

Poços Quânticos Duplos Acoplados

Coupled Double Quantum Wells

Élder Mantovani Lopes¹; Daniel Ferreira César²; José Leonil Duarte³;
Ivan Frederico Lupiano Dias⁴; Edson Laureto⁵; Luiz Carlos Poças⁶

Resumo

O progresso das técnicas de crescimento de materiais semicondutores possibilita a oportunidade de fabricação de novos dispositivos semicondutores que podem contribuir para o desenvolvimento da nanotecnologia. A confecção de heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade permite a obtenção de novos efeitos baseados nas propriedades quânticas desses sistemas, os quais despertam grande interesse tecnológico, especialmente nos setores opto-eletrônico e de telecomunicações. Neste trabalho são discutidos alguns conceitos básicos relacionados a uma dessas heteroestruturas: o Poço Quântico Duplo Acoplado (PQDA). A dedução da expressão para a determinação dos níveis de energia de PQDAs é apresentada em detalhes. Os resultados obtidos através desta expressão são comparados com resultados experimentais obtidos através da técnica de fotoluminescência (PL), complementando o trabalho.

Palavras-chave: Semicondutores. Poços Quânticos. Fotoluminescência.

Abstract

The progress of the semiconductor growth techniques allows the opportunity to produce new semiconductor devices that may contribute to the development of the nanotechnology. The fabrication of semiconductor heterostructures with high quality allows the obtaining of new effects based on the quantum properties of those systems, which have stimulated great technological interest, especially on the optoelectronic and telecommunications fields. In this work some basic concepts related to one of those heterostructures are discussed: the Coupled Double Quantum Well (CDQW). The deduction of the expression for the determination of the energy levels in CDQWs is presented in details. The results obtained through this expression are compared with experimental results obtained through photoluminescence (PL) measurements, complementing the work.

Key words: Semiconductors. Quantum Wells. Photoluminescence.

¹ Aluno de pós-doutorado do Departamento de Física, Química e Biologia da Universidade Estadual Paulista (UNESP) - Presidente Prudente. E-mail: eldermantovani@yahoo.com.br

² Aluno de doutorado do Instituto de Física da Universidade Federal de São Carlos. E-mail: dfcesar@gmail.com

³ Docente do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina. E-mail: jlduarte@uel.br

⁴ Docente do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina. E-mail: idias@uel.br

⁵ Docente do Departamento de Física da Universidade Estadual de Londrina. E-mail: laureto@uel.br

⁶ Docente da Faculdade de Ciências Integradas do Pontal, Universidade Federal de Uberlândia. Email: lcp@pontal.ufu.br

Introdução

Sistemas eletrônicos baseados em heteroestruturas de poços quânticos têm sido largamente utilizados para a confecção de diversos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, tais como fotodetectores, moduladores ópticos, transistores, lasers, etc. Nas últimas décadas, bastante atenção também tem sido dada ao estudo de heteroestruturas baseadas na configuração de poços quânticos duplos acoplados (PQDAs). Tal interesse deve-se à importância dessas heteroestruturas, tanto do ponto de vista das aplicações tecnológicas, na obtenção de características desejáveis para a aplicação em dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, quanto do ponto de vista da pesquisa acadêmica, na observação de novos efeitos físicos.

Como exemplos de aplicações tecnológicas de PQDAs podemos citar a sua utilização na confecção de dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, tais como: transistores de efeito de campo (FET) (PERALTA et al., 2002), detectores “terahertz” sintonizáveis (GRISH, 2002), moduladores (JÄNES; HOLMSTRÖM; EKENBERG, 2002; YOSHIDA et al., 2004), lasers (MIURA; KATAYAMA, 2006), etc.

Com relação à pesquisa acadêmica, o efeito de acoplamento entre os poços em PQDAs estruturalmente otimizados pode gerar uma série de consequências, dentre elas: mudanças no índice de refração (RISTIC; JAEGER, 2006), amplificação luminosa (WEI-HUAI; JIN-HUI; JIN-YUE, 2005), alterações na mobilidade eletrônica (SAHU, 2004) e intensificação do efeito Stark confinado quanticamente (KIM; LEE, 2000). Outros efeitos interessantes têm estimulado a pesquisa e aplicação dos PQDAs, especialmente com relação às suas propriedades excitônicas (RIOS; PORRAS-MONTENEGRO, 2005; RYCZKO; SEK; MISIEWICZ, 2002), em particular a possibilidade da formação de éxcitons indiretos (LARIONOV; TIMOFEEV, 2001; LARIONOV et al., 2002), com elétrons e buracos confinados em regiões

espaciais diferentes. Éxcitons indiretos devem apresentar um grande tempo de recombinação e, por este motivo, espera-se que ocorra condensação de éxcitons, analogamente à condensação de Bose-Einstein de bósons. Este assunto tem sido tratado em diversos trabalhos (LARIONOV; TIMOFEEV, 2001; LARIONOV et al., 2002, 2006; BUTOV et al., 2001; BUTOV; GOSSARD; CHEMLA, 2002; DREMIN et al., 2002; SNOKE, 2002; SNOKE et al., 2002).

