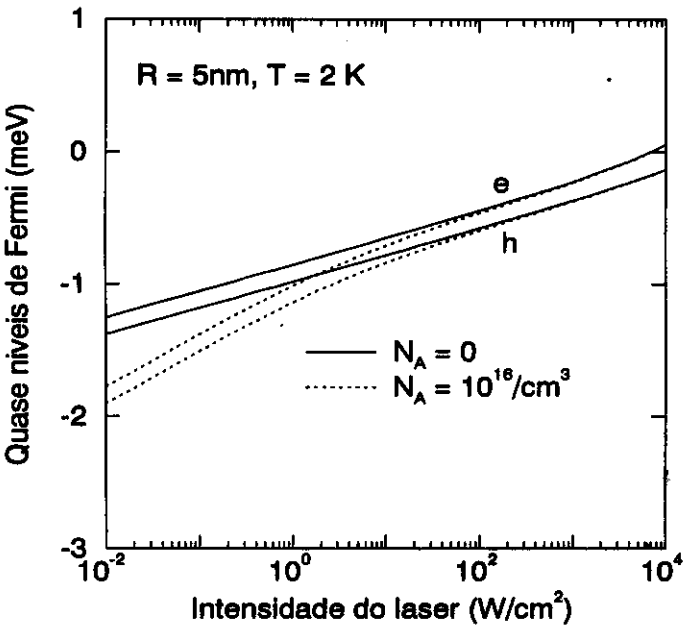



Fig. 4.5: Quase-níveis de Fermi em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à temperatura $T = 2\ K$ e $R = 5,\ nm$.

Para $T = 2\ K$ e baixas intensidades do laser (onde $n_e/n_0 \ll 1$), ou seja, no regime não degenerado é importante a recombinação com buracos ligados que segue a equação $\omega_A = \omega_{cA} \approx n_e$, a qual depende linearmente com a intensidade do laser.

Neste limite, os quase-níveis de Fermi são descritos por $\mu_e = k_B T \ln(n_e/\sqrt{\pi n_0}) = k_B T \ln(I/I_a)$ onde $I_a$ é uma constante para $N_A \neq 0$. Em intensidades intermédiarias, $n_e$ varia de linear para um comportamento de raiz quadrada o que faz com que $\mu_e = k_B T/2\ln(I/I_b)$ onde $I_b$ é outra constante (para $N_A = 0$, $n_e$ tem dependência de raiz quadrada com $I$). Um raciocínio semelhante se apresenta para buracos. Este comportamento pode ser observado na figura 4.5 onde a inclinação muda de um fator 2 do caso de um fio quântico intrínseco ($N_A = 0$) para um fio altamente dopado ($N_A \neq 0$) na faixa de intensidades intermediarias. No regime degenerado (onde $n_e$ depende linearmente com $I$), $\mu_e = k_B T(n_e/n_0)^2 = I^2/I_c$, com $I_c$ constante e os quase-níveis de Fermi aumentam quadraticamente.

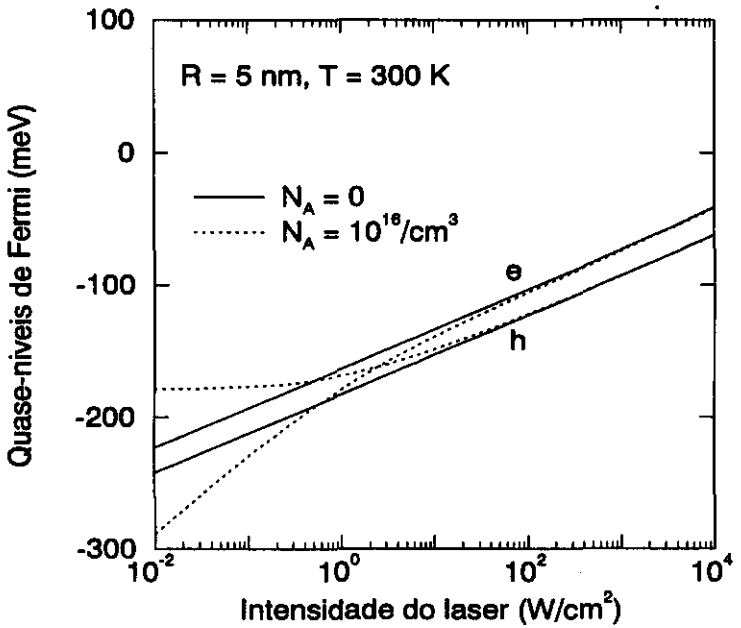



Fig. 4.6: Quase-níveis de Fermi em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ com temperatura $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$.

Para altas temperaturas, os quase-níveis de Fermi de fios quânticos intrínsecos têm o mesmo comportamento que em baixas temperaturas. No que se refere aos $QWWs$ dopados, no limite não degenerado, [vide Fig. 4.5] estes "níveis" obede-

cem essencialmente a $n_e = n_h$ onde $\mu_e = k_B T/2 \ln(I/I_b)$, com um comportamento semelhante para $\mu_h$.

Os tempos de vida de recombinação radiativos $T_{cv}$, $T_{cA}$, e $T_{tot}$ são apresentados em função da intensidade do laser nas figuras 4.7 e 4.8. Estes foram calculados levando em conta a eq. 4.25 para baixas e altas temperaturas.

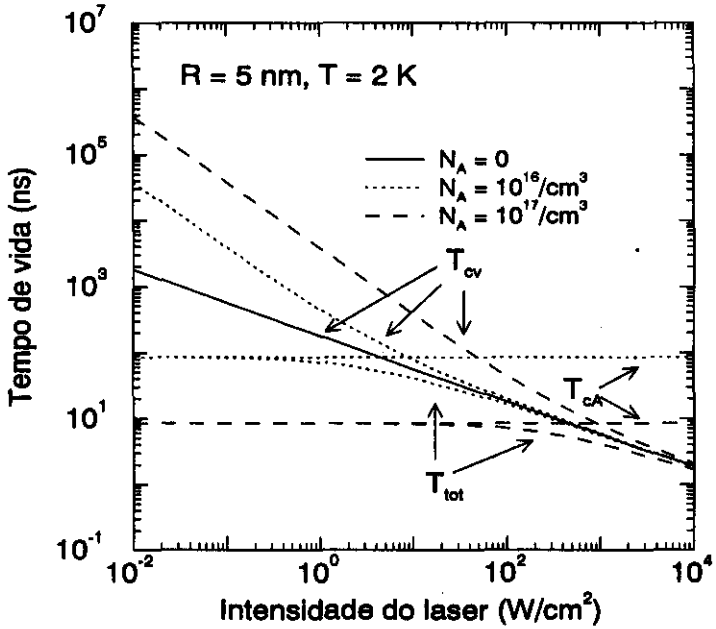



Fig. 4.7: Tempo de vida radiativo em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 2\ K$ e $R = 5\ nm$.

No limite não degenerado e à baixas temperaturas, o tempo de recombinação com buracos livres para fios quânticos altamente dopados muda inversamente com a densidade de elétrons, $T_{cv} \approx 1/\mathrm{n}_e$. Por outro lado, sabemos que a densidade de elétrons é diretamente proporcional à intensidade do laser e, portanto, $T_{cv} \approx 1/I$. Neste mesmo regime, para fios quânticos intrínsecos, temos que o tempo de recombinação de elétrons com buracos livres muda com o inverso da raiz quadrada da intensidade do laser, $T_{cv} \approx 1/\sqrt{I}$, para $N_A = 0$. O tempo de recombinação com buracos ligados às impurezas aceitadoras, $T_{cA}$, para concentrações $N_A \neq 0$, é

essencialmente constante. Neste caso, as impurezas estão praticamente ionizadas e $\omega_{cv} \approx n_e$ fazendo com que o tempo $T_{cv}$ tenha um comportamento inverso ao número de aceitadores por unidade de comprimento $N_A^L$, para baixas intensidades do laser. Para altas intensidades do laser ($I \gg I_0 \approx 300\ W/cm^2$, $n_e/n_0 \gg 1$), temos que $\omega_{cv} \approx n_e$ e o tempo de recombinação com buracos livres $T_{cv}$ vai para um valor limite, já que as impurezas estão totalmente ionizadas.

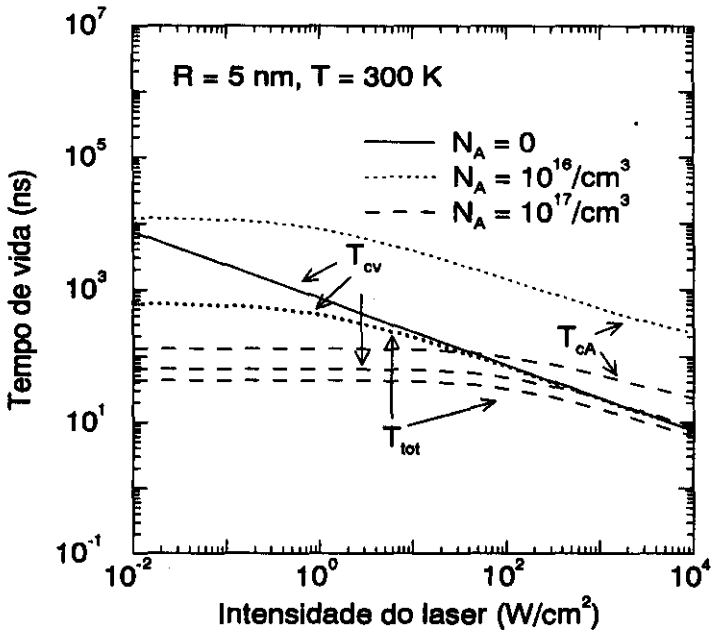



Fig. 4.8: Tempo de vida radiativo em função da intensidade do laser para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$.

Para altas temperaturas e baixas intensidades do laser ( caso não degenerado), o tempo de recombinação radiativa com buracos livres para fios quânticos intrínsecos muda novamente de forma inversa com a densidade de portadores, $T_{cv} \approx 1/n_e$, como no caso de baixas temperaturas. Agora, como o mecanismo de recombinação é diferente no caso de fios quânticos dopados, ou seja, uma concentração apreciável de elétrons fica nas impurezas, este tempo de recombinação adquire um comportamento praticamente constante. Na faixa de intensidades intermediárias do laser, este tempo

diminui, já que uma quantidade apreciável de impurezas foram preenchidas. Na faixa de altas intensidades do laser este tempo assume valores conhecidos do fio intrínseco devido a que às impurezas foram completamente saturadas. Da mesma forma, o tempo de recombinação com buracos ligados às impurezas rasas, $T_{cA}$, comporta-se de acordo com a taxa de recombinação $\omega_{cA}$ já que ele decresce com $\omega_{cA} \approx N_A^L n_e n_h$ sendo inversamente proporcional a $N_A^L n_h$. Pode-se observar que este comportamento ocorre na faixa de baixas até intensidades intermediárias antes de superar o número característico $n_0$. Por outro lado, é importante notar que o comportamento do tempo total, $T_{tot}$, também diminui uma vez superado o limite não degenerado.

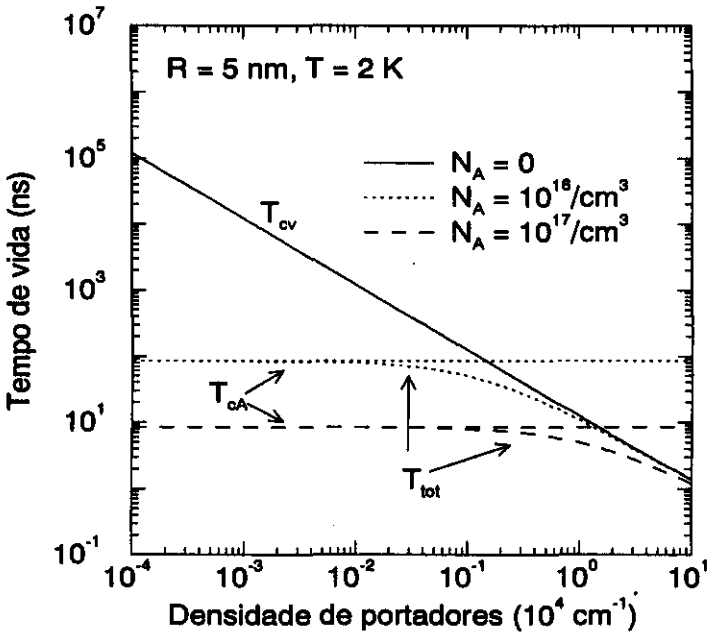



Fig. 4.9: Tempo de vida radiativo em função da densidade de portadores para um $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 2\ K$ e $R = 5\ nm$.

Os tempos de recombinação em função da densidade de portadores para diferentes temperaturas, $R = 5\ nm$ e diferentes concentrações de impurezas se observaram nas figuras 4.9 e 4.10.

