

Vinicius Andrade de Oliveira

**Efeitos da quantização magnética nas transições
ópticas de poços quânticos no regime de
temperatura ambiente**

São Carlos - SP

2025

Vinicius Andrade de Oliveira

**Efeitos da quantização magnética nas transições ópticas
de poços quânticos no regime de temperatura ambiente**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos para obtenção do título de Mestre em Física.

Universidade Federal de São Carlos

Departamento de Física

Orientador: Marcio Daldin Teodoro

São Carlos - SP

2025

Agradecimentos

Agradeço a toda a minha família, especialmente aos meus pais, Walter e Sonia, pelo apoio e amor incondicional, sempre orando e zelando por mim. Aos meus irmãos, Wagner e Miriã, por me tratarem com tanto amor, carinho e paciência, acalmando todo o caos ao meu redor. Que, apesar de todas as brigas, sempre foram meu porto seguro.

Aos colegas de laboratório e do mezanino, por tornarem os dias mais leves e agradáveis: Gabriel, André, Tiago, Andreij, Fred, Gabriel A. e Chico. Em especial à Alessandra, por me ajudar em todo o processo de adaptação a São Carlos;

Aos Profs. Drs: Carlos Trallero-Giner e Victor Lopez-Richard, pela paciência e atenção nas discussões de conceitos teóricos e pelos bons cafés;

Aos Profs. Drs: Pedro Pablo González Borrero, Eduardo Vicentini e Valdirlei Fernandes Freitas, por me apresentarem ao universo da pesquisa científica;

Ao orientador, Prof. Dr. Márcio Daldin Teodoro, por me aceitar como orientando e por toda a paciência e compreensão, essenciais para o meu desenvolvimento como pesquisador;

Ao Prof. Dr. Euclides Marega Junior e o *Institute of Nanoscale Science and Engineering- University of Arkansas* pelas amostras crescidas;

À CAPES pelo auxílio financeiro, que possibilitou que esse trabalho acontecesse.

Por fim, agradeço a todos os amigos de Guarapuava e região que contribuíram, direta ou indiretamente, para a concretização deste trabalho.

Dedico este trabalho à minha família, que sempre orou por mim

Resumo

Esforços da comunidade científica têm sido dedicados ao desenvolvimento e à incorporação de semicondutores de alta qualidade nas mais diversas aplicações. Grande parte desse trabalho foi direcionado para as técnicas de crescimento, como a epitaxia por feixes moleculares, possibilitando a fabricação de nanoestruturas, como os poços quânticos, por exemplo. Entre os materiais utilizados para a confecção de nanoestruturas destaca-se o arseneto de gálio (GaAs), um composto binário que possui alta versatilidade e compatibilidade com outros compostos da família III-V. Dentre os inúmeros avanços realizados em termos científicos, atualmente, as tecnologias disponíveis permitem a aplicação de técnicas, como magneto-fotoluminescência em diferentes regimes de temperatura e com alta estabilidade térmica e mecânica, viabilizando a investigação dessas estruturas em regimes que até a pouco tempo não eram acessíveis. No presente trabalho, foram investigados o comportamento dos níveis de energia de poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos em diferentes orientações do substrato de GaAs, utilizando a técnica de magneto-fotoluminescência. Os resultados revelaram transições ópticas envolvendo níveis de energia associados a transição elétron-buraco pesado e elétron-buraco leve à 0 T. O aumento do campo magnético induziu a emissão de dois novos níveis de energia que ainda não haviam sido observados em temperatura ambiente. A primeira transição envolve elétron e o segundo nível de buraco pesado, se mostrando invariante em relação a polarização de spin. A segunda transição apresentou um comportamento assimétrico, em que para a polarização de spin up o nível corresponde a elétrons recombinando com o primeiro nível de Landau de buracos leves, e a polarização de spin down foi associada a transição entre elétrons e o terceiro nível de Landau de buracos pesados. Portanto, a técnica de magneto-fotoluminescência aplicada em temperatura ambiente permitiu medir diretamente níveis excitados e a assimetria na emissão de determinada população de spin que ainda não havia sido reportada.

Palavras-chaves: Fotoluminescência, Poços quânticos, Campo Magnético, Temperatura Ambiente

Abstract

Efforts from the scientific community have been devoted to the development and incorporation of high-quality semiconductors into different applications. A large part of this effort was focused on growth techniques, through molecular beam epitaxy, enabling the fabrication of nanostructures such as quantum wells. Along the materials used for nanostructures growth, Gallium Arsenide (GaAs) stands out, as this binary offers high versatility and compatibility with other III-V compounds. Among the scientific advances made, currently, the technology available allow the application of techniques, like magnetophotoluminescence in different temperatures range with high thermal and mechanical stability, enabling the investigation of these structures in a way that was not accessible until recently. In the present work, we investigate the energy levels of quantum wells GaAs/AlGaAs grown on a GaAs substrate with different orientation using magnetophotoluminescence technique. The results reveal optical transition associate with the energy levels of the transition electron-heavy hole and electron light-hole at 0 Tesla. Increasing the magnetic field induced the emission of two new energy levels that had not yet been observed at room temperature. The first transition involves an electron and the second heavy-hole level, showing invariance in spin polarization. The second transition exhibited asymmetric behaviour, for spin up polarization, the level corresponds to electrons recombining with the first Landau level of light holes, while for spin down polarization, it was associated with the transition between electrons and the third Landau level of heavy holes. Therefore, the magnetophotoluminescence technique applied at room temperature allowed the direct measurement of excited levels and the asymmetry in the emission of a specific spin population, which had not yet been reported.

Key-words: Photoluminescence, Quantum well, Magnetic Field, Room Temperature

Lista de ilustrações

Figura 1 – (a) Estrutura blenda de zinco para o Arseneto de Gálio e Arseneto de Alumínio. Esferas em azul representam átomos de Ga(Al) e esferas em rosa representam átomos de As. (b) A correspondente rede recíproca com os pontos de alta simetria (Γ, Σ, X, L) da 1ª zona de Brillouin.	6
Figura 2 – (a) Banda eletrônica do GaAs e (b) AlAs calculadas à temperatura de 0 K, acompanhado de um zoom próximo ao ponto Γ da estrutura, identificando as diferentes simetrias da banda de valência.	8
Figura 3 – Geometria das ligações químicas do GaAs para as diferentes orientações do substrato. A) [100], B) [111]A C), [211]A e D) [311]A. Esferas em azul representam átomos de Ga e esferas em rosa representam átomos de As.	10
Figura 4 – (a) Banda vibracional do GaAs e (b) AlAs calculadas pela teoria da densidade funcional perturbada.	11
Figura 5 – Energia do gap do $Al_xGa_{1-x}As$ nos pontos Γ, X e L , para diferentes concentrações de x.	12
Figura 6 – Representação esquemática de um poço infinito.	14
Figura 7 – Representação esquemática de um poço finito de GaAs com barreiras de $Al_{1-x}Ga_xAs$, com os dois primeiros níveis de energia ilustrados.	17
Figura 8 – Representação do efeito Zeeman com as respectivas regras de seleção. Em (a) está o estado inicial ($l=2$) e estado final ($l=1$) na ausência de campo magnético. Em (b) está a separação dos estados com diferentes momentos decorrente da aplicação de campo magnético.	23
Figura 9 – Medidas da energia de recombinação óptica do par elétron-buraco em uma amostra de InSb <i>bulk</i> em função do campo magnético aplicado. Em aproximadamente 3 Tesla ocorre a separação dos modos do elétron e fônons LO.	24
Figura 10 – Exemplos das curvas correspondente a distribuição Loretziana (curva em azul) e Gaussiana (curva em preto).	28
Figura 11 – Representação do processo de <i>band-tail</i> demonstrando uma diferença na energia observada na fotoluminescência e na energia do gap.	29
Figura 12 – Ilustração da montagem experimental de uma máquina de epitaxia por feixe molecular.	32
Figura 13 – Representação esquemática da amostra de poço quântico crescida na direção [100] e (b) [311]A.	33

Figura 14 – (a) Diagrama do processo de fotoluminescência em $\vec{k} = 0$. O processo ocorre com a incidência de um feixe de luz com energia $h\nu_L$ promovendo um elétron da banda de valência para a banda de condução e gerando um buraco na banda de valência. Após a excitação, ambos os portadores sofrem o processo de relaxação para os fundos das respectivas bandas até a ocorrência da recombinação com uma energia $h\nu$. (b) A densidade de estados para o processo de luminescência.	34
Figura 15 – Representação da luz propagando no eixo z. Em vermelho, tem-se um campo magnético oscilando em x e, em azul, o campo elétrico oscilando em y. À direita, está a decomposição do vetor \vec{E} em suas componentes x e y.	35
Figura 16 – Diferentes tipos de polarização. Em (a), polarização linear, em que o campo elétrico oscila apenas em um plano. Em (b), a polarização circular, em que o campo elétrico oscila com a mesma amplitude enquanto rotaciona. Em (c), a polarização elíptica, em que o campo elétrico oscila com diferentes amplitudes enquanto rotaciona.	36
Figura 17 – Representação de um feixe polarizado a direita $\sigma+$ e abaixo a representação de um feixe polarizado a esquerda $\sigma-$	36
Figura 18 – Regras de seleção para: (a) o GaAs na forma Bulk, (b) GaAs em uma estrutura de poço quântico.	37
Figura 19 – Diagrama do esquema óptico utilizado para a técnica de fotoluminescência.	38
Figura 20 – Representação esquemática do criostato utilizado para a técnica de magneto-fotoluminescência em temperatura ambiente.	39
Figura 21 – Espectros de fotoluminescência obtidos para a amostra [100] à 300 K, junto a uma análise qualitativa das emissões observadas. Em a) está a amostra com a luz polarizada a direita e em b) a luz polarizada a esquerda.	41
Figura 22 – Comparação do espectro de fotoluminescência da amostra [100] à 300 K com diferentes polarizações, com campo magnético aplicado de valores de 0, 3, 5, 7, 8 e 9 Tesla. O espectro em preto é a luz polarizada à direita e em vermelho a luz polarizada à esquerda.	42
Figura 23 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [100] tomando como base as emissões conhecidas em 0 Tesla em ambas as polarizações. A esquerda o ajuste para a polarização $\sigma-$ e a direita o ajuste para $\sigma+$	43
Figura 24 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [100] levando como base o surgimento de mais uma emissão no lado de alta energia que desloca-se rapidamente com o campo magnético. A esquerda o ajuste para a polarização $\sigma-$ e a direita o ajuste para $\sigma+$	44

Figura 25 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [100] levando como base o surgimento de mais duas emissões com o campo magnético. A esquerda o ajuste para a polarização $\sigma-$ e a direita o ajuste para $\sigma+$	45
Figura 26 – Espectros de fotoluminescência obtido para a amostra [311]A à 300 K. Em a) são apresentados os espectros de PL em função do campo magnético com a luminescência polarizada a direita e em b) com luz polarizada a esquerda.	46
Figura 27 – Comparação do espectro de fotoluminescência da amostra [311]A à 300 K com diferentes polarizações, com campo magnético de 0, 3, 5, 7 e 9 Tesla. O espectro em preto é a luz polarizada a direita e em vermelho a luz polarizada a esquerda.	47
Figura 28 – Energia das curvas obtidas dos ajustes com quatro curvas gaussianas em função do campo magnético para a amostra A) [100] e B) [311]A. Os círculos fechados indicam dados da polarização circular $\sigma+$ e os círculos abertos a polarização $\sigma-$	48
Figura 29 – Diagrama do poço infinito utilizado para calcular os níveis de energia da amostra [100].	50
Figura 30 – Diagrama do poço finito utilizado para o cálculo dos níveis de energia da amostra [100].	51
Figura 31 – Energias dos três primeiros níveis de Landau ($N=1, 2$ e 3) em função do campo magnético calculadas para o primeiro nível de buraco pesado ($HH_{1,N}$) e de buraco leve ($LH_{1,N}$) para a amostra crescida em [100].	52
Figura 32 – (a) Espectro de fotoluminescência obtido experimentalmente para o poço de GaAs [100]. (b)) Espectro teórico obtido utilizando a energia calculada para um poço finito somado a os níveis de Landau calculados.	53
Figura 33 – Níveis de energia obtidos pelos ajustes da amostra [100] utilizando 4 gaussianas. Resultados experimentais para os níveis de energia em função da polarização são mostrados em (a), enquanto que os resultados teóricos são apresentados em (b).	54
Figura 34 – Níveis de energia obtidos pelos ajustes da amostra [311]A utilizando 4 gaussianas. Resultados experimentais para os níveis de energia em função da polarização são mostrados em (a), enquanto que os resultados teóricos são apresentados em (b).	55

Lista de tabelas

Tabela 1 – Tabela das massas efetivas e energias de gap utilizadas para o cálculo dos níveis de energia dos poços de GaAs [100] e GaAs [311]A.	49
Tabela 2 – Os dois primeiros níveis de energia para o elétron (E_e), buraco leve (E_{LH}) e buraco pesado (E_{HH}) calculados para um poço infinito de GaAs [100].	49
Tabela 3 – Primeiro nível (n=1) de energia do elétron, buraco pesado e buraco leve calculado para o poço finito de GaAs [100], junto ao ponto de intersecção (x) da equação transcendental (Eq. 2.16)	51

Lista de abreviaturas e siglas

QW	Poço quântico, sigla do inglês <i>Quantum Well</i>
SL	Superredes, sigla do inglês <i>Superlattices</i>
MBE	Epitaxia por feixe molecular, sigla do inglês <i>Molecular Beam Epitaxy</i>
GaAs	Arseneto de Gálio
AlGaAs	Arsenieto de Gálio e Alumínio
GaAsP	Fosfeto de Arsenieto de Gálio
GaAsSb	Antimoneto de Arsenieto de Gálio
InGaAs	Arsenieto de Índio e Gálio
GaN	Nitreto de Gálio
AlGaN	Nitreto de Alumínio e Gálio
DVD	Disco digital versátil, sigla do inglês <i>Digital Versatile Disc</i>
InAlAs	Arsenieto de Alumínio e Gálio
InAs	Arseneto de Índio
CFC	Cúbica de face centrada
BV	Banda de valência
BC	Banda de condução
BZ	1ª Zona de Brillouin, do inglês <i>Brillouin Zone</i>
HH	Buraco Pesado, do inglês <i>Heavy Hole</i>
LH	Buraco Leve, do inglês <i>Light Hole</i>
LA	Longitudinal Acústico
TA	Transversal Acústico
LO	Longitudinal Óptico
TO	Transversal Ópticos

FWHM	Largura à meia altura, sigla do inglês <i>Full Width at Half Maximum</i>
UAV	Ultra-alto-vácuo
ML	Monocamada, sigla do inglês <i>Monolayer</i>

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	6
2.1	As ligas binárias GaAs e AlAs: Estruturas cristalinas e de bandas	6
2.1.1	A liga ternária $Al_xGa_{1-x}As$	11
2.2	Propriedades Ópticas de Poços Quânticos	13
2.2.1	Poço Infinito	14
2.2.2	Poço Finito	15
2.2.3	Éxciton	18
2.3	Efeitos do Campo Magnético	19
2.4	Efeitos da Temperatura sobre as Propriedades Ópticas de Semicondutores	25
3	OBJETIVOS	30
4	MATERIAIS E METODOLOGIA	31
4.1	Epitaxia por feixes moleculares	31
4.2	Fotoluminescência	33
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	40
5.1	Espectros de Magneto-fotoluminescência	40
5.1.1	Magneto-Fotoluminescência da amostra [100]	40
5.1.2	Magneto-Fotoluminescência da amostra [311]A	45
5.1.3	Discussão dos modelos de ajuste	47
5.2	Modelagem teórica para os resultados obtidos	48
5.2.1	Aplicação do modelo teórico	49
6	CONCLUSÕES	56
7	ANEXOS	58
	Referências	67

1 Introdução

Nas últimas décadas destaca-se o avanço tecnológico com a aplicação de semicondutores nas mais diversas áreas de aplicação, em que o ponto inicial é associado a confecção dos transistores em 1947. O rápido desenvolvimento tecnológico foi evidenciado pela observação de Gordon Moore, cofundador da *Intel Corporation*, que enunciou que a cada 18 meses o número de transistores em um circuito integrado dobraria, o que ficou conhecido como a lei de Moore e motivou a miniaturização e avanço das indústrias de semicondutores [1].

Grande parte do desenvolvimento de tais tecnologias está relacionado à qualidade de crescimento dos semicondutores, permitindo a fabricação de estruturas cristalinas com alta pureza e poucos defeitos. Destacam-se as estruturas à base dos materiais da família III-V da tabela periódica, amplamente estudadas e aplicadas em nanoestruturas, como poços quânticos (QW, do inglês *Quantum Well*) e super-redes (SL, do inglês *Superlattice*), utilizando como principal técnica de crescimento a epitaxia por feixe molecular (MBE, do inglês *Molecular Beam Epitaxy*) [1, 2]. Dentre esses materiais, um dos mais investigados ao longo das últimas décadas é o composto binário Arseneto de Gálio (GaAs), um dos principais componentes da optoeletrônica. Devido à sua alta versatilidade e compatibilidade com outros compostos da família III-V, este material serve como base para a fabricação de ternários, como *AlGaAs*, *GaAsP*, *GaAsSb*, *InGaAs*, entre outros, essenciais para tecnologias nas áreas de geração de energia, emissores e detectores de luz, e armazenamento de dados [3, 4].

Grande parte dos primeiros protótipos das aplicações de poços quânticos em estruturas como emissores, lasers e detectores surgiram no início dos anos 80, com investigações sobre as propriedades dessas estruturas. Em 1983, a investigação da eletroabsorção pelo efeito Stark em poços quânticos de GaAs/AlGaAs demonstrou o potencial dessas estruturas para a modulação de luz. A viabilidade dessa aplicação em temperatura ambiente está associada ao grande deslocamento dos picos para a região de menores energias devido à aplicação de campo elétrico [5]. Nos anos seguintes, foram investigados os éxcitons em poços quânticos de GaAs/AlGaAs (100Å) no regime de temperatura ambiente, observando-se efeitos não lineares [6, 7]. Utilizando-se da técnica de mistura de quatro ondas degeneradas, foram identificadas diferentes emissões e demonstrada a possibilidade da utilização das estruturas de QW em sistemas de comunicação, incentivando a investigação das diferentes propriedades da estruturas [6, 7]. Com o objetivo de realizar uma análise mais precisa dos éxcitons com a temperatura, foi utilizada a técnica de fotoluminescência (PL, do inglês *photoluminescence*) em poços de GaAs/AlGaAs com 100 Å[8]. A partir dos dados experimentais, constatou-se a dificuldade de obter medidas para temperaturas superiores

a 150 K devido à baixa resolução dos sistemas de detecção disponíveis, o que impedia a diferenciação das emissões, em especial, para poços mais estreitos, em que seria possível uma melhor distinção entre as emissões, permitindo uma análise mais completa [8].

Em 1988, Xi Long Zheng realizou uma investigação por fotorrefletância dos éxcitons em poços quânticos de GaAs/AlGaAs (100Å), aplicando campo magnético em temperatura ambiente [9]. Os resultados demonstraram a existência de éxcitons e níveis de Landau, porém, novamente, devido à limitação da técnica experimental, uma análise precisa das emissões da estrutura foi impossibilitada. Isso exigiria medidas auxiliares para confirmação dos níveis de energia observados, o que não era possível, já que as demais técnicas de espectroscopia da época não permitiam realizar medições com a aplicação de campo magnético em temperaturas elevadas [9].

Com o avanço dos estudos de poços quânticos visando diferentes aplicações, a possibilidade de fabricação de emissores de luz ganhou notoriedade com o trabalho de Yasuhiko Arakawa [10], discutindo como a baixa dimensionalidade dos poços quânticos poderia reduzir a influência da temperatura no *threshold* de lasers, incentivando a investigação da aplicação de poços quânticos na fabricação de tais dispositivos [10]. Esse fenômeno foi demonstrado de diversas formas, como o trabalho de (Nakamura et al., 1999) fabricando lasers violetas (399, 401 e 405 nm) à base de múltiplos poços quânticos de GaN/AlGaN, todos operáveis a 50 C°, destinados a aplicação nos antigos leitores de DVD [11]. Com o desenvolvimento das técnicas de crescimento e a criação de diferentes arranjos estruturais, incluindo as estruturas de poços quânticos em cascata, foi possível a fabricação de lasers no infravermelho (5.4μm), operáveis em temperaturas de até 30 C° [12]. Atualmente, existe uma vasta gama de lasers baseados em estruturas de poços quânticos, com uma ampla faixa de emissão espectral. Muitos estudos têm se concentrado na redução dos custos de fabricação e no aumento da eficiência destes dispositivos [12–15].

No ramo da geração de energia, a utilização de estruturas de confinamento demonstrou diversas vantagens na aplicação em células solares. A principal delas está relacionada à possibilidade de engenharia das emissões da estrutura, modulando sua composição e dimensão, o que permite sua utilização em regimes que eram limitados pelo gap dos materiais [4]. As primeiras células solares baseadas em poços quânticos apresentaram limitações devido à perda de eficiência em temperatura ambiente, um problema que tem sido contornado com a adição de defeitos na estrutura e o uso de outros arranjos de semicondutores [4]. Atualmente os pontos quânticos fazem parte da terceira geração de células solares, atuando como sensibilizadores, capturando elétrons da região ativa da célula solar e gerando múltiplos éxcitons, o que possibilita ultrapassar os valores teóricos de eficiência [16–18]. Contudo, o custo para fabricação destes materiais é significativamente maior do que as tradicionais células baseadas no silício, o que motiva a pesquisa para obtenção de configurações que levem a uma redução no custo de fabricação destas novas

tecnologias.

Para sistemas de fotodeteção, uma comparação dos sistemas operando no infravermelho de poços quânticos foi realizada por Rogalski et al., 2003 [19]. O estudo demonstrou uma ótima resposta na região de temperaturas criogênicas, no entanto, com o aumento da temperatura, os ruídos térmicos da estrutura reduziam a eficiência do detector [19]. Após anos de investigação, foram desenvolvidos arranjos capazes de reduzir os efeitos térmicos da estrutura, melhorando a eficiência com a temperatura, mas ainda muito limitados para a região de temperatura ambiente [20, 21]. Um trabalho recente demonstrou que o arranjo de InGaAs/InAlAs em cascata quântica apresenta uma ótima detecção em temperatura ambiente. Essa estabilidade foi alcançada utilizando um forte acoplamento entre as camadas e diferentes níveis de energias, permitindo separar os elétrons fotoexcitados dos térmicos [20, 21].

Toda esta ampla gama de aplicações atuais de poços quânticos motivou também um enorme leque de pesquisa em termos de ciência básica, muitas vezes, para solucionar problemas em abertos gerados pela indústria de semicondutores. Assim, durante décadas a comunidade científica se dedicou também aos aspectos fundamentais de tais nanoestruturas, em especial, a investigação das propriedades ópticas e dos níveis de energias contidos dentro deste poços. Por exemplo, uma investigação de 2010 sobre poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos em diferentes orientações cristalinas do substrato de GaAs realizou medidas de fotoluminescência de 12 a 300 K. A partir dos resultados, foram obtidos espectros bem resolvidos em todo o intervalo de temperatura. O aumento de temperatura resultou em uma maior separação dos picos de emissão observados, que foram relacionados as interações de elétron-buraco pesado e elétron-buraco leve, além de destacar o ganho de intensidade do pico associado ao buraco leve [22].

Um estudo de 2014 sobre magneto-fotoluminescência em poços quânticos investigou as propriedades da polarização de poços de InAs/InGaAs/InAlAs com dimensões de 3, 4 e 6 nm, demonstrando um grau de polarização circular de aproximadamente 10% à 120 K [23]. Ainda, destaca-se a intensa fotoluminescência observada em temperatura ambiente, indicando uma ótima eficiência quântica no processo de recombinação nos poços quânticos. No entanto, não foi realizada uma investigação sobre a influência dos campos magnéticos na emissão óptica em temperatura ambiente [23].

As tecnologias atuais já permitem a aplicação da técnica de fotoluminescência em poços quânticos no regime de temperatura ambiente, com resolução suficiente para investigar os processos envolvidos. A técnica de magneto-fotoluminescência também é viável, como demonstrado por (Kotera et al., 2002) em suas medidas com campos magnéticos de até 10 Tesla, à uma temperatura de 275K, para o estudo das propriedades ópticas de poços InGaAs/InAlAs [24].

A literatura sobre poços quânticos é altamente abrangente em relação às diferentes

abordagens para estudar e aplicar as estruturas de confinamento. No entanto, quando volta a discussão para o comportamento das estruturas sob influência de campo magnético em temperatura ambiente, a literatura permanece escassa [9].

Considerando que a técnica de magneto-fotoluminescência é essencial para investigar as propriedades ópticas e eletrônicas de semicondutores, bem como o avanço na aplicação de estruturas de confinamento, observa-se que a literatura ainda é limitada nesse contexto. Nesse sentido, essa dissertação tem como objetivo investigar as emissões ópticas em poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos nas direções [100] e [311]A do substrato de GaAs, utilizando a técnica de magneto-fotoluminescência à temperatura ambiente (300 K). Foram observadas as emissões das transições de elétron-buraco pesado ($e_1 - HH_1$) e elétron-buraco leve ($e_1 - LH_1$) à 0 Tesla, e com o aumento do campo magnético surgiram duas novas emissões. A abordagem teórica demonstrou que a primeira emissão, que surge com o aumento do campo magnético, está relacionada ao primeiro nível de Landau do buraco pesado ($HH_{1,1}$), com energia invariante nas polarizações circulares $\sigma-$ e $\sigma+$. A segunda emissão, que surge com o campo magnético, apresenta mudança com diferentes polarizações: para $\sigma-$, desloca-se rapidamente com campo magnético, podendo estar relacionada ao segundo nível de Landau do buraco-pesado ($HH_{1,2}$). Para a polarização $\sigma+$, a emissão pode ser atribuída ao primeiro nível de Landau do buraco-leve ($LH_{1,1}$).

Este trabalho está organizado da seguinte forma: o capítulo 2 é dividido em duas subseções. Na primeira é feita uma revisão das propriedades estruturais, eletrônicas e vibracionais dos binários GaAs e AlAs, juntamente à influência da concentração de alumínio no ternário AlGaAs. Na segunda subseção, são contextualizadas as consequências do crescimento de heteroestruturas no regime quântico, formando níveis de energia, além de discutir os modelos utilizados para estimar os processos ópticos nos poços, evidenciando os fenômenos observáveis com a aplicação de campo magnético e aumento da temperatura. São destacados os Níveis de Landau, o efeito Zeeman, a separação de modos do polaron para o campo magnético, a variação do gap de energia, o aumento de população de fônons e efeitos da largura de linha devido ao aumento de temperatura. O capítulo 3 apresenta os objetivos desta dissertação, que consiste em estudar as interações que ocorrem no regime de temperatura ambiente com a aplicação de campo magnético. O capítulo 4 apresenta as técnicas experimentais utilizadas no crescimento de poços quânticos, juntamente com as características das amostras utilizadas neste trabalho. São enunciados também os princípios físicos do processo de fotoluminescência, junto ao sistema óptico utilizado neste trabalho. O capítulo 5 é dedicado a apresentação dos resultados experimentais obtidos por magneto-fotoluminescência das amostras à temperatura ambiente, identificando as emissões a 0 Tesla e discutindo, com o auxílio de ajustes, o comportamento e o surgimento de novas emissões com o aumento do campo magnético. Finalmente são demonstrados os cálculos realizados para modelar os comportamento observados. Por fim, o capítulo final apresenta as conclusões dos principais resultados e contribuições obtidos a partir deste

trabalho.

2 Fundamentos teóricos

Este capítulo é dedicado a uma revisão dos conceitos físicos que envolvem certas propriedades fundamentais de materiais semicondutores, tais como, ligas cristalinas, massa efetiva, heteroestruturas semicondutoras, estrutura de bandas e o efeito do campo magnético e temperatura nas transições ópticas. Esses conceitos serão diretamente aplicados nos resultados obtidos dentro desta dissertação.

2.1 As ligas binárias GaAs e AlAs: Estruturas cristalinas e de bandas

As heteroestruturas semicondutoras que serão estudadas neste trabalho são baseadas nas ligas semicondutoras Arseneto de Gálio (GaAs) e Arseneto de Alumínio (AlAs), e neste sub-tópico será feita uma revisão de suas principais propriedades, como estrutura cristalina, estrutura de bandas e massa efetiva. Tais ligas são formadas por quantidades iguais de átomos de gálio/alumínio (Ga/Al) e arsênio (As), formando ligações covalentes. Devido à eletronegatividade do As (ânion) ser superior à do Ga (cátion), a ligação tem caráter polar, o que resulta em um pequeno momento de dipolo entre os átomos.