Neste trabalho, alguns conceitos fundamentais relacionados aos PQDAs são apresentados. A expressão utilizada para calcular os níveis de energia nessas heteroestruturas é deduzida detalhadamente e os resultados obtidos através da mesma são comparados com resultados experimentais provenientes de medidas de fotoluminescência (PL), apresentando boa concordância. Outros resultados experimentais relacionados a importantes propriedades ópticas de PQDAs complementam o trabalho, como, por exemplo, a variação da energia de emissão e da largura de linha do pico de PL em função da espessura da barreira que acopla os poços quânticos (“spike”).

Poços quânticos simples e poços quânticos duplos acoplados

Poço quântico simples

Dentre as diversas heteroestruturas que podem ser produzidas através das técnicas de crescimento epitaxial, a de poço quântico simples (PQS) é certamente a mais pesquisada. O PQS é um sistema composto de dois materiais semicondutores com “gaps” de energia diferentes e pode ser construído, por exemplo, crescendo-se uma camada de GaAs entre duas camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. O $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ possui um “gap” de energia maior que o GaAs e a estrutura criada forma uma região de confinamento bidimensional para os portadores de cargas, com níveis de energia discretos e característicos desse poço em particular. Alterando-se a concentração de Al nas camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, modifica-se o “gap”

de energia do material, sendo possível, inclusive, controlar os níveis de energia dos elétrons e dos buracos no poço quântico (LOURENÇO et al., 2001a, 2001b). A figura 1 apresenta uma estrutura de PQS, o perfil do potencial criado pela mesma e a representação da função de onda eletrônica para o estado fundamental em um PQS finito.

A diferença de energia “ ΔE_g ” (onde $\Delta E_g = E_g^{\text{AlGaAs}} - E_g^{\text{GaAs}}$, ver figura 1b) define um perfil de potencial unidimensional $V_{(z)}$ atrativo para os portadores na região $0 < z < L$, ou seja, forma-se um poço de potencial para elétrons na banda de condução e um poço de potencial para buracos na banda de valência. A espessura da camada de GaAs na direção de crescimento (z) define a região do poço quântico e é representada por L .

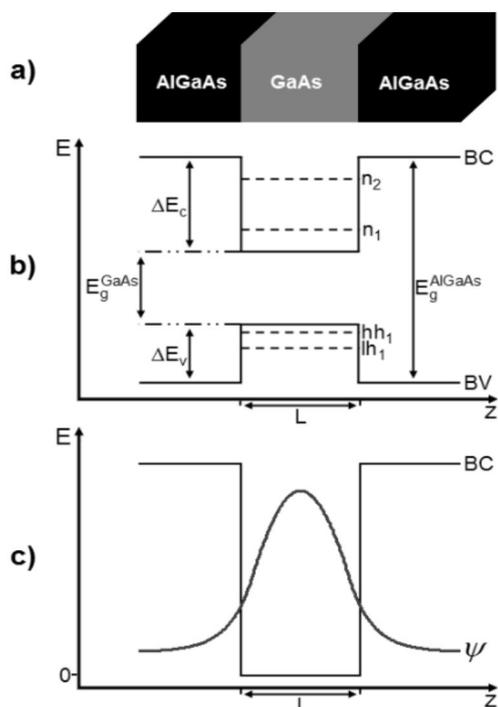


Figura 1. a) Poço quântico simples; b) Representação do perfil de potencial do PQS: z é a direção de crescimento do PQS, L representa a largura do poço, e_1 o primeiro nível de elétrons, hh_1 o primeiro nível de buracos pesados e lh_1 o primeiro nível de buracos leves; c) Representação da função de onda eletrônica associada ao nível de energia fundamental de um PQS finito.

O potencial descrito na figura 1b restringe o movimento dos portadores de carga (elétrons e

buracos) na direção normal às interfaces (direção z), permanecendo livre o movimento nas direções x e y . Desta maneira, o movimento das partículas na direção z é quantizado. No GaAs volumétrico, por exemplo, as bandas de buraco leve e buraco pesado são degeneradas (apresentam a mesma energia) em $k = 0$. O confinamento dos portadores em uma região espacial reduzida, com a conseqüente quantização do movimento na direção z , levanta a degenerescência, uma vez que a energia dos níveis quantizados é proporcional ao inverso das massas efetivas, separando os níveis dos buracos pesados dos buracos leves na banda de valência. Na figura 1b são ilustrados os níveis de energia quantizados para elétrons (e_1, e_2, \dots, e_n) na banda de condução e para buracos leves (lh_1, lh_2, \dots, lh_n) e buracos pesados (hh_1, hh_2, \dots, hh_n) na banda de valência. Para o GaAs a quantização começa a tornar-se significativa quando $L \sim 300 \text{ \AA}$, dependendo da altura da barreira de potencial.

Geralmente, para fins didáticos, o primeiro caso a se considerar é o do poço quântico de potencial infinito. Nesse caso, as interfaces são abruptas e as barreiras infinitas, não havendo, portanto, penetração das funções de onda, que descrevem a distribuição dos portadores de carga, além da região do poço. Nessa aproximação, os níveis de energia variam com o inverso do quadrado da espessura do poço ($1/L^2$) e a solução do problema pode ser encontrada em textos básicos de Mecânica Quântica (EISBERG; RESNICK, 1979; GAZIOROWICZ, 1979).