Existem evidências experimentais de fotoluminescência e de processos de captura

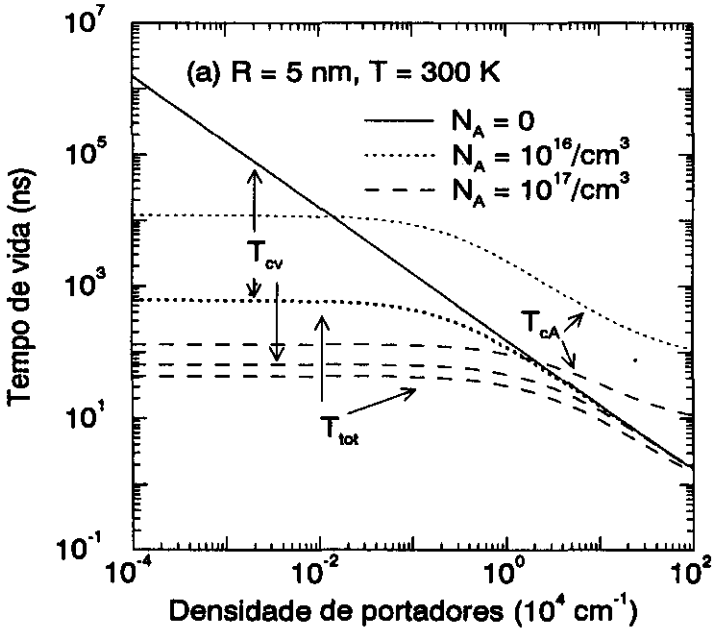



Fig. 4.10: Tempo de vida radiativo em função da densidade de portadores em um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, As)Al$ à $T = 300\ K$ e $R = 5\ nm$.

em fios quânticos retangulares [36] crescidos usando técnicas de implantação $MIEI$ ( " Masked implantation enhanched intermixing") e de corte seco ("Dry Etching"). Estas técnicas permitem o crescimento de fios e pontos quânticos de alta qualidade, mas introduzem efeitos parasíticos tais como impurezas, efeitos de corte, redução na flexibilidade das estruturas observada na largura e na periodicidade, que podem ser melhoradas usando técnicas litográficas.

Com o "Etching" e a técnica $MIEI$, é possível construir fios quânticos a partir de 30 e 40 nanômetros ($nm$) respectivamente, observando-se que os processos de relaxação e de captura de portadores dependem significativamente do tamanho do poço de confinamento no fio.

Efeitos causados pelas impurezas na implantação e de danos de corte no "etching" são algumas das desvantagens que apresentam estas técnicas, trazendo como consequência uma má qualidade na fotoluminescência nos fios menores que 100 $nm$,

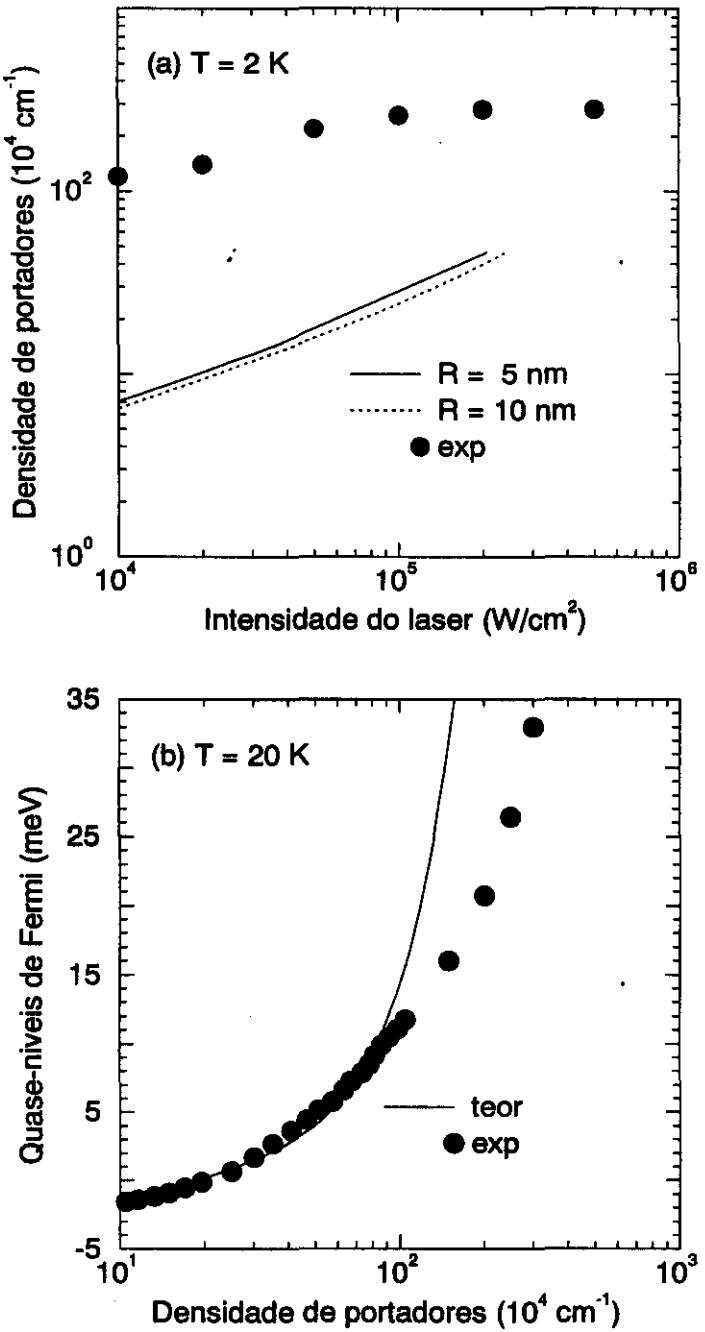



Fig. 4.11: *a*). Densidade de portadores em função da intensidade do laser à $T = 2\ K$, para $QWW's$ de raios $R = 5$, $10\ nm$ (linha sólida e pontilhada) e um resultado experimental para um fio retangular com confinamento lateral de $65\ nm$. b) Quase-níveis de Fermi teórico para um $QWW$ de $8\ nm$ (linha sólida) e um fio quântico retangular experimental de área equivalente (pontos) à $T = 20\ K$.

reduzindo assim sensivelmente os tempos de vida dos portadores.

Alguns resultados experimentais podem ser observados na figura 4.11 onde fazemos uma comparação dos dados da densidade de portadores em função da intensidade do laser (Fig. 4.11*a*), para o fio quântico retangular de 65 $nm$ de confinamento lateral (experimental) e para os fios quânticos cilíndricos de 5 e 10 $nm$ (teóricos). Observamos que no limite de altas intensidades do laser, os resultados experimentais alcançam valores superiores em uma ordem de grandeza com relação aos resultados teóricos. Esta diferença pode ser atribuída tanto à diferença geométrica quanto à diferença de tamanho dos fios apresentados.

No caso dos quase-níveis de Fermi em função da densidade de portadores (vide Fig. 4.11*b*), consideramos um fio quântico retangular de confinamento lateral igual a 65 $nm$ e um fio quântico cilíndrico de área equivalente à temperatura $T = 20\ K$. Os resultados teóricos e experimentais apresentam valores semelhantes quando a densidade de portadores está na faixa de $10^5\ cm^{-1}$ a $10^6\ cm^{-1}$. Mas para concentrações maiores de portadores, estes quase-níveis adquirem valores diferentes. Isto é atribuído novamente às diferenças de forma e tamanho.

## 4.3 Conclusões

Estudamos recombinações radiativas em fios quânticos ($QWW$) cilíndricos de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, excitados por um feixe laser de $cw$ em um experimento de $PL$ em condições quase-estacionárias seguindo a aproximação da massa efetiva e um modelo de banda parabólica para descrever elétrons e buracos. No estado fundamental, consideramos a absorção interbanda e alguns mecanismos de recombinação tais como a recombinação de elétrons com buracos livres e com buracos ligados a impurezas aceitadoras.

Calculamos as densidades de portadores, potenciais químicos de elétrons e buracos e os tempos de recombinação de portadores para baixas ($T$= 2 $K$) e altas temperaturas ($T$ = 300 $K$) para um fio quântico em função da intensidade do laser.

Resultados experimentais mostram que a fotoluminescência e os processos de recombinação em fios quânticos retangulares crescidos por técnicas $MIEI$ e Etching estão em boa concordância com os resultados obtidos no estudo de fios quânticos cilíndricos de $GaAl$-$(Ga, Al)As$.

Não levamos em conta os processos Auger, a recombinação excitônica e mecanismos como a difusão espacial, importantes no caso de baixas temperaturas.

Desafortunadamente, em contraposição com o caso de poços quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, não conhecemos à temperatura ambiente medidas de $PL$ de laser $cw$ em fios quânticos para poder comparar com nossas predições teóricas. Esperamos entretanto, que nossos resultados sejam de interesse no entendimento quantitativo de futuros trabalhos experimentais de fotoluminescência neste campo.

# Capítulo 5

# Fotoluminescência de Fios Quânticos Incluindo Impurezas Rasas e Armadilhas[‡]

Da mesma forma que no caso de impurezas rasas, a presença de defeitos profundos nos materiais semicondutores também podem mudar suas propriedades físicas. Estados localizados aparecem unicamente se a simetria translacional do cristal perfeito é quebrada. Num material real sempre temos imperfeições e elas existem pelo fato de terem sido introduzidas deliberadamente ou simplesmente porque são resíduos do crescimento do cristal. Desta forma, o cristal pode ter por exemplo, impurezas químicas, vacâncias, etc.

Falamos de estados localizados ou níveis profundos quando suas energias estão fortemente ligadas ao "gap", o que faz com que estes níveis não possam ser tratados com a teoria da massa efetiva. As funções de onda neste caso são fortemente

[‡]Parte deste trabalho foi apresentada na 10*th* International Conference on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter, Prague, 18-23 August 1996 (J. of Luminesc.-submetida para publicação ); uma descrição mais completa foi submetida para publicação no J. Appl. Phys.

localizadas devido ao potencial coulombiano de curto alcance, que traz como consequência o aumento das interações . A concentração destas funções de onda devida às impurezas gera a quebra do modelo hidrogenóide.

O problema destes níveis profundos é que não possuem um modelo básico pelo qual possam ser estudados. Uma descrição destes estados pode ser feita se suas características físicas são convenientemente adaptadas à equação de Schrödinger.

Na ausência de uma solução analítica, nós trabalhamos o caso de armadilhas de maneira fenomenológica.

Um dos primeiros estudos da recombinação não radiativa em níveis de impurezas profundos foi feito por Schockley-Read-Hall [50]. Neste modelo, elétrons e buracos se recombinam pela captura sucessiva de $e$-$h$ nos níveis de impurezas profundas. Durante esta transição , uma energia igual à energia do "gap" é dissipada. Recentemente, tem-se desenvolvido uma quantidade apreciável de trabalhos baseados no estudo pioneiro de Shockley-Read-Hall, principalmente em materiais em "bulk". Estudos teóricos e experimentais [27, 28, 51, 52] de fotoluminescência em sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade, envolvendo armadilhas, mostram que os processos de recombinação radiativa e não radiativa desempenham um papel importante nas propriedades ópticas dos semicondutores.

Neste capítulo, estudamos o comportamento da densidade de portadores, os quase-níveis de Fermi e os tempos de recombinação radiativos e não radiativos em $QWW's$, em presença de impurezas rasas e armadilhas e em função da intensidade do feixe laser de onda contínua, à temperatura ambiente, para um raio do fio quântico de 5 $nm$ e para diferentes razões de captura.

Calculamos também a eficiência de captura dos estados de impurezas e a intensidade de fotoluminescência.

## 5.1 Fenomenologia de Armadilhas

Nesta seção , fazemos referência aos diferentes tipos de recombinação que acontecem num semicondutor. Centraremos nossa atenção principalmente na recombinação que inclui defeitos. Porém discutiremos brevemente os outros processos envolvidos.

Segundo o mecanismo de recombinação , três tipos de processos podem acontecer: recombinação banda-banda, recombinação por defeitos (centros locais) e recombinação de superfície. A recombinação banda-banda se produz quando o elétron livre transita da banda de condução para a banda de valência acompanhada da eliminação de elétrons e buracos livres. Este processo acontece quando são obedecidos os princípios de conservação de energia e de momentum. Neste caso, é possível distinguir três mecanismos de recombinação : recombinação com radiação , por fônons e por colisão.

Se em um semicondutor existem defeitos onde os níveis locais estão no "gap", há possibilidade de ocorrência do processo de recombinação por defeitos profundos (ou níveis locais).

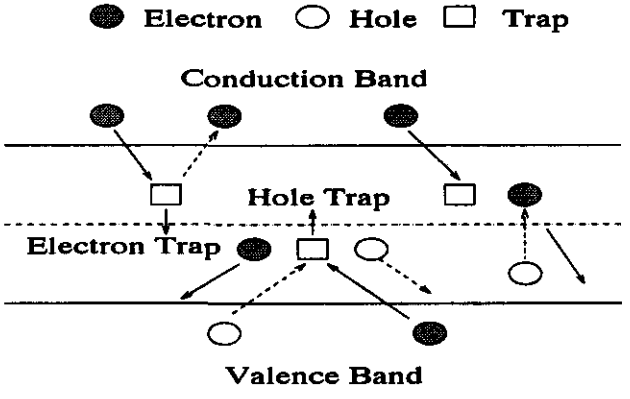



Fig. 5.1: Ilustração de armadilhas, centros de geração e recombinação em um fio quântico.

A recombinação radiativa de superfície acontece pela recombinação dos porta-

dores em níveis locais superficiais.