As estruturas cristalinas do GaAs e AlAs, como ilustrado na Figura 1(a), são formadas por duas redes cúbicas de faces centradas (CFC) interpenetradas e deslocadas em um quarto ao longo da diagonal principal do cubo. Esta estrutura é denominada blenda de zinco (*zinc-blend*) e a sua base é composta da célula unitária da molécula de GaAs, com um átomo na origem $(0,0,0)$ e outro em $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ onde a_0 é o parâmetro de rede da célula. Seu valor é 5,653 Å para o GaAs e 5,660 Å para o AlAs [1, 25].

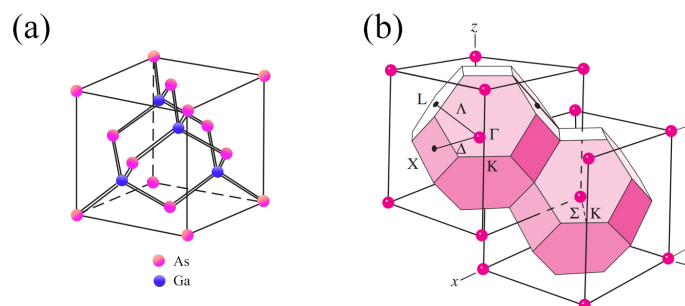


Figura 1 – (a) Estrutura blenda de zinco para o Arseneto de Gálio e Arseneto de Alumínio. Esferas em azul representam átomos de Ga(Al) e esferas em rosa representam átomos de As. (b) A correspondente rede recíproca com os pontos de alta simetria (Γ, Σ, X, L) da 1ª zona de Brillouin.

Imagem modificada de Yu Cardona. [1]

A partir da estrutura cristalina do espaço real, é possível definir a rede recíproca do material pelo vetor de onda \vec{k} . A rede recíproca permite investigar as estruturas de bandas (banda de condução (BC) e banda de valência (BV)) pelos estados do vetor de onda \vec{k} permitidos na rede. Assim como no espaço real, a rede recíproca é periódica e tem uma célula unitária, definida a partir da célula de Wigner-Seitz. A primeira zona da célula unitária é denominada 1ª zona de Brillouin (BZ, do inglês *Brillouin Zone*), e nela está contida todas as informações relevantes para o comportamento do elétron na rede. Os pontos de alta simetria da BZ são denotados por nomes simbólicos. Para os pontos dentro da estrutura é utilizado letras gregas, e os pontos nas bordas são denotados por letras romanas, como está ilustrado na Figura 1(b). Os principais pontos de simetria para os materiais que compõem este trabalho são: o centro $\vec{k}=(0,0,0)$ denotado por Γ e as bordas $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$ e $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1)$ que correspondem aos pontos X e L [1, 25, 26].

Com o desenvolvimento do estudo do comportamento dos elétrons em semicondutores, destacando-se os trabalhos desenvolvidos por Bloch e Kronig-Penney, foi desenvolvida a teoria das bandas, na qual os elétrons estão separados em duas bandas principais: a banda de valência (BV) e a banda de condução (BC) [27]. Para os semicondutores no equilíbrio e temperatura de zero Kelvin (K), as bandas de valência e condução são separadas por uma energia de gap característica de cada material. Quando um elétron é excitado com energia suficiente para ser promovido para a banda de condução, um estado vazio é deixado na banda de valência, e chamado de buraco, que possui carga elétrica oposta a do elétron. [26].

O ponto de maior interesse para os materiais da família III-V, que formam os binários GaAs e AlAs, é o ponto $\Gamma(\vec{k} = 0)$. Pela distribuição eletrônica do material, tem-se um orbital antiligante s , correspondente à banda de condução e três estados ligantes na banda de valência do tipo p . Para outros semicondutores com elementos de maior massa, tais como Ge e Sb, o acoplamento spin-órbita não é desprezível, sendo necessário analisar o momento angular total (\vec{J}), o momento angular orbital \vec{L} e o momento de spin \vec{S} , onde $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ [1, 25, 26].

A partir da rede recíproca, é possível calcular a estrutura de bandas do material. As Figuras 2(a) e (b) representam as estruturas de bandas para o GaAs e para o AlAs, respectivamente. Para o GaAs, nota-se que o máximo valor da BC e o mínimo ponto da BV encontram-se no mesmo ponto de simetria Γ . Sendo assim, o material tem um gap direto [1, 26]. Para o caso do AlAs, o máximo do BC está no ponto X e o mínimo da BV está no ponto Γ , portanto, este material possui um gap indireto e requer a presença de um fônon para que esta a transição óptica aconteça [1, 26]. A compreensão dessas bandas é essencial para entender os processos de recombinação dos portadores eletrônicos.

Também na Figura 2, pode-se observar as informações a respeito dos orbitais dos materiais GaAs e AlAs. Pela distribuição eletrônica dos compostos da família III-V, têm-se

uma ligação do tipo s na BC e três ligações do tipo p na BV. O orbital antiligante s ($l=0$), com $\vec{L}=0$, $\vec{S}=\pm 1/2$ e $\vec{J}=1/2$ com a simetria Γ_6 que é altamente isotrópica, ou seja, a massa do elétron m_e é praticamente invariável com a direção cristalina, como ilustrado no inset da Figura 2(a). Para o orbital do tipo p ($l=1$), têm-se $\vec{L}=1$ e $\vec{S}=\pm 1/2$, com momento angular total $\vec{J}=3/2$ ou $\vec{J}=1/2$. O quadrupeto formado por $\vec{J}=3/2$ tem maior energia e simetria Γ_8 , sendo degenerado em $\vec{k} = 0$ (ponto Γ), enquanto o dupletto $\vec{J}=1/2$ tem menor energia e simetria Γ_7 , e é chamada de banda de *split-off* (SO). Ainda, a diferença de energia entre os estados $\vec{J}=3/2$ e $\vec{J}=1/2$ é dada pelo *split-off* (E_{SO}) [1, 25, 26].

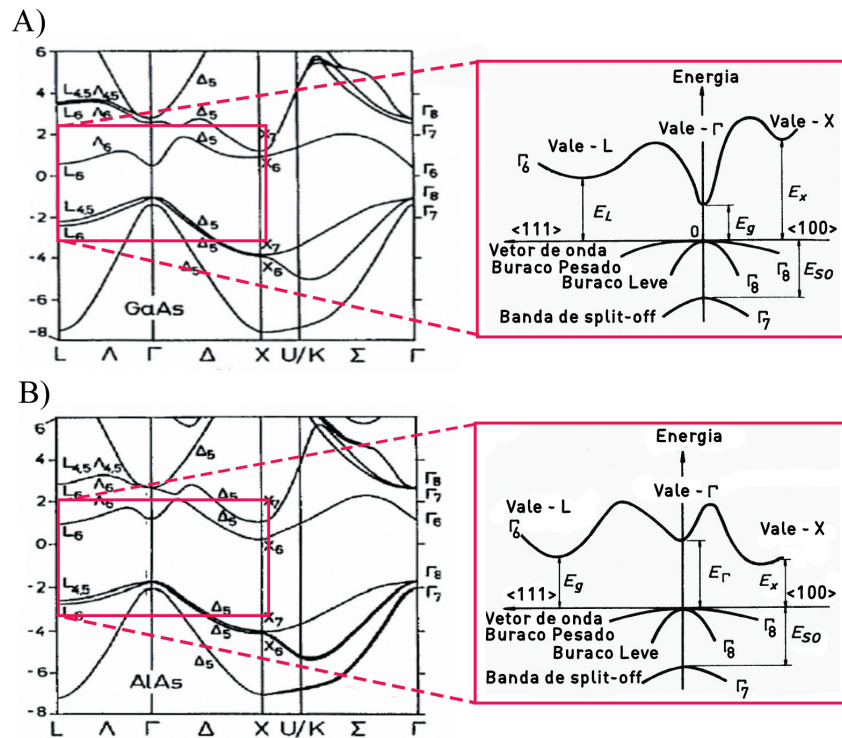


Figura 2 – (a) Banda eletrônica do GaAs e (b) AlAs calculadas à temperatura de 0 K, acompanhado de um zoom próximo ao ponto Γ da estrutura, identificando as diferentes simetrias da banda de valência.

Imagem Modificada de [28].

Outra característica de grande importância são as curvaturas das bandas em torno dos pontos de alta simetria. A região degenerada dos estados $\vec{J}=3/2$ tem diferentes curvaturas próximas do ponto Γ . Como o potencial dentro de uma estrutura cristalina é complexo devido às diversas interações que ocorrem entre a rede e o elétron, elétron-elétron, entre outras, torna-se necessário utilizar uma abordagem mais simples para investigar o comportamento dos portadores nessas estruturas. Uma das abordagens mais populares é a aproximação da massa efetiva, na qual supõe-se que o potencial da rede seja constante e que todas as interações na rede alteram a massa do portador, permitindo descrever as diferentes interações do sistema pelo parâmetro da massa efetiva (m^*) [1, 25, 26, 29]:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(\vec{k})}{dk^2}, \quad (2.1)$$

em que $\frac{d^2 E(\vec{k})}{dk^2}$ é a segunda derivada da energia em relação ao momento \vec{k} e \hbar é a constante de Planck reduzida. Desta forma, é possível determinar as massas efetivas a partir da curvatura da estrutura de bandas do material, que pode ser positiva, negativa ou mesmo nula, sendo o valor sempre calculado em relação a massa de repouso m_0 do elétron. Devido à relação da curvatura com a massa efetiva, os níveis energéticos formados dentro da banda de valência são classificadas pela sua massa, sendo as de maiores massas denominadas buracos pesados (HH, do inglês *Heavy Hole*), e as de menores massas, buracos leves (LH, do inglês *Light Hole*) [1, 25, 26, 28].

A partir da abordagem da massa efetiva, esforços foram feitos para tabelar as massas dos portadores em diferentes semicondutores, podendo citar a vasta literatura sobre as propriedades do GaAs e suas ligas [30, 31]. As caracterizações mostraram que a massa efetiva do elétron (m_e^*) é altamente isotrópica, enquanto as massas dos buracos (m_h^*) na banda de valência são anisotrópicas, ou seja, o potencial ao qual o buraco é exposto na direção [100] é diferente da direção [111], [311] e assim por diante. [25].

Considerando a relevância da direção de crescimento, é bem conhecido que todas as propriedades optoeletrônicas de semicondutores III-V dependem fortemente da orientação do substrato sobre o qual o(s) semicondutor(es) será(ão) crescido(s). Para o presente estudo, o substrato escolhido foi o de GaAs. Tipicamente o crescimento é realizado na orientação [100], contudo, muitas outras orientações também podem ser escolhidas.

Na Figura 3, pode-se observar a geometria das ligações químicas do GaAs em diferentes orientações. Para a direção [100] as ligações químicas do substrato correspondem as ligações duplas da terminação em átomos de arsênio. No caso da orientação [111], domina as ligações simples. Para os casos intermediários, entre as orientações [100] e [111], a ligação química com o substrato é mista entre ligações simples e duplas. Para a estrutura crescida em um substrato na orientação [211] há duas vezes mais ligações simples do que sítios com ligações duplas, sendo assim, as propriedades assemelham-se às do semicondutor crescido na superfície [111]. Outro caso relevante é da direção [311], em que há o mesmo número de sítios com ligações simples e ligações duplas, tendo a mesma contribuição das direções [100] e [111] [32]. Por convenção, a polaridade do arranjo é A se o último plano atômico for formado por átomos da família III (Gálio, Alumínio, Índio, entre outros) e B se terminar em átomos da família V (Arsênio, Antimônio, Nitrogênio) [33].

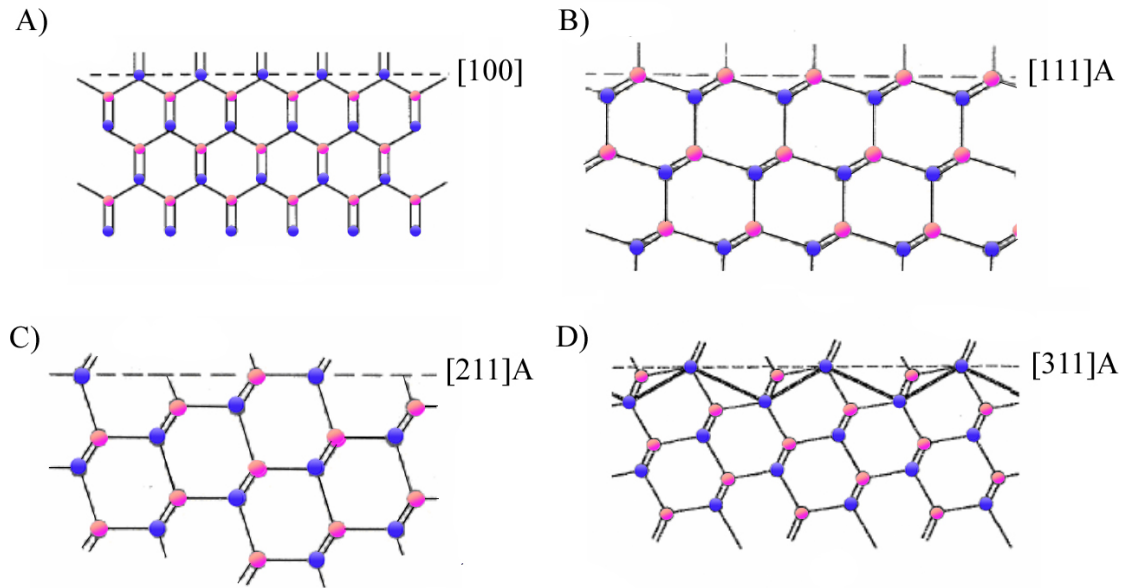


Figura 3 – Geometria das ligações químicas do GaAs para as diferentes orientações do substrato. A) [100], B) [111]A C), [211]A e D) [311]A. Esferas em azul representam átomos de Ga e esferas em rosa representam átomos de As.

Imagem modificada de [32].

Outro aspecto relevante a direção de crescimento do substrato é referente as monocamadas (ML, do inglês *MonoLayer*). A célula unitária na direção [100] é composta por duas monocamadas, que são a composição de uma camada de gálio e uma camada de arsênio. O tamanho da monocamada é determinado pela expressão da distância entre os planos atômicos:

$$d = \frac{a_o}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (2.2)$$

onde d é a distância interplanar e h , k e l são os índices de Müller. O valor da monocamada para o substrato de GaAs orientado na direção [100] é de 2,83 Å, na direção [111] é de 3,26 Å e na [311] é 1,7 Å.

Outro fenômeno responsável por alterar as propriedades eletrônicas no material é a vibração da rede, deslocando os átomos da sua posição de equilíbrio e alterando a interação elétrons-rede. A magnitude da vibração da rede é dada pelos fônons, que são o quanta de energia de vibração. A oscilação do material é descrita pelo deslocamento dos átomos em relação a sua posição de equilíbrio e é caracterizado por seu momento \vec{q} , seu ramo (acústico ou óptico) e seu modo de vibração (longitudinal e transversal) [26]. Na Figura 4 está apresentado os modos vibracionais do GaAs e AlAs. A vibração do material depende da simetria do cristal. Para o caso das estruturas blenda de zinco, sua célula unitária é formada por dois átomos, permitindo seis ramos de fônons. As bandas de maior energia dizem respeito a contribuição dos fônons ópticos, enquanto que as de menores energias ao ramo acústico. No ponto Γ , tanto no GaAs quanto no AlAs, há dois fônons acústicos transversais (TA) degenerados com fônons acústico longitudinal (LA), todos com

com energias desprezíveis. Os fônons ópticos transversais (TO) também são duplamente degenerados no ponto Γ , com frequência de aproximadamente 250 cm^{-1} ($\approx 31 \text{ meV}$), enquanto o fônons óptico longitudinal (LO) possui frequência de 280 cm^{-1} ($\approx 35 \text{ meV}$). No caso do AlAs, os fônons ópticos transversais (TO) têm frequência de 380 cm^{-1} ($\approx 43 \text{ meV}$) e o fônons óptico longitudinal (LO), de 280 cm^{-1} ($\approx 35 \text{ meV}$).

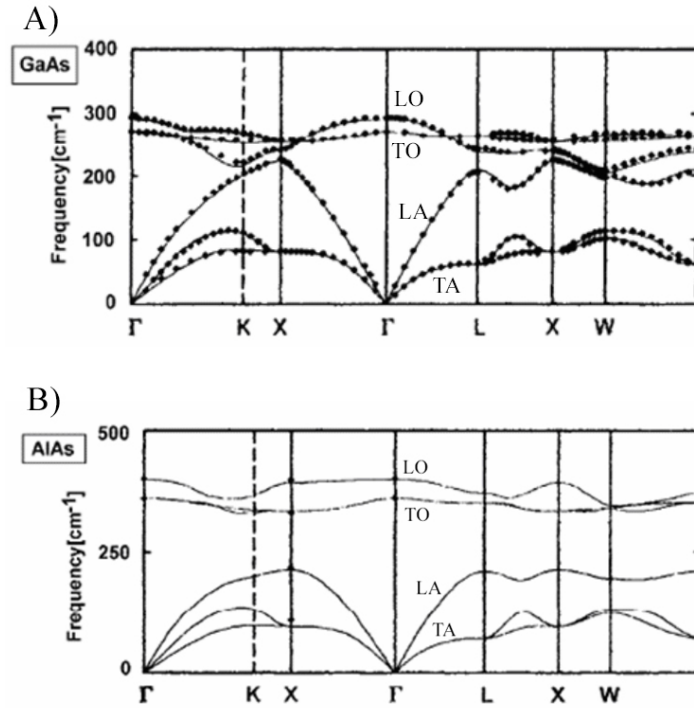


Figura 4 – (a) Banda vibracional do GaAs e (b) AlAs calculadas pela teoria da densidade funcional perturbada.

Imagem Modificada de [34, 35].

Devido a semelhança entre as estruturas do GaAs e AlAs, é possível a confecção do ternário AlGaAs com alta qualidade, que permite modular as propriedades do ternário a partir da concentração de alumínio, o que será discutido na próxima seção.

2.1.1 A liga ternária $Al_xGa_{1-x}As$

Como descrito acima, uma segunda possibilidade para alterar a estrutura de bandas dos semicondutores pode ser atingida pela mescla dos três elementos (Ga, Al e As) em proporções controladas de gálio e alumínio, formando uma nova liga ternária chamada de arseneto de gálio e alumínio ($Al_xGa_{1-x}As$). Sua estrutura de bandas é um intermédio entre aquelas do GaAs e AlAs, o que depende da concentração (x) de alumínio na liga. A concentração relativa dos elementos afeta diretamente todos os parâmetros físicos do material, tais como constante de rede, massa efetiva, gap de energia, índice de refração, etc. Como essas propriedades do material alteram-se com a sua composição, isso foi amplamente

estudado, junto a resultados empíricos, permitindo equacionar os parâmetros com base na concentração de alumínio [29].

Por exemplo, o parâmetro de rede de $Al_xGa_{1-x}As$ é obtido pela interpolação de:

$$a^{AlGaAs} = 5.6536 + 0.0094x, \quad (2.3)$$

notando-se que as ligas GaAs e AlAs têm um descasamento de rede de apenas 0.17%, ou seja, o parâmetro de rede do AlGaAs possui valor similar ao do GaAs, permitindo o crescimento de estruturas de alta qualidade, livres de defeitos e efeitos de tensão [29]. Da mesma maneira, o estudo da estrutura eletrônica das ligas semicondutoras já foi feito por meio das mais diferentes experimentações e demonstrou que o formato geral da energia é ditado pela equação quadrática

$$E_g(x) = a + b'x + cx(x - 1), \quad (2.4)$$

convenientemente escrita como

$$E_g(x) = a + bx + cx^2 \quad b = b' - c, \quad (2.5)$$

com a e b' relacionados aos materiais que compõem a liga, enquanto c é o parâmetro de *bowing* que está relacionado com o desordenamento da liga, que para o $AlGaAs$ assume a expressão na seguinte forma:

$$E_g^{AlGaAs}(x) = xE_g^{AlAs} + (1 - x)E_g^{GaAs} - x(1 - x)C^{AlGaAs}, \quad (2.6)$$

onde C^{AlGaAs} é a constante de *bowing*. A Figura 5 mostra a variação do gap de energia do AlGaAs com a variação da concentração de Alumínio, em que pode ser observado uma mudança significativa no gap do material. Para $x > 0.45$, o gap do material torna-se indireto (o vale X está abaixo de Γ) tendendo, portanto, a estrutura eletrônica do AlAs [29, 31].

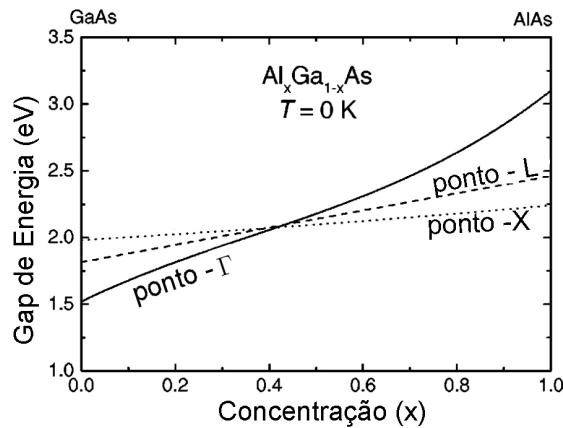


Figura 5 – Energia do gap do $Al_xGa_{1-x}As$ nos pontos Γ , X e L, para diferentes concentrações de x.

Imagem Modificada de [31].

Devido a alta compatibilidade do ternário AlGaAs (com baixas concentrações de Al) com o GaAs, tornou-se possível a confecção de estruturas de confinamento como poços quânticos (QW) com baixa deformidade e alto grau de pureza, que são o foco de investigação desta dissertação.

2.2 Propriedades Ópticas de Poços Quânticos

Nesta seção serão descritas as propriedades ópticas gerais de poços quânticos necessárias para o bom entendimento dos resultados obtidos nesta dissertação. O primeiro conceito relacionado a tais nanoestruturas é relacionado a heteroestruturas semicondutoras, que são estruturas formadas por camadas alternadas de diferentes materiais, ou mesmo do mesmo material desde que possuam diferentes parâmetros de rede, sobre um determinado substrato. Esta alternância entre materiais provoca naturalmente uma variação no perfil de potencial da heteroestrutura. A partir da variedade de arranjos entre semicondutores, é possível obter as mais diversas propriedades optoeletrônicas, permitindo um controle preciso e o desenvolvimento da engenharia de estrutura de bandas, que em última instância, controla as propriedades do material (dispositivo) na sua forma final. Portanto, esta seção aprofunda-se na abordagem utilizada para estudar as heteroestruturas dos materiais da família III-V da tabela periódica, com foco nas nanoestruturas de confinamento.

Graças ao avanço nas técnicas de crescimento de semicondutores de alta precisão (como a epitaxia por feixe molecular, MBE), heteroestruturas com dimensões na escala nanométrica são passíveis de serem crescidas rotineiramente. A alternância dos materiais leva a um perfil de potencial com descontinuidade nas bordas ao longo direção de crescimento, formando barreiras e poços de confinamento para os portadores de carga contidos nessas estruturas.

No regime em que heteroestruturas são crescidas com dimensões na ordem do comprimento de onda de *de Broglie* dos portadores, fenômenos de quantização passam a ser observados o que é demonstrado comparando o limite da energia cinética com a energia térmica do sistema, respeitando o princípio de incerteza de Heisenberg:

$$l_w \approx \sqrt{\frac{\hbar^2}{m_{e(h)}k_B T}}, \quad (2.7)$$

em que l_w é a largura do poço, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura em Kelvin e $m_{e(h)}$ a massa do elétron (buraco).

O regime quântico leva à quantização das bandas, descrita pelo número quântico principal n, formando níveis de energias bem definidos (denotados por $E_{e(h)_n}$) para os elétrons e buracos [26, 36]. A quantização dos níveis de energia pode ser estudada com a equação de Schrödinger, separando a função de onda na coordenada de confinamento (z) e no movimento livre (plano x-y), da seguinte maneira:

$$\Psi(x, y, z) = \psi(x, y)\phi(z), \quad (2.8)$$

em que $\phi(z)$ é a função de onda da região de confinamento e $\psi(x, y)$ é a função de onda no plano x-y [26]. Resolvendo as equações separadamente, para o plano x-y, temos o caso de partícula livre, que é um problema amplamente conhecido, em que a energia (E_{xy}) é dada pela energia cinética do movimento descrito pelo vetor \vec{k} :

$$E_{xy,e(h)}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_{e(h)}^*}, \quad (2.9)$$

com a função de onda $\psi(x, y)$ de um portador livre, que pode ser descrito por ondas planas:

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})}, \quad (2.10)$$

onde A é uma constante de normalização.

Para determinar a energia de confinamento do elétron(buraco) $E_{e(h),n}$ e a função de onda correspondente $\phi(z)$ há diferentes abordagens, e, no presente estudo, serão discutidas as duas principais: o poço infinito, que supõe que a descontinuidade nas bordas cria uma barreira de potencial infinita, e o poço finito, que se aproxima do modelo real com uma barreira finita confinando o par elétron-buraco [26].

2.2.1 Poço Infinito

A Figura 6 é uma abordagem utilizada para poço de potencial infinito, em que supõe-se que a energia de confinamento nas barreiras é infinita, impossibilitando que o portador escape do poço por processos como tunelamento, resultando em infinitos estados ligados [25, 26, 36].

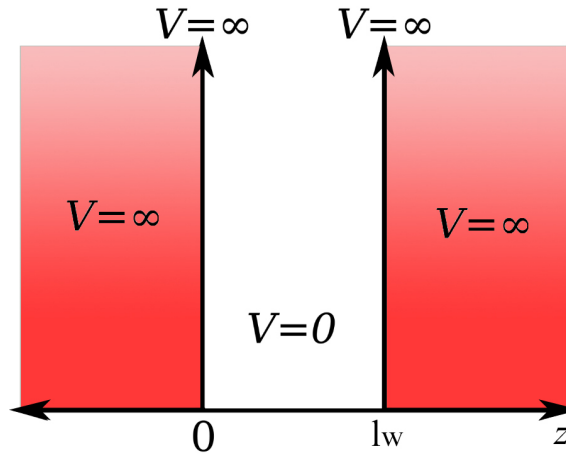


Figura 6 – Representação esquemática de um poço infinito.
Imagem do próprio autor.

O potencial $V(z)$ determina a barreira de confinamento e l_w é a largura do poço. Tal potencial pode ser descrito como:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 < z < l_w, \\ \infty & \text{para } z \leq 0 \text{ e } z \geq l_w, \end{cases} \quad (2.11)$$

Como o problema é limitado a região dentro do poço, onde $V(z)=0$, a equação de Schrödinger para o elétron(buraco) é escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}^*} \frac{d^2\phi_n(z)}{dz^2} = E_{e(h),n}\phi_n(z). \quad (2.12)$$

Definindo $k = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$, a equação de Schrödinger (2.12) tem como solução geral uma onda oscilante. Aplicando a condição de contorno que $\phi(0) = \phi(l_w) = 0$ nas interfaces e normalizando a expressão, o resultado será uma função seno oscilando em kz com os mínimos nas bordas do poço, o que é possível respeitando a condição $k_n = \frac{n\pi}{l_w}$:

$$\phi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{l_w}} \sin\left(\frac{n\pi z}{l_w}\right), \quad (2.13)$$

e, substituindo k pelo valor dado na condição de contorno, é possível expressar a energia do n -ésimo estado para os elétrons(buracos) confinados como:

$$E_{e(h),n} = \frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}^*} \left(\frac{n\pi}{l_w}\right)^2. \quad (2.14)$$

A partir da equação da energia, observa-se que todos os níveis de energia são múltiplos do estado $n=1$, que é a energia do estado fundamental ($E_{e(h),1}$) do portador [26, 36]. Devido à barreira de potencial ser infinita, o sistema permite infinitos estados ligados.

O cálculo do poço infinito é utilizado para estimar os primeiros níveis de energia do material, principalmente no intervalo de estruturas com alto grau de confinamento, como sistemas com baixa energia térmica e com uma grande descontinuidade nas bordas da BC e BV. Em grande parte, é um modelo utilizado para compreender a quantização da energia de maneira simplificada [26].

2.2.2 Poço Finito

O modelo do poço finito é mais utilizado para a quantização dos níveis de energias devido à diferença abrupta de energia potencial entre as interfaces, mas ainda permitindo que os portadores escapem por diferentes processos. Desta forma, trata-se de um modelo mais realístico do que o poço infinito [26, 36]. A popularidade do modelo está relacionada

com as estruturas crescidas por MBE, criando poços finitos reais que confinam os elétrons e buracos, com a altura da barreira dada pela diferença entre o gap dos materiais que constituem a heteroestrutura, possibilitando a aplicação de conceitos teóricos em sistemas reais [25, 26, 36].