No gráfico 5.1, explicamos os diferentes tipos de recombinações que podem acontecer num semicondutor que possue defeitos profundos ou armadilhas em função da intensidade do laser. Em um semicondutor tipo-$p$ que possue uma quantidade grande de buracos, a recombinação se produz da seguinte forma: se a armadilha captura elétrons (vide desenho da esquerda no gráfico 5.1), esta têm a possibilidade de capturar um elétron que desce da banda de condução adquirindo imediatamente, uma carga negativa ou têm a capacidade de emitir um elétron para a banda de condução (processo que é fraco e que vamos desprezar). Se a armadilha captura buracos (caso que não consideramos em nosso estudo, vide centro do gráfico), esta pode emitir um elétron para a banda de valência o que seria equivalente à captura de um buraco emitido desde a banda de valência. No terceiro caso, o elétron que desce da banda de condução e entra na armadilha imediatamente transita deste nível profundo para a banda de valência, o que equivale, à captura de um buraco pela armadilha (neste caso a concentração de elétrons que descem das armadilhas à banda de valência, é significativa, vide desenho da direita). Desta forma, as armadilhas atuam como centros de recombinação .

Neste capítulo da tese, resolvemos a equação básica no estado estacionário para a densidade de elétrons de condução levando em conta a influência de armadilhas (de elétrons), usando diferentes parâmetros tais como a temperatura e o raio do $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, Al)$. Seguimos essencialmente o mesmo procedimento usado para descrever aceitadores no $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, Al)$ [53], a equação da taxa para a mudança na densidade de elétrons de condução por unidade de comprimento ($n_e$) é dada por $\frac{dn_e}{dt} = \omega_A$ - $\omega_{cv}$ - $\omega_{cA}$ - $\omega_T$ , onde $\omega_A$, $\omega_{cv}$ e $\omega_{cA}$ são as taxas por unidade de comprimento da absorção interbanda, da recombinação radiativa de elétrons com buracos livres (na banda de valência) e com buracos ligados às impurezas aceitadoras,

respectivamente, e $\omega_T$ corresponde à taxa de elétrons de condução capturados por armadilhas. Ou seja, no estado estacionário, $\omega_A = \omega_{cv} + \omega_{cA} + \omega_T$.

O cálculo das diferentes taxas de recombinação é realizado usando a regra de ouro de Fermi, exceto no caso da taxa de elétrons que se recombinam com armadilhas, a qual é descrita fenomenologicamente [20,27,51]. A taxa por unidade de comprimento da criação de pares elétron-buraco pela absorção interbanda de fotons do laser *cw* é proporcional à intensidade $I$ do laser e é dada por [53]

$$\omega_A = \frac{4\pi\hbar\alpha_f\sqrt{2\mu_{c,v}}(\frac{P_{cv}^2}{2})}{\eta(\omega)m_0^2(\hbar\omega)^2}|\langle f_c(\rho)|f_v(\rho)\rangle|^2\frac{\theta(\hbar\omega-\varepsilon_{eff})}{\sqrt{\hbar\omega-\varepsilon_{eff}}}I, \tag{5.1}$$

ede maneira semelhante, a recombinação radiativa de elétrons ($n_e$) da primeira sub-banda de condução com buracos livres ($n_h$) da primeira sub-banda de valência e com buracos ligados a aceitadores são expressas por [53]

$$\omega_{cv} = \frac{16}{3}\alpha_f\frac{\varepsilon_{eff}}{\hbar}\frac{\eta(\varepsilon_{eff})(\frac{P_{cv}^2}{2})}{m_0^2c^2}|\langle f_c(\rho)|f_v(\rho)\rangle|^2 n_0 Q(n_e,n_h), \tag{5.2}$$

$$\omega_{cA} = \frac{32}{3\hbar}N_A\alpha_f\frac{n(\varepsilon_{eff})(\frac{P_{cv}^2}{2})}{m_0^2c^2}\int_0^R \rho_i d\rho_i J_{cA}(\lambda,\rho_i)n_A[E_A(\rho_i)]P(\rho_i), \tag{5.3}$$

onde todas as quantidades anteriores possuem a mesma definição que no capítulo anterior [53].

Com o objetivo de considerar a recombinação não radiativa (efeitos de armadilhas), assumimos, por simplicidade, que existe um só tipo de armadilhas, ou seja, armadilhas que capturam elétrons da banda de condução . Consideramos o problema fenomenologicamente [20, 27, 51] e supomos que a taxa para que um elétron entre nas armadilhas depende da densidade de estados de armadilhas disponíveis ($s_0$ -$s$), onde $s_0$ é a densidade total de sítios de armadilhas por *cm* e $s$ é a densidade de elétrons nas armadilhas ocupadas, ou seja,

$$\omega_T = r_T(s_0 - s)n_e = \frac{n_e}{T_e}, \tag{5.4}$$

onde $r_T$ é a taxa de elétrons entrando nas armadilhas $(cm/s)$ e

$$T_e = \frac{1}{r_T(s_0 - s)} \tag{5.5}$$

é o tempo de vida de captura. Note que a população de elétrons dos estados de armadilhas é aumentada quando elétrons da sub-banda de condução entram nestes estados e diminui quando os elétrons que estão nas armadilhas se recombinam com buracos livres na sub-banda de valência (recombinação não radiativa). Este é um processo que depende da densidade de elétrons nos estados de armadilhas e da densidade de buracos livres,

$$\frac{ds}{dt} = r_T(s_0 - s)n_e - r_R s n_h = \frac{n_e}{T_e} - \frac{n_h}{T_h}, \tag{5.6}$$

onde $r_R$ é a taxa ( em $cm/s$) de elétrons nos estados de armadilhas que se recombinam com buracos livres e $T_h$ é o tempo de recombinação não radiativa correspondente. Podemos introduzir [51] um tempo de recombinação não radiativo efetivo dos portadores em termos do tempo não radiativo de elétrons ($T_e$) e buracos ($T_h$) como $\tau_{eff} = \sqrt{T_e T_h}$ e obter

$$s = \frac{s_0}{2}[1 \pm \sqrt{1 - \frac{1}{\tau^*_{eff}}}\,], \tag{5.7}$$

com $\tau^*_{eff} = \frac{\tau_{eff}}{\tau_0}$ e

$$\tau_0 = \frac{2}{s_0\sqrt{r_T r_R}}, \tag{5.8}$$

que é o tempo não radiativo característico dos portadores.

Finalmente, o formalismo descrito deve ser complementado com uma equação que determina a conservação de carga, ou seja,

$$n_h = n_e + n_A^I + s, \tag{5.9}$$

onde $n_A^I$ é o número de aceitadores ionizados por unidade de comprimento [53]. Das equações anteriores , obtemos diretamente que no estado estacionário

$$s = \frac{n_A^I + (1+\alpha)n_e}{2}\left[-1 + \sqrt{1 + \frac{4\alpha s_0 n_e}{[n_A^I + (1+\alpha)n_e]^2}}\ \right], \tag{5.10}$$

com $\alpha = r_T/r_R$. Note que na eq. (5.7), o sinal negativo (positivo) corresponde a intensidades do laser menores (maiores) que o valor da intensidade característica $I_{ch}$ [51] (para a qual $s = \frac{s_0}{2}$ e $\tau_{eff}$ é igual ao valor mínimo $\tau_0$) da intensidade do laser *cw*. A intensidade do laser característica $I_{ch}$ é obtida da solução da equação

$$I^* = \frac{I - \frac{I_{PL}}{\chi}}{I_{cr}} = 1 + \frac{2n_A^I}{s_0}, \tag{5.11}$$

com $\chi = \frac{\omega_A}{I}$ (repare que $\chi$ independe da intensidade do laser),

$$I_{cr} = \frac{1}{4}\frac{r_T r_R s_0^2}{\chi(r_T - r_R)}, \tag{5.12}$$

e

$$I_{PL} = \omega_{cv} + \omega_{cA} \tag{5.13}$$

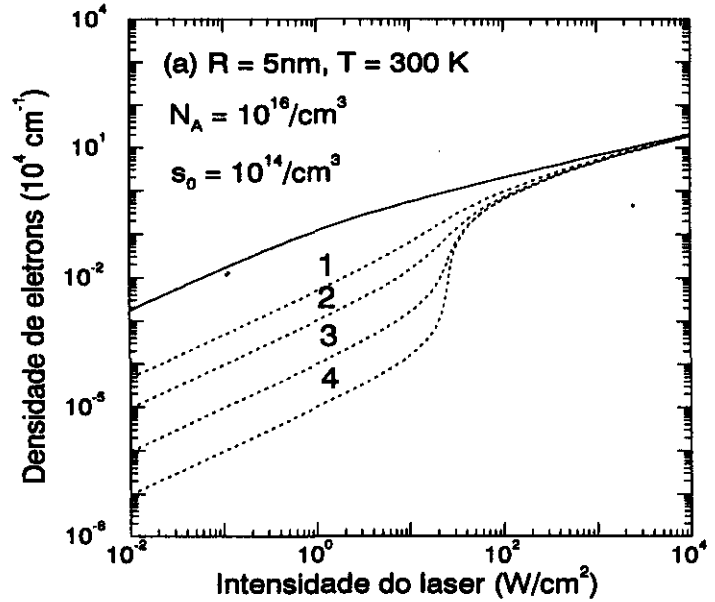
é a intensidade de fotoluminescência total integrada. Repare que com o objetivo de ter saturação de armadilhas, a condição $r_T > r_R$ deve ser cumprida.

Das equações anteriores definimos a aproximação teórica usada neste trabalho para estudar os efeitos de armadilhas e impurezas rasas aceitadoras no estado estacionário na fotoluminescência em um *QWW* de *GaAs-(Ga, Al)As*.

## 5.2 Resultados e discussão

Nossos resultados nesta seção foram obtidos para um fio quântico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ e assumimos que os "gaps" de energia dependem da temperatura e de valores apropriados da constante dielétrica e massa efetiva para a heteroestrutura de $GaAs$ [16, 30, 53]. Usamos a regra geral 60%-40% para a discontinuidade do "gap" nas bandas de condução e valência, respectivamente. Também consideramos uma distribuição homogênea de aceitadores dentro do $QWW's$ e usamos o mesmo procedimento que no capítulo anterior [16] para obter as energias de ligação e as funções de onda de aceitadores. Levamos em conta que a energia do laser $\hbar\omega = 1.75$ $eV$ e o indice de refração igual a $\eta(\omega) \approx \eta(\varepsilon_{eff}) \approx 3.5$.

Com o objetivo de estudar os efeitos de armadilhas e aceitadores, é apresentada na figura 5.2$a$ e 5.2$b$ a densidade de elétrons tanto no caso de impurezas rasas (linha sólida), $N_A = 10^{16}/cm^3$, quanto no caso que inclui impurezas rasas mais armadilhas, $s_0 = 10^{14}/cm^3$ e $s_0 = 10^{16}/cm^3$ (linha pontilhada), à temperatura ambiente em função da intensidade do laser para diferentes valores da taxa de captura $r_T/r_R$, onde fixamos um valor típico [35] para a taxa não radiativa $r_R \cong 10^9 cm/seg$. Observe que para baixas intensidades do laser [$I \ll I_{ch}$, vide eq. 5.11], a densidade de elétrons de condução apresenta uma dependência linear com a intensidade do laser, entretanto, no limite de altas intensidades do laser, a dependência desta densidade de portadores é de raiz quadrada. Na ausência de armadilhas ($s_0 = 0$) [53], este comportamento é semelhante com os resultados obtidos para um poço quântico [30]: à temperatura ambiente e para uma faixa determinada da intensidade do laser, os elétrons de condução se recombinam com buracos livres na sub-banda de valência de acordo com a estatística de Maxwell-Boltzmann e $I \approx n_e n_h$. No regime de baixas intensidades, não há praticamente buracos ligados às impurezas aceitadoras [53] e a



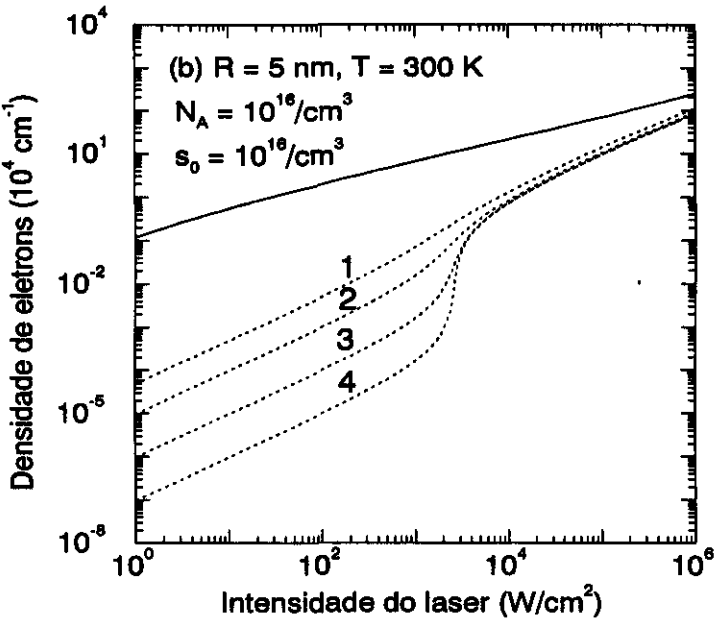




Fig. 5.2: Densidades de elétrons de condução para um *QWW* cilíndrico de *GaAs*-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$ à $T = 300\ K$, em função da intensidade do laser *cw*, com densidade de impurezas rasas $N_A = 10^{16}/cm^3$, e duas densidades de armadilhas: (*a*) $s_0 = 10^{14}/cm^3$, (*b*) $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$, curva 4: $r_T/r_R = 1000$. As linhas sólidas correspondem aos resultados na ausência de armadilhas.

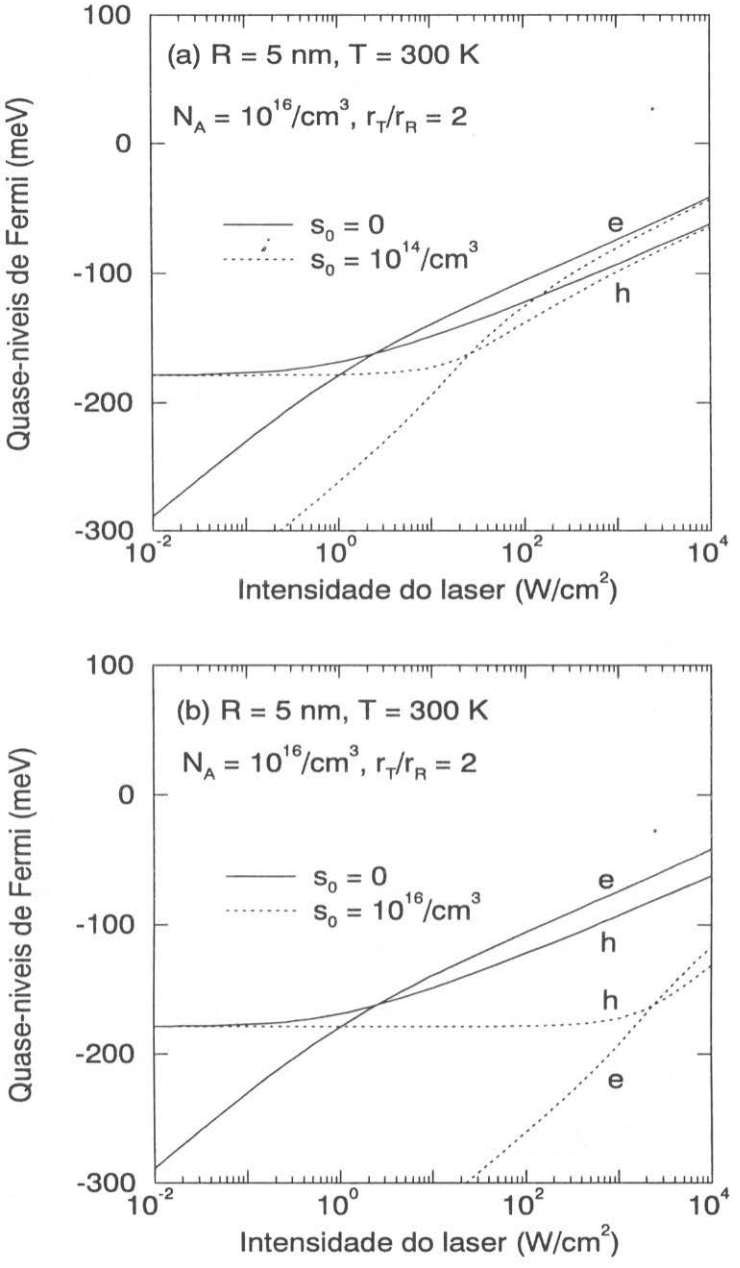



Fig. 5.3: Quase-níveis de Fermi (ou potenciais químicos) de condução ($e$) e valência ($h$) a $T = 300\ K$ para um fio quântico cilíndrico $QWW$ de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, com $R = 5\ nm$ para uma concentração de impurezas rasas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$ e razão $r_T/r_R = 2$ das taxas de captura e recombinação não radiativa em função da intensidade do laser $cw$. As concentrações de armadilhas são: ($a$) $s_0 = 10^{14}/cm^3$ e ($b$) $s_0 = 10^{16}/cm^3$. As linhas sólidas correspondem aos resultados na ausência de armadilhas.

densidade de buracos $n_h$ é essencialmente igual à densidade de aceitadores ionizados e $I \approx n_e$. No regime de altas intensidades, $n_e \approx n_h$ e se atinge o comportamento de raiz quadrada. Um comportamento semelhante é observado quando os efeitos de armadilhas são inclúidos, com a diferença que, para baixas intensidades do laser ($I \ll I_{ch}$), a recombinação envolvendo armadilhas é muito importante ( e a densidade de elétrons é dramaticamente reduzida, esta diminuição dependendo essencialmente da densidade de armadilhas e da razão $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativa). No regime de altas intensidades ($I \gg I_{ch}$), a saturação de armadilhas acontece (se $r_T/r_R > 1$) e retornamos ao comportamento anterior.

Na figura 5.3, apresentamos os quase-níveis de Fermi das sub-bandas de valência e de condução de um $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ à temperatura ambiente para uma razão fixa $r_T/r_R = 2$ das taxas de captura e recombinação não radiativas em função da intensidade do laser. O comportamento na ausência de armadilhas é semelhante ao de um poço quântico [30], onde o efeito de impurezas rasas determina uma diminuição do potencial químico (tanto para elétrons quanto para buracos) devido às correspondentes reduções nas densidades de portadores. No caso de buracos se pode observar que para muito baixas intensidades do laser, não há essencialmente buracos ligados a aceitadores, a densidade de buracos $n_h$ é igual à densidade de aceitadores ionizados e os efeitos de armadilhas são desprezíveis.

Os diferentes tempos de vida de elétrons de condução à temperatura ambiente são apresentados na figura 5.4 para um $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ e para uma razão fixa das taxas de captura e recombinação não radiativa $r_T/r_R = 2$. Discutimos anteriormente o comportamento dos tempos de recombinação de elétrons e buracos na ausência de armadilhas [53]. Levando em conta os efeitos de armadilhas, o tempo de vida total de elétrons é substancialmente modificado no regime de baixas intensidades do laser, quando os processos de recombinação de elétrons são essencialmente

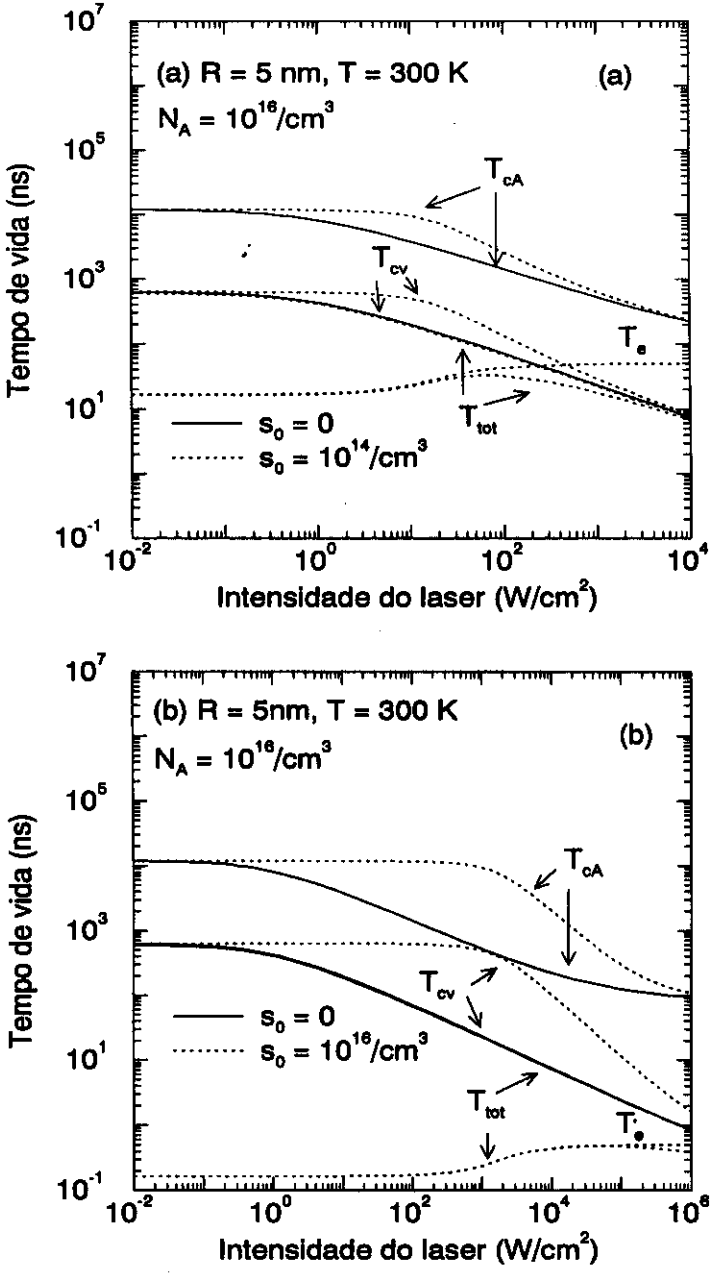
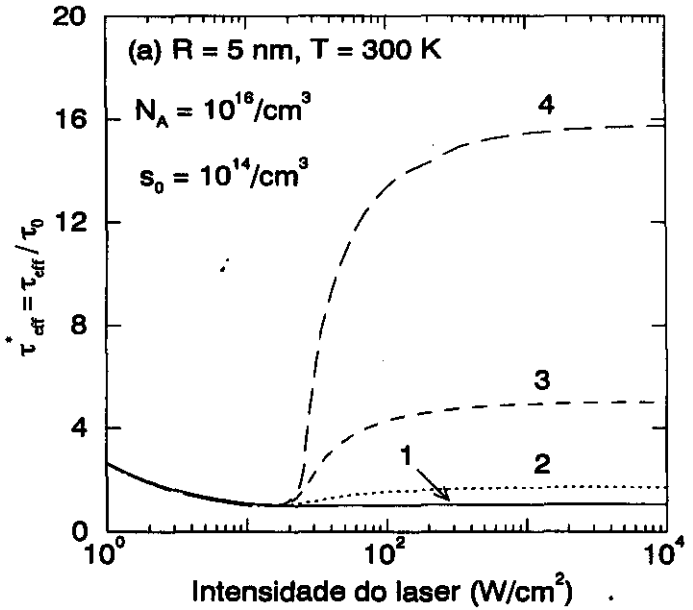



Fig. 5.4: Tempos de vida de elétrons de condução para um fio quântico cilíndrico $QWW$ de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, à $T = 300\ K$, para uma concentração de impurezas rasas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$ e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$ em função da intensidade do laser $cw$. Resultados teóricos são apresentados para uma razão $r_T/r_R = 2$ das taxas de captura e recombinação não radiativa. As curvas sólidas correspondem aos resultados na ausência de armadilhas.



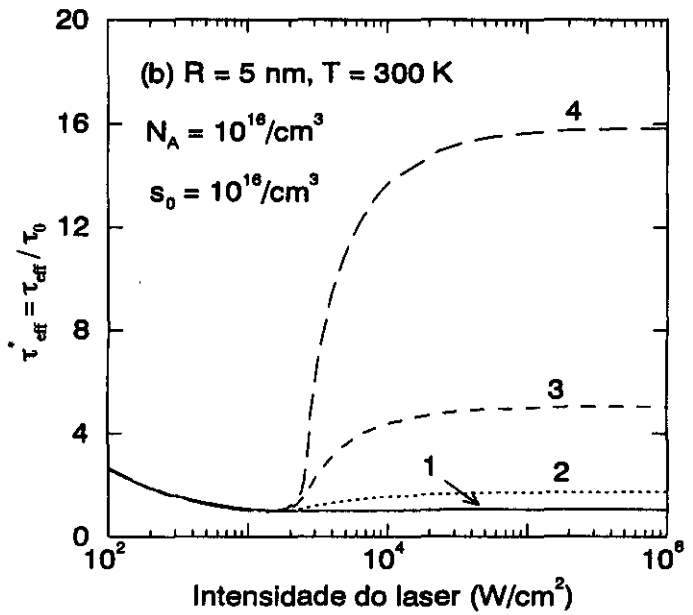




Fig. 5.5: Tempos efetivos de decaimento não radiativo (em unidades reduzidas) em função da intensidade do laser *cw* à $T = 300\ K$ para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$ para uma concentração de impurezas rasas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$ e armadilhas (*a*) $s_0 = 10^{14}/cm^3$, (*b*) $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$, curva 4: $r_T/r_R = 1000$. Note as diferentes escalas no eixo horizontal.

dominados pela recombinação de elétrons de condução com armadilhas. Naturalmente, no regime de altas intensidades do laser, acontece efetivamente a saturação das armadilhas e o tempo de vida total de elétrons $\frac{1}{T_{tot}} = \frac{1}{T_{cv}} + \frac{1}{T_{cA}} + \frac{1}{T_e}$ se reduz aos resultados prévios sem armadilhas ($T_{cv}$ e $T_{cA}$ são os tempos de recombinação radiativa de elétrons de condução com buracos livres e buracos ligados a impurezas [30, 53], respectivamente). Os tempos efetivos de decaimento não radiativos ( em unidades de $\tau_0$, vide eq. 5.8) são apresentados para os mesmos parâmetros do $QWW$ na figura 5.5, para diferentes razões das taxas de captura e recombinação não radiativa. Para baixas intensidades do laser, o tempo efetivo não radiativo independe [51] praticamente da razão $r_T/r_R$, entretanto para altas intensidades do laser ($I \gg I_{ch}$) este tempo é muito sensível a esta razão, atingindo a saturação no valor $\tau^*_{eff} = \frac{\alpha+1}{2\sqrt{\alpha}}$-vide eqs. 5.7 e 5.10). O comportamento anterior é apresentado também para a dependência com a intensidade do laser da fração de elétrons presos em armadilhas em $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, que é apresentado na figura 5.6. Note que o valor de saturação para a fração de armadilhas que contem elétrons é dada por $\frac{s}{s_0} \approx \frac{\alpha}{1+\alpha}$, que se obtem imediatamente da eq. (5.10) para altas intensidades do laser.