Para a resolução de poços quânticos finitos, como ilustrado na Figura 7, o sistema é mais complexo, sendo necessário considerar a interação das funções de onda associadas aos portadores de carga com a barreira. Dessa forma, é necessário conhecer os parâmetros físicos dos materiais que constituem tanto o poço quanto a barreira [26, 36]. Assim, diferentemente dos poços infinitos, é necessário tratar a descontinuidade na função de onda nas interfaces, com as condições propostas, por exemplo, por BenDaniel-Duke, de que a função de onda, $\psi(z)$, e sua primeira derivada dividida pela massa efetiva do portador $(\frac{1}{m^*})(\frac{\partial\psi(z)}{\partial z})$, devem ser contínuas nas interfaces [25, 26, 36, 37].

Para o cálculo dos níveis de energia do poço, será usada como base a Figura 7, com a barreira potencial do elétron dada pela descontinuidade da banda de condução e a barreira dos buracos dado pela descontinuidade da banda de valência. O potencial da barreira é dado pela diferença entre o gap de energia da barreira e do poço ($E_g = E_g^{barreira} - E_g^{poço}$), em que é determinado uma proporção (tratada na literatura como *offset*) para as barreiras [25, 36]. Como exemplo, para este trabalho serão utilizados os valores usuais de $0,75E_g$ para a barreira da banda de condução (E_c) e de $0,25E_g$ para a barreira da banda de valência (E_v). O valor do *offset* no material pode ser alterado, provocando pequenas variações nos níveis de energia. Dessa forma, diversos trabalhos utilizam de métodos numéricos para encontrar o melhor *offset* para o modelo proposto [25, 36].

Como já é bem conhecido, a função de onda dos portadores contidos dentro do poço deve ter comportamento oscilatório (semelhante a uma função do tipo cosseno) e deve decair exponencialmente dentro da região da barreira. Resolvendo a equação de Schrödinger com as massas efetivas dos portadores dentro do poço (denotado por m_w^*) e na barreira (m_b^*) e definindo o momento dentro do poço como $k_w = \frac{\sqrt{2m_w^*E}}{\hbar}$ e o momento na barreira como $k_b = \frac{\sqrt{2m_b^*(V-E)}}{\hbar}$, obtém-se as seguintes soluções para as funções de onda ao longo da direção z (considerando que essa seja a direção de crescimento):

$$\phi(z) = \begin{cases} B\cos(k_w z) & \text{para } -\frac{l_w}{2} \leq z \leq \frac{l_w}{2}, \\ Ce^{-k_b z} & \text{para } z < -\frac{l_w}{2} \text{ e } z > \frac{l_w}{2}, \end{cases} \quad (2.15)$$

em que B e C são constantes de normalização.

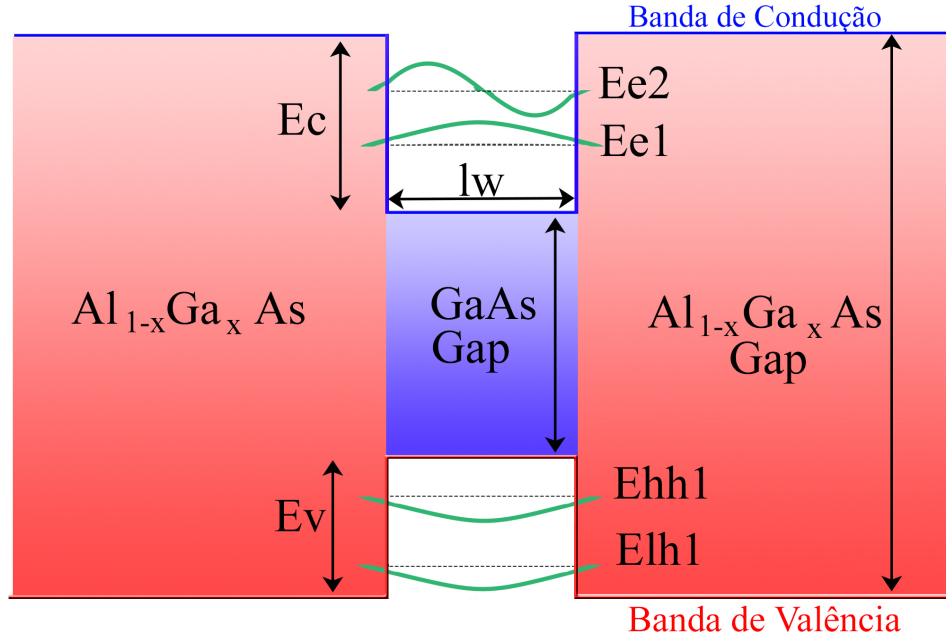


Figura 7 – Representação esquemática de um poço finito de GaAs com barreiras de $Al_{1-x}Ga_xAs$, com os dois primeiros níveis de energia ilustrados.

Imagem do próprio autor.

Aplicando as condições para as interfaces e manipulando as expressões chega-se a equação transcendental:

$$tg(x) = \left(\frac{m_w^*}{m_b^*} \right)^{(1/2)} \frac{\sqrt{\xi - x^2}}{x}, \quad (2.16)$$

onde define-se que $x = \frac{k_w l_w}{2}$, $\xi = \frac{m_w^* l_w^2 E_{c(v)}}{2\hbar^2}$ e $E_{c(v)}$ sendo a barreira de potencial da banda de condução(valência).

Esta equação permite determinar os valores de x de forma numérica, que é o ponto de interseção das curvas. A partir desse valor, determina-se, com as respectivas massas, a energia do elétron (E_{e1}), do buraco pesado (E_{HH1}) e leve (E_{LH1}) pela seguinte relação:

$$E_{e,HH,LH} = \frac{2\hbar^2 x^2}{m_w^* l_w^2}. \quad (2.17)$$

Para o caso do poço infinito, há infinitos estados ligados ao poço. Por outro lado, para o caso do poço finito, o número de estados ligados (\mathcal{N}) pode ser estimado utilizando a quantização de Bohr-Sommerfeld. Sabendo que os autoestados de \vec{k} estão separados por π/l_w [25]. Sendo assim, o número de estados ligados é dado pelo número inteiro da expressão de \mathcal{N} , como segue:

$$[\mathcal{N}] = 1 + Int \left[\left(\frac{2m_w}{\hbar^2 \pi^2} E_{c(v)} l_w^2 \right)^{1/2} \right]. \quad (2.18)$$

O termo Int denota a parte inteira da equação, podendo ser zero nos casos em que o poço quântico comporta apenas um estado ligado, sendo os estados fundamentais independentes de fatores como a barreira de potencial $E_{c(v)}$. Assim, espera-se que a contribuição dos estados fundamentais do elétron (E_{e_1}), do buraco pesado (E_{HH_1}) e buraco leve (E_{LH_1}) sejam observáveis [25].

2.2.3 Éxciton

Um dos principais mecanismos presentes na emissão de luz em semicondutores, está relacionado com a formação do par elétron-buraco. Como discutido anteriormente, pela teoria das bandas nos sólidos, quando o material é excitado com energia maior do que o gap do material, cria-se um elétron livre na banda de condução e um buraco na banda de valência. O buraco na banda de valência comporta-se como uma carga positiva. Sendo assim, existe a probabilidade de ocorrer uma ligação eletrostática entre o par elétron-buraco. Essa interação do par elétron-buraco é de caráter coulombiano e provoca uma redução na energia total da emissão, formando assim o éxciton, com energia descrita como E_{X0} [26, 36].

Como o buraco tem um valor de massa efetiva superior ao do elétron, o sistema da interação coulombiana do par elétron-buraco pode ser tratado como um átomo hidrogenoide neutro [25, 36]. Resolvendo o sistema como um átomo de hidrogênio e realizando as correções para a massa efetiva, é possível expressar o raio do éxciton (a_X) e a sua energia de ligação (E_{X0}) em termos do raio de Bohr (a_B), a massa reduzida (μ), a constante dielétrica do material (ϵ_r), a constante de Rydberg (Ry) e o nível de energia do éxciton (n_X):

$$a_X = \left(\frac{m_o \epsilon_r a_B}{\mu} \right) n_X^2, \quad (2.19)$$

$$E_{X0} = - \frac{\left(\frac{\mu}{m_o \epsilon_r^2} Ry \right)}{n_X^2}. \quad (2.20)$$

Para o GaAs *bulk* os valores obtidos para a energia de ligação e raio do éxciton são de $E_{X0} = -4.7$ meV e $a_o = 115$ Å respectivamente, o que condiz com os valores obtidos experimentalmente em temperaturas criogênicas [36]. Sendo assim, a energia da transição óptica para materiais *bulk* é expressa como:

$$E_{\hbar\nu_{bulk}} = E_g + E_X^0. \quad (2.21)$$

No caso de heteroestruturas, como os poços quânticos, o problema do átomo hidrogenoide é tratado como órbitas em apenas um plano (x-y), permitindo demonstrar que, em estruturas de confinamento, a energia de ligação do éxciton (E_X^0) é 4 vezes maior e seu raio (a_X) é a metade do valor obtido em estruturas *bulk* [36]. Além disso, nessas nanoestruturas, deve-se levar em conta a energia do confinamento do elétron e dos buracos (E_{HH}) e (E_{LH})

para calcular as transições ópticas [26, 36]. Sendo assim, a energia da transição óptica pode ser escrita como:

$$E_{\hbar\nu_{2D}} = E_{gpoço} + E_{HH_1} + E_{e_1} + E_X. \quad (2.22)$$

Para materiais *bulk* a energia de ligação do éxciton pode ser determinada facilmente com técnicas experimentais, utilizando-se da equação (2.21). No caso das estruturas de confinamento, há uma incerteza no cálculo das transições ópticas, relacionada com as energias de confinamento dos portadores ($E_{e(h)}$). De forma geral, para métodos experimentais em que é possível observar demais níveis do éxciton ($n>1$), determina-se a magnitude da ligação excitônica pela diferença entre os níveis de energia. Para casos mais complexos a energia do éxciton é tratada como uma perturbação no sistema, o que é possível devido a ordem de grandeza da ligação (poucos meV) [26, 36].

2.3 Efeitos do Campo Magnético

O estudo da aplicação de campo magnético em semicondutores não magnéticos, com o objetivo de caracterizar as propriedades do material é vastamente difundido, permitindo estudar as órbitas dos portadores e obter informações sobre o nível de Fermi do material, estado de spin, entre outros. A aplicação de campo magnético na direção de crescimento (z) dos poços quânticos evidencia fenômenos que podem ser observados opticamente, dentre os quais estão os níveis de Landau, deslocamento diamagnético e efeito Zeeman. Para iniciarmos a discussão deste parâmetro externo sobre as propriedades ópticas de poços quânticos, descrevemos o hamiltoniano total ($\mathcal{H}_{\mathcal{T}}$) do portador de carga sob efeito de um campo magnético dado por:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{T}} = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} - q\vec{A}) \mp \frac{1}{2}g^*(z)\mu_B B + V, \quad (2.23)$$

em que o primeiro termo do hamiltoniano diz respeito aos fenômenos de níveis de Landau e deslocamento diamagnético. Os níveis de Landau consistem no surgimento de níveis de energia adicionais ao estado fundamental devido à aplicação de campo magnético na direção de crescimento (z), que confina os portadores no plano perpendicular xy , cujas órbitas são magneticamente quantizadas e oscilam com uma frequência típica, denominada frequência ciclotrônica (ω_c) [26, 36]. O fenômeno também pode ser observado em sistemas de partículas ligadas eletrostaticamente, em que o aumento do campo magnético eleva a energia ciclotrônica até quebrar a ligação, fazendo com que se comportem como os portadores livres, apresentando os fenômenos descritos anteriormente [26, 36].

Estudos abordando os níveis de Landau dos éxcitons em sistemas de poços quânticos, são realizados com os portadores se movendo em forma ciclotrônica no plano xy enquanto confinados em z . O hamiltoniano dos níveis de Landau para os éxcitons ($\hat{\mathcal{H}}_L$) é dado pela

equação (2.24), em que $\hat{p}_{e(h)}^2$ é o operador momento do elétron (buraco), κ é a constante dielétrica do sistema e $|r_e - r_h|$ é a distância do par elétron-buraco [38–41].

$$\hat{\mathcal{H}}_L = E_g + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e^*} + \frac{\hat{p}_h^2}{2m_h^*} - \frac{e^2}{\kappa|r_e - r_h|}. \quad (2.24)$$

Agora, aplicando as seguintes considerações: reescrevendo o hamiltoniano ($\hat{\mathcal{H}}_L$) para partículas em um campo eletromagnético e utilizando as transformações de calibre apresentadas por Yang e Sham ($\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$); utilizando a simetria do movimento das órbitas dos buracos e elétrons com as coordenadas cilíndricas, permitindo descrever o sistema pela coordenada de centro de massa $\vec{R} = (m_{xy}^e \vec{r}_e + m_{xy}^h \vec{r}_h)/(m_{xy}^e + m_{xy}^h)$ e a coordenada do plano $\vec{r} = \vec{r}_h - \vec{r}_e$; fazendo uso da aproximação de dipolo com a conservação das coordenadas de confinamento z_e e z_h , o Hamiltoniano da equação (2.4) pode ser reescrito como:

$$\hat{\mathcal{H}}_L = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z_e} \right) \frac{1}{m_z^e} \left(\frac{\partial}{\partial z_e} \right) + V(z_e) - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z_e} \right) \frac{1}{m_z^h} \left(\frac{\partial}{\partial z_e} \right) + V(z_h) \quad (2.25)$$

$$- \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}^h} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}^h} \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{2i} \hbar^2 \frac{\mu_{xy}^h}{\mu_-^h} \omega_c^h \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\mu_{xy}^h (\omega_c^h)^2}{8} r^2 + V_C(r, z_e - z_h), \quad (2.26)$$

em que \hbar é a constante de planck reduzida, $m_z^{e(h)}$ é a massa do elétron (buraco) na direção de crescimento do poço. Os termos $\frac{\partial}{\partial}$, referem-se às derivadas parciais das coordenadas: z do poço, r e ϕ do par elétron-buraco. O termo $V(z_{e(h)})$ é o potencial de confinamento do elétron (buraco), μ_{xy}^h é a massa reduzida no plano xy , $\omega_c^h = eB/\mu_{xy}^h$ é a frequência ciclotrônica do éxciton, $\mu_-^h = m_{xy}^h m_{xy}^e / (m_{xy}^h - m_{xy}^e)$ é uma simplificação algébrica e $V_C(r, z_e - z_h)$ é a energia de ligação do éxciton [38–41]. Reorganizando o hamiltoniano pelas diferentes contribuições:

$$\hat{\mathcal{H}}_L = \mathcal{H}_{\mathcal{QW}}(z) + \mathcal{H}_{\mathcal{B}}(r, \phi) + V_c(r, z_e - z_h), \quad (2.27)$$

em que $\mathcal{H}_{\mathcal{QW}}(z)$ corresponde às energias do poço quântico, o qual pode ser calculado das diferentes formas citadas e não depende do campo magnético. O segundo termo $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ descreve o movimento ciclotrônico do par elétron-buraco no plano xy do poço [39–41]. Ainda, o termo com dependência quadrática em ω_c^h (proporcional ao campo magnético B) é o coeficiente de diamagnetismo. Portanto, esses termos correspondem à interação do campo magnético como um todo.

O termo $V_c(r, z_e - z_h)$ é a interação coulombiana do par elétron-buraco (éxciton). Como se supõe que o confinamento ocorra no poço, é possível utilizar apenas o primeiro termo da expansão binomial em z , eliminando a dependência na coordenada de confinamento z . A resolução do Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_L$, envolvendo todas as interações de campo

magnético, permite investigar diferentes características do material com as diferentes abordagens e aproximações utilizadas. Para o presente estudo, tratou-se o problema do par elétron-buraco confinado no poço e o éxciton como uma perturbação, separando a função de onda e reescrevendo-a como [39–41]:

$$\psi(r, z_h, z_e) = \phi_{n_e}(z_e)\phi_{n_h}(z_h)\Phi_{N,l}^0(r, \phi), \quad (2.28)$$

em que a função de onda $\phi_{n_{e(h)}}(z_{e(h)})$ corresponde ao elétron (buraco) na banda de condução (valência) do poço quântico e pode ser obtida resolvendo o termo equivalente ao potencial de confinamento do Hamiltoniano ($\mathcal{H}_{\mathcal{QW}}$) nos níveis de energia $n_{e(h)}$, que trata-se de um problema de poço finito. O termo $\Phi_{N,l}^0(r, \phi)$ refere-se à função de onda da interação com o campo magnético (\mathcal{H}_B) e os estados quantizados em N . Aplicando o operador de momento angular $\hat{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$, é possível descrever o movimento relativo do par elétron-buraco no campo magnético, com os número quântico l e N [39–41]. Reescrevendo a função de onda da interação do campo magnético, têm-se:

$$\Phi_{N,l}^0(r, \phi) = R(r)e^{il\phi}. \quad (2.29)$$

Para determinar a função de $R(r)$, aplica-se então o hamiltoniano \mathcal{H}_L na função $\Phi_{N,l}^0(r, \phi)$, reduzindo o problema à solução de uma equação diferencial. Após algumas manipulações, é possível mostrar que se trata de uma equação de Kummer, que permite a solução na forma de funções hipergeométricas. Para que esta função seja finita, a mesma deve ser quantizada no número inteiro (N) [41]. Rescrevendo a função de onda do movimento radial do par elétron-buraco no plano xy , têm-se a seguinte equação:

$$\Phi_{N,l}^0 = \sqrt{\frac{(N+|l|)!}{N!\pi(2\lambda^2)^{|l|+1}} \frac{1}{|l|!}} e^{il\phi} r^{|l|} e^{-r^2/4\lambda^2} \times M\left(-N, |l|+1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right), \quad (2.30)$$

onde N é a quantização dos níveis de Landau, l é o número quântico azimutal, $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ é o comprimento magnético, i é a unidade imaginária ($\sqrt{-1}$) e $M(-N, |l|+1, x)$ é a função hipergeométrica confluyente. Aplicando o hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_L$ à função de onda obtida, é possível determinar a energia dos portadores no plano xy . Portanto, a energia total da interação é dada pela soma da energia do elétron, do buraco, do gap do material e da contribuição do campo magnético, desconsiderando a interação Coulombiana descrita por $V_c(r)$. A equação abaixo resume esses argumentos:

$$E_{n_e, n_h, N, l}^0 = E_{n_e} + E_{n_h} + E_g + \hbar\omega_c^h \left(N + \frac{|l|+1}{2} - \frac{\mu_{xy}^h}{\mu_{\perp}^h} \right). \quad (2.31)$$

Para calcular a contribuição da energia potencial V_C , utiliza-se da teoria de perturbação da seguinte maneira:

$$E_{n_e, n_h, N, l} = E_{n_e, n_h, N, l}^0 + \langle \Phi_{N,l}^0 | V_C | \Phi_{N,l}^0 \rangle + \sum_{N' \neq N} \frac{|\langle \Phi_{N',l}^0 | V_C | \Phi_{N,l}^0 \rangle|^2}{E_{N,l}^0 - E_{N',l}^0}, \quad (2.32)$$

com o termo $E_{n_e, n_h, N, l}^0$ correspondente a energia não perturbada do sistema, $\langle \Phi_{N, l}^0 | V_c | \Phi_{N, l}^0 \rangle$ a perturbação de primeira ordem e o somatório a perturbação de segunda ordem. A função de onda com a perturbação de segunda ordem ($\Phi_{N, l}^{(2)}$) é descrita por:

$$\Phi_{N, l}^{(2)} = \Phi_{N, l}^0 + \sum_{N' \neq N} \frac{\langle \Phi_{N, l}^0 | V_c | \Phi_{N', l}^0 \rangle}{E_{N, l}^0 - E_{N', l}^0} \Phi_{N', l}^0 + \sum_{\substack{N' \neq N \\ N'' \neq N}} \frac{\langle \Phi_{N', l}^0 | V_c | \Phi_{N'', l}^0 \rangle \langle \Phi_{N', l}^0 | V_c | \Phi_{N, l}^0 \rangle}{(E_{N, l}^0 - E_{N', l}^0)(E_{N, l}^0 - E_{N'', l}^0)} \Phi_{N', l}^0, \quad (2.33)$$

com $\Phi_{N, l}^0$ a função de onda não perturbada, o primeiro somatório é a perturbação de primeira ordem e o segundo somatório a perturbação de segunda ordem. Para casos em que o número quântico n é 1, o número quântico l fica limitado a o único valor $l=0$, permitindo utilizar das propriedades das funções hipergeométricas, simplificando o problema da perturbação [41, 42]. Reescrevendo os elementos da perturbação como um único termo, dado por:

$$\langle \Phi_{N, 0}^0 | V_c | \Phi_{M, 0}^0 \rangle = \langle \Phi_{M, 0}^0 | V_c | \Phi_{N, 0}^0 \rangle = \frac{e^2}{\sqrt{2}\lambda\epsilon} \sum_{i=0}^N (-1)^j \binom{N}{j} \frac{1}{j!} \frac{\Gamma(j+1/2)\Gamma(1/2+M-j)}{\Gamma(M+1)\Gamma(1/2-j)} \quad (2.34)$$

em que e é a carga do elétron, $\lambda = \sqrt{\hbar/eB}$ é o comprimento magnético, Γ representa a função gama, e N e M são os níveis de Landau ($N \leq M$), com j sendo o índice do somatório em N .

Assim, é possível realizar um cálculo completo da influência do éxciton nos níveis de Landau de uma estrutura de poço quântico. Outra abordagem para o problema é a utilização de métodos numéricos autoconsistentes, que permitem estimar a massa efetiva do plano, a contribuição magnética, a energia do éxciton ou outros parâmetros. No caso deste estudo, foram utilizados parâmetros da literatura para estimar os níveis de Landau $HH_{n, N}$ e $LH_{n, N}$.

Alguns trabalhos investigaram o processo da interação entre éxcitons e fônons em estruturas de poços quânticos, analisando a intensidade da emissão desse fenômeno [41]. De maneira geral, a intensidade depende da excitação, dos processos de espalhamento, dos termos da interação de Fröhlich, da interação elétron-fônon, da interação éxciton-fônon no plano, e do termo de *overlap*, definido pela amplitude de probabilidade W_{FI} , dada pela função:

$$W_{FI} \propto \left[\frac{1}{(\hbar\omega_s - E_{n_e, n_h, N, 0}^0 + i\Gamma_{n_e, n_h, N, 0})(\hbar\omega_L - E_{n_e, n_h, N, 0}^0 + i\Gamma_{n_e, n_h, N, 0})} \right]^2, \quad (2.35)$$

onde $\omega_{L(S)}$ é a frequência angular do fóton incidente (espalhado) e $\Gamma_{n_e, n_h, N, 0}$ é a largura de linha das emissões [41]. Investigando a expressão, obtém-se uma relação entre o termo de *overlap* e os níveis de Landau (dado por N). Neste trabalho, a atenção será voltada

para a dependência em $(N)^{-2}$. Para isso, a intensidade dos dados foi normalizada de 0 a 1, visando modelar a intensidade relativa a partir do máximo.

Outra consequência da aplicação de campo magnético na direção de crescimento é o chamado Efeito Zeeman, representado pelo segundo termo no lado direito da equação (2.23). Na Figura 8(a), está representada a transição entre os estados $l=2$ e $l=1$ na ausência de campo magnético ($\vec{B}=0$). Já na Figura 8(b), com o campo magnético aplicado ($\vec{B} \neq 0$), observa-se a quebra da degenerescência dos níveis de energia, com diferentes momentos magnéticos totais, decorrente da dependência com o spin e o momento magnético da carga eletrônica [43]. Assim, o efeito Zeeman revela o acoplamento do momento magnético das órbitas com o momento de spin dos portadores, permitindo diferenciar os estados de spin através do desdobramento do nível de energia.

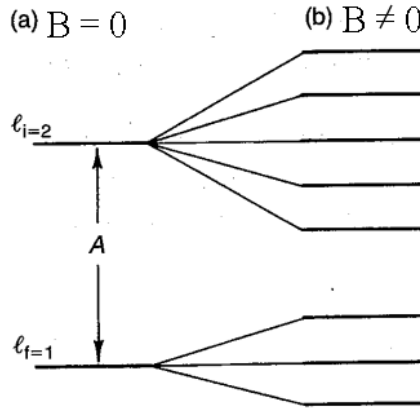


Figura 8 – Representação do efeito Zeeman com as respectivas regras de seleção. Em (a) está o estado inicial ($l=2$) e estado final ($l=1$) na ausência de campo magnético. Em (b) está a separação dos estados com diferentes momentos decorrente da aplicação de campo magnético.

Imagem modificada de [43].

No hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_T$ sua contribuição está relacionado ao termo $\hat{\mathcal{H}}_Z$:

$$\hat{\mathcal{H}}_Z = \mp \frac{1}{2} g_0^*(z) \mu_B \vec{B}, \quad (2.36)$$

onde μ_B é o magneton de Bohr (0,0579 meV/T), \vec{B} é a magnitude do campo magnético aplicado na direção de crescimento (z) e g_0 é o fator de Landé, cujo valor pode ser determinado experimentalmente [36].

O campo magnético também afeta o comportamento do elétron como um todo na estrutura, e esta interação é descrita pela constante de acoplamento de Fröhlich (α_{ep} , dada pela seguinte equação:

$$\alpha_{ep} = \frac{1}{137} \left(\frac{m^* c^2}{2\hbar\omega_{LO}} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right], \quad (2.37)$$

em que c é a velocidade luz no vácuo, m^* é a massa efetiva do elétron, ω_{LO} é a frequência dos fônons ópticos longitudinais, ϵ_∞ é a constante dielétrica e ϵ_{st} a constante dielétrica estática. No caso de estruturas fracamente polares, o valor de α_{ep} é menor do que 1. Assim, o campo magnético afeta significativamente as interações que ocorrem entre os portadores de carga, destacando-se a interação elétron-fônon. O movimento dos elétrons na estrutura polar faz com que os íons ao seu redor sejam afetados, deslocando a rede como um todo. Como consequência há um aumento da massa efetiva do elétron, formando a quasipartícula chamada de polaron. O deslocamento do polaron pode ser descrito como um elétron se propagando em uma nuvem de fônons longitudinais ópticos (LO) [26, 44–46].

Na Figura 9, apresenta-se o comportamento da energia de emissão de uma amostra de InSb *bulk* em função do campo magnético aplicado. A partir de 3 Tesla, observa-se que a energia do modo fundamental desdobra-se em dois picos devido à quebra do acoplamento elétron-fônon. Assim, é possível observar a separação dos modos do elétron e do fônon com o aumento do campo magnético. A intensidade da separação também é descrita pela constante de Fröhlich para o material em estudo [44, 45, 47].

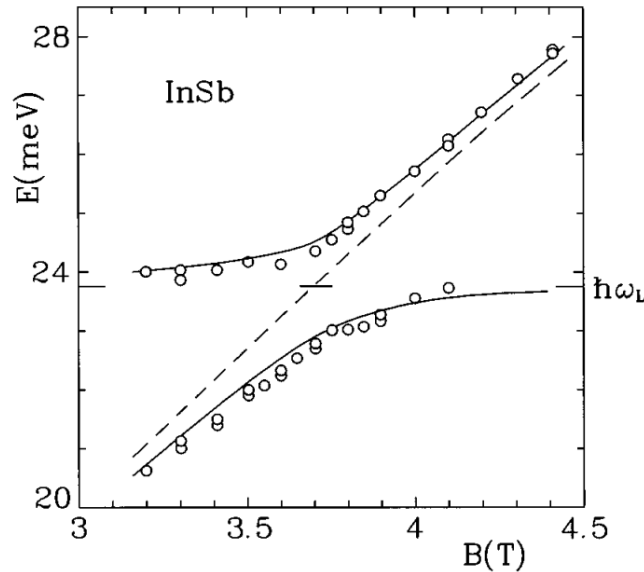


Figura 9 – Medidas da energia de recombinação óptica do par elétron-buraco em uma amostra de InSb *bulk* em função do campo magnético aplicado. Em aproximadamente 3 Tesla ocorre a separação dos modos do elétron e fônons LO.