Se denotamos $n_h^0$ como a população de buracos no limite quando a intensidade do laser não está presente à temperatura ambiente (que é igual à densidade de aceitadores ionizados), a eficiência de captura $\eta_t = \frac{s}{n_h - n_h^0}$, a fração de população de elétrons da sub-banda de condução [com referência a população efetiva de buracos de valência ( $n_h$ - $n_h^0$) gerada pela excitação do laser] $\eta_e = \frac{n_e}{n_h - n_h^0}$ e a fração efetiva de aceitadores ionizados pelo laser $\eta_i = \frac{n_A^I - n_h^0}{n_h - n_h^0}$, elas estão relacionadas via a equação de conservação de carga (eq. 5.9) e $\eta_t + \eta_e + \eta_i = 1$ para qualquer valor da intensidade do laser. Este comportamento é claramente observado nas Figs. 5.7, 5.8 e 5.9, para duas concentrações de armadilhas e várias razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas. Note que a eficiência de captura têm um máximo na

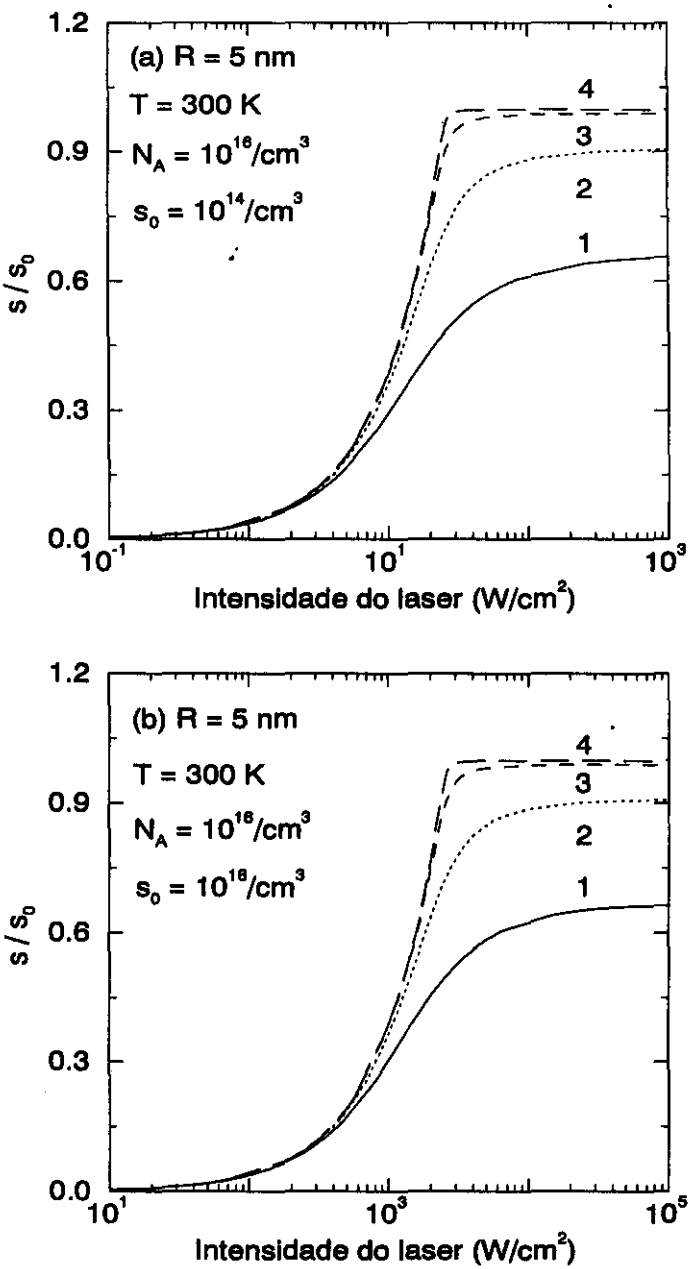
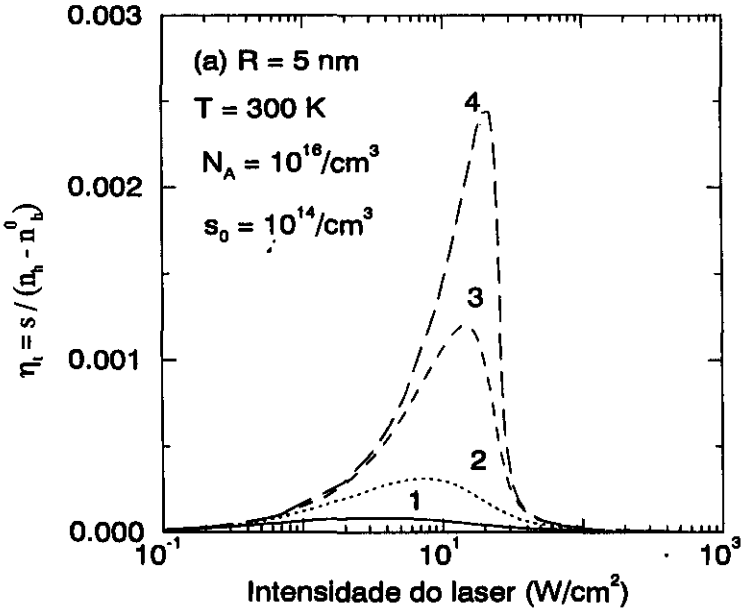



Fig. 5.6: Fração de armadilhas populadas por elétrons em função da intensidade do laser ($cw$), à $T = 300\ K$ para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas ($a$) $s_0 = 10^{14}/cm^3$, ($b$) $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$.



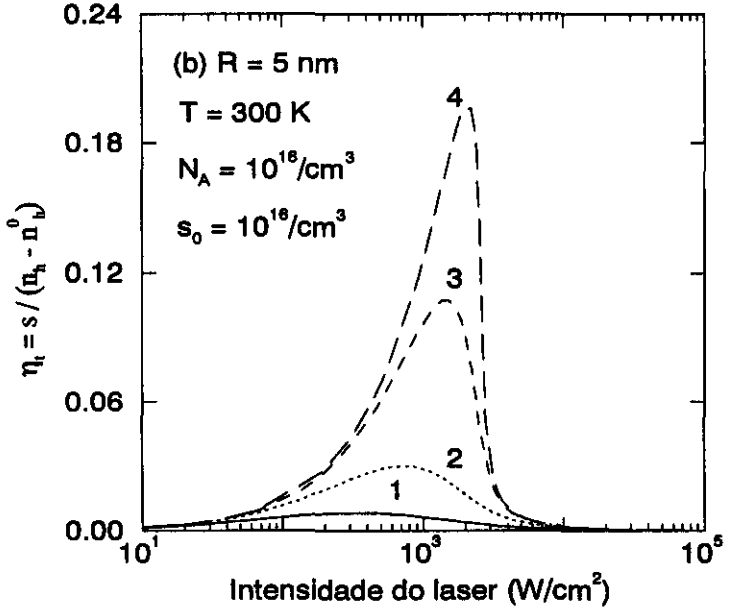




Fig. 5.7: Eficiências de captura em função da intensidade do laser *cw*, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas (*a*) $s_0 = 10^{14}/cm^3$, (*b*) $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$.

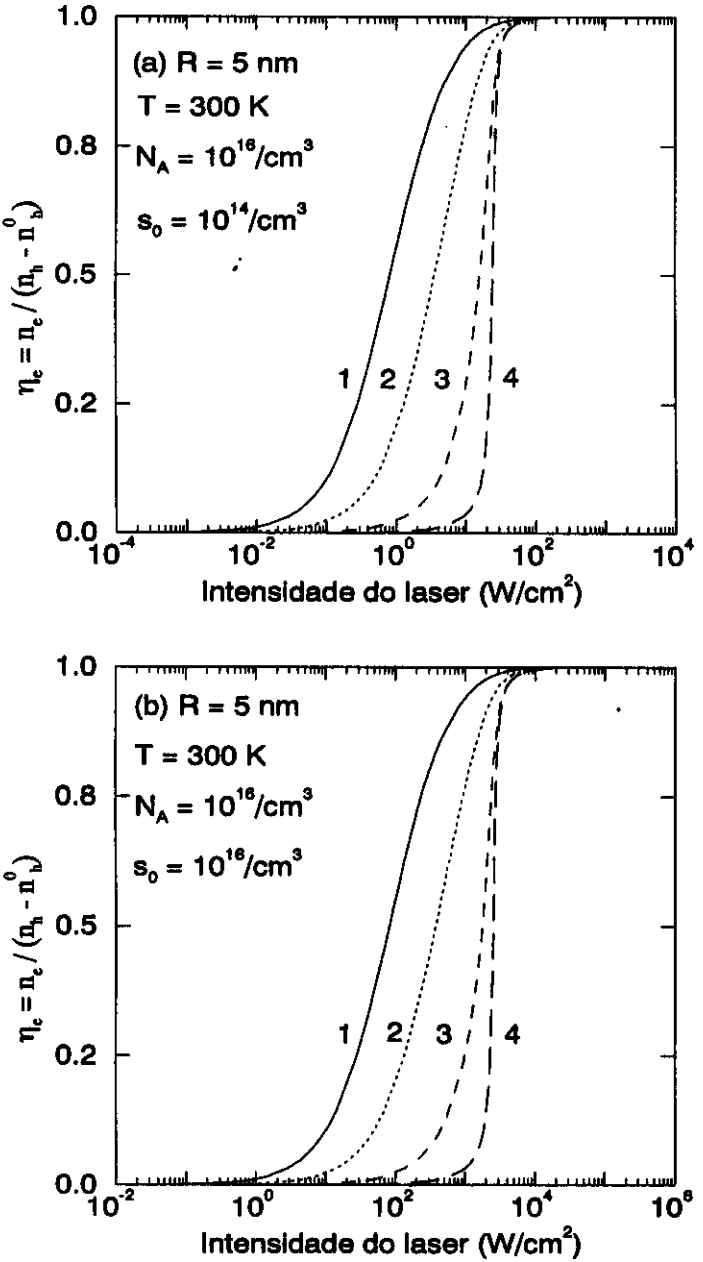



Fig. 5.8: Fração da pupulação de elétrons na sub-banda de condução (com referência à concentração de buracos de valência gerada pela excitação do laser) em função da intensidade do laser *cw*, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas (*a*) $s_0 = 10^{14}/cm^3$, (*b*) $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$.

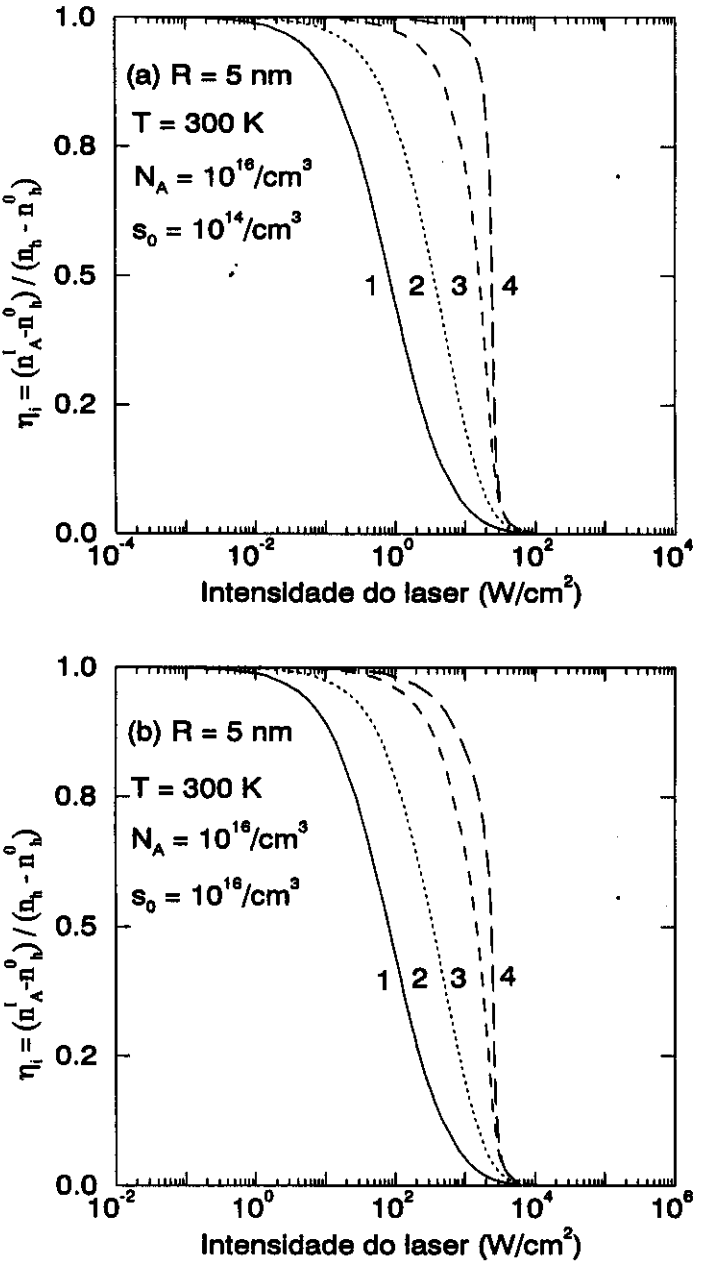
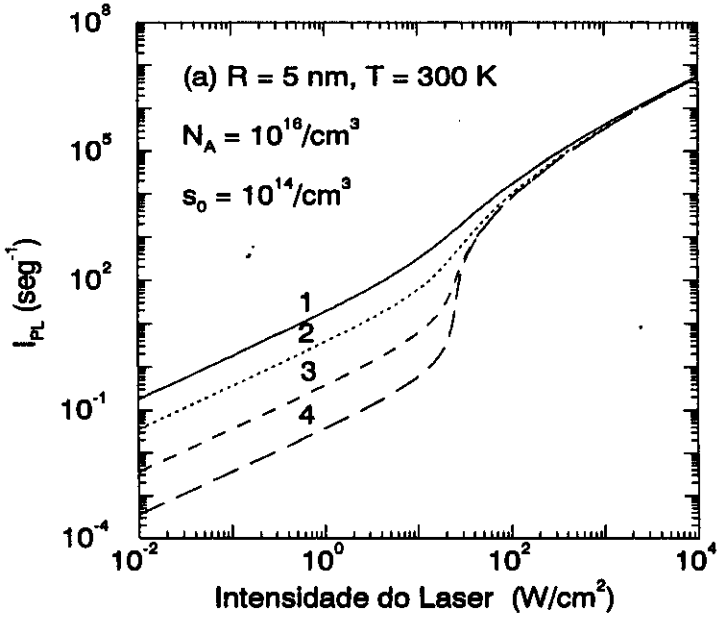



Fig. 5.9: Concentração efetiva de aceitadores ionizados (com referência à população efetiva de buracos de valência gerada pela excitação do laser), em função da intensidade do laser *cw*, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com raio $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$.



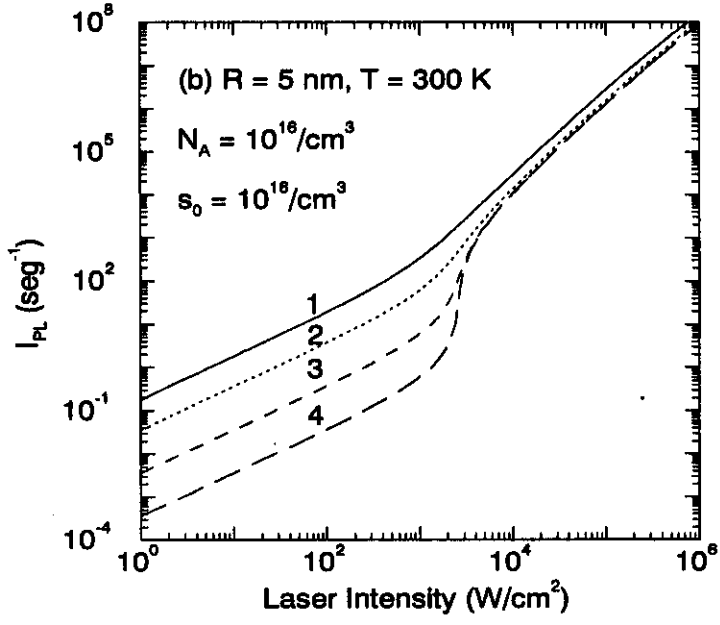




Fig. 5.10: Intensidade de fotoluminescência total integrada em função da intensidade do laser $cw$, à $T = 300\ K$, para um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com $R = 5\ nm$, para uma concentração de impurezas aceitadoras $N_A = 10^{16}/cm^3$, e armadilhas $(a)$ $s_0 = 10^{14}/cm^3$, $(b)$ $s_0 = 10^{16}/cm^3$. Resultados teóricos são apresentados para diferentes razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativas: curva 1: $r_T/r_R = 2$, curva 2: $r_T/r_R = 10$, curva 3: $r_T/r_R = 100$ e curva 4: $r_T/r_R = 1000$.

intensidade do laser característica $I_{ch}$ (vide figura 5.7), que corresponde ao mínimo do tempo de decaimento efetivo não radiativo (vide figura 5.5), ou seja, quanto menor o tempo de decaimento efetivo não radiativo tanto maior será a eficiência de captura do sistema. Também, para altas intensidades do laser, a saturação de armadilhas acontece e, como $n_e \approx n_h$, com $n_h^0 \ll n_h$ se obtém que $n_e = 1$ (vide Figura 5.8).

Finalmente, na figura 5.10 apresentamos a dependência da intensidade de fotoluminescência total integrada $PL$ ($I_{PL}$) para uma concentração fixa de impurezas aceitadoras em um $QWW$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ à temperatura ambiente, para duas concentrações de armadilhas e diferentes razões das taxas de captura e recombinação não radiativa em função da intensidade do laser. O comportamento da $I_{PL}$ com a intensidade do laser é semelhante ao comportamento da densidade de elétrons de condução com esta intensidade. Também, os efeitos de armadilhas são muito importantes no regime de baixas intensidades, como é aparente da figura 5.10. Poderíamos notar que um comportamento semelhante tanto da densidade de portadores quanto da $I_{PL}$ foi observado experimentalmente em $QW's$ de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ por Ding e colaboradores [27].

## 5.3 Conclusões

Estudamos em detalhe os efeitos de armadilhas e impurezas rasas aceitadoras à temperatura ambiente em um processo de fotoluminescência no estado estacionário para um fio quântico de $GaAs$-$(Ga, Al)As$, por meio de um cálculo quântico das taxas de transição das recombinações radiativas de elétrons de condução com buracos livres e buracos ligados às impurezas aceitadoras. Fizemos também um tratamento fenomenólogico das taxas não radiativas associadas com transições que envolvem

elétrons de condução entrando nas armadilhas e elétrons presos recombinando-se com buracos livres. Cálculos em função da intensidade do laser *cw* foram realizados para diversos tempos de vida de recombinação radiativa e não radiativa, para os quase-níveis de Fermi (ou potenciais químicos), densidade de portadores e varias eficiências de recombinação . Estudamos também a dependência da intensidade de fotoluminescência total integrada em função da intensidade do laser. Para nosso conhecimento este é o primeiro tratamento teórico dos efeitos de impurezas rasas e armadilhas no processo de fotoluminescência em fios quânticos cilíndricos. Infelizmente, não temos resultados experimentais que envolvam os estados de impurezas anteriormente mencionados para comparar com nossos resultados teóricos. Entretanto, nosso principal resultado teórico sugere que os efeitos de impurezas rasas e armadilhas são importantes no regime de baixas intensidades do laser, isto certamente é de significativa importância no entendimento quantitativo de futuros trabalhos experimentais de fotoluminescência em fios quânticos no estado estacionário à temperatura ambiente.

# Capítulo 6

# Conclusões Gerais e Perspectivas Futuras

Nos últimos anos, o estudo de efeitos quânticos em sistemas de baixa dimensionalidade têm motivado um grande esforço de pesquisa teórica e experimental que têm levado a desenvolver uma ampla área de estudo na física da materia condensada e consequentemente conduzido a um rápido avanço tecnológico em dispositivos eletrônicos semicondutores.

Motivados pela importância física e tecnológica destas pesquisas, o estudo das energias de ligação e os processos de recombinação associados a experimentos de fotoluminescência nos sistemas de baixa dimensionalidade têm sido amplamente discutidos teórica e experimentalmente. No caso dos processos de recombinação é de destacável importância a análise, a interpretação e a determinação dos canais de recombinação dominantes que dependem das condições específicas nas quais o experimento é desenvolvido. Neste sentido, recombinações radiativas associadas a portadores livres, impurezas, excitons, etc, têm sido amplamente discutidas na literatura em diferentes condições experimentais.

Neste contexto, calculamos as energias de ligação de impurezas rasas aceitado-

ras em um fio quântico cilíndrico de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ em função do raio do fio e da posição da impureza. Estas energias de ligação foram estudadas usando a aproximação da massa efetiva e o método variacional. Levamos em conta um poço de confinamento finito com uma profundidade determinada pela descontinuidade da banda proibida no fio quântico e no meio que o rodeia.

No cálculo das energias de ligação , encontramos que estas energias mudam tanto com o raio quanto com a posição da impureza no fio quântico. Estas energias aumentam quando o raio do fio diminui atingindo um máximo para um raio determinado e posteriormente estas energias diminuem indo para valores característicos do material em "bulk" quando o raio do fio é muito pequeno ou quando é muito grande. No caso em que a impureza se movimenta para o centro do fio ao longo do raio, observamos também que a energia de ligação aumenta. Nossos resultados estão em boa concordância com os resultados teóricos obtidos tanto em fios quânticos retangulares, quando as áreas são de dimensões comparáveis, quanto em poços quânticos de tamanhos semelhantes.

O estudo de impurezas rasas e armadilhas em sistemas de baixa dimensionalidade constitui um tópico de relevância tanto em pesquisa básica como na aplicação tecnológica. Um desenvolvimento sistemático foi feito para os processos de recombinação radiativa e não radiativa em fios quânticos de $GaAs$-$(Ga, Al)As$ que envolvem impurezas rasas e armadilhas excitados por um laser de onda contínua ($cw$) em um experimento de fotoluminescência em condições quase-estacionárias. No caso dos processos de recombinação com impurezas rasas, trabalhamos com a aproximação da massa efetiva e o modelo de banda parabólica com o objetivo de descrever elétrons e buracos. Calculamos as densidades de portadores, potenciais químicos de elétrons e buracos e os tempos de recombinação de portadores para baixas ($T$= 2 $K$) e altas temperaturas ($T$ = 300 $K$) para fios quânticos de 5 e 10 $nm$ de raio.

Os níveis profundos e as impurezas rasas determinam as propriedades ópticas dos materias semicondutores, desta forma as armadilhas ou níveis profundos atuam como centros de recombinação na transição dos elétrons da banda de condução para a banda de valência. Assim, em nossos resultados observamos que estes centros de recombinação mudam significativamente as densidades dos portadores, os quase-níveis de Fermi, os tempos de vida, etc. Neste caso ainda foram calculados os tempos de vida não radiativos de elétrons e buracos e as eficiências de captura dos diferentes estados de impurezas, observando que eles são sensíveis às diferentes concentrações de estados de impurezas e às razões $r_T/r_R$ das taxas de captura e recombinação não radiativa. Da mesma forma, evidências experimentais mostram que a fotoluminescência e os processos de recombinação em fios quânticos retangulares crescidos por diferentes técnicas estão em boa concordância com nossos resultados, quando as áreas são de dimensões comparáveis. Por outro lado, é necessário lembrar que em nosso estudo dos processos de recombinação não levamos em conta a recombinação excitônica, importante a baixas temperaturas, os processos Auger e os mecanismos de difusão espacial.

Para nosso conhecimento este é o primeiro tratamento teórico dos efeitos de impurezas rasas e armadilhas no processo de fotoluminescência em fios quânticos cilíndricos. Embora não existam resultados experimentais que envolvam simultaneamente os estados de impurezas anteriormente mencionados, nosso estudo sugere que os efeitos de impurezas rasas e armadilhas são importantes no regime de baixas intensidades do laser. Acreditamos, que isto seja de significativa importância no entendimento quantitativo de futuros trabalhos experimentais de fotoluminescência em fios quânticos, no estado estacionário à temperatura ambiente.

Como extensão de nosso trabalho, propomos estudar igualmente os processos de recombinação radiativa em poços quânticos, levando em conta os efeitos de impure-

zas rasas e armadilhas que seriam possíveis de comparar com resultados experimentais já existentes na literatura. Por outro lado, efeitos excitônicos tanto em poços quanto em fios quânticos são importantes de considerar a baixas temperaturas já que são temas de interesse tanto teórico como tecnológico para o entendimento da física dos sistemas de baixa dimensionalidade. Outros aspectos importantes de estudo nestes processos de recombinação que podem ser considerados são a mudança contínua da temperatura para uma intensidade do laser fixa e a presença de campos magnéticos associados aos fios quânticos.

# Apêndice A

# Energias de Ligação

O hamiltoniano para um elétron em um fio quântico na ausência de impurezas, com potencial de confinamento finito se pode resolver tanto para uma partícula livre $[V(\rho) = 0]$, quanto para uma partícula confinada $[V(\rho) = V_0]$.