Imagem retirada de [48];

A separação dos modos é observada quando a energia ciclotrônica ($\hbar\omega_c$) é aproximadamente a energia do fônon LO ($\hbar\omega_{LO}$), permitindo que o elétron se mova sem sofrer influência dos fônons. Neste regime de desacoplamento, é possível diferenciar a massa do material em massa polarônica (m^{**}) e massa efetiva do elétron (m^*) pela seguinte aproximação:

$$\frac{m^{**}}{m^*} \approx 1 + \frac{1}{6}\alpha_{ep}. \quad (2.38)$$

A energia em que ocorre a separação dos modos do elétron e fônon pode ser estimada utilizando os níveis de Landau, com o processo ocorrendo quando a diferença de energia entre dois níveis de Landau é igual a energia do fônon LO [47], permitindo equacionar o processo como:

$$En + \hbar\omega_c \left(i + \frac{1}{2}\right) - \left[En + \hbar\omega_c \left(j + \frac{1}{2}\right)\right] = \hbar\omega_{LO}. \quad (2.39)$$

Reescrevendo

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar\omega_{LO}}{i - j} \quad (2.40)$$

e, considerando a conservação da energia do fônon ($\hbar\omega_{LO}$) e reescrevendo em termos de B, chega-se a expressão:

$$B = \frac{\hbar\omega_{LO}m}{(i - j)\hbar e}. \quad (2.41)$$

Trabalhos em GaAs *bulk* demonstraram correções para o acoplamento entre os elétrons e fônons longitudinais ópticos (LO) do material. Sendo assim, é possível estimar o campo magnético em que o fenômeno ocorre e a intensidade do acoplamento [26, 45–48]. Portanto, a observação de polarons enriquece ainda mais o cenário de fenômenos induzidos por um campo magnético externo.

2.4 Efeitos da Temperatura sobre as Propriedades Ópticas de Semicondutores

O estudo da emissão óptica dos semicondutores geralmente é feito a baixas temperaturas (próximo a 0 K). Com o aumento da temperatura, há um aumento no grau de vibração da estrutura cristalina, afetando diretamente os níveis de energia, alterando a concentração de portadores, o gap do material, o alargamento da linha de emissão, entre outras propriedades. Nesta seção, será dado enfoque em como a temperatura afeta a energia do gap, a concentração de portadores e o alargamento da linha de emissão.

As primeiras investigações experimentais sobre como os semicondutores são afetados pela temperatura mostraram que a energia do gap diminui de forma quadrática em baixas temperaturas e de forma linear para temperaturas mais altas [49]. A partir de uma abordagem considerando a interação dos fônons por meio da estatística de Bose-Einstein, desenvolveram-se modelos nos quais, com o aumento da temperatura, a expressão tende a um platô [49]. Com base nessa abordagem, diversos modelos semiempíricos foram propostos com base nos mesmo princípios, buscando uma melhor modelagem do comportamento

da energia do gap com a temperatura e consideram a interação elétron-fônon como o mecanismo dominante, desprezando o influência da dilatação térmica da rede [49, 50].

Para heteroestruturas, é necessário compreender como o gap dos materiais varia com a temperatura, já que o grau de confinamento está relacionado com a diferença do gap entre o material do poço e o material das barreiras. Assim, como a energia da transição óptica está diretamente relacionado com o gap do poço [26, 36], de forma geral, observa-se um deslocamento da energia da interação do par elétron-buraco para menores valores acompanhada de uma redução no grau confinamento.

Como a vibração da rede é ditada por fônons, que são bósons, sua população é dada pela estatística de Bose-Einstein, permitindo escrever a sua população como:

$$n_{\bar{q}}(\hbar\omega_{\bar{q}}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\bar{q}}}{k_B T}} - 1}, \quad (2.42)$$

em que $n_{\bar{q}}$ é o número médio de fônons, $\omega_{\bar{q}}$ é a frequência do fônon e T é a temperatura. Sendo assim, a temperatura aumenta a população de fônons, possibilitando a ocorrência de diferentes espalhamentos entre elétron e fônon, afetando a intensidade e a física envolvida nos processos ópticos [26, 51].

Um dos fenômenos devido o espalhamento dos fônons no material é a interação com o éxciton, o que aumenta a largura de linha de sua emissão [52, 53]. Com base no acoplamento elétron-fônon, modelos foram desenvolvidos para ajustar a largura de linha com a temperatura. Na região de baixas temperaturas, parte da largura à meia altura (FWHM, do inglês full width at half maximum) está relacionada com irregularidades na interface e outras características da própria estrutura. Esta contribuição é denominada como um termo inomogêneo (FWHM Γ_i). Com o aumento da temperatura, aumenta-se a ocorrência de espalhamentos por fônons, processo denominado homogêneo (FWHM Γ_h). Assim, o espalhamento total em função da temperatura pode ser escrito como:

$$\Gamma_t = \Gamma_i + \Gamma_h. \quad (2.43)$$

Utilizando a densidade de fônon, juntamente com uma constante de acoplamento entre elétrons e fônons (Γ_c), é possível ajustar a largura de linha com a temperatura através da seguinte equação:

$$\Gamma_h = \Gamma_c \left[\exp\left(\frac{E_{ph}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (2.44)$$

onde E_{ph} é a energia do fônon longitudinal ótico do material estudado [51, 54].

O processo de recombinação espontânea (R_{sp}) pode ser descrito pelo espectro de absorção do material, que é representado pela relação de van Roosbroeck-Shockley:

$$R_{sp} \propto \frac{S(\hbar\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar\omega - E_F}{kT}\right) - 1}, \quad (2.45)$$

em que $S(\hbar\omega)$ é uma função de distribuição qualquer, E_F é a energia de Fermi, k a constante de Boltzmann, T a temperatura do sistema.

Para as transições que ocorrem em $\vec{k} \approx 0$ (ponto Γ), ou seja, não dependem do valor de \vec{k} , a intensidade da emissão está diretamente relacionada com a densidade de éxcitons na região $\vec{k} \approx 0$. Para os processos que ocorrem em $\vec{k} \neq 0$, devido os espalhamentos da interação éxciton-fônon, a densidade de éxcitons cai significativamente, e, como consequência, há um aumento no tempo de vida dos portadores, afetando diretamente a intensidade da emissão [55].

Sendo assim, é possível distinguir dois limites principais: para o caso de poucas interações com fônons a intensidade está no seu máximo devido à alta população de éxcitons em $\vec{k} \approx 0$, a função $S(\hbar\omega)$ é dada por uma distribuição Lorentziana [7, 51, 54, 55]. Para o caso com muitos espalhamentos da interação éxciton-fônon (tipicamente em altas temperaturas), a densidade de éxcitons cai rapidamente, e a emissão é descrita por uma distribuição Gaussiana $S(\hbar\omega)$ [51, 54, 55]. Assim, estas funções de distribuição são dadas por:

$$S(z) = \frac{1}{\pi} \frac{\sigma}{(z - \mu)^2 + \sigma^2} \quad \text{Distribuição Lorentziana}, \quad (2.46)$$

$$S(z) = \frac{A}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(z - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{Distribuição Gaussiana}, \quad (2.47)$$

em que σ está relacionado com a largura de linha (assim como o FWHM) da distribuição, A com a amplitude e μ com o centro da curva. Uma forma de analisar os parâmetros da distribuição é considerar σ como o desvio padrão dos dados, μ como a média dos dados e A como a intensidade. Em muitos sistemas as curvas são normalizadas de 0 a 1 ($A=1$), tratando a intensidade em porcentagem da ocorrência do fenômeno que está sendo estudado [56]. Na interpretação física das curvas, σ está relacionado com o tempo de vida das emissões e μ à energia da ressonância da transição óptica.

Na Figura 10 estão apresentados exemplos das curvas de distribuição Lorentziana (em azul) e Gaussiana (em preto). Claramente a curva Lorentziana tem seu pico mais estreito e decai rapidamente nas bordas, o que justifica sua aplicação nos processos de transição óptica dos éxcitons em ressonância. Estudos sobre a largura de linha em poços quânticos, com base em distribuições Lorentzianas, demonstraram que a largura de linha das emissões dos níveis de HH e LH aumentam rapidamente com a temperatura, tornando inviáveis os ajustes com distribuições Lorentzianas [8, 57]. Isso evidencia como o aumento dos processos de espalhamento domina os processos ópticos com a temperatura. Por outro lado, a curva Gaussiana é mais ampla, permitindo ajustar as transições ópticas com as diferentes contribuições do sistema, trazendo um ajuste satisfatório para regiões de altas temperaturas, em grande parte dos casos.

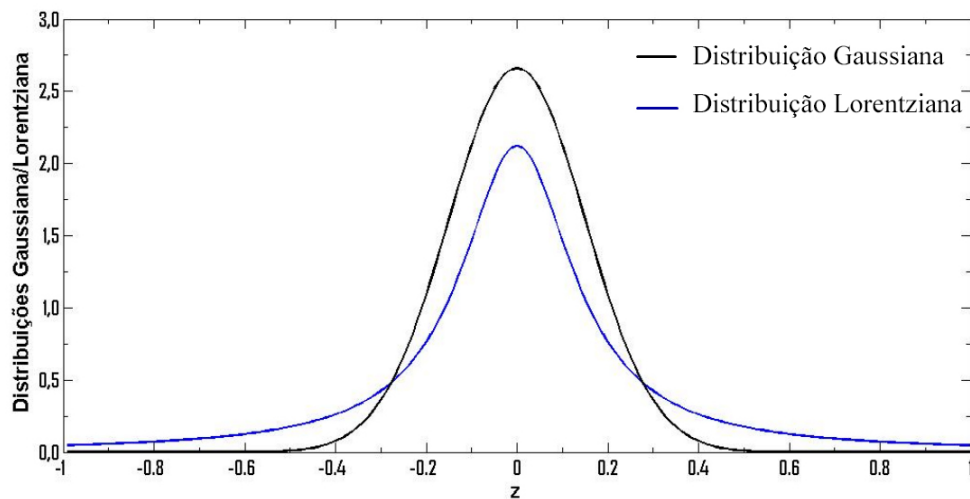


Figura 10 – Exemplos das curvas correspondente a distribuição Loretziana (curva em azul) e Gaussiana (curva em preto).

Imagem modificada de [56]

De forma geral, não há um consenso sobre a forma de linha da recombinação excitônica [8, 51, 57]. Alguns estudos optam pela utilização de ambas as distribuições (Lorentziana e Gaussiana) para representar os processos homogêneos e inhomogêneos [8, 51, 54, 57–59]. Como neste trabalho as amostras foram investigadas opticamente à temperatura ambiente, regime dominado pela interação éxciton-fônon, serão utilizadas curvas gaussianas para representar as transições ópticas.

Outro aspecto interessante relacionado ao aumento do número de portadores em semicondutores, ilustrado na Figura 11, é o fenômeno de *bandtail*. O processo foi evidenciado por Urbach, que comparou o comportamento de diferentes materiais com a temperatura, percebendo que, com o aumento da temperatura, as bordas das bandas não eram abruptas, mas apresentavam um decaimento exponencial dependente da temperatura e um parâmetro (γ) denominado parâmetro de Urbach [60, 61]. Como consequência do processo de *bandtail* as transições ópticas do material são influenciadas, permitindo transições ópticas com energias menores do que as esperadas, o que é evidenciado pelo aumento na largura de linha da emissão óptica do material, alargando-a de forma assimétrica para menores energias [61]. O processo ocorre porque a grande quantidade de portadores promovidos termicamente relaxa até a borda da banda de condução (BC) [61]. Esse aumento significativo de portadores intensifica a interação coulombiana entre as bordas da BC e BV, tornando-se forte o suficiente para estender os estados eletrônicos para dentro do gap entre essas regiões [61].

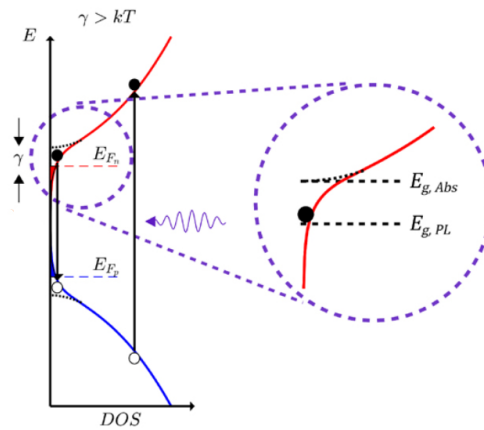


Figura 11 – Representação do processo de *band-tail* demonstrando uma diferença na energia observada na fotoluminescência e na energia do gap.

Imagem retirada de [61]

De forma geral, as principais consequências da temperatura em poços quânticos são: a redução do potencial de confinamento, deslocamento das transições ópticas para menores energias, aumento do processo de espalhamento por fônons e aumento na largura de linha das emissões. Assim, esse trabalho será dedicado a investigar a resposta magneto-óptica de poços quânticos de GaAs/AlGaAs no regime de temperatura ambiente.

3 Objetivos

O objetivo desta dissertação de mestrado é estudar as interações que ocorrem em poços quânticos de GaAs/AlGaAs em temperatura ambiente com a técnica de magnetofotoluminescência e determinar o comportamento dos níveis de energias adicionais que surgem além dos esperados no regime de altos campos magnéticos.

4 Materiais e Metodologia

Nesta seção serão discutidas as técnicas experimentais utilizadas neste trabalho, como a de crescimento de epitaxia por feixes moleculares e fotoluminescência, junto as características estruturais apresentadas pelas amostras utilizadas.

4.1 Epitaxia por feixes moleculares

O crescimento de estruturas semicondutoras com alta pureza e com controle preciso da deposição de materiais é possível devido à aplicação de técnicas de crescimento epitaxial, ou seja, o crescimento de camadas orientadas em um substrato. As técnicas de crescimento têm focado sua atenção em diversos tipos de semicondutores, dentre eles, naqueles formados pelos elementos da família III-V da tabela periódica, os quais são utilizados principalmente na confecção de dispositivos optoeletrônicos [1, 25, 62].

A técnica consiste na deposição controlada de átomos em um substrato aquecido em um sistema em condição de ultra-alto-vácuo (UAV). Os primeiros protótipos de MBE cresceram estruturas poli-cristalinas e, devido as condições de vácuo não serem ideais, o sistema apresentava a incorporação de impurezas indesejadas (como o carbono) nas amostras crescidas. Anos mais tarde o laboratório da Bell obteve condições de UAV, permitindo estudar as interações entre os átomos e o substrato cristalino [55], levando ao entendimento da influência do substrato no processo de crescimento. Ainda, foi observado que os defeitos estão diretamente relacionados com a interação dos elementos crescidos com o substrato, tornando necessário uma superfície limpa e não-reativa. Para obter tal superfície, a preparação do substrato é feita em duas partes. Na primeira, utiliza-se de um ataque químico para remover as impurezas do substrato, produzindo uma superfície livre de impurezas, e protegendo das contaminações atmosféricas através de uma fina camada de óxido. A segunda parte é feita com a amostra já no sistema de MBE, aquecendo o substrato para a dessorção do óxido da superfície. Toda a preparação do substrato permite o crescimento de estruturas de alto grau de pureza [32, 55].

A Figura 12 mostra uma representação esquemática simplificada da epitaxia por feixes moleculares. As células de efusão possuem os elementos que serão utilizados para o crescimento, que para os elementos III-V normalmente são os de Gálio, Alumínio, Arsênio, Índio e Fósforo. Os materiais das células são evaporados, gerando os feixes moleculares, que são direcionados ao substrato. A base do processo é a reação térmica dos feixes moleculares, com o substrato aquecido a uma temperatura típica entre 500-600 °C, fazendo com que os feixes depositados desloquem-se para seus sítios na rede, diminuindo a formação de defeitos [1, 25, 32, 62, 63]. O crescimento das camadas está diretamente relacionado com

a adesão dos átomos que estão chegando no substrato, que é diferente para os elementos do grupo III e os do grupo V. Para o controle total das monocamadas depositadas, todo o processo é monitorado por um sistema de difração de elétrons de alta energia por reflexão (RHEED, do inglês *Reflection High Energy Electron Diffraction*) [1, 25, 32, 55, 62, 64].

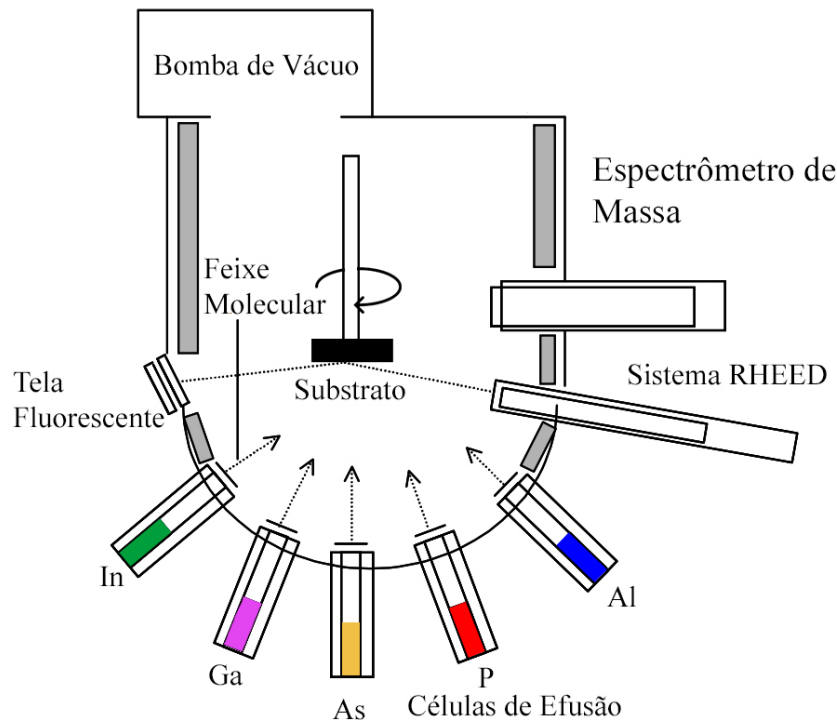


Figura 12 – Ilustração da montagem experimental de uma máquina de epitaxia por feixe molecular.

Modificada de [64];

No caso deste trabalho, as amostras foram crescidas no Instituto de Nanociências e Engenharia da Universidade de Arkansas – EUA. Os substratos de GaAs não dopados escolhidos possuem orientação nas direções [100] e [311]A, e foram mantidos por 10 minutos à uma temperatura de 580 °C sob o fluxo de As_4 , visando remover óxidos das superfície. Na sequência, a temperatura do substrato foi aumentada para 600 °C para realizar o crescimento [32].

Uma representação das amostras está na Figura 13. Primeiramente foi crescido uma camada *buffer* com 0.1 μm de GaAs, com o crescimento de 20 poços quânticos múltiplos na sequência. Todo o crescimento foi feito simultâneo para as duas direções, com os parâmetros estruturais calibrados para a amostra crescida na direção [100]. Esta amostra possui barreiras de $Al_{(0,36\pm 0,01)}Ga_{0,64}As$ ($285 \pm 11\text{Å}$) e poços de GaAs ($55 \pm 2\text{Å}$), finalizada com uma camada tampão de GaAs com 60 Å. A razão dos elementos III-V foi de 15, e a velocidade de crescimento de 0,5 ML/s para o GaAs. A segunda amostra, [311]A, foi crescida nas mesmas condições da amostra crescida na direção [100], e, devido as diferentes propriedades físicas do substrato, o parâmetros finais dos poços são: $Al_{(0,33\pm 1)}Ga_{0,67}As$

($256 \pm 5 \text{ \AA}$) e poço de GaAs ($52 \pm 1 \text{ \AA}$). Todos os parâmetros foram determinados por difração de raios-X [32].

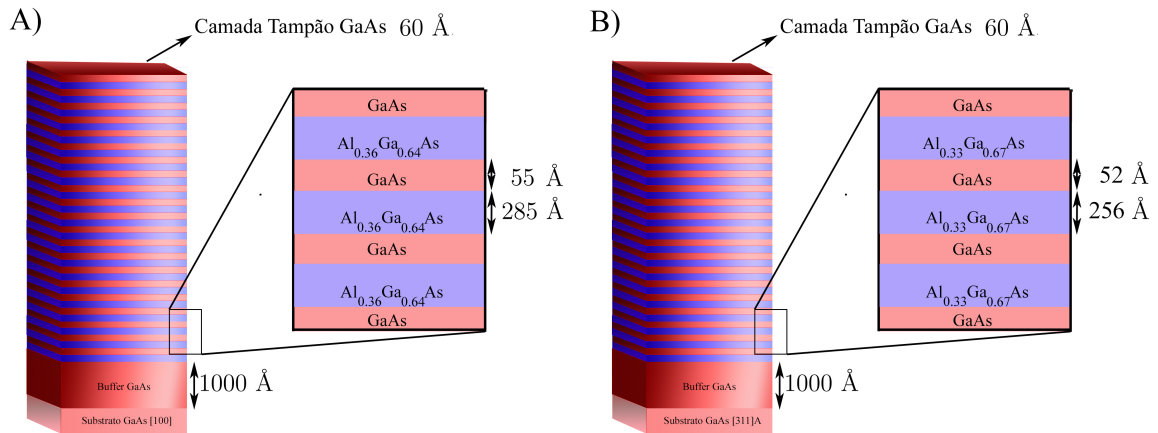


Figura 13 – Representação esquemática da amostra de poço quântico crescida na direção [100] e (b) [311]A.

Imagem do próprio autor.

4.2 Fotoluminescência

Uma das técnicas mais utilizadas para a investigação óptica de semicondutores é a fotoluminescência, que se baseia no processo de emissão radiativa dos materiais sob uma determinada excitação óptica. O processo está representado na Figura 14, que ocorre quando um material é excitado por fótons com energia usualmente superior ao *band gap* do material, injetando elétrons na banda de condução e deixando buracos na banda de valência, formando um par elétron-buraco (par e-h). Após o processo, os elétrons perdem energia pela emissão de fônons (termalização), relaxando para os mínimos da banda de condução, recombinando e emitindo um fóton com energia equivalente ao nível de energia a partir do qual a recombinação aconteceu, podendo ser o próprio gap do material, ou níveis excitônicos e defeitos, por exemplo [26].

Para o caso da recombinação radiativa, as características da emissão são analisadas como a impressão digital óptica do material, podendo revelar um amplo cenário de informações sobre o material em estudo. Por exemplo, a aplicação da fotoluminescência em poços quânticos permite investigar, tamanho da estrutura, efeitos de rugosidade (*strain*), flutuações na composição química, efeitos de defeitos e as funções de ondas associadas aos níveis de energia contidos dentro do poço.

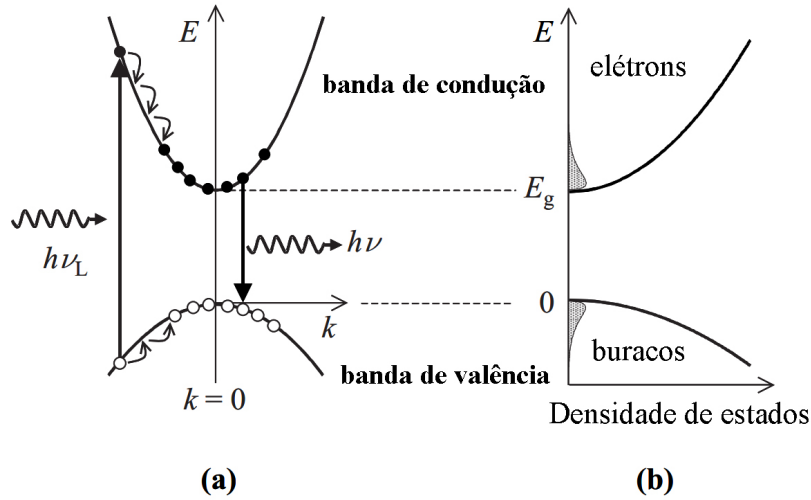


Figura 14 – (a) Diagrama do processo de fotoluminescência em $\vec{k} = 0$. O processo ocorre com a incidência de um feixe de luz com energia $h\nu_L$ promovendo um elétron da banda de valência para a banda de condução e gerando um buraco na banda de valência. Após a excitação, ambos os portadores sofrem o processo de relaxação para os fundos das respectivas bandas até a ocorrência da recombinação com uma energia $h\nu$. (b) A densidade de estados para o processo de luminescência. Imagem Adaptada de [26];

Sendo assim, a partir do fóton emitido, pode-se analisar informações a respeito dos portadores envolvidos no processo, com suas distribuições tratadas a partir da estatística de Fermi-Dirac. Ainda, é possível equacionar a densidade de estados com dependência da massa efetiva, fundamental para a compreensão da dinâmica dos portadores, permitindo determinar parâmetros essenciais para o estudo de semicondutores. Para portadores livres, as equações para a densidade de estados $N_{e,h}$ e para a densidade de estados (Figura 14(b)) $f_{e,h}$ são dadas por:

$$N_{e,h} \propto \sqrt{E}, \quad (4.1)$$

$$f_{e,h} = \left(e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T} \right)} + 1 \right)^{-1}. \quad (4.2)$$

A partir da manipulação das equações (4.1) e (4.2) é possível reescrever o número total da densidade de elétrons (e buracos), que pode ser resolvido de forma numérica: [26]

$$N_e = \int_0^\infty \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \left[e^{\left(\frac{E-E_F}{k_B T} \right)} + 1 \right]^{-1} dE, \quad (4.3)$$

permitindo modelar sistemas de emissões ópticas em materiais volumétricos [26].

Finalmente, a possibilidade de variar parâmetros externos, como campo magnético e temperatura, associada ao controle preciso dos estados de polarização da luz de excitação e

de emissão, torna essa técnica ainda mais completa para uma ampla gama de investigações em diferentes campos da ciência.

Especificamente para estudos envolvendo a aplicação de campo magnético, o controle da polarização da luz é essencial para a investigação de importantes parâmetros, como efeito Zeeman e o grau de polarização de spin do material. Para a compreensão de como a polarização da luz é utilizada na fotoluminescência é necessário entender como as ondas eletromagnéticas interagem com os estados de spin de um semiconductor. Na Figura 15, está a representação de uma onda eletromagnética propagando na direção z , com o campo elétrico (\vec{E}) e o campo magnético (\vec{B}) oscilando perpendicularmente à direção de propagação. A orientação do vetor do campo elétrico determina a polarização da luz. Decompondo o campo elétrico em duas componentes E_x e E_y , descritas como:

$$\vec{E}_x(z, t) = E_{0x} \cos(kz - \omega t) \hat{i}, \quad (4.4)$$

$$\vec{E}_y(z, t) = E_{0y} \cos(kz - \omega t + \delta) \hat{j}, \quad (4.5)$$

em que δ é a fase entre as ondas. O vetor resultante da soma das duas componentes depende da fase e amplitude das ondas. Para o caso da luz não polarizada (luz natural), a onda resultante oscila em todas as direções [65].

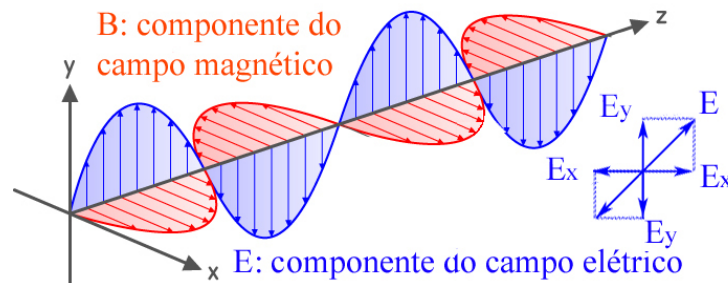


Figura 15 – Representação da luz propagando no eixo z . Em vermelho, tem-se um campo magnético oscilando em x e, em azul, o campo elétrico oscilando em y . À direita, está a decomposição do vetor \vec{E} em suas componentes x e y .

Imagem modificada de [66];

A partir da luz natural, é possível obter diferentes formas de luz polarizada, dispostas na Figura 16, com o auxílio de polarizadores e placas de onda obtêm-se a luz polarizada linear, elíptica e circular. Para o caso da polarização linear, é necessário que não exista diferença de fase entre E_{0x} e E_{0y} , ou seja, $\delta = 0$. Com isso, a onda resultante é dada por apenas uma componente que oscila no plano. O mesmo ocorre se somarmos uma fase π à onda. Essa polarização é denominada polarização linear. Vale ressaltar que a diferença de amplitude entre as ondas não interfere na polarização [65].

Para o caso em que a diferença de fase é $\delta = \pi/2$, há dois casos. Se as componentes tiverem amplitudes diferentes, ou seja, $E_{0x} \neq E_{0y}$, a onda oscila rotacionando de forma

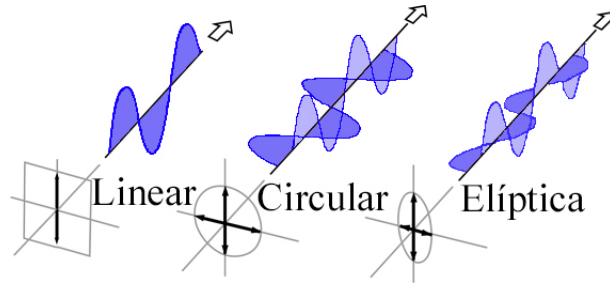


Figura 16 – Diferentes tipos de polarização. Em (a), polarização linear, em que o campo elétrico oscila apenas em um plano. Em (b), a polarização circular, em que o campo elétrico oscila com a mesma amplitude enquanto rotaciona. Em (c), a polarização elíptica, em que o campo elétrico oscila com diferentes amplitudes enquanto rotaciona.