No caso de uma partícula livre onde o raio do fio é $\rho \leq R$ temos que,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*}, \tag{A.1}$$

a qual se expressa como a equação diferencial

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi = E\psi \cdot \tag{A.2}$$

Usando o método de separação de variáveis, a função de onda neste caso pode ser escrita em coordenadas cilíndricas

$$\psi(r, \phi, z) = R(\rho)Q(\phi)Z(z) \cdot \tag{A.3}$$

Substituindo a eq.A.3 na eq. A.2 e dividindo por $R(\rho)Q(\phi)Z(z)$ se obtem

$$\frac{1}{R(\rho)}[\frac{d^2}{d\rho^2}R + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}R] + \frac{1}{Q(\phi)}\frac{1}{\rho^2}\frac{d^2}{d\phi^2}Q + \frac{1}{Z(z)}\frac{d^2}{dz^2}Z + \frac{2m^*E}{\hbar^2} = 0 \cdot \tag{A.4}$$

Fazendo

$$\begin{cases} Z(z) = e^{ikz} \\ Q(\phi) = e^{il\phi} \\ x = k\rho \end{cases} \tag{A.5}$$

e susbstituindo em eq.A.4 se obtem

$$x^2\frac{d^2R}{dx^2} + x\frac{dR}{dx} + [(\frac{2m^*E}{k^2\hbar^2} - 1)x^2 - l^2]R = 0 \cdot \tag{A.6}$$

Esta expressão é semelhante à Eq. 127 de Hildebrand [54]

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + x(a + 2bx^r)\frac{dy}{dx} + [c + gx^{2s} - b(1 - a - r)x^r + b^2x^{2r}]y = 0 \tag{A.7}$$

com solução

$$y = x^{\frac{(1-a)}{2}}e^{-(\frac{2bx^r}{r})}Z_p(\frac{\sqrt{g}}{s}x^s) \tag{A.8}$$

onde

$$p = \frac{1}{s}\sqrt{(\frac{1-a}{2}) - c} \tag{A.9}$$

comparando as eq.A.6 e eq.A.7 temos que $a = 1$, $b = 0$, $s = 1$, $c = -l^2$ e $g = \frac{2m^*E}{\hbar^2k^2}$ -1, e em consequência $p = l$.

De acordo com a eq.A.8 e para $\frac{\sqrt{g}}{s}$ real, obtemos como solução uma função

$$R(x) = Z_p(\sqrt{g}x) \tag{A.10}$$

e com $x = k\rho$, transformamos a eq.A.10 em uma função de Bessel,

$$R(\rho) = N_2 J_l(\sqrt{g}k\rho) \tag{A.11}$$

onde $N_2$ é uma constante.

Para $\rho$ igual ao raio do poço $\sqrt{g}k\rho$ é um zero da função de Bessel então fazemos que $\sqrt{g}k = k_{nl}$, obtendo

$$(\frac{2m^* E_{nl}}{\hbar^2 k^2} - 1)k^2 = k_{nl}^2, \tag{A.12}$$

ou

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k^2 + k_{nl}^2) \cdot \tag{A.13}$$

com as soluções eq.A.5 e eq.A.13, a função de onda eq.A.3 fica

$$\psi(\rho, \phi, z) = N_2 e^{ikz} e^{il\phi} J_l(k_{nl}\rho) \cdot \tag{A.14}$$

Para uma partícula confinada em um potencial $V = V_0$ para um raio $\rho \geq$ R o procedimento para encontrar a função de onda é o mesmo, só que a equação diferencial é modificada num fator $r_{nl}$ que envolve este potencial de confinamento. Logo a solução obtida é

$$\psi(\rho, \phi, z) = N_2 \frac{J_l(r_{nl}R)}{K_l(b_{nl}R)} e^{\mathbf{ik}\cdot\mathbf{z}} K_l(r_{nl}\rho), \tag{A.15}$$

com

$$r_{nl} = \sqrt{\frac{2mE_{nlk}}{\hbar^2} - k^2} \tag{A.16}$$

A constante de normalização $N_2$ é encontrada a partir de

$$\int dr\psi^*\psi = 1 \cdot \tag{A.17}$$

Utilizando a relação de ortonormalidade para as funções de Bessel,

$$\int_0^R \rho d\rho J_l^2(k_{nl}R\frac{\rho}{R}) = \frac{R^2}{2}J_{l+1}^2(k_{nl}R)\delta_{nn} \cdot \tag{A.18}$$

Logo a solução geral para $\psi(\rho,\phi,z)$ eq.A.14, nos dois casos é

$$\psi(\rho,\phi,z) = N_2 \begin{cases} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}}e^{il\theta}J_l(r_{nl}\rho), & \rho \leq R \\ \\ \frac{J_l(r_{nl}R)}{K_l(b_{nl}R)}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}}K_l(r_{nl}\rho), & \rho \geq R, \end{cases} \tag{A.19}$$

com

$$N_2^{-2} = \pi L R^2 \left( \frac{K_{l-1}(b_{nl}R)K_{l+1}(b_{nl}R)J_l^2(r_{nl}R)}{K_l^2(b_{nl}R0} - J_{l-1}(r_{nl}R)J_{l+1}(r_{nl}R)\cdot \right) \tag{A.20}$$

Para obter a constante de normalização na presênça da impureza se deve cumprir a condição de normalização eq. A.17, então

$$\begin{aligned} &2\pi N_3^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz\{\int_0^R \rho d\rho J_0^2(r_{10}\rho)e^{-2\lambda\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+z^2}} + \\ &\frac{J_0^2(r_{10}R}{K_0^2(b_{10}R)}\int_R^{\infty} \rho d\rho K_0^2(b_{10}\rho)e^{-2\lambda\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+z^2}}\} = 1 \end{aligned} \tag{A.21}$$

se consideramos que

$$I_1 = 2\int_0^{\infty} dz e^{-2\lambda\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+z^2}}, \tag{A.22}$$

da qual obtemos como solução

$$I_1 = 2|\rho-\rho_i|K_1(2\lambda|\rho-\rho_i|), \tag{A.23}$$

onde a função $K_1(2\lambda|\rho - \rho_i|)$ cumpre com a condição

$$\frac{d}{d\lambda}K_0(2\lambda|\rho - \rho_i|) = -2|\rho - \rho_i|K_1(2\lambda|\rho - \rho_i|), \tag{A.24}$$

transformamos a eq. A.21 em

$$\begin{aligned} -N_3^2\frac{d}{d\lambda}\int_0^{2\pi} d\phi\{\int_0^R \rho d\rho J_0^2(r_{10}\rho)K_0(2\lambda|\rho - \rho_i|) + \\ +\frac{J_0^2(r_{10}R)}{K_0^2(b_{10}R)}\int_R^{\propto} \rho d\rho k_0^2(b_{10}\rho)K_0(2\lambda|\rho - \rho_i|)\} = 1 \cdot \end{aligned} \tag{A.25}$$

Por outro lado, de acordo com Jackson [55], $K_0(2\lambda|\rho - \rho_i|)$ se pode escrever como:

$$\begin{aligned} K_0[2\lambda(\rho^2 + \rho_i^2 - 2\rho\rho_i cos(\pi))] = I_0(2\lambda\rho_<)K_0(2\lambda\rho_>) + \\ + \sum_{m=1}^{\propto} cos(m\pi)I_m(2\lambda\rho_<)K_m(2\lambda\rho_>) \end{aligned} \tag{A.26}$$

onde $\rho_<$ ($\rho_>$) é o menor (maior) entre $\rho$ e $\rho_i$.

Subtituindo a expressão anterior na condição de normalização (eq. A.25) temos

$$N_3^2 = -2\pi\frac{d}{d\lambda}(H + M), \tag{A.27}$$

onde

$$H = \int_0^R \rho J_0^2(r_{10}\rho)I_0(2\lambda\rho_<)K_0(2\lambda\rho_>)d\rho \tag{A.28}$$

e

$$M = \frac{J_0^2(r_{10}R)}{K_0(b_{10}R)}\int_R^{\propto} \rho K_0^2(b_{10}\rho)I_0(2\lambda\rho_<)K_0(2\lambda\rho_>)d\rho \cdot \tag{A.29}$$

A interação energética entre o campo de radiação e um sistema atômico pode escrever-se da seguinte forma [47]

$$H_i = \sum_j -(\frac{e}{mc})A_j \cdot p + (\frac{e^2}{mc^2})A_j^2, \tag{A.30}$$

onde a soma é sobre todos os elétrons do sistema, $e$ a cargo do elétron, $c$ a velocidade da luz, $\vec{A}_j$ o vetor potencial e $\vec{p}$ o momentum. Fazemos duas simplificações para facilitar nosso cálculo: (i) assumimos a aproximação de um elétron, (ii) não levamos em conta as aproximações de segunda ordem, que são importantes nos desemvolvimentos de trabalhos de óptica não linear. Logo,

$$H_i = -(\frac{e}{mc})\vec{A} \cdot \vec{p} \tag{A.31}$$

onde,

$$A = \sum_\lambda \{A_{0\lambda}\hat{\varepsilon}_\lambda exp[i(k_\lambda \cdot r - \omega_\lambda t)] + A^*_{0\lambda}\hat{\varepsilon}_\lambda exp[-i(k_\lambda \cdot r - \omega_\lambda t)]\} \tag{A.32}$$

o subindice $\lambda$ envolve as duas direções de polarização e $\widehat{\varepsilon_\lambda}$ é o vetor unitário que denota uma das duas direções de polarização . Desta forma

$$H_{int} = \frac{e}{m_0 c} A_0 \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p} \cdot \tag{A.33}$$

Lenando em conta a expressão para $H_{int}$, as probabilidades de transição por unidade de tempo por unidade de comprimento entre dois estados quânticos, são calculdas por meio da regra de ouro de Fermi

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} |< f \mid H_{int} \mid i >|^2 \, \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \cdot \tag{A.34}$$

Aqui $W$ é a taxa de transição entre níveis atômicos de energia $E_i$ e $E_f$ que se obtêm da soma de todas as componentes degeneradas do estado inicial ($i$) e final ($f$) levando em conta os modos de polarização $\lambda$.

Para o caso de absorção interbanda temos

$$W = \frac{2\pi}{\hbar}(\frac{e}{m_0 c})^2 A_0^2 \sum_{n,m,\alpha,\beta} |< F_{n,\beta}(r)U_{c,\beta}(r) \mid \widehat{\varepsilon} \cdot p \mid F_{m,\alpha}(r)U_{v,\alpha}(r) \mid^2 \times \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (A.35)$$

onde $\alpha_f$ é a constante de estrutura fina, $n$, $m$ são os números quânticos que descrivem os estados quânticos que entram no processo, que para nosso caso, são os estados fundamentais da banda de condução ($n = c$) e valência ($m = v$) respectivamente. As funções $F_{m,\alpha}(r)U_{v,\alpha}(r)$ e $F_{n,\beta}(r)U_{c,\beta}(r)$ descrevem o comportamento das funções de onda dos estados inicial e final as quais levam em conta as expressões $U_{v,\alpha}(r)$ ou $U_{c,\beta}(r)$ que contêm o efeito de spin que é subindicado por $\alpha$ e $\beta$.

Trabalhando na primeira zona de Brillouin e no estado fundamental ($n = 1$, $m = 1$) temos que

$$\omega_A = \frac{1}{2}(\frac{A_0 e}{\hbar m_0 c})^2 \sum_{\alpha,\beta} \mid \widehat{\varepsilon} \cdot \vec{p}^{c,v}_{\alpha,\beta} \mid^2 |< f_c(\rho) \mid f_v(\rho) >|^2 . \frac{\Theta(\hbar\omega - \varepsilon_{eff})}{\sqrt{\hbar\omega - \varepsilon_{eff}}} \quad (A.36)$$

Levando em conta o efeito de spin ($\alpha$, $\beta$) nas funções de Bloch temos que

$$< s \mid p_x \mid x >=< s \mid p_y \mid y >=< s \mid p_z \mid z >, \quad (A.37)$$

onde se cumpre que [39]

$$< s \mid p_y \mid x >=< s \mid p_x \mid y >=< s \mid p_x \mid z >= 0 \cdot \quad (A.38)$$

Assim, expressamos a soma que envolve o vetor de polarização e o momentum como

$$\sum_{\alpha} \mid \widehat{\varepsilon} \cdot p_{\alpha}^{c,v} \mid^2 = m_0^2 \Pi^2 (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) \tag{A.39}$$

onde $\varepsilon_x$, $\varepsilon_y$ são as componentes do campo e $\Pi^2$ é o quadrado do elemento de matriz [39]

$$\Pi^2 = \frac{1}{m_0^2} \mid < s \mid p_x \mid x > \mid^2 \tag{A.40}$$

A amplitude do vetor potencial se pode expressar em função da intensidade do feixe laser

$$A_0^2 = \frac{2\pi\hbar c^2}{\varepsilon_r \omega_\lambda} N_\lambda = \frac{2\pi c}{\eta \omega_\lambda^2} I \cdot \tag{A.41}$$

Desta forma

$$\omega_A = \frac{4\pi\hbar\alpha_f \sqrt{2\mu_{c,v}} (\frac{P_{cv}^2}{2})}{\eta(\omega) m_0^2 (\hbar\omega)^2} |\langle f_c(\rho) | f_v(\rho) \rangle|^2 \frac{\theta(\hbar\omega - \varepsilon_{eff})}{\sqrt{\hbar\omega - \varepsilon_{eff}}} I \cdot \tag{A.42}$$