Imagem Modificada de [67].

elíptica, chamada de polarização elíptica. Para o caso em que $E_{0x} = E_{0y}$, a onda rotaciona de forma circular, chamada de polarização circular. Se essa rotação for feita no sentido horário, é chamada de luz circularmente polarizada à esquerda, denotada como $\sigma-$, e a rotação no sentido anti-horário é chamada de circularmente polarizada à direita, denotada como $\sigma+$ [65]. Na imagem 17 está representado o feixe com a polarização circular à direita ($\sigma+$) e à esquerda ($\sigma-$). A polarização circular está relacionada com o spin dos fótons que constituem a onda eletromagnética, tendo uma projeção do momento angular na direção de sua propagação. Para o caso $\sigma+$ essa projeção é $+1$, $\sigma-$ é -1 . Para a polarização linear há sobreposição dos dois estados.

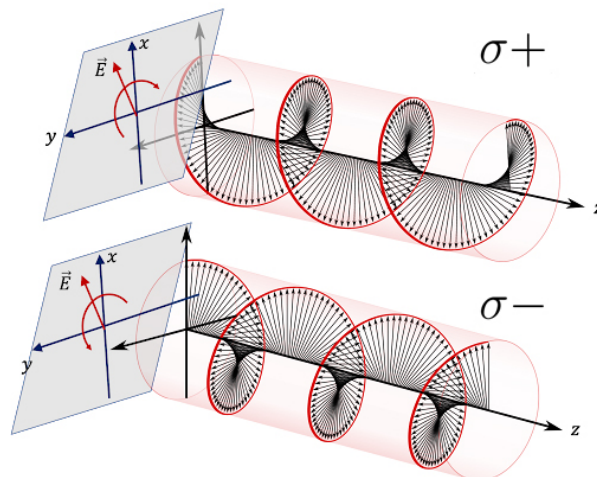


Figura 17 – Representação de um feixe polarizado a direita $\sigma+$ e abaixo a representação de um feixe polarizado a esquerda $\sigma-$.

Imagem modificada de [68];

A partir da determinação dos estados de polarização da luz oriunda de uma amostra semicondutora, é possível determinar as transições possíveis para este material. Por exemplo, na Figura 18, é apresentado um diagrama das transições permitidas para o GaAs na sua forma bulk e em QW. No processo de recombinação do elétron com o buraco,

o momento angular obedece às regras de seleção $\Delta J = 1$ e $m_J = \pm 1$. Isso possibilita observar diferentes estados com distintas polarizações, o que depende do momento angular das bandas e as projeções de momento angular associadas à polarização circular ($\sigma^+ = +1$ e $\sigma^- = -1$) [69].

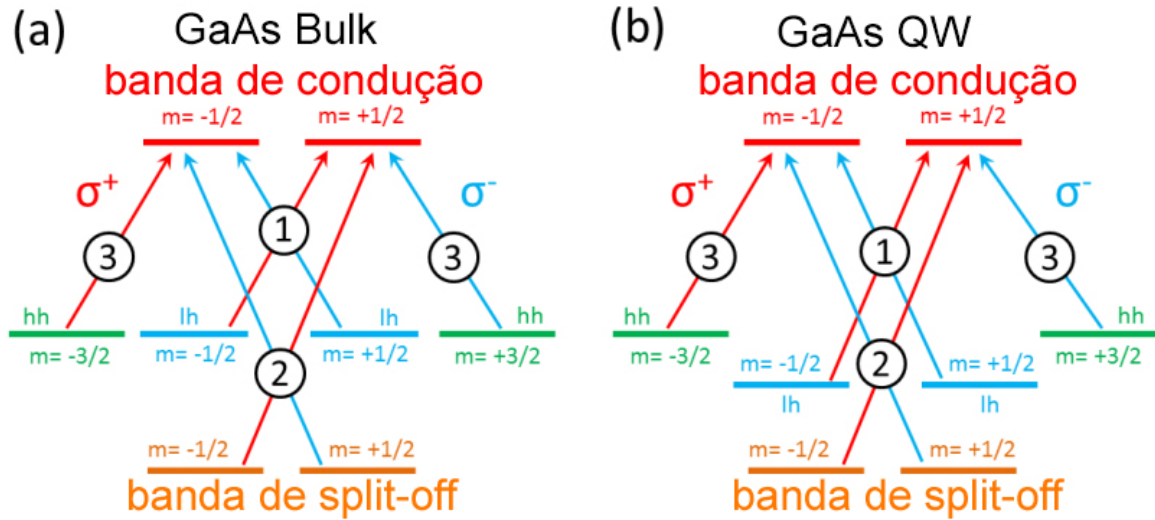


Figura 18 – Regras de seleção para: (a) o GaAs na forma Bulk, (b) GaAs em uma estrutura de poço quântico.

Imagem Modificada de [70];

Para a aplicação da técnica de fotoluminescência e magneto-fotoluminescência utilizadas neste trabalho, foi feito uso de um criostato de ciclo fechado de hélio (Atto-cube/AttoDry 1000), o qual pode ser utilizado para medidas em temperaturas de 3,5 K à 300 K com a aplicação de campo magnético até 9 T na região da amostra.

A configuração óptica utilizada está detalhada na Figura 19. Para a fotoluminescência utilizou-se como fonte luminosa um laser de comprimento de onda emitindo em 730 nm (1,698 eV) com uma potência de 20 μ W. A luz do canal de excitação (em vermelho) é proveniente do laser sendo guiada por fibra óptica até o setup experimental. Ao longo do caminho óptico, utiliza-se de uma placa de meia onda ($\lambda/2$) e um polarizador Glan-Taylor para orientar a polarização da luz de forma linear na direção desejada. Aqui foi escolhida a direção vertical perpendicular ao plano da página. O feixe de laser é então guiado por meio de espelhos e divisores de feixe para dentro do criostato incidindo na lente objetiva de abertura numérica 0.68 e distância focal de 1,6 mm, para então excitar uma região de 1 μ m da amostra.

O canal de detecção (representado em verde) consiste em uma placa de um quarto de onda ($\lambda/4$) acompanhada de um polarizador linear, permitindo selecionar a luz circularmente polarizada a esquerda (σ^+) ou a direita (σ^-). Na sequência a luz incide em um filtro passa banda eliminando a contribuição do laser e é guiada (distância de aproximadamente

1.5 m) por um conjunto de espelhos até o espectrômetro e detector CCD.

A fotoluminescência emitida pela amostra foi detectada com um espectrômetro (Andor Shamrock 75cm), equipado com uma *Charge Coupled Device* (CCD) de silício (Andor Idus). Visando uma melhor resolução espacial, utilizou-se da técnica de microscopia confocal, que permite a obtenção simultânea de alta resolução espacial e de contraste óptico, através da focalização e coleção de luz do mesmo plano focal desejado, em que os raios fora deste plano são rejeitados pelo uso dos chamados *pin-holes*, que para o canal de excitação, foi o núcleo da fibra mono-modo quem atuou como tal. Devido o comprimento do canal de detecção, os feixes que não estavam no foco de lente objetiva divergem o suficiente para não serem detectados pelo espectrômetro, garantindo a confocalidade do sistema. Para o canal de inspeção (em laranja) é utilizado um divisor de feixe, junto a um *Light Emitting Diode* (LED) e uma câmera, possibilitando observar a posição do laser e a amostra.

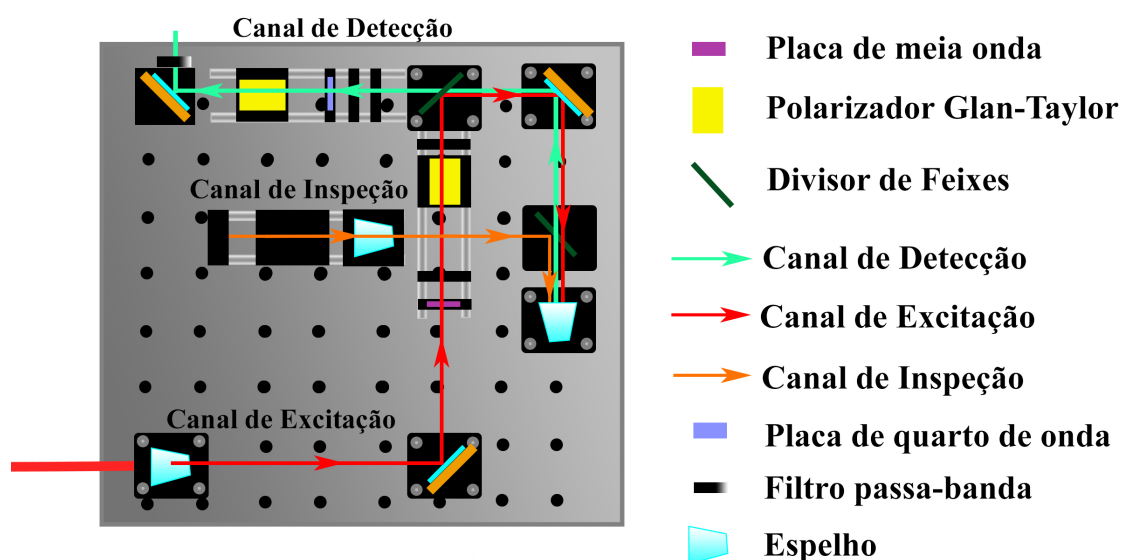


Figura 19 – Diagrama do esquema óptico utilizado para a técnica de fotoluminescência. Imagem do próprio autor.

Na sequência, um diagrama do sistema que é inserido dentro do criostato (*stick* do microscópio) está disposto na Figura 20. Nele, a amostra é colada em um chip e anexada a um módulo de titânio localizado na extremidade do *stick* o qual está sobre o conjunto de microdeslocadores. Para a utilização da bobina supercondutora em temperatura ambiente (300 K) acoplou-se uma bomba de vácuo na região da amostra, impedindo a troca de calor com o exterior e evitando que a bobina supercondutora aqueça, permitindo a aplicação de campos magnéticos até 9 Tesla em temperatura ambiente.

Para o alinhamento do canal de excitação, utiliza-se de alvos de alinhamentos óptico em conjunto com os espelhos, garantindo que o feixe não desvie do centro do canal até o criostato. Dentro do criostato, utiliza-se o canal de inspeção, visualizando o feixe luminoso

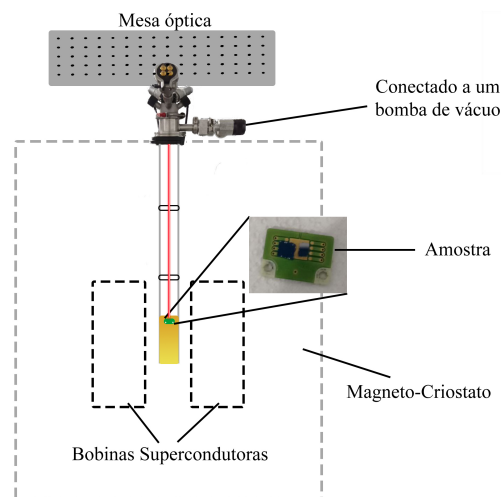


Figura 20 – Representação esquemática do criostato utilizado para a técnica de magnetofotoluminescência em temperatura ambiente.

Imagem do próprio autor.

na amostra (chamado de *spot*) com o auxílio dos microdeslocadores. Analisando o *spot* do laser verifica-se se está incidindo perpendicular a amostra, o que é feito observando o comportamento do *spot* aproximando e afastando o foco, em que o alinhamento é corrigido pelos dois últimos espelhos do esquema óptico.

Garantindo que o feixe esteja incidindo corretamente na amostra, inicia-se o alinhamento do canal de detecção, reduzindo a potência do laser e diminuindo a abertura da fenda do espectrômetro. Em seguida, remove-se o filtro passa-banda e realiza-se uma primeira medida de fotoluminescência, observando o espectro de emissão do laser. A partir da emissão do laser, alinha-se o canal de detecção, maximizando o sinal óptico proveniente do feixe. E então adiciona-se o filtro passa-banda para impedir a contribuição do laser, e a potência de excitação é aumentada, permitindo identificar o sinal da amostra e realizar novamente o procedimento de alinhamento com o sinal de fotoluminescência da amostra.

Neste trabalho, as amostras foram mantidas sempre em 300 K, com espectros de fotoluminescência tomados a cada 0,1 T no intervalo de 9 a -9T, em que cada região (positiva/negativa) corresponde a uma das componentes de polarização circular da luz emitida pela amostra.

5 Resultados e Discussão

Neste capítulo serão apresentados os resultados experimentais de magneto-fotoluminescência para os poços quânticos investigados junto à discussão teórica e modelagem das emissões observadas.

5.1 Espectros de Magneto-fotoluminescência

Todos os resultados que serão apresentados nesta dissertação foram medidos em 300 K, com a excitação do laser em polarização linear e a detecção da luminescência separada em suas componentes circulares $\sigma+$ e $\sigma-$, respectivamente. Estas amostras já foram extensamente investigadas à baixas temperaturas e em função de campo magnético, e os resultados podem ser encontrados nas referências [22, 32, 71, 72].

Para facilitar a leitura deste capítulo, as duas amostras de poços quânticos crescidos nas orientações [100] e [311]A do substrato de GaAs serão descritas apenas pelas respectivas direções de crescimento e divididos em seções separadas. Os resultados obtidos da amostra [100] estão dispostos na seção 5.1.1 e da amostra [311]A na seção 5.1.2. As demais seções descreverão as análises e modelagens realizadas a fim de entender a origem das emissões observadas da fotoluminescência em função do campo magnético aplicado.

5.1.1 Magneto-Fotoluminescência da amostra [100]

A Figura 21 apresenta os espectros de magneto-fotoluminescência da amostra [100] medidos entre 0 a 9 Tesla, em que as componentes circulares das emissões foram divididas entre os painéis (a) e (b).

Inicialmente, à 0 T, destacam-se duas emissões claramente observáveis, sendo um pico com energia centrada em 1,532 eV e um ombro com maior energia emitindo em 1,557 eV. Estas duas emissões já foram investigadas por (Teodoro et al., 2008) e (Cesar et al., 2010), sendo o pico de menor energia atribuído a transição elétron-buraco pesado ($e_1 - HH1$ - linha contínua em vermelho) e o ombro em maior energia associado a transição elétron-buraco leve ($e_1 - LH1$ - linha contínua em verde) [22, 32]. Tal separação é evidente para temperaturas acima de 100 K, cuja contribuição para a emissão do $e_1 - LH1$ também aumenta com o aumento da temperatura devido à separação dos níveis de energia induzido por este parâmetro externo. A partir destes resultados, nota-se também que com o aumento do campo magnético surge mais uma emissão em aproximadamente 5 Tesla, com energia por volta de 1.563 eV (e representada por uma linha contínua em azul) e que se desloca rapidamente para maiores valores de energia à medida que o campo magnético aumenta.

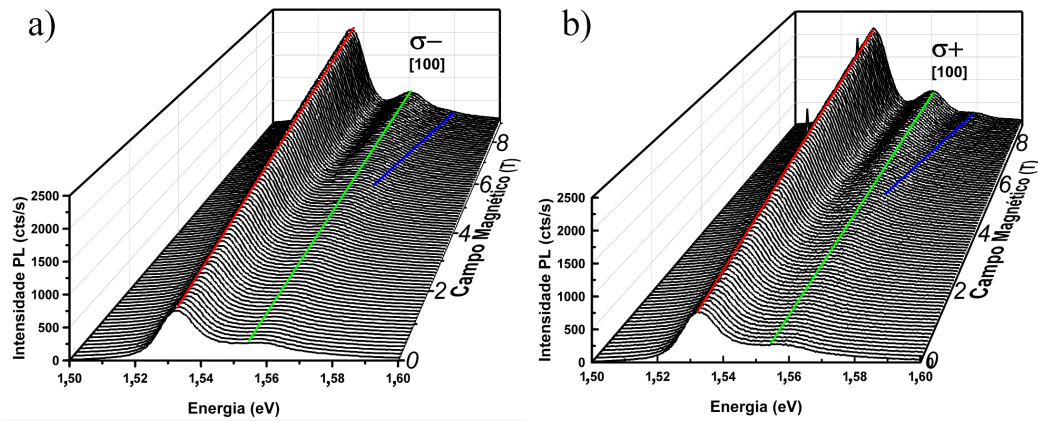


Figura 21 – Espectros de fotoluminescência obtidos para a amostra [100] à 300 K, junto a uma análise qualitativa das emissões observadas. Em a) está a amostra com a luz polarizada a direita e em b) a luz polarizada a esquerda.

Imagem do próprio autor.

Para uma melhor visualização dos resultados apresentados na Figura 21, a Figura 22 apresenta os gráficos organizados e sobrepondo ambas as polarizações da luz ($\sigma+$ e $\sigma-$) para diferentes valores de campos magnéticos. Inicialmente constata-se que o campo magnético provoca um aumento na intensidade de emissão, efeito este associado ao aumento no grau de confinamento magnético que, por sua vez, aumenta a força de oscilador. Comparando agora os picos de emissão relacionados à transição $e_1 - HH_1$ (pico de menor energia). Pela análise da polarização é possível constatar que tal emissão é invariante com a polarização e para qualquer valor de campo magnético, não havendo assim nenhum grau de polarização circular. As energias destes picos são deslocada lentamente com o aumento campo magnético, chegando ao máximo de 1,534 eV em 9 Tesla, portanto, com um desvio diamagnético de apenas 1 meV. Tal efeito é associado ao alto valor de temperatura que impede que qualquer coerência na população de spin seja atingida. Ainda, o alargamento do pico de emissão na região de menores energias pode estar relacionado com processos como *bandtail* e à alta energia térmica do sistema, permitindo que transições ocorram em energias menores do que a ressonância (máximo da emissão). A banda na região de maiores energias está relacionada com os portadores livres do sistema [73].

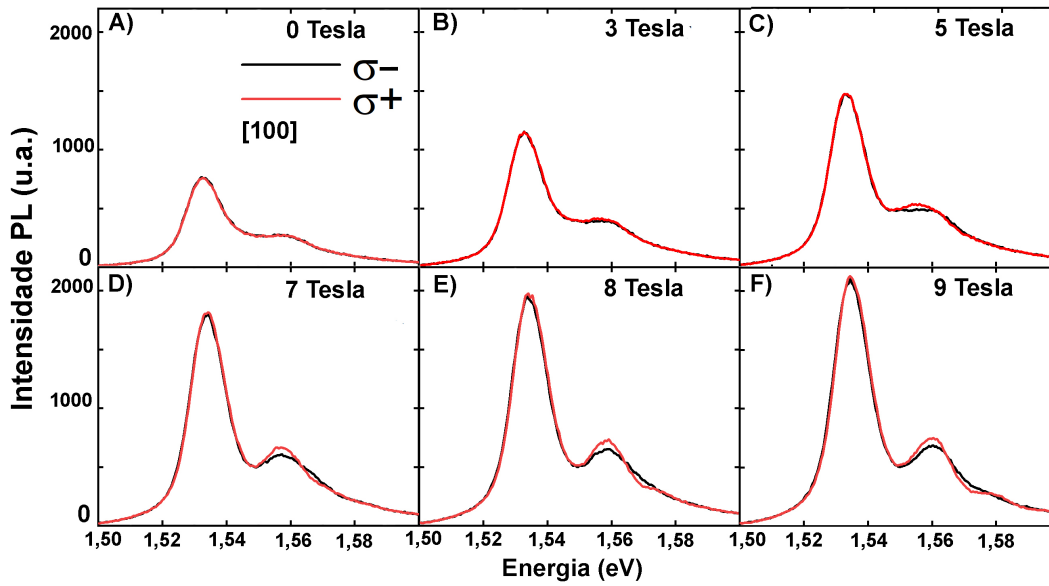


Figura 22 – Comparação do espectro de fotoluminescência da amostra [100] à 300 K com diferentes polarizações, com campo magnético aplicado de valores de 0, 3, 5, 7, 8 e 9 Tesla. O espectro em preto é a luz polarizada à direita e em vermelho a luz polarizada à esquerda.

Imagem do próprio autor.

Para a transição envolvendo elétrons e buracos leves (em aproximadamente 1,557 eV) notas-se que, de fato, a partir de 5 T existe uma diferença na área integrada de ambas as componentes circulares, com um aumento na intensidade e um estreitamento do pico com o campo magnético, mas a curva forma um platô plano em 5 Tesla. Esse platô desaparece em campos superiores, tornando a curva assimétrica e larga. Finalmente, em ambas as polarizações, a energia da emissão em 9 Tesla é aproximadamente 1,559 eV (novamente, apenas 2 meV de deslocamento diamagnético).

Especial destaque pode ser dado agora para a terceira emissão em alta energia à 9 T, que para a componente $\sigma+$ há um pico evidente, enquanto que para a componente oposta apenas um ombro é observado em tal valor de campo magnético. Este pico emite energia em valor de 1,579 eV para a polarização ($\sigma+$). Para a polarização ($\sigma-$), não há um pico bem definido, mas observa-se a presença um ombro de emissão.

Após a descrição dos dados obtidos, iniciamos os processos de deconvolução dos espectros obtidos. Como descrito no capítulo 3, as curvas que apresentaram os melhores ajustes foram as do tipo gaussiano. Devido ao número e forma dos picos de emissão, a escolha para o número e forma de ajustes foram um processo longo e trabalhoso, e, aqui, será demonstrado de forma simplificada os principais resultados encontrados.

Na Figura 23 está disposto o ajuste das curvas experimentais considerando apenas as duas emissões conhecidas a 0 Tesla. Para ambas as polarizações foi necessário variar parâmetros da emissão (posição do pico e FWHM) $e_1 - HH_1$ para melhor ajustar a região

entre as emissões, aumentando significativamente a largura de linha da emissão $e - LH_1$. Para campos magnéticos maiores do que 5 T, o patamar observado impossibilitou um ajuste satisfatório, pois a curva gaussiana se sobrepõem as informações da assimetria do $e - LH_1$ devido ao aumento da largura de linha. Além disso, a região entre LH_1 e a terceira emissão em mais alta energia não é tão bem ajustada para a polarização $\sigma+$ devido, novamente, ao aumento na largura de linha do $e_1 - LH_1$.

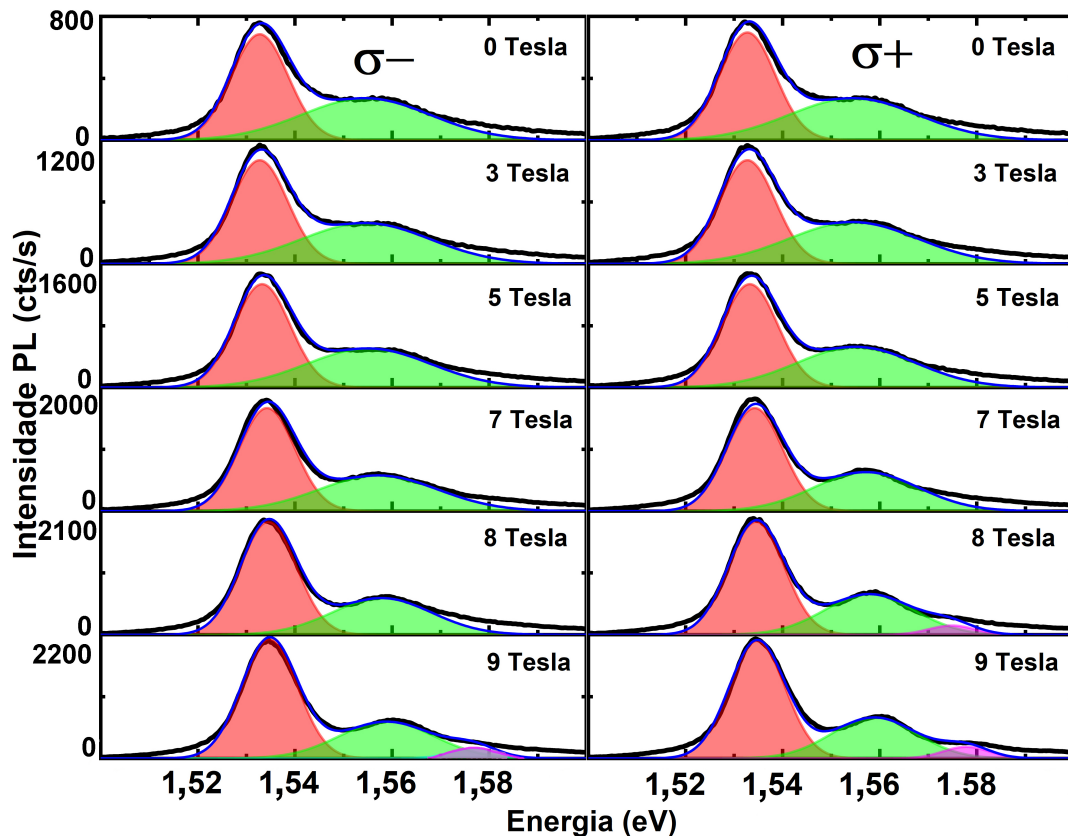


Figura 23 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [100] tomando como base as emissões conhecidas em 0 Tesla em ambas as polarizações. A esquerda o ajuste para a polarização $\sigma-$ e a direita o ajuste para $\sigma+$.

Imagem do próprio autor.

Motivado pela dificuldade de ajustar a região entre as duas emissões localizadas no lado de maior energia dos espectros de PL, foi efetuado uma nova tentativa de ajuste disposta na Figura 24. Como o pico de alta energia (representado pela cor roxa) é claramente observado em 9 T, a partir dele, foi observado como ocorre sua evolução para menores valores de campos. Desta maneira, foi possível distingui-lo a partir de campos magnéticos de 5 T. Assim, utilizando uma curva adicional neste intervalo de campo, que se desloca lentamente até a região de 7 Tesla e, a partir desse ponto, passa a deslocar rapidamente em energia até 9 Tesla, foi possível identificar e mapear o comportamento desta emissão presente em mais alta energia.

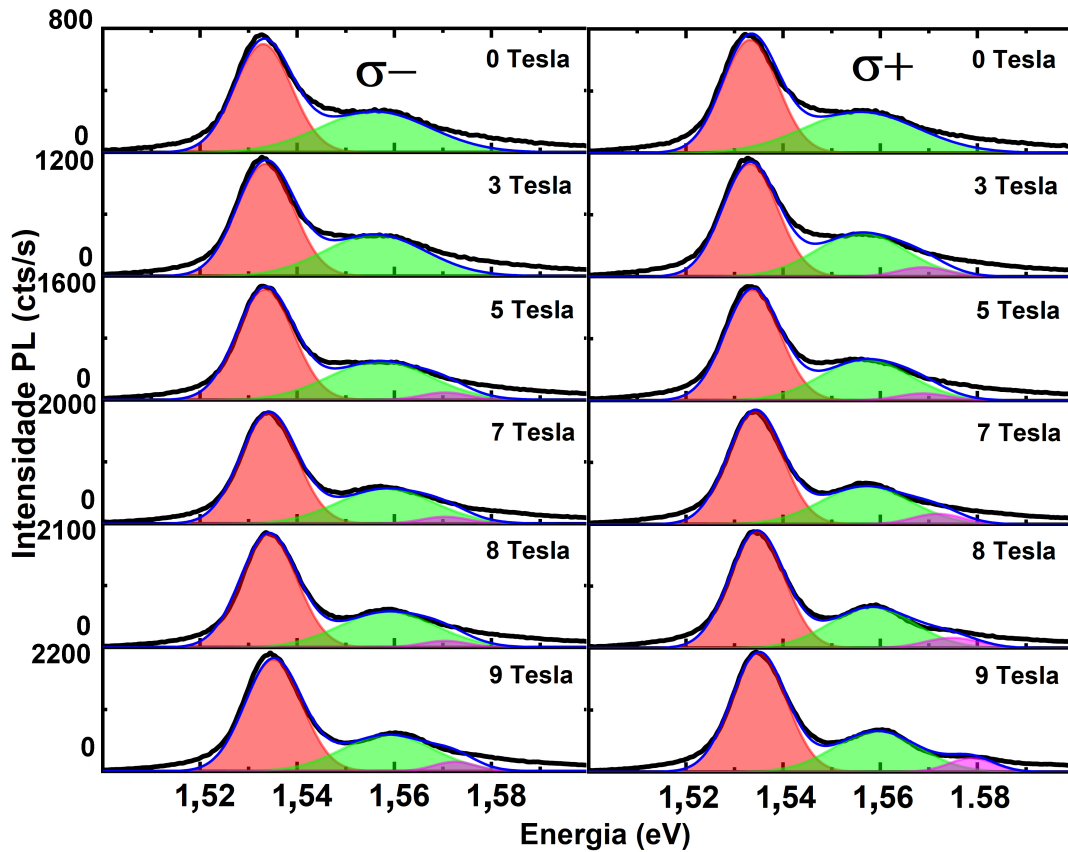


Figura 24 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [100] levando como base o surgimento de mais uma emissão no lado de alta energia que desloca-se rapidamente com o campo magnético. A esquerda o ajuste para a polarização σ^- e a direita o ajuste para σ^+ .

Imagem do próprio autor.

Essa abordagem melhorou o ajuste da região entre a transição $e - LH_1$ e a terceira emissão para a polarização σ^+ , mas não teve influência na dificuldade de ajustar a região entre a primeira e segunda emissão. Além disso, o comportamento da terceira emissão, que inicialmente se desloca lentamente com o campo magnético antes de acelerar, é semelhante ao processo de magneto-polaron como o resultado apresentado na Figura 9, com a separação dos modos do fônon e elétron.

Assim, levamos em consideração uma terceira abordagem de ajuste e que está disposta na Figura 25, na qual utilizamos uma emissão auxiliar para ajustar a região entre $e_1 - HH_1$ e $e_1 - LH_1$, região onde o platô em 5 T foi observado.

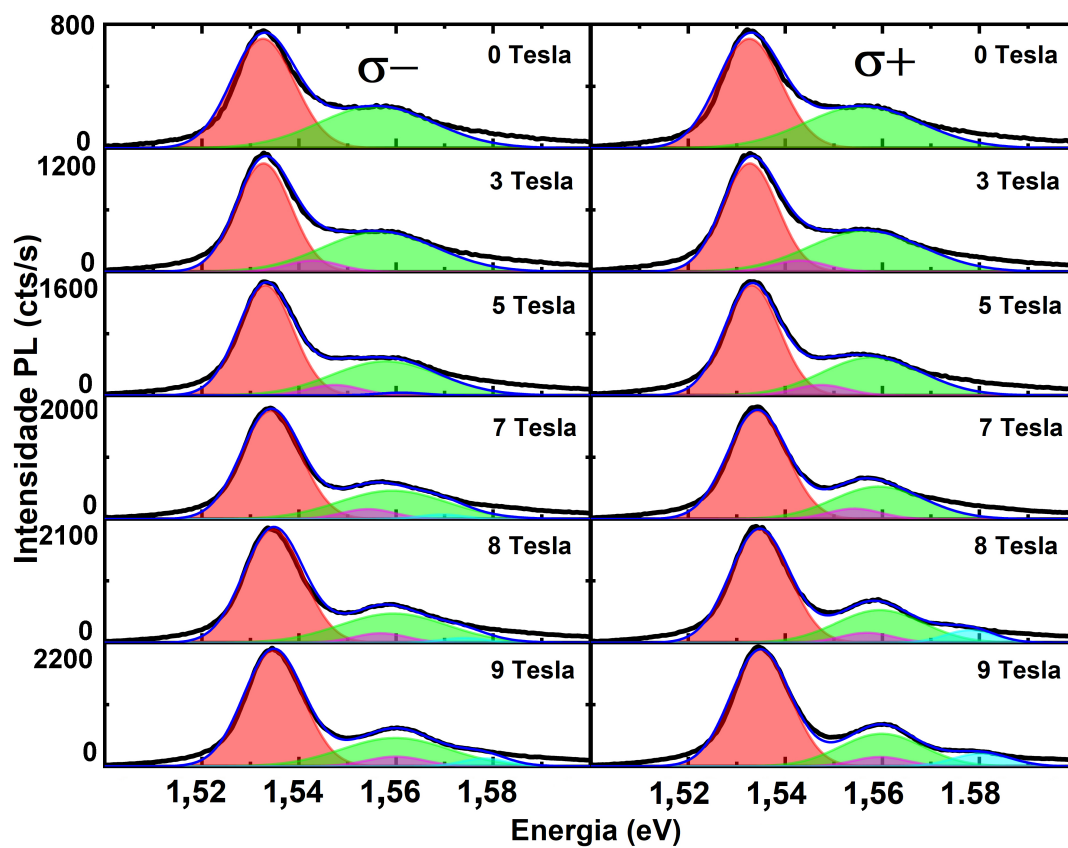


Figura 25 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [100] levando como base o surgimento de mais duas emissões com o campo magnético. À esquerda o ajuste para a polarização σ^- e à direita o ajuste para σ^+ .

Imagem do próprio autor.

A abordagem utilizando uma gaussiana auxiliar entre HH_1 e LH_1 , juntamente com uma curva adicional à direita do nível de LH_1 , possibilitou um ajuste que condiz com a curva experimental para toda a região do espectro. O ajuste foi semelhante para ambas as polarizações, seguindo um maior deslocamento em energia para a quarta emissão na polarização σ^- . Na sequência serão apresentados as mesmas análises para a amostra [311]A, para depois então, discutirmos os resultados obtidos a partir destes ajustes.

5.1.2 Magneto-Fotoluminescência da amostra [311]A

Na Figura 26 são apresentados agora os espectros de magneto-fotoluminescência da amostra [311]A medidos de 0 á 9 Tesla, com as componentes circulares das emissões divididas entre os painéis (a) σ^- e (b) σ^+ .

A princípio, observa-se a contribuição de duas emissões bem definidas à 0 T, o primeiro pico com energia centrada em 1,535 eV e um ombro de maior energia em 1,56 eV. As origens destes picos são as mesmas atribuídas a amostra [100] [22, 32], em que a primeira emissão está relacionada com a transição elétron-buraco pesado ($e_1 - HH_1 -$

linha contínua em vermelho) e a segunda está associada a transição elétron-buraco leve ($e_1 - LH_1$ - linha contínua em verde) [22, 32]. A separação entre esses níveis também torna-se evidente com a temperatura, aumentando a contribuição do nível associada ao ombro $e_1 - LH_1$ [22]. Aumentando o campo magnético, observa-se o surgimento da mesma emissão desconhecida na amostra [100] em aproximadamente 5 Tesla, com energia de 1.565 eV (representada pela linha contínua em azul) e que se desloca rapidamente para maiores valores de energia com o aumento do campo magnético.

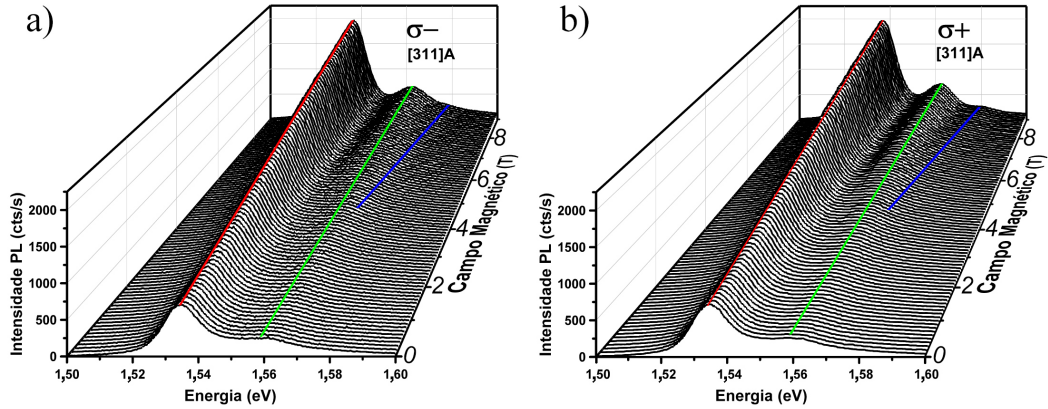


Figura 26 – Espectros de fotoluminescência obtido para a amostra [311]A à 300 K. Em a) são apresentados os espectros de PL em função do campo magnético com a luminescência polarizada a direita e em b) com luz polarizada a esquerda. Imagem do próprio autor.

Para uma melhor visualização dos resultados obtidos na Figura 26, a Figura 27 apresenta os gráficos organizados, sobrepondo ambas as polarizações ($\sigma+$ e $\sigma-$) para diferentes valores de campo magnético. Observa-se, primeiramente, um aumento da intensidade de todas as emissões com o campo magnético pela mesma razão do comportamento apresentado pela amostra [100]. Analisando o tendência da transição $e_1 - HH_1$ (pico de menor energia), verifica-se que a emissão permanece invariável com a polarização para qualquer campo magnético, não havendo grau de polarização circular, assim como ocorreu também para a amostra [100]. Além disso, os picos deslocam-se lentamente em energia.

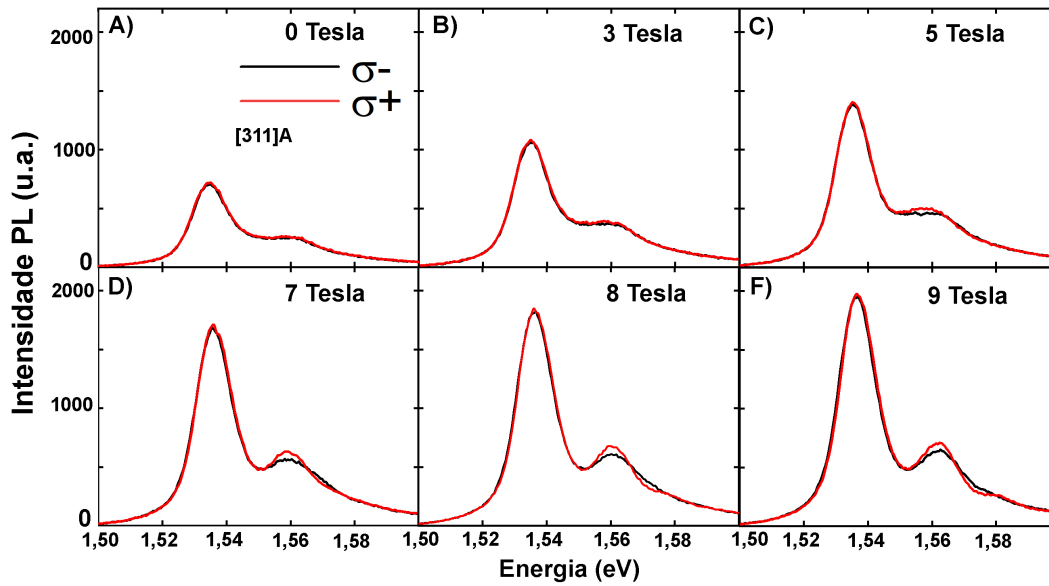


Figura 27 – Comparação do espectro de fotoluminescência da amostra [311]A à 300 K com diferentes polarizações, com campo magnético de 0, 3, 5, 7 e 9 Tesla. O espectro em preto é a luz polarizada a direita e em vermelho a luz polarizada a esquerda.

Imagem do próprio autor.

A partir de uma primeira análise, observa-se o mesmo padrão das emissões da amostra crescida na orientação [100], com as amostras levemente deslocadas para maiores energias, o que também foi verificado pela análise das Figuras 26 e 27. Motivado pelas abordagens utilizadas para ajustar a amostra [100], o mesmo procedimento foi efetuado à amostra [311], com os ajustes obtidos dispostos em anexo.

5.1.3 Discussão dos modelos de ajuste

O melhor ajuste dos espectros de magneto-fotoluminescência das amostras [100] e [311]A, foram obtidos a partir da abordagem das quatro emissões, apresentado na Figura 25 para a amostra [100]. Na Figura 28, é mostrado o comportamento das energias dos quatro picos obtidas a partir dos ajustes dos espectros de PL em função do campo magnético para a polarização circular $\sigma+$ (indicada pelos círculos fechados) e a polarização $\sigma-$ (círculos abertos) de ambas as amostras. Os ajustes foram realizados em todo o intervalo de 0 à 9 Tesla, com passos de 0,1 Tesla. As curvas em verde e vermelho correspondem às emissões $e_1 - HH_1$ e $e_1 - LH_1$, respectivamente, enquanto as curvas em magenta e ciano representam as emissões não identificadas que surgem com o aumento do campo magnético.

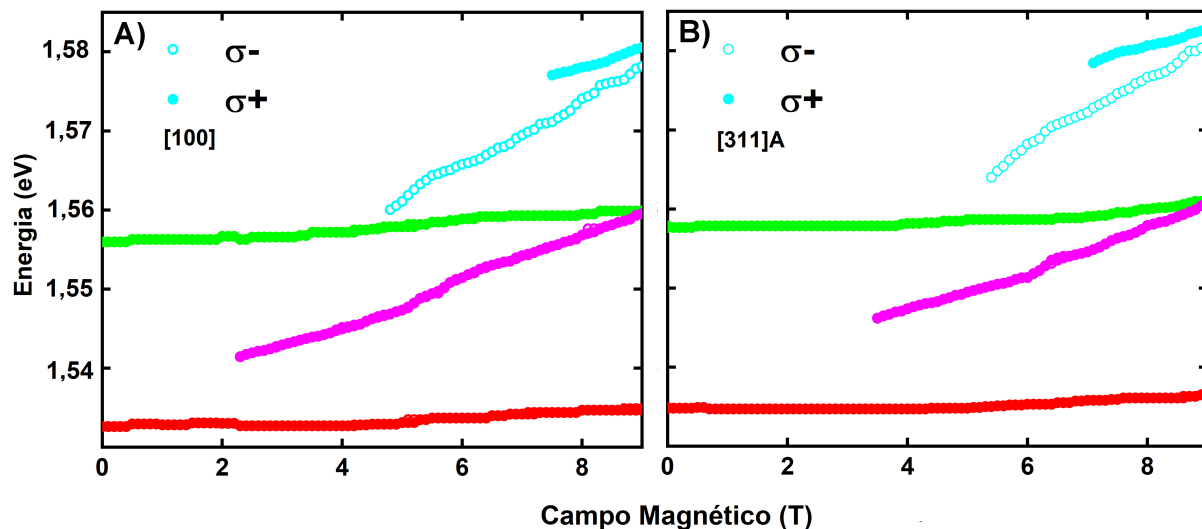


Figura 28 – Energia das curvas obtidas dos ajustes com quatro curvas gaussianas em função do campo magnético para a amostra A) [100] e B) [311]A. Os círculos fechados indicam dados da polarização circular $\sigma+$ e os círculos abertos a polarização $\sigma-$.

Imagem do próprio autor.

A análise do comportamento das fotoluminescências em função do campo magnético aplicado destacam a semelhança entre os ajustes das amostras [100] e [311]A, em termos da forma de linha e do número de transições ópticas observadas. A partir dos ajustes, observa-se a invariância na energia dos níveis de energia das emissões $e_1 - HH_1$, $e_1 - LH_1$ e a curva em magenta. A única emissão que apresentou um aparente desdobramento Zeeman foi a curva de mais alta energia representada em ciano. Para a polarização $\sigma+$, o pico desaparece abaixo de 7 T, enquanto que para a polarização $\sigma-$, este pico de maior energia existe até campos de 5 T, com uma maior inclinação da curva E vs B em relação a polarização contrária, demonstrando uma forte assimetria entre ambas as polarizações.

5.2 Modelagem teórica para os resultados obtidos

Com o objetivo de compreender as emissões obtidas pelos ajustes dos espectros de fotoluminescência em função do campo magnético, apresentadas na Figura 28, foi realizada uma abordagem teórica utilizando parâmetros da literatura para calcular as emissões dos poços quânticos. Os cálculos foram implementado em Python no *Visual Studio Code*, com o auxílio das bibliotecas *numpy* e *matplotlib*.

Os dados apresentados na tabela 1 correspondem aos parâmetros utilizados e extraídos de amostras *bulk* para a abordagem teórica e foram retirados da literatura [30, 74]. De acordo com os dados apresentados, observa-se que a pequena diferença de concentração de alumínio das amostras estudadas aqui é irrelevante nos parâmetros do

$Al_{0.36}Ga_{0.64}As$. Vale ressaltar que a literatura apresenta uma ampla variedade de valores para a massa efetiva do mesmo material, como demonstrado por (Nakwaski, 1995) [75].

Parâmetro	GaAs[100]	GaAs [311]A	$Al_{0.36}Ga_{0.64}As$
m_e	0.063mo	0.063mo	0.096mo
m_{LH}	0.087mo	0.085mo	0.1031mo
m_{HH}	0.5mo	0.54mo	0.572mo
m_{LHxy}	0.20mo	0.254mo	–
m_{HHxy}	0.11mo	0.146mo	–
E_g	1,422 eV	1,422 eV	1,82 eV

Tabela 1 – Tabela das massas efetivas e energias de gap utilizadas para o cálculo dos níveis de energia dos poços de GaAs [100] e GaAs [311]A.

Dados retirados de [30, 74, 75]

A partir do resultado obtido no cálculo das energias das transições ópticas, aplicou-se a teoria dos níveis de Landau para investigar o comportamento de tais energias em função do campo magnético. Com a aproximação da dependência de N^{-2} e com base na relação de proporcionalidade entre a intensidade e a matriz de *overlap*, modelou-se a intensidade relativa dos níveis de Landau [41]. Para a simplificar o modelo, considerou-se a largura de linha das transições $e_1 - HH_1$ e $e_1 - LH_1$ como constantes, com valor de 7 meV.

5.2.1 Aplicação do modelo teórico

Para o cálculo dos níveis de energias no poço infinito supõe-se que os elétrons e buracos do GaAs estão altamente confinados, sem interação com a barreira. Dessa forma, a energia independe dos parâmetros da barreira de $Al_{0.36}Ga_{0.64}As$. Os cálculos foram efetuados utilizando a equação (2.14), com a energia de transição descrita pela equação (2.22). Na tabela 2 estão dispostas as energias calculadas dos dois primeiros níveis do elétron, do buraco leve e buraco pesado, respectivamente.

Nível de Energia	n=1	n=2
E_e	0,1973	0,7834
E_{LH}	0,1504	0,6019
E_{HH}	0,0241	0,0967

Tabela 2 – Os dois primeiros níveis de energia para o elétron (E_e), buraco leve (E_{LH}) e buraco pesado (E_{HH}) calculados para um poço infinito de GaAs [100].

A Figura 29 apresenta os níveis de energia obtidos do cálculo para o poço infinito. A energia esperada para a transição do buraco ($e_1 - HH_1$) é de 1,6454 eV, enquanto para o buraco leve ($e_1 - LH_1$), espera-se uma emissão em 1,7717 eV, com esses estados separados por 0,1263 eV ($E_{LH_1} - E_{HH_1}$). Comparando com os dados experimentais, em que

$(e_1 - HH_1) = 1,532$ eV e $(e_1 \rightarrow LH_1) = 1,557$ eV, observa-se que os cálculos superestimaram as energias, o que pode estar relacionado à energia térmica do sistema, fazendo com que o modelo do poço infinito não corresponda exatamente ao sistema real.

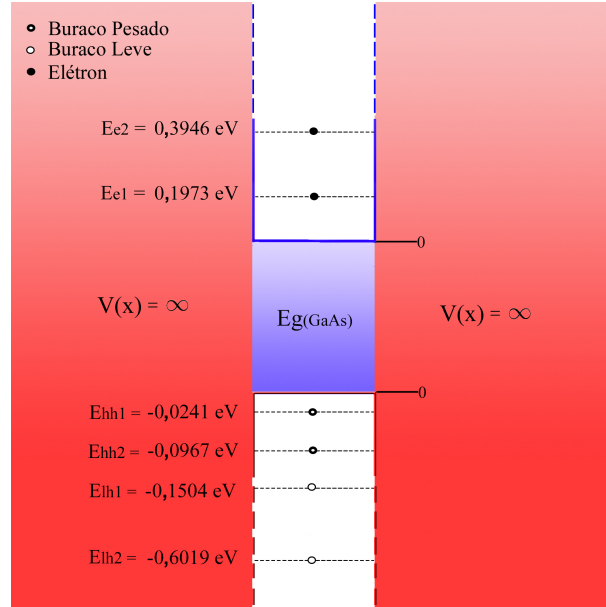


Figura 29 – Diagrama do poço infinito utilizado para calcular os níveis de energia da amostra [100].

Imagem do próprio autor.

Tendo em vista que a abordagem para o poço infinito não foi eficaz, e supondo que as barreiras não confinam o sistema de forma ideal, adotou-se o modelo do poço finito. Para nortear os cálculos que serão demonstrados na sequência, a expressão (2.18) foi empregada com o objetivo de verificar os estados ligados no sistema. Estimando os valores para o elétron, buraco pesado e buraco leve, a contribuição da parte inteira da expressão foi de aproximadamente zero. Sendo assim, o número de estados ligados, correspondem apenas aos estados fundamentais do elétron e dos buracos. Para os cálculos, foi selecionado o *offset* da banda de condução de $0,75E_g$ e o da banda de valência de $0,25E_v$, resultando em uma barreira de 0,31 eV para o elétron e de 0,13 eV para os buracos. Para diferentes valores de *offset* os níveis de energia deslocavam apenas alguns meV, não afetando de forma significativa o resultado final.

O cálculo da energia dos elétrons e dos buracos foi realizado conforme o processo descrito na seção do poço finito, com a energia de transição dada pela equação (2.22), desconsiderando a contribuição do éxciton. Na tabela 3 estão mostradas as energias do elétron (E_e), buraco leve (E_{LH}) e buraco pesado (E_{HH}), juntamente com os pontos de intersecção da equação transcendental (2.16). Os gráficos da equação transcendental estão dispostos nas figuras em anexo, e na Figura 30 está uma representação dos níveis de energia calculados. Para a transição do estado fundamental elétron-buraco pesado ($e_1 - HH_1$), a energia esperada é de 1,5104 eV. Para a transição elétron-buraco leve ($e_1 - LH_1$) é de

1,5389 eV, com uma diferença de energia entre os dois níveis de 0,0285 eV. Comparando com os dados experimentais, o máximo das transições ($e_1 - HH_1$) está em $\approx 1,5331$ eV e ($e_1 - LH_1$) $\approx 1,5573$ eV, com a diferença entre os níveis de 0,0256 eV. Pode-se observar que as energias estão deslocadas para valores menores do que as experimentais, o que pode ser atribuído à utilização de um modelo simplificado para o cálculo dos níveis de energia, podendo haver erros relacionado às contribuições de diferentes naturezas, como a energia térmica do sistema.

Nível de Energia	n=1 (eV)	ponto de intersecção (x)
E_e	0,0744	0,968
E_{LH}	0,0425	0,860
E_{HH}	0,0140	1,186

Tabela 3 – Primeiro nível (n=1) de energia do elétron, buraco pesado e buraco leve calculado para o poço finito de GaAs [100], junto ao ponto de intersecção (x) da equação transcendental (Eq. 2.16)

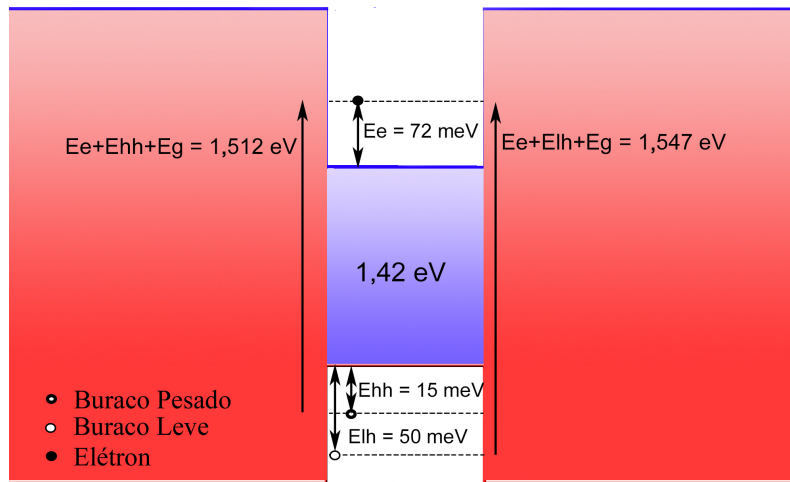


Figura 30 – Diagrama do poço finito utilizado para o cálculo dos níveis de energia da amostra [100].

Imagem do próprio autor

Com o aumento do campo magnético, ocorre a emissão de outras transições, o que foi observado nos ajustes dos dados experimentais descritos anteriormente. Os cálculos do poço finito já demonstraram que não há possibilidade de tais emissões observadas estarem relacionadas com as transições dos níveis de energia para $n > 1$. Assim, outras hipóteses precisam ser consideradas para descrever os fenômenos observados.

Para o ajuste mostrado na Figura 24, observou-se um comportamento semelhante ao do magneto-polaron, destacado na Figura 9. Para comprovar o acoplamento elétron-fônon

(polaron), calculou-se a condição em que a energia ciclotrônica é igual à energia do fônon longitudinal óptico, ou seja, $\hbar\omega_c \approx \hbar\omega_{LO}$. Utilizando como base a energia do fônon LO do GaAs, foi calculado o campo magnético em que ocorre a ressonância ciclotrônica do poço quântico de GaAs. A partir dos cálculos realizados, concluiu-se que a ressonância ciclotrônica para estados vizinhos ($i-j=1$) ocorre com um campo magnético de 17,26T, o que não é consistente com o que é observado nos espectros, descartando a hipótese de que uma das emissões auxiliares esteja relacionada com os modos referente à quasipartícula polaron.

Descartando a possibilidade da curva gaussiana deslocar-se rapidamente com o campo magnético devido o acoplamento elétron-fônon e considerando que as curvas surgem com o aumento do campo magnético, na Figura 31 estão dispostos os resultados para o cálculo dos três primeiros níveis Landau ($N= 1, 2$ e 3) do buraco pesado ($HH_{1,N}$) e buraco leve ($LH_{1,N}$), respectivamente. Para os cálculos, foram utilizados os parâmetros dispostos na Tabela 1, aplicando a mesma massa efetiva para elétron na direção de confinamento (m_z^e) e na direção do plano (m_{xy}^e), o que pode ser feito devido à isotropia da massa do elétron. Para os buracos, a influência da direção cristalina sobre o valor da massa efetiva é relevante. Em geral, no plano x-y, a massa do buraco pesado diminui e a massa do buraco leve aumenta. A energia de ligação do éxciton foi tratada como uma perturbação, descrita na seção 2.2.3.

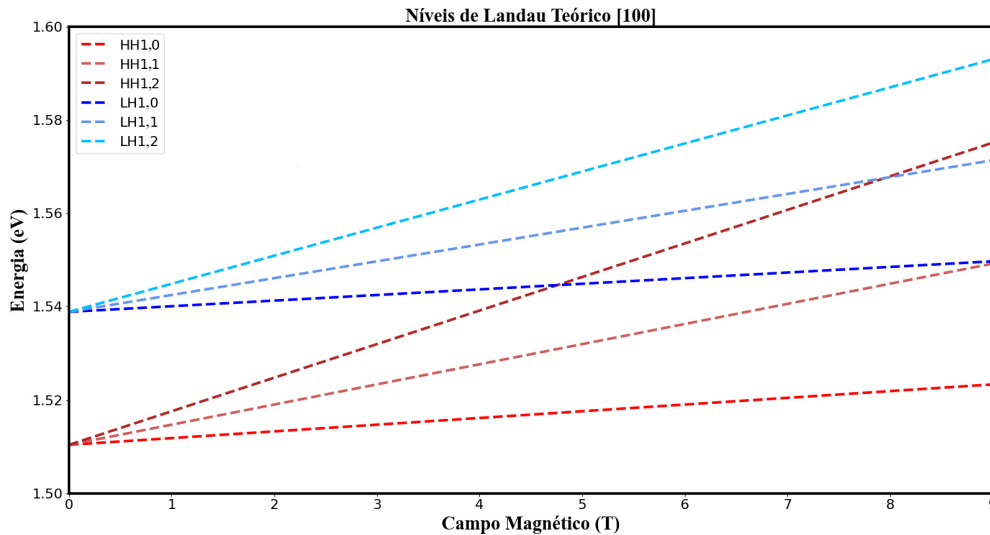


Figura 31 – Energias dos três primeiros níveis de Landau ($N=1, 2$ e 3) em função do campo magnético calculadas para o primeiro nível de buraco pesado ($HH_{1,N}$) e de buraco leve ($LH_{1,N}$) para a amostra crescida em [100].

Imagem do próprio autor.

Uma análise do comportamento dos primeiros níveis de Landau demonstrou semelhança entre os níveis e o comportamento dos ajustes, com exceção dos estados fundamentais.

Os níveis de Landau atestam a existência de um nível intermediário, $HH_{1,1}$, entre os níveis fundamentais $HH_{1,0}$ e $LH_{1,0}$ e de níveis que deslocam rapidamente em campo magnético próximos à emissão de $LH_{1,0}$, comportamento observado nos ajustes anteriores. Algumas diferenças foram observadas nos dados experimentais, como o comportamento para a curva que surge a altos campos, na polarização $\sigma+$, em que um comportamento compatível com o nível de $LH_{1,1}$ é observado, enquanto, para a polarização $\sigma-$, a emissão desloca-se mais rapidamente em campo magnético, levando a um comportamento esperado para a curva $HH_{1,3}$.

Na Figura 32(a) está apresentado o espectro de fotoluminescência da amostra [100] à 9 Tesla. Em 32(b) está a mesma curva simulada teoricamente. Para a confecção do modelo, as curvas gaussianas foram centradas nas energias calculadas e dispostas na Figura 31. As intensidades das curvas foram obtidas normalizando o espectro de 0 a 1, adotando as intensidades totais pelos níveis de $HH_{1,0}$ e $LH_{1,0}$, com as demais intensidades determinadas pela proporção de $(N)^{-2}$.