De maneira semelhante como na eq. A.39 o termo que inclue os efeitos de polarização para calcular os processos de recombinação é

$$\sum_{\alpha=1,2} \int \frac{d^3 r}{(2\pi)^3} = \frac{16\pi}{3} m_0^2 \Pi^2 \cdot \tag{A.43}$$

Seguindo o mesmo processo feito para $\omega_A$ calculamos as taxas de racombinação com buracos livres, $\omega_{cv}$, e com buracos ligados às impurezas aceitadoras, $\omega_{cA}$

$$\omega_{cv} = \frac{4\pi e^2}{m_0^2} \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{|< f_c(\rho) \mid f_v(\rho) >|^2}{\eta(\omega)\omega} (\frac{p_{cv}^2}{2}) [\varepsilon_{\lambda x}^2 + \varepsilon_{\lambda y}^2] \times$$
$$\int dk n_c(k) n_v(k) \delta[\frac{\hbar^2}{2\mu_{cv}} - (\hbar\omega - \varepsilon_{eff})] \cdot \tag{A.44}$$

Considerando as diferentes expressões para as densidades de elétrons e buracos ( eq. 4.1 e eq. 4.12) expressamos $\omega_{cv}$ como

$$\omega_{cv} = \frac{16}{3}\alpha_f(\frac{\varepsilon_{eff}}{\hbar})\frac{n(\varepsilon_{eff})(\frac{P_{cv}^2}{2})}{m_0^2c^2}|\langle f_c(\rho)|f_v(\rho)\rangle|^2 n_0 Q(n_e, n_h) \tag{A.45}$$

onde $Q(n_e, n_h)$ é dada na eq. 4.17 e

$$\omega_{cA} = \frac{2b\eta^3\alpha_f}{(2\pi)^2\varepsilon m_0^2\hbar c^2}\int_0^{\propto} dk \sum_i |< A_\alpha(r) \mid F_{n,\alpha}^c(r) >|^2 \times$$
$$n_c(k)n_A(k)[\varepsilon(\rho_i) + \frac{\hbar^2k^2}{2m_c}] \tag{A.46}$$

onde $b$ é semelhante ao termo $B.14$, $A_\alpha(r)$ é a expressão que descreve a função de onda dos estados de impurezas. Considerando estas expressões temos que

$$\omega_{cA} = \frac{32}{3\hbar}N_A\alpha_f\frac{n(\varepsilon_{eff})(\frac{P_{cv}^2}{2})}{m_0^2c^2}\int_0^R \rho_i d\rho_i J_{cA}(\lambda, \rho_i)n_A[E_A(\rho_i)]P(\rho_i), \tag{A.47}$$

onde $J_{cA}$ é a expressaõ correspondiente à eq. 4.21 que leva em conta a função de onda tentativa com sua respectiva constante de normalização , o parâmetro variacional e a posição da impureza.

# Bibliografia


[1] L. Esaki and R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM. J. Res. Develop*, 14:61–65, 1970.

[2] W. Kohn and J. M. Luttinger. Theory of donors states in silicon. *Phys. Rev. B*, 98:915–925, 1955.

[3] G. Bastard. Hydrogenic impurity in quantum well: A simple model. *Phys. Rev. B*, 24:4714–4722, 1981.

[4] G. Bastard. Hydrogenic impurity states in a quantum well. *Surf. Sci*, 113:165–169, 1982.

[5] S. Chaudhuri. Hydrogenic impurity ground state in $GaAs$-$Al_xGa_{1-x}As$ multiple quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 28:4480–4488, 1983.

[6] R. L. Greene and K. K. Bajaj. Energy levels of hydrogenic imputity in $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$. *Solid State Commun*, 45:825–829, 1983.

[7] C. Mailhiot, Y. C. Chang, and T. C. McGill. Energy spectra of donors in $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well structures in the effective-mass approximation. *Phys. Rev. B*, 26:4449–4457, 1982.

[8] 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.

[9] S. Fraizzoli and A. Pasquarello. Binding energies of ground and exited states of shallow acceptors in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum-wells. *Phys. Rev. B*, 42:5349–5352, 1990.

[10] S. Fraizzoli, F. Bassani, and R. Buczko. Shallow donor impurities in $GaAs$-$Al_xGa_{1-x}As$ quantum-well structures: Role of the dielectric-constant mismatch. *Phys. Rev. B*, 41:5096–5014, 1990.

[11] G. N. Carneiro, G. Weber, and L. E. Oliveira. Binding energies and intra-donor absorption spectra in $GaAs$-$GaAlAs$ quantum wells. *Semicond. Sci. Technol*, 10:41–44, 1995.

[12] 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*, 34:8676–8683, 1986.

[13] J. López-Gondar, J. d'Albuquerque Castro, and L. E. Oliveira. Electric-field effects on shallow impurity states in $GaAs$-$(Ga, Al)As$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, 42:7069–7077, 1990.

[14] G. W. Brayant. Hydrogenic impurity states in quantum well wires: Shape effects. *Phys. Rev. B*, 31:7812–7820, 1985.

[15] R. L. Greene and K. K. Bajaj. Energy levels hydrogenic impurity states in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells structures. *Solid State Commun*, 54:825–829, 1985.

[16] N. Porras-Montenegro, J. López-Gondar, and L. E. Oliveira. Binding energies and density of impurity states of shallow hydrogenic impurities in cylindrical quantum-well wires. *Phys. Rev. B*, 43:1824–1827, 1991.

[17] 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.

[18] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, D. J. Eilenberger, P. W. Smith, A. C. Gossard, and W. T. Tsang. Large room-temperature optical nonlinearity in $GaAs$-$Al_xGa_{1-x}As$ multiple quantum well structures. *Appl. Phys. Lett*, 41:679–681, 1982.

[19] R. C. Miller, A. C. Gossard, W. T. Tsang, and O. Munteanu. Extrinsic photoluminescence form $GaAs$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, 25:3871–3877, 1982.

[20] J. E. Fouquet and A. E. Siegman. Room-temperature photoluminescence times in a $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ molecular beam epitaxy multiple quantum well structure. *Appl. Phys. Lett*, 46:280–282, 1985.

[21] N. Kamata, K. Yamada, H. Tsuchiya, H. Katahama, Yukio Shakuda, and Takeo Suzuki. Separation of non-radiative and below-gap emission lifetimes in a heavily Si-doped $GaAs/AlGaAs$ quantum well. *J. Lum. Phys*, 48:763–767, 1991.

[22] H. Haug and S. W. Koch. Semiconductor laser theory with many-body effects. *Phys. Rev. A*, 39:1887–1898, 1989.

[23] K.-H. Schlaad, Ch. Weber, J. Cunningham, C. V. Hoof, G. Borghs, G. Weimann, W. Schlapp, H. Nickel, and C.Klingshirn. Many-particle effects and

nonlinear optical properties of $GaAs/(Al,Ga)As$ multiple-quantum-well structures under quasistacionary excitation conditions. *Phys. Rev. B*, 43:4268–4275, 1991.

[24] M. Gurioli, A. Vinattieri, M. Colocci, C. Deparis, J. Massies, G. Neu A. Bosacchi, and S. Frabchi. Temperature dependence of the radiative and noradiative recombination time in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 44:3115–3124, 1991.

[25] P. J. Bishop, M. E. Daniels, B. K. Ridley, and K. Woodbridge. Radiative recombination in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, 45:6686–6691, 1992.

[26] R. Cingolani and K. Ploog. Frequency and density dependent radiative recombination processes in III-V semiconductor quantum wells and superlattices. *Adv. Phys*, 40:5365–623, 1991.

[27] Y. J. Ding, C. L. Guo, J. B. Khurgin, K.-K., and J. L. Merz: Characterization of recombination processes in multiple narrow asymetric coupled quantum wells based on the dependence of photoluminescence on laser intensity. *Appl. Phys. Lett*, 60:2051–2053, 1992.

[28] Y. J. Ding, C. L. Guo, S. Li, J. B. Khurgin, K. K. Law, and J. L. Merz. Continuous-wave photoluminescence excitation spectra of multiple narrow-stepped quantum wells: Evidence for saturation of interface traps. *Appl. Phys. Lett*, 75:154–156, 1992.

[29] G. Bongiovanni and J. L. Staehli. Density dependence of electron-hole plasma lifetime in semiconductor quantum well. *Phys. Rev. B*, 46:9861–9864, 1992.

[30] L. E. Oliveira and M. de Dios-Leyva. Radiative lifetimes, quasi-fermi-levels, and carrier densities in $GaAs$-$(Ga, Al)As$ quantum-well photoluminescence under steady-state excitation conditions. *Phys. Rev. B*, 48:15092–15102, 1993.

[31] D. S. Citrin. Long intrinsic radiative of excitons in quantum wires. *Phys. Rev. Lett.*, 69:3393–3396, 1992.

[32] J. F. Ryan, R. A. Taylor, A. J. Turberfield, A. Maciel, J.M. Worlock, A. C. Gossard, and W. Wiegmann. Time-resolved photoluminescence of two-dimensional hot carriers in $GaAs$-$AlGaAs$ heterostructures. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1841–1844, 1984.

[33] D. Oberhauser, H. Kalt, W. Schlapp, H. Nickel, and C. Klingshirn. Exciton dynamics in $GaAs/GaAlAs$ multiple quantum well structures. *J. Lum. Phys*, 48 & 49:717–720, 1991.

[34] O. Brandt, K. Kanamoto, M. Gotoda, T. Isu, and N. Tsukada. Recombination processes and photoluminescence intensity in quantum wells under steady-state and transient conditions. *Phys. Rev. B*, 51:7029–7035, 1995.

[35] A. Fujiwara, K. Muraki, S. Fukatsu, and Y. Shiraki. Enhancement of nonradiative recombination due to resonant electron capture in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 51:14324–14329, 1995.

[36] G. Mayer, F. E. Prins, G. Lehr, H. Schweizer, H. Leier, B. E. Maile, J. Straka, A. Forchel, and G. Weimann. Carrier relaxation in intermixed $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum wires. *Phys. Rev. B*, 47:4060–4063, 1993.

[37] B. K. Rydley. Kinetics of radiative recombination in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 41:12190–12196, 1990.

[38] W. Pickin and J. P. R. David. Carrier decay in *GaAs* quantum wells. *Appl. Phys. Lett*, 56:268–270, 1990.

[39] G Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostrucures.* Les Editions de Physique, Les Ulis, France, 1988.

[40] M. Jaros. *Physics and Applications of Semiconductors Microstructures.* Oxford scince publications, Department of Physics the University, Newcastle upon Tyne, 1971.

[41] H. N. Spector and J. Lee. Relativistic one-dimensional hydrogen atom. *Am. J. Phys*, 53:248–251, 1985.

[42] L. E. Oliveira. Spatially dependent sreening calculation of binding energies of hydrogenic impurity states in $GaAs$-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, 38:10641–10644, 1988.

[43] B. I. Shklovskii and A. L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors.* Springer-Verlag, A. F. IOFFE Physico-Technical Institute, 1971.

[44] J. W. Brown and H. N. Spector. Hydrogen impurities in quantum well wires. *J. Appl. Phys*, 59:1179–1186, 1986.

[45] R. C. Miller, D. A. Kleinman, and A. C. Gossard. Energy-gap discontinuities and effective masses for $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ qantum wells. *Phys. Rev. B*, 29:7085–7087, 1984.

[46] W. T. Masselink, Y.-C. Chang, and H. Morkoç. Binding energies of acceptors in $GaAs$-$Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, 28:7373–7378, 1983.

[47] Willardson Beer. *Semiconductors and Semimetals.* Academic Press, Academic Press, INC, 1982.

[48] A. Vojak, W. D. Laidig, N. Holonyak, J. J. Coleman JR, M. D. Camras and, and P.D. Dapkus. High-energy (visible-red) stimulated emission in *GaAs*. *J. Appl. Phys*, 52:621–624, 1981.

[49] G.D. Mahan and L. E. Oliveira. Quasi-fermi-levels in quantum-well photoluminescence. *Phys. Rev. B*, 44:3150–3156, 1991.

[50] W. Shockley and W. T. Read Jr. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Phys. Rev.*, 87:835–842, 1952.

[51] Y. J. Ding, J. V. D. Veliadis, and J. B. Khurgin. Nonradiative recombination and saturation of traps in multiple intrinsic quantum wells. *Appl. Phys. Lett*, 45:1914–1918, 1994.

[52] P. Michler, T. Forner, V. Hofsä$\beta$, F. prins, K. Zieger, F. Scholz, and A. Hangleiter. Nonradiative recombination via strongly localized defects in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 49:16632–16636, 1994.

[53] S. T. Pérez-Merchancano, M. de Dios-Leyva, and L. E. Oliveira. Radiative recombination in cylindrical $GaAs$-$(Ga, Al)As$ quantum-well wires under quasistationary excitation conditions. *Phys. Rev. B*, 53:12985–12989, 1996.

[54] Francis B. Hildebrand. *Advanced Calculus for Applications.* Prentice-Hall, inc, New Jersey, 1980.

[55] Jonh David Jackson. *Classic Electrodinamic.* John Wiley & Sons, inc, New York, 1974.