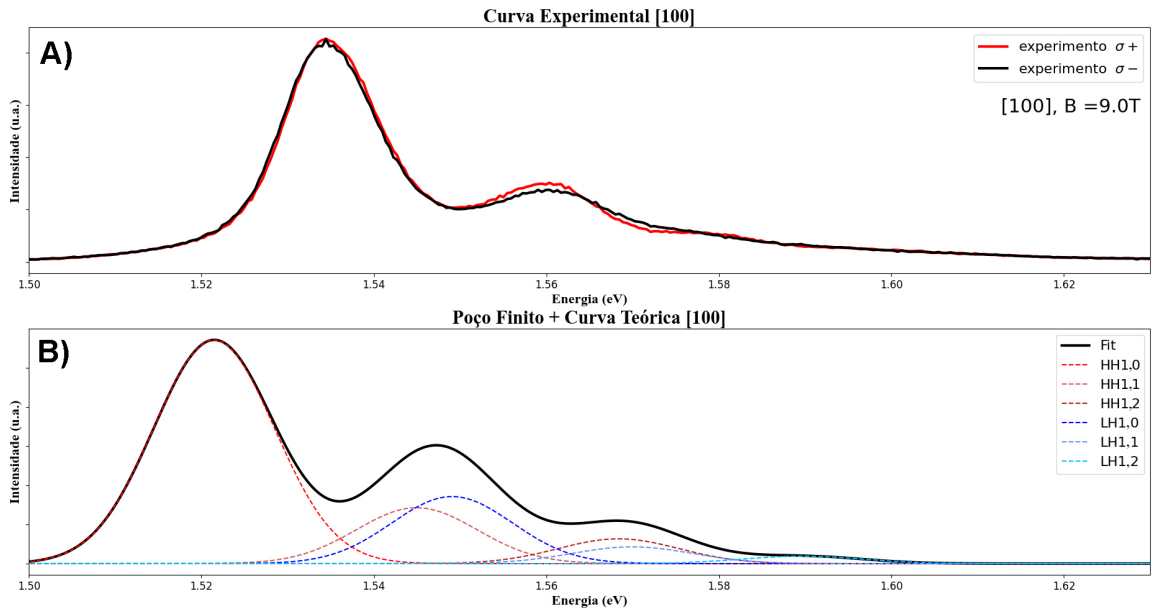


Figura 32 – (a) Espectro de fotoluminescência obtido experimentalmente para o poço de GaAs [100]. (b) Espectro teórico obtido utilizando a energia calculada para um poço finito somado a os níveis de Landau calculados.

Imagem do próprio autor.

Na Figura 33 é apresentado uma comparação da diferença entre os níveis de energias obtidos experimental e teoricamente, com a emissão $e_1 - HH_1$ em 0 eV. Nota-se que a contribuição dos níveis de energia $HH_{1,0}$, $HH_{1,1}$ e $LH_{1,0}$ existem para as duas polarizações. Na região de altos campos observa-se uma contribuição semelhante ao nível de $HH_{1,2}$ na polarização $\sigma-$, enquanto para a polarização $\sigma+$ observa-se uma contribuição semelhante ao nível de $LH_{1,1}$, demonstrando a assimetria existente para este nível de energia em função da população de spin investigada.

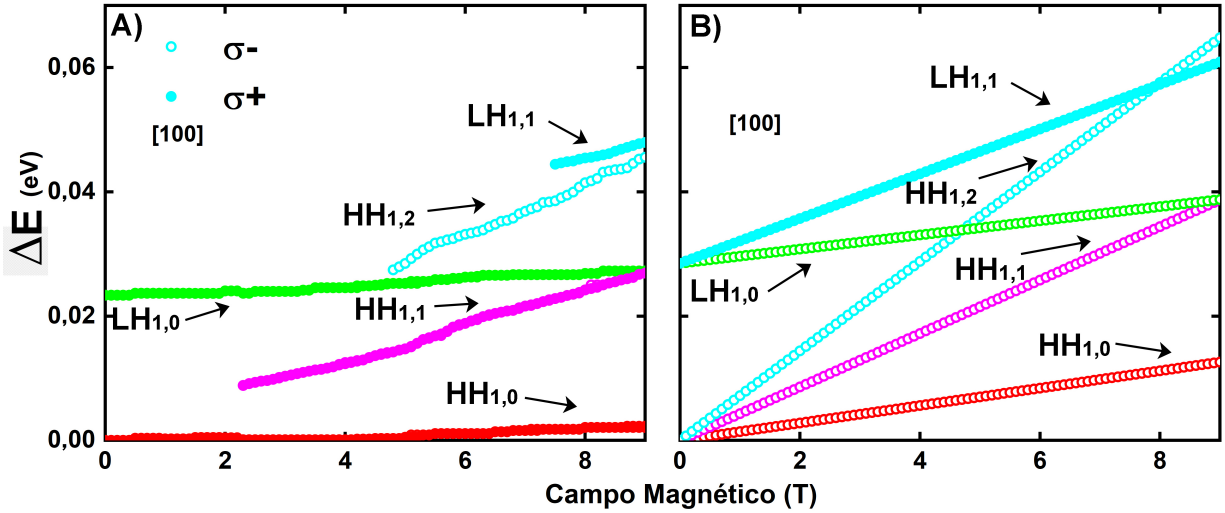


Figura 33 – Níveis de energia obtidos pelos ajustes da amostra [100] utilizando 4 gaussianas. Resultados experimentais para os níveis de energia em função da polarização são mostrados em (a), enquanto que os resultados teóricos são apresentados em (b).

Imagem do próprio autor.

Claramente, existe uma boa concordância entre os ajustes experimentais e os níveis de Landau calculados, o que permite modelar o comportamento do poço finito em temperatura ambiente. Devido às limitações do modelo, não foi possível explicar a diferença nos espectros com a polarização, o que será ainda implementado.

Devido à semelhança dos espectros e os ajustes das amostras [100] e [311]A, utilizou-se a mesma abordagem para a amostra [311]A. Todas as Figuras e Tabelas estão dispostas na seção Anexo. Inicialmente foram calculados os níveis de energia para um poço infinito, o que superestimou as energias dos níveis de $e_1 - HH_1$ e $e_1 - LH_1$. A utilização do modelo do poço finito permitiu estimar as energias dos níveis em aproximadamente $e_1 - HH_1 \approx 1,518$ eV e $e_1 - LH_1 \approx 1,549$. Com a energia obtida pelo cálculo do poço finito, foram determinados os níveis de Landau.

A Figura 34 apresenta uma comparação entre a diferença de energia dos dados obtidos experimentalmente (Fig. 34(a)), e os teóricos (Fig. 34(b)). Novamente, observa-se a contribuição dos estados $HH_{1,0}$, $HH_{1,1}$ e $LH_{1,0}$ para ambas as polarizações. Em região de altos campos, nota-se a contribuição do nível de $HH_{1,2}$ na polarização σ^- , e do nível de $LH_{1,1}$ para a polarização σ^- .

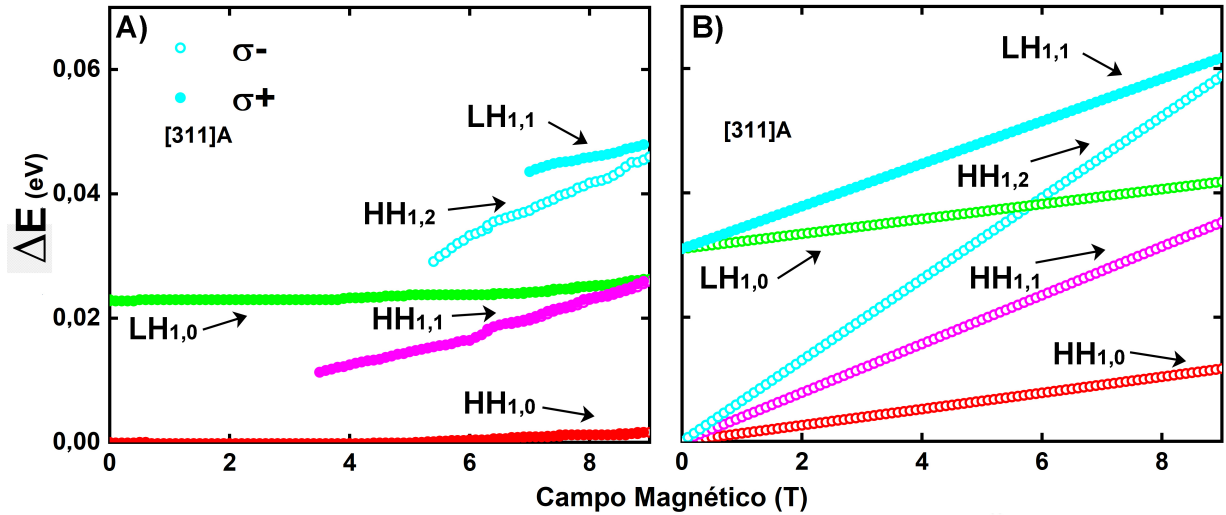


Figura 34 – Níveis de energia obtidos pelos ajustes da amostra [311]A utilizando 4 gaussianas. Resultados experimentais para os níveis de energia em função da polarização são mostrados em (a), enquanto que os resultados teóricos são apresentados em (b).

Imagem do próprio autor.

O ajuste observado foi bastante semelhante ao da amostra [100], o que pode estar relacionado à influência das ligações duplas da orientação [100], que dominam as propriedades ópticas da amostra orientada na direção [311]A, além da energia térmica ser suficientemente para aproximar os parâmetros físicos dos poços quânticos aos do bulk, suprimindo as diferenças de fenômenos físicos que já foram reportados à baixas temperaturas. A posição da energia das emissões mostrou-se invariável na região de campos magnéticos inferiores a 5 Tesla. Já na região de altos campos (acima de 5 Tesla), observou-se uma contribuição do segundo nível de Landau do buraco pesado ($HH_{1,2}$) na polarização σ^- e a influência do primeiro nível de Landau do buraco leve ($LH_{1,1}$) na polarização σ^+ .

6 Conclusões

Este trabalho teve como objetivo investigar e modelar as transições ópticas de poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidos nas direções [100] e [311]A do substrato de GaAs, utilizando a técnica de magneto-fotoluminescência em temperatura ambiente (300 K). A partir dos resultados experimentais de fotoluminescência, foram observadas duas transições em temperatura ambiente: a de menor energia associada à transição elétron-buraco pesado ($e_1 - HH_1$), e a segunda, correspondente à transição elétron-buraco leve ($e_1 - LH_1$). Com o aumento de campo magnético, surgiram outros dois níveis de energia. Devido à alta temperatura do sistema, que aumenta significativamente a largura de linha das emissões, a análise desses níveis de energia mostrou-se complexa, sendo necessária a utilização de diferentes abordagens.

Na primeira abordagem, tentou-se prever o comportamento dos níveis de energia com o aumento do campo magnético, utilizando as emissões conhecidas na literatura. Isso resultou em um ajuste grosseiro que desconsiderava muitas informações obtidas experimentalmente. Na segunda abordagem, focou-se na invariância do nível de energia dos estados fundamentais de buraco pesado, realizando um ajuste com uma emissão em maior energia, proporcionando um ajuste semelhante ao magneto polaron, com uma dificuldade em ajustar a região entre as duas emissões conhecidas, o que demonstrou uma influência de outra natureza.

Uma terceira abordagem foi realizada, levando-se em consideração as limitações das duas anteriores, que falharam em ajustar a região entre as duas emissões conhecidas e no comportamento da segunda emissão com o aumento do campo magnético. Para a região entre as duas emissões, foi adicionada uma curva de ajuste que se desloca fracamente com o campo magnético. Já para a segunda emissão, considerou-se a assimetria da curva como a contribuição de outra emissão, o que resultou em um ajuste mais completo.

Para investigar os modelos propostos para os níveis de energia dos poços quânticos, utilizaram-se dois modelos: o primeiro tratou o sistema como um poço infinito, e o segunda utilizou o modelo de poço finito com a abordagem da incompatibilidade das massas efetivas nas bordas.

Os cálculos do poço infinito resultaram em uma extrapolação dos níveis de energia observados experimentalmente, sugerindo que, devido à alta energia térmica do sistema, a suposição de um alto confinamento não é válida, tornando o modelo do poço infinito ineficaz para modelar as transições. Por outro lado, a abordagem do poço finito confirmou a contribuição das transições elétron-buraco pesado ($HH_{1,0}$) e elétron-buraco leve ($LH_{1,0}$). Os cálculos obtidos dos níveis de energia estavam levemente deslocado para menores energias,

mas o modelo se mostrou viável para a investigação de estruturas de confinamento em temperatura ambiente.

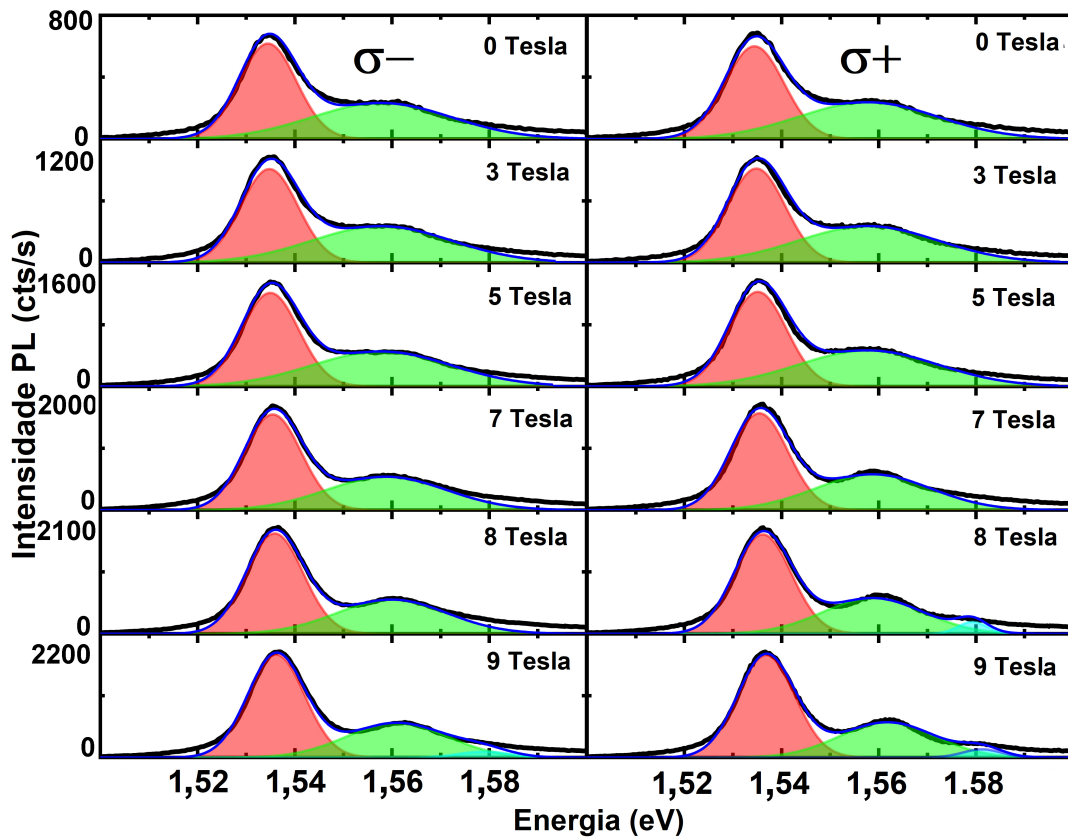
Utilizando a teoria de níveis de Landau para estruturas de confinamento, calculou-se a contribuição dos três primeiros níveis ($N= 1, 2$ e 3) do buraco pesado e do buraco leve. O cálculo dos níveis de Landau levou à conclusão de que, entre as emissões conhecidas ($HH_{1,0}$ e $LH_{1,0}$), está a contribuição de $HH_{1,1}$, e que os outros níveis são responsáveis pelas contribuições na região de alto campo magnético. Buscando visualizar a contribuição desses níveis, modelaram-se as curvas gaussianas centradas nas energias dos níveis de Landau, com a intensidade proporcional às emissões fundamentais, permitindo visualizar um espectro teórico da magneto-fotoluminescência (magnetoPL). Analisando os dados experimentais e os ajustes teóricos, pode-se observar uma maior contribuição dos estados de buraco pesado para a polarização $\sigma-$.

O mesmo procedimento foi efetuado para a amostra [311]A, com os níveis de energia levemente deslocados para maiores energias. Os cálculos dos estados fundamentais e os níveis de Landau apresentaram o mesmo padrão da amostra [100], com a contribuição do segundo nível de Landau do buraco pesado ($HH_{1,2}$) na polarização $\sigma-$ e a influência do primeiro nível de Landau do buraco leve ($LH_{1,1}$) na polarização $\sigma+$. A semelhança dos espectros pode estar relacionado com as contribuições duplas de arsênio da geometria de ligação química da amostra [100].

Desta forma, a empregabilidade da técnica de magnetoPL se mostrou eficiente na determinação precisa dos níveis de energias contidos dentro de poços quânticos e seus desdobramentos com a aplicação do campo magnético, que revelou a assimetria existente nos estados excitados de acordo a população de spin analisada.

7 Anexos

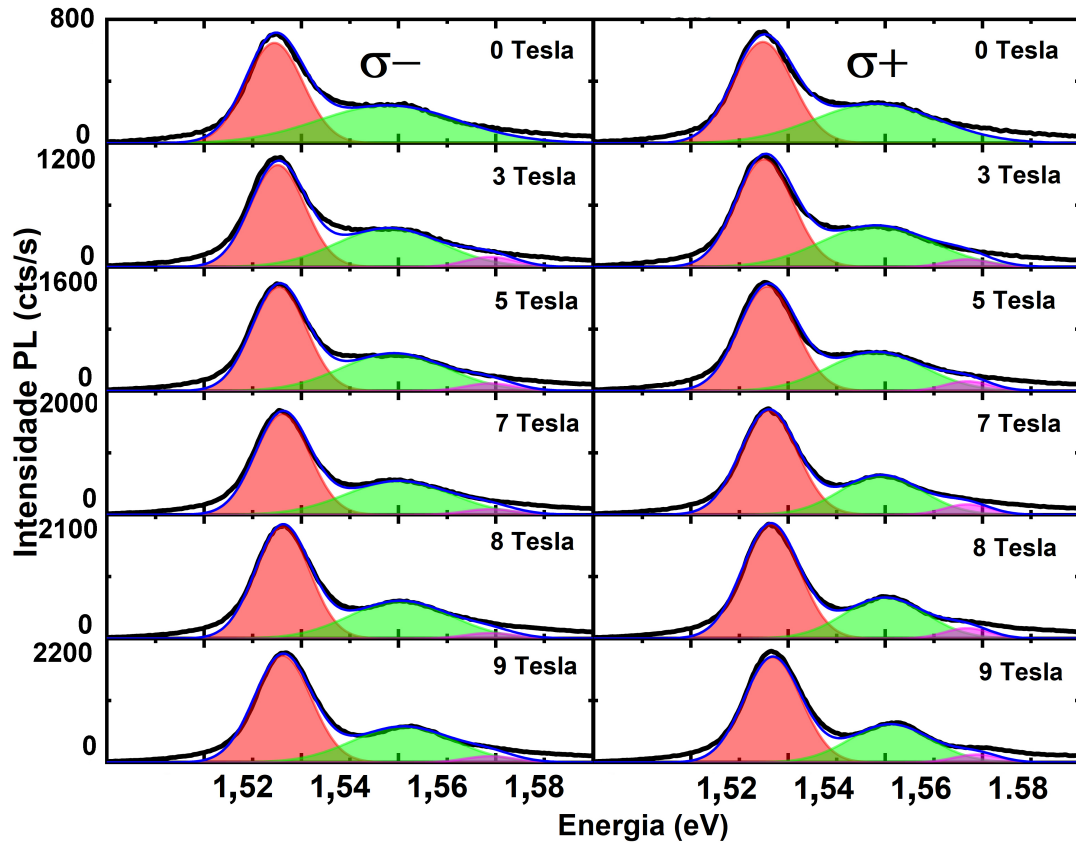
Na Figura A1, são apresentados os ajustes com base nas emissões conhecidas à 0 Tesla para a amostra [311]A nas polarizações circulares σ^- (à esquerda) e σ^+ (à direita). Assim como discutido para a amostra [100] na seção 5.1.1, a curva em verde acaba sobrepondo todas as informações.



Anexo A1 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [311]A levando como base as emissões conhecidas em 0 Tesla. A esquerda o ajuste para a polarização σ^- e a direita o ajuste para σ^+ .

Imagem do próprio autor.

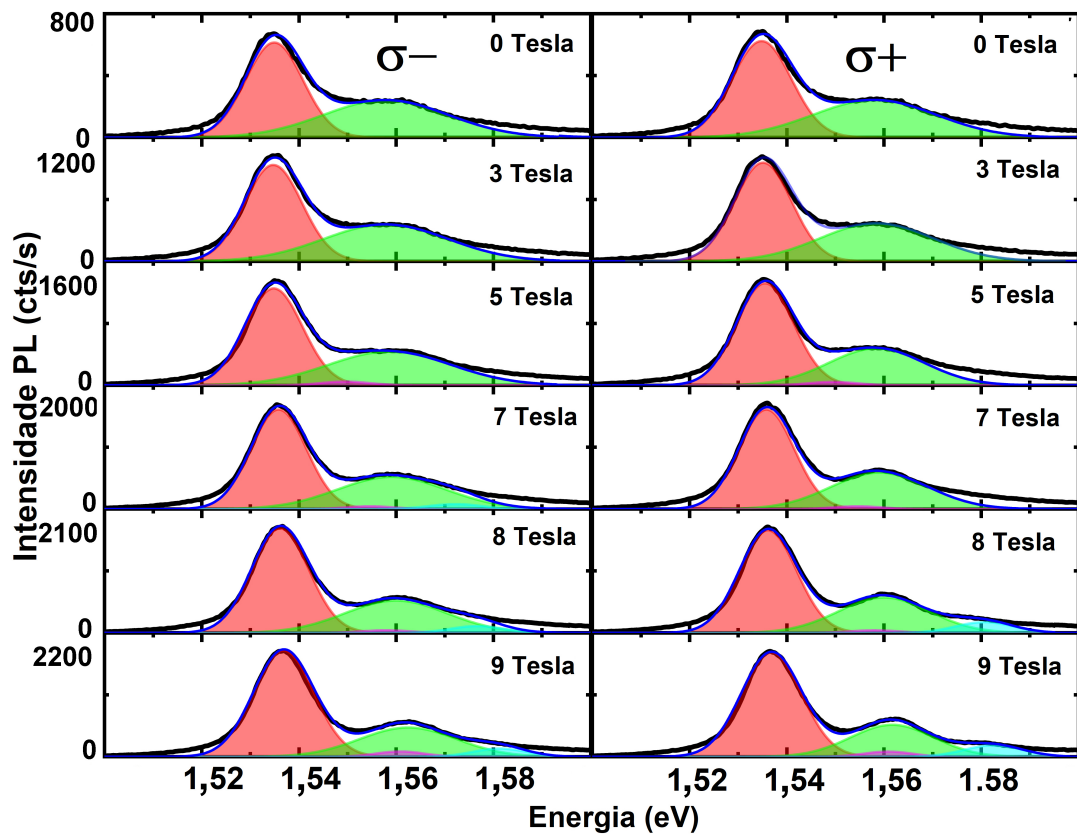
Na Figura A2, estão os ajustes com a adição de uma emissão auxiliar a direita da transição elétron buraco-leve ($e_1 - LH_1$) para a amostra [311]A nas polarizações circulares σ^- (à esquerda) e σ^+ (à direita). Para ajustar a região entre as emissões $e_1 - HH_1$ e $e_1 - LH_1$ foi necessário aumentar a largura de linha da emissão $e_1 - LH_1$, dificultando o ajuste com o aparecimento da emissão em magenta.



Anexo A2 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [311]A levando como base o surgimento de uma emissão que desloca rapidamente com o campo magnético. A esquerda o ajuste para a polarização σ^- e a direita o ajuste para σ^+ .

Imagem do próprio autor.

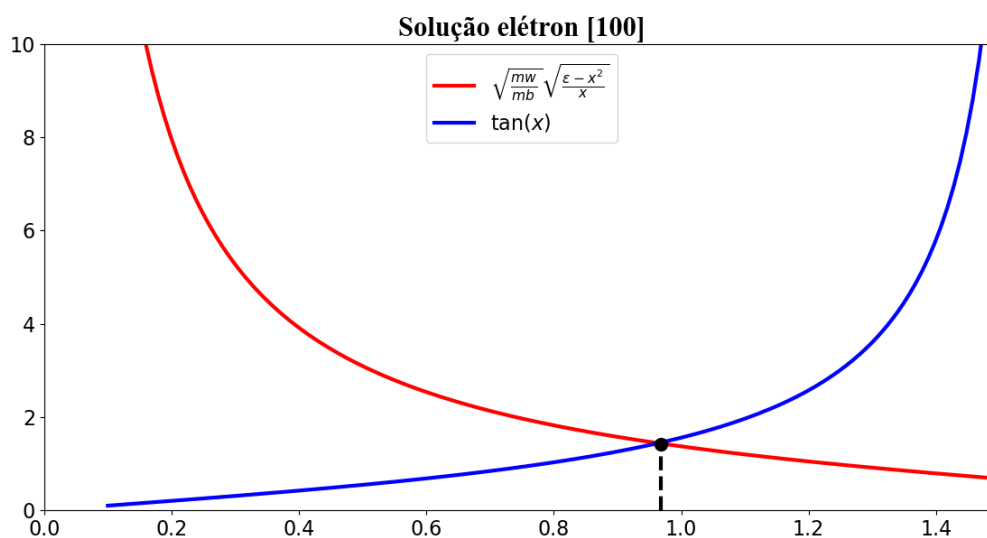
Na Figura A3, estão os ajustes com a adição de duas curvas gaussianas, uma emissão entre os níveis de $e_1 - HH_1$ e $e_1 - LH_1$, e outra à direita da transição ($e_1 - LH_1$) para a amostra [311]A nas polarizações circulares σ^- (à esquerda) e σ^+ (à direita). A partir do modelo apresentado foi obtido o melhor ajuste do espectro.



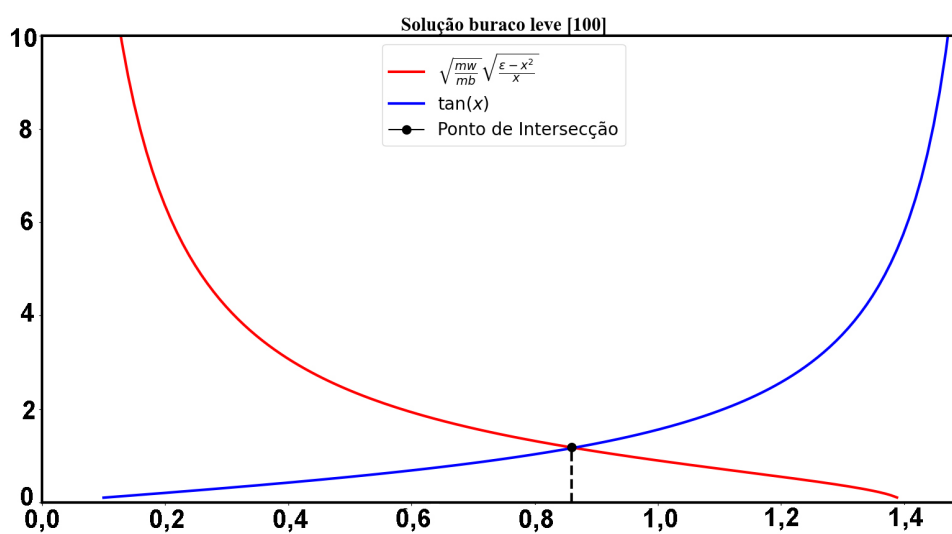
Anexo A3 – Ajuste do espectro de fotoluminescência da amostra [311]A levando como base o surgimento de duas emissões com o campo magnético. À esquerda o ajuste para a polarização σ^- e à direita o ajuste para σ^+ .

Imagem do próprio autor.

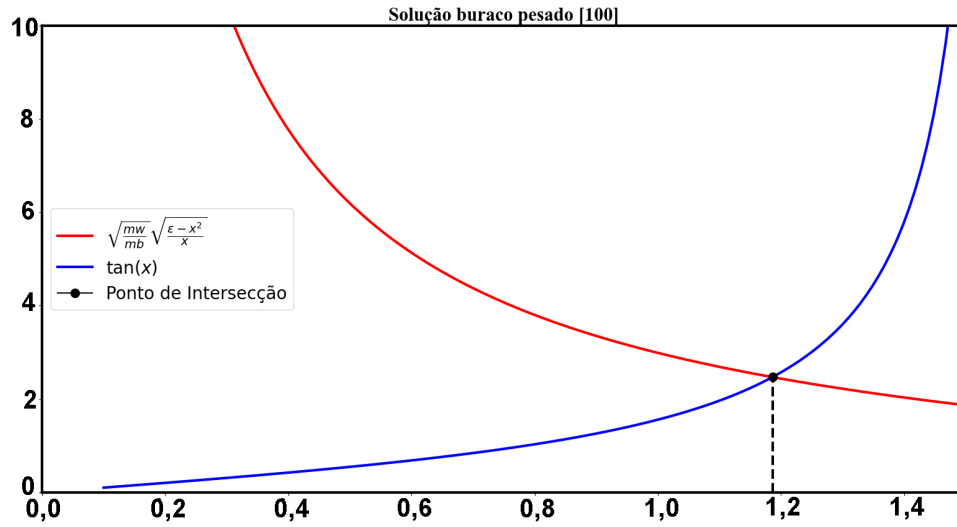
Nas Figuras A4, A5 e A6, estão os gráficos da equação transcendental (Eq. 2.16.), para o poço quântico crescido na direção [100], com os parâmetros físicos descritos na tabela 1. 1



Anexo A4 – Equação transcendental para o elétron [100].
 Imagem do próprio autor.



Anexo A5 – Equação transcendental para o buraco leve [100].
 Imagem do próprio autor.

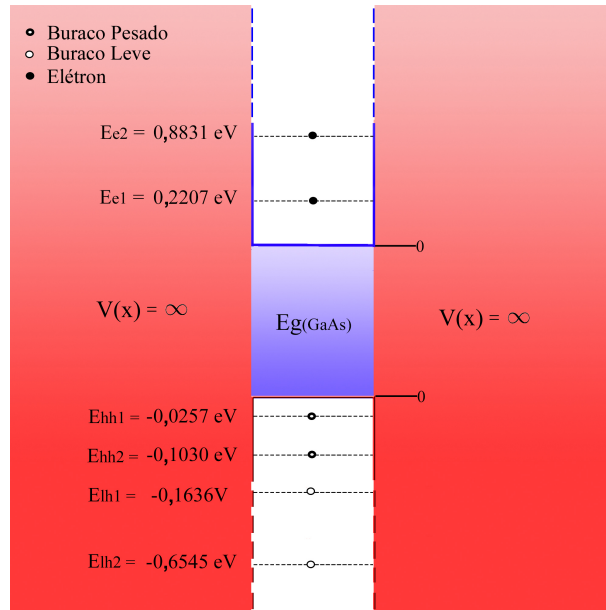


Anexo A6 – Equação transcendental para o buraco pesado [100].
Imagem do próprio autor.

Na tabela A1 e Figura A7, estão os dois primeiros níveis de energia ($n=1$ e $n=2$) para a amostra orientada na direção [311]A.

Nível de Energia	n=1	n=2
E_e	0,2207	0,8831
E_{LH}	0,1636	0,6545
E_{HH}	0,0257	0,1030

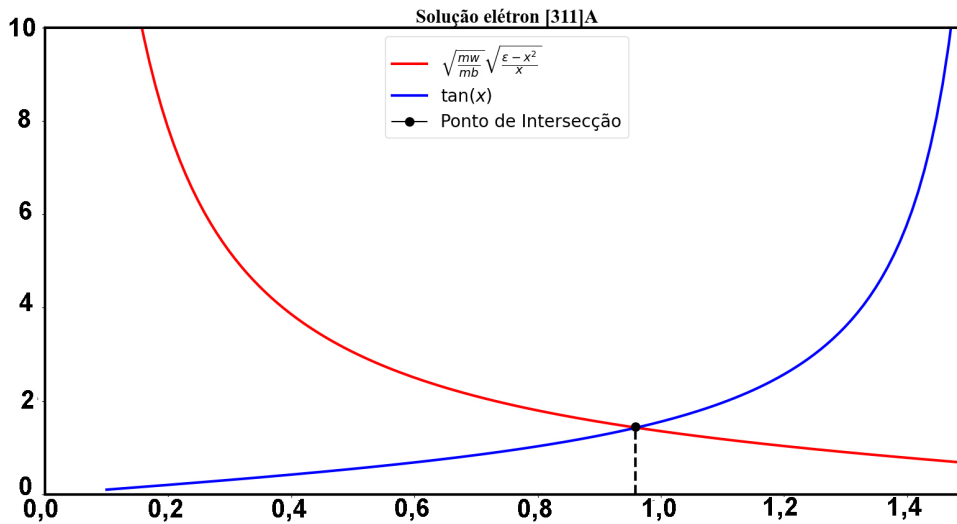
Tabela A1 – Os dois primeiros níveis de energia para o elétron (E_e), buraco leve (E_{LH}) e buraco pesado (E_{HH}) calculados para um poço infinito de GaAs [311]A.



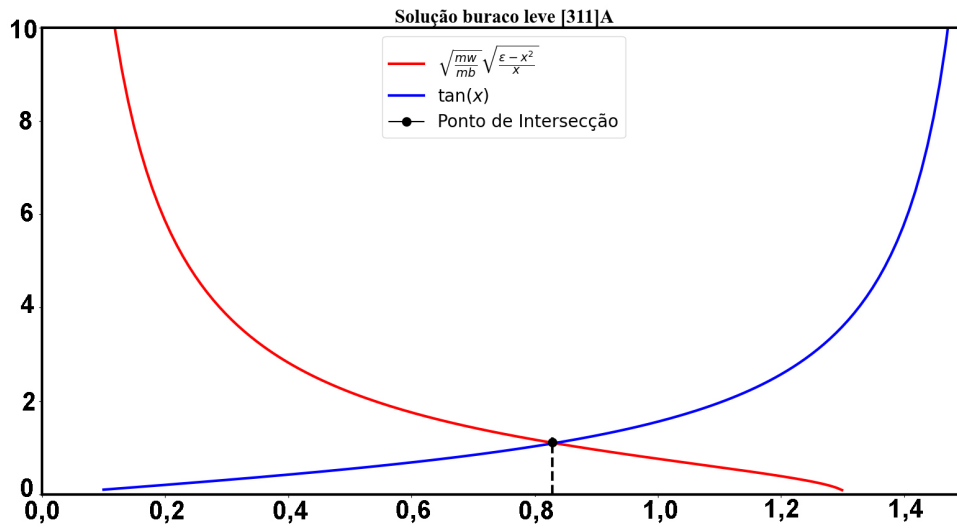
Anexo A7 – Níveis de energia para o modelo do poço infinito para a amostra de GaAs [311]A.

Imagem do próprio autor.

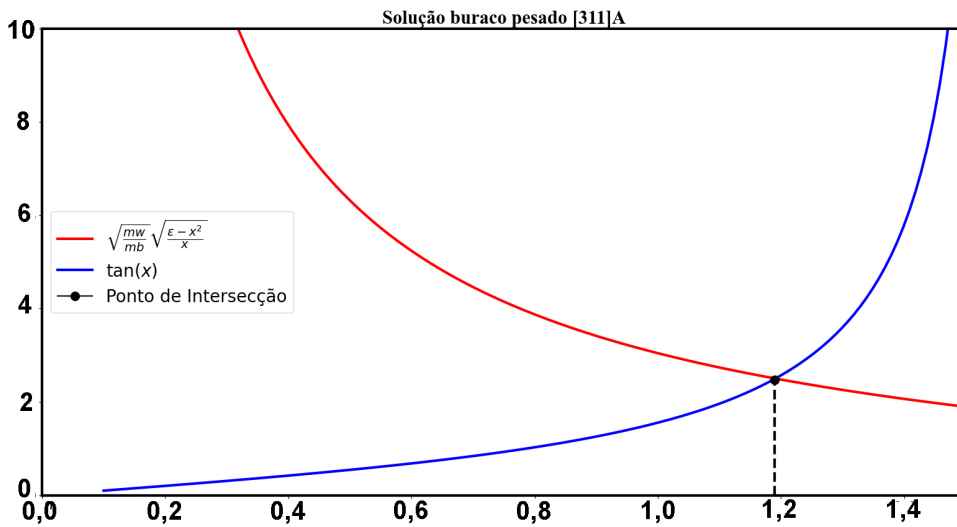
Nas Figuras A8, A9 e A10, estão os gráficos da equação transcendental (Eq. 2.16.) para a amostra [311]A. Os cálculos foram feitos com os parâmetros da tabela 1, a partir do ponto de intersecção foi calculado os níveis de energia (Eq. 2.17.).



Anexo A8 – Equação transcendental para o elétron [311]A
Imagem do próprio autor.



Anexo A9 – Equação transcendental para o buraco leve [311]A.
 Imagem do próprio autor.

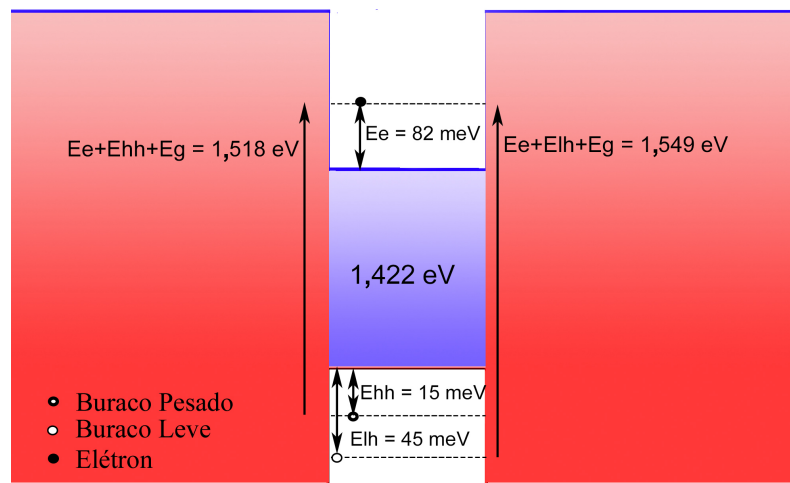


Anexo A10 – Equação transcendental para o buraco pesado [311]A.
 Imagem do próprio autor.

Na tabela A2 estão as energias e os pontos de intersecção dos estados fundamentais do elétron (E_e), buraco pesado (E_{HH}) e buraco leve (E_{LH}), para a amostra orientada na direção [311]A. Na figura A11 está uma representação das energias de transições calculadas.

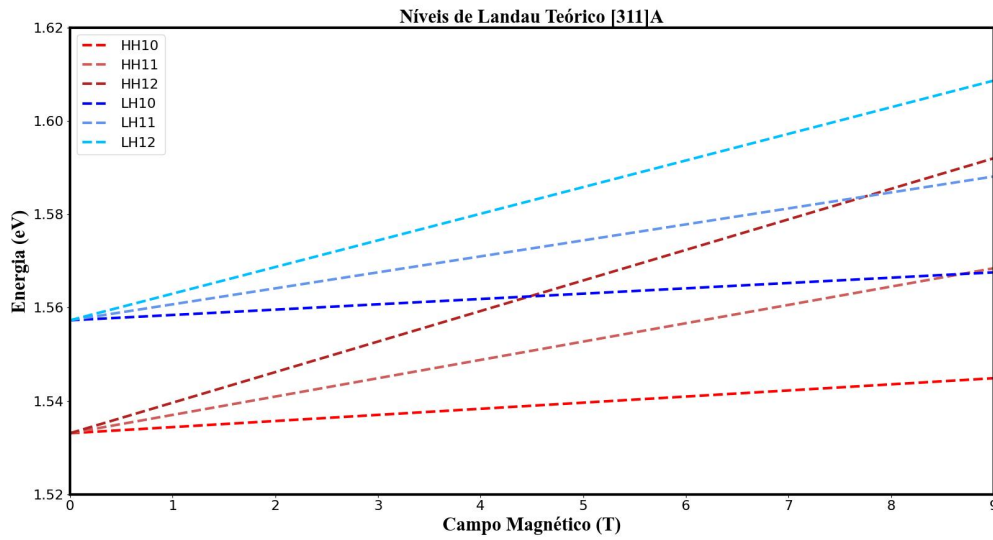
Nível de Energia	n=1	ponto de intersecção (x)
E_e	0.0816	0.968
E_{LH}	0.0452	0.829
E_{HH}	0.0147	1.19

Tabela A2 – Níveis de energia do elétron (E_e), buraco leve (E_{LH}) e buraco pesado E_{HH} calculados para o poço finito de GaAs [311]A, junto a o ponto de intersecção (x) da equação transcendental (Eq. 2.16).



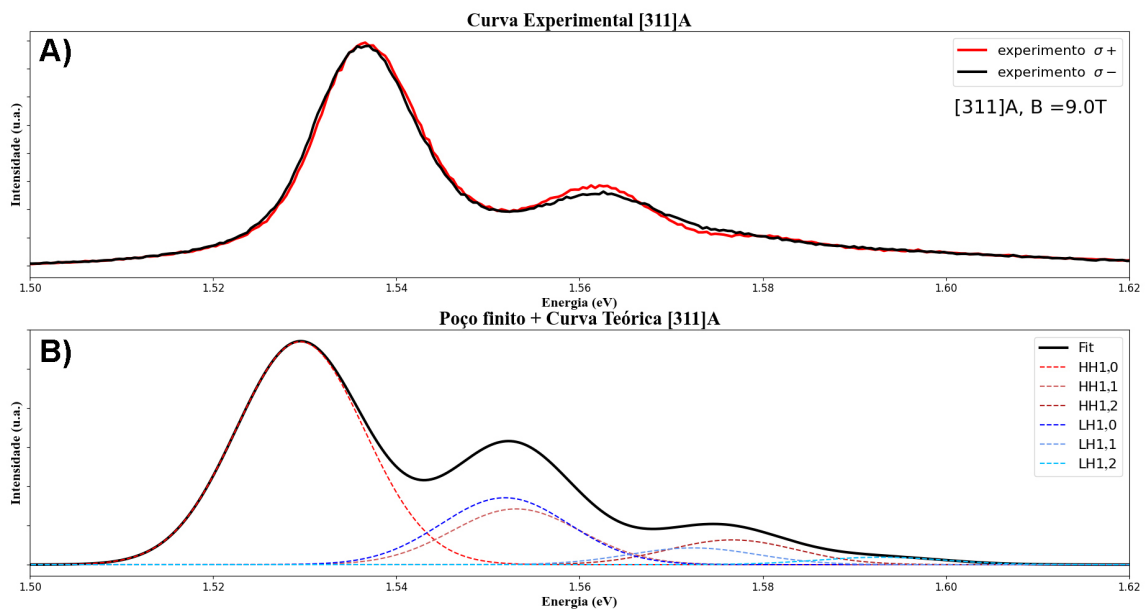
Anexo A11 – Níveis de energia obtido pelo cálculo do poço finito da amostra [311]A. Imagem do próprio autor.

Na figura A12 estão os três primeiros níveis de Landau ($N = 1, 2$ e 3) do buraco pesado (HH) e buraco leve (LH). As energias foram calculadas utilizando a teoria descrita na seção 2.3..



Anexo A12 – Energia dos três primeiros níveis de Landau ($N=1, 2$ e 3) em função do campo magnético para os níveis de buraco pesado ($HH_{1,N}$) e de buraco leve ($LH_{1,N}$), para a amostra crescida em $[311]A$.
Imagem do próprio autor.

Na figura A13 em A) está o espectro de magneto-fotoluminescência da amostra $[311]A$ à 9 Tesla em ambas as polarizações ($\sigma+$ e $\sigma-$). Em B), está a modelagem da intensidade relativa dos três primeiros níveis de Landau do buraco pesado ($HH_{1,N}$) e buraco leve ($LH_{1,N}$).



Anexo A13 – A) Espectro de fotoluminescência obtido experimentalmente para o poço de GaAs $[311]A$. B) Espectro teórico, para o modelo da imagem foi utilizado a energia calculado para um poço finito somado a os níveis de Landau calculado.

Imagem do próprio autor.

Referências

- 1 PETER, Y.; CARDONA, M. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010.
- 2 ESAKI, L.; TSU, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, v. 14, n. 1, p. 61–65, 1970.
- 3 CHAMBERS, S. A. A potential role in spintronics. *Materials Today*, v. 5, n. 4, p. 34–39, 2002.
- 4 BARNHAM, K. et al. Quantum well solar cells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 14, n. 1-2, p. 27–36, 2002.
- 5 CHEMLA, D. et al. Electroabsorption by stark effect on room-temperature excitons in gaas/gaalas multiple quantum well structures. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 42, n. 10, p. 864–866, 1983.
- 6 CHEMLA, D. et al. Room temperature excitonic nonlinear absorption and refraction in gaas/algaas multiple quantum well structures. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, IEEE, v. 20, n. 3, p. 265–275, 1984.
- 7 MILLER, D. et al. Large room-temperature optical nonlinearity in gaas/ga1-x alxas multiple quantum well structures. *Applied Physics Letters*, v. 41, n. 8, p. 679–681, 1982.
- 8 LEE, J.; KOTELES, E. S.; VASSELL, M. Luminescence linewidths of excitons in gaas quantum wells below 150 k. *Physical Review B*, v. 33, n. 8, p. 5512, 1986.
- 9 ZHENG, X. et al. Evidence of room-temperature exciton by magnetophotorefectance in epitaxial gaas and quantum well structures. *Applied physics letters*, American Institute of Physics, v. 52, n. 12, p. 984–986, 1988.
- 10 ARAKAWA, Y.; SAKAKI, H. Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current. *Applied physics letters*, American Institute of Physics, v. 40, n. 11, p. 939–941, 1982.
- 11 NAKAMURA, S. et al. Violet ingan/gan/algan-based laser diodes operable at 50 c with a fundamental transverse mode. *Japanese journal of applied physics*, IOP Publishing, v. 38, n. 3A, p. L226, 1999.
- 12 BLASER, S. et al. Room-temperature, continuous-wave, single-mode quantum-cascade lasers at λ 5.4 μ m. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 86, n. 4, 2005.
- 13 VODOPYANOV, K. L. *Laser-based mid-infrared sources and applications*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2020.
- 14 MENG, B.; WANG, Q. J. Broadly tunable single-mode mid-infrared quantum cascade lasers. *Journal of Optics*, IOP Publishing, v. 17, n. 2, p. 023001, 2015.
- 15 JIRAUSCHEK, C.; KUBIS, T. Modeling techniques for quantum cascade lasers. *Applied Physics Reviews*, AIP Publishing, v. 1, n. 1, 2014.

- 16 LEE, J.-W. et al. Quantum-dot-sensitized solar cell with unprecedentedly high photocurrent. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 3, n. 1, p. 1050, 2013.
- 17 TIAN, J.; CAO, G. Semiconductor quantum dot-sensitized solar cells. *Nano reviews*, Taylor & Francis, v. 4, n. 1, p. 22578, 2013.
- 18 BARNHAM, K. et al. Quantum well solar cells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier, v. 14, n. 1-2, p. 27–36, 2002.
- 19 ROGALSKI, A. Quantum well photoconductors in infrared detector technology. *Journal of Applied Physics*, American Institute of Physics, v. 93, n. 8, p. 4355–4391, 2003.
- 20 DOUGAKIUCHI, T. et al. High photoresponse in room temperature quantum cascade detector based on coupled quantum well design. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 109, n. 26, 2016.
- 21 LEVINE, B. Quantum-well infrared photodetectors. *Journal of applied physics*, v. 74, n. 8, p. R1–R81, 1993.
- 22 CESAR, D. et al. Contrasting lh-hh subband splitting of strained quantum wells grown along [001] and [113] directions. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 81, n. 23, p. 233301, 2010.
- 23 THERENT'EV, Y. V. et al. Magneto-photoluminescence of InAs/InGaAs/InAlAs quantum well structures. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 104, n. 10, 2014.
- 24 KOTERA, N. et al. Temperature effect of magneto-photoluminescence in InGaAs/InAlAs quantum wells: application of band theory to nonparabolic conduction subband. *Microelectronic engineering*, Elsevier, v. 63, n. 1-3, p. 301–307, 2002.
- 25 BASTARD, G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. New York, NY (USA); John Wiley and Sons Inc., 1990.
- 26 FOX, M. *Optical properties of solids*. [S.l.]: Oxford university press, 2010. v. 3.
- 27 KRONIG, R. d. L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the royal society of London. series A, containing papers of a mathematical and physical character*, v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931.
- 28 BLAKEMORE, J. Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. *Journal of Applied Physics*, v. 53, n. 10, p. R123–R181, 1982.
- 29 COHEN, M. L.; CHELIKOWSKY, J. R. *Electronic structure and optical properties of semiconductors*. [S.l.]: APS, 2012. v. 75.
- 30 ADACHI, S. GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research and device applications. *Journal of applied physics*, APS, v. 58, n. 3, p. R1–R29, 1985.
- 31 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J.; RAM-MOHAN, L. R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, v. 89, n. 11, p. 5815–5875, 2001.

- 32 TEODORO, M. et al. Substrate orientation effect on potential fluctuations in multi-quantum wells of gaas/ algaas. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 103, n. 9, 2008.
- 33 GATOS, H. C.; LAVINE, M. C. Characteristics of the {111} surfaces of the iii-v intermetallic compounds. *Journal of the Electrochemical Society*, v. 107, n. 5, p. 427, 1960.
- 34 LAUTENSCHLAGER, P. et al. Interband critical points of gaas and their temperature dependence. *Physical Review B*, v. 35, n. 17, p. 9174, 1987.
- 35 KIM, O.; SPITZER, W. Infrared reflectivity spectra and raman spectra of ga_{1-x}al_x as mixed crystals. *Journal of Applied Physics*, v. 50, n. 6, p. 4362–4370, 1979.
- 36 HARRISON, P.; VALAVANIS, A. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.
- 37 BENDANIEL, D.; DUKE, C. Space-charge effects on electron tunneling. *Physical review*, v. 152, n. 2, p. 683, 1966.
- 38 YANG, S.-R. E.; SHAM, L. Theory of magnetoexcitons in quantum wells. *Physical review letters*, APS, v. 58, n. 24, p. 2598, 1987.
- 39 AKIMOTO, O.; HASEGAWA, H. Interband optical transitions in extremely anisotropic semiconductors. ii. coexistence of exciton and the landau levels. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 22, n. 1, p. 181–191, 1967.
- 40 GREENE, R. L.; BAJAJ, K. K.; PHELPS, D. E. Energy levels of wannier excitons in g a a s- ga 1- x al x as quantum-well structures. *Physical Review B*, APS, v. 29, n. 4, p. 1807, 1984.
- 41 VINA, L. et al. Role of excitons in double raman resonances in gaas quantum wells. *Physical Review B*, v. 53, n. 7, p. 3975, 1996.
- 42 MAGNUS, W.; OBERHETTINGER, F.; SONI, R. P. *Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 52.
- 43 MELISSINOS, A. C.; NAPOLITANO, J. *Experiments in modern physics*. [S.l.]: Gulf Professional Publishing, 2003.
- 44 JOHNSON, E.; LARSEN, D. Polaron induced anomalies in the interband magnetoabsorption of insb. *Physical Review Letters*, v. 16, n. 15, p. 655, 1966.
- 45 HORST, M. et al. Resonant polarons in a gaas-gaalas heterostructure. *Solid state communications*, v. 53, n. 4, p. 403–405, 1985.
- 46 WU, X.; PEETERS, F.; DEVREESE, J. Polaron cyclotron-resonance mass in a single gaas quantum well. *Physical Review B*, APS, v. 40, n. 6, p. 4090, 1989.
- 47 TRALLERO-GINER, C.; SANTIAGO-PÉREZ, D. G.; FOMIN, V. M. New magneto-polaron resonances in a monolayer of a transition metal dichalcogenide. *Scientific Reports*, v. 13, n. 1, p. 292, 2023.

- 48 PFEFFER, P. Resonant and nonresonant polarons in bulk insb. *Physical Review B*, APS, v. 57, n. 19, p. 12156, 1998.
- 49 PÄSSLER, R. Basic model relations for temperature dependencies of fundamental energy gaps in semiconductors. *physica status solidi (b)*, v. 200, n. 1, p. 155–172, 1997.
- 50 VARSHNI, Y. P. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *physica*, v. 34, n. 1, p. 149–154, 1967.
- 51 GOPAL, A. V. et al. Photoluminescence study of exciton–optical phonon scattering in bulk gaas and gaas quantum wells. *Journal of Applied Physics*, v. 87, n. 4, p. 1858–1862, 2000.
- 52 AKSENOV, I. et al. Effect of a magnetic field on the excitonic luminescence line shape in a quantum well. *Physical Review B*, v. 51, n. 7, p. 4278, 1995.
- 53 POLIMENI, A. et al. Linewidth broadening of excitonic luminescence from quantum wells in pulsed magnetic fields. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 13, n. 2-4, p. 349–352, 2002.
- 54 WZ, S.; AZ, L. et al. Optical properties of quaternary gainassb/algaassb strained quantum wells. *Physical Review B*, 1996.
- 55 BORRERO, P. P. G. *Crescimento e caracterização de pontos quânticos naturais de InAs e In0.5Ga0.5As sobre diferentes orientações cristalográficas do substrato de GaAs*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 1998.
- 56 PASCHOLATI, P. R. *Distribuição de Probabilidade*. 2014.
- 57 IWAMURA, H.; KOBAYASHI, H.; OKAMOTO, H. Excitonic absorption spectra of gaas–alas superlattice at high temperature. *Japanese journal of applied physics*, v. 23, n. 10A, p. L795, 1984.
- 58 LEE, W. et al. Phonon screening of excitons in atomically thin semiconductors. *Physical Review Letters*, v. 133, n. 20, p. 206901, 2024.
- 59 RUDIN, S.; REINECKE, T.; SEGALL, B. Temperature-dependent exciton linewidths in semiconductors. *Physical Review B*, v. 42, n. 17, p. 11218, 1990.
- 60 URBACH, F. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids. *Physical review*, APS, v. 92, n. 5, p. 1324, 1953.
- 61 WONG, J.; OMELCHENKO, S. T.; ATWATER, H. A. Impact of semiconductor band tails and band filling on photovoltaic efficiency limits. *ACS Energy Letters*, ACS Publications, v. 6, n. 1, p. 52–57, 2020.
- 62 HARIMA, N.; NELSON, J.; OHACHI, T. Characterization of mbe grown gaas/algaas heterointerfaces with photoluminescence from quantum wells. *Journal of crystal growth*, v. 237, p. 274–277, 2002.
- 63 PLOOG, K. Molecular beam epitaxy of semiconductor quantum wells and superlattices. *Journal of Crystal Growth*, v. 79, n. 1-3, p. 887–899, 1986.

- 64 DHAKA, V. D. Ultrafast capture and relaxation of carriers in ingaas semiconductor quantum well nanostructures. *Journal of Crystal Growth*, Tampere University of Technology, 2006.
- 65 HECHT, E. *Optics*. [S.l.]: Pearson Education India, 2012.
- 66 AERONOMY, R. B. I. for S. *Studying Earth's magnetic field by looking at the aurora*. 2020. Disponível em: <<https://www.aeronomie.be/en/news/2020/studying-earths-magnetic-field-looking-aurora>>.
- 67 PHYSICS, H. *Classification of Polarization*. 2000. Disponível em: <<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/phyopt/polclas.html>>.
- 68 LING, S. J. *Physics Bootcamp: Polarization of Light*. 2020. Disponível em: <<http://www.physicsbootcamp.org/section-polarization-of-light.html>>.
- 69 PIERCE, D. T.; MEIER, F. Photoemission of spin-polarized electrons from gaas. *Physical Review B*, APS, v. 13, n. 12, p. 5484, 1976.
- 70 ULLAH, S. *Optical control and detection of spin coherence in multilayer systems*. Tese (Doutorado) — Universidade de Sao Paulo, 2017.
- 71 JR, V. L. et al. Spin-dependent analysis of homogeneous and inhomogeneous exciton decoherence in magnetic fields. *Physical Review B*, APS, v. 105, n. 4, p. 045414, 2022.
- 72 JACOBSEN, G. M. et al. Magnetoabsorption and spin polarization inversion in gaas/algaas quantum wells. *Physical Review B*, APS, v. 110, n. 3, p. 035417, 2024.
- 73 FUJIWARA, K.; TSUKADA, N.; NAKAYAMA, T. Observation of free excitons in room-temperature photoluminescence of gaas/algaas single quantum wells. *Applied physics letters*, v. 53, n. 8, p. 675–677, 1988.
- 74 LOS, J.; FASOLINO, A.; CATELLANI, A. Valence band structure of (001),(012),(011),(111),(112),(113) gaas algaas quantum wells. *Microelectronics journal*, Elsevier, v. 26, n. 8, p. 745–749, 1995.
- 75 NAKWASKI, W. Effective masses of electrons and heavy holes in gaas, inas, alas and their ternary compounds. *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier, v. 210, n. 1, p. 1–25, 1995.