Uma situação mais real, a do poço quântico de potencial finito, também tem sua solução descrita em textos básicos de Mecânica Quântica (EISBERG; RESNICK, 1979; GAZIOROWICZ, 1979) e, nesse caso, as equações transcendentes que permitem determinar as energias de confinamento na banda de condução são:

$$k \cotg(kL/2) = -\kappa \quad (1)$$

$$k \operatorname{tg}(kL/2) = \kappa \quad (2)$$

onde k é o vetor de onda do elétron no poço e κ é o vetor de onda do elétron na barreira.

A equação (1) e a equação (2) não podem ser resolvidas analiticamente. Elas podem ser determinadas graficamente ou numericamente. Equações semelhantes descrevem as energias de confinamento para os buracos leves e buracos pesados na banda de valência.

A função de onda $\psi(z)$ descreve uma onda no interior do poço que decai exponencialmente dentro da barreira, como pode ser observado na figura 1c. A penetração da função de onda na barreira tem consequências importantes nas propriedades ópticas e de transporte de heteroestruturas e é aplicada de forma prática aos dispositivos semicondutores.

É essa penetração das funções de onda nas barreiras que explica os interessantes fenômenos observados em estruturas de PQDA e super-redes (SR) (VALADARES et al., 1987).

Poço quântico duplo acoplado

PQDAs correspondem a dois poços quânticos simples separados por uma estreita barreira central. Efeitos de tunelamento através dessa barreira provocam a interação entre as funções de onda dos dois poços quânticos, provocando o acoplamento dos mesmos. Nesse caso, o estado fundamental da partícula, que seria único em um poço quântico isolado, se separa em estados simétrico e anti-simétrico, com níveis de energia diferentes e que dependem da largura e da altura da barreira central.

A figura 2 mostra uma estrutura de PQDA, o perfil do potencial criado pela mesma e a representação da função de onda eletrônica para o estado fundamental (primeiro nível simétrico).

A expressão que fornece a solução exata para os níveis de energia em um PQDA simétrico é (BASTARD, 1988):

$$2 \cos kL + \left(\xi - \frac{1}{\xi}\right) \operatorname{sen} kL \pm \left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) \operatorname{sen} kL \exp(-\kappa h) = 0 \quad (3)$$

onde:

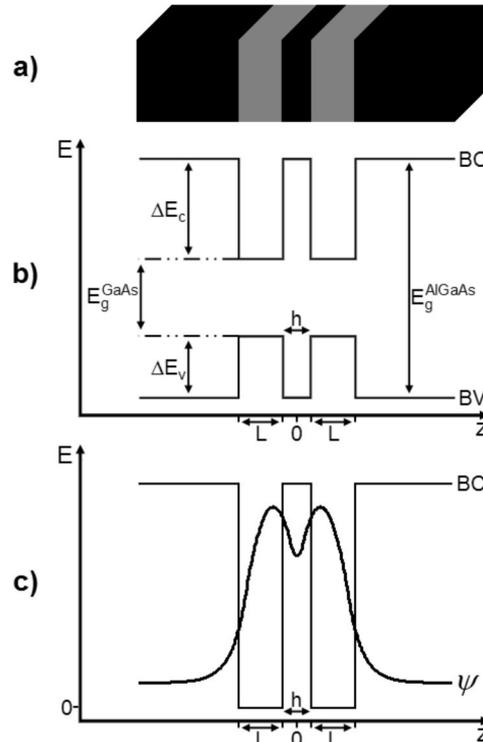


Figura 2. a) Poço quântico duplo acoplado; b) Representação do perfil de potencial do PQDA: z é a direção de crescimento do PQDA, L representa a largura dos poços e h a largura da barreira central (por simplicidade, os níveis de energia para elétrons e buracos não são ilustrados); c) Representação da função de onda eletrônica associada ao nível de energia fundamental (primeiro nível simétrico) de um PQDA.

$$k = \sqrt{\frac{2m_w^* E_l}{\hbar^2}}, \quad (4)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_b^* (V - E_l)}{\hbar^2}}$$

L é a largura dos poços individuais, h é a largura da barreira central, $\xi = (m_w/k)(\kappa/m_b)^{1/2}$, E_l representa a energia da l -ésima subbanda da partícula e $V = \Delta E_c$ ou ΔE_v .

Então, no limite em que $h \rightarrow 0$, a equação (3), que é a expressão para o poço quântico duplo simétrico de espessura L , deve se tornar a expressão para o PQS com largura $2L$. De fato, com $h = 0$ na equação (3) tem-se:

$$2 \cos kL + \left(\xi - \frac{1}{\xi}\right) \text{sen}kL \pm \left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) \text{sen}kL = 0 \quad (5)$$

resultando em duas expressões:

$$k \cotg(kL) = -\kappa \quad (6)$$

para o sinal positivo e

$$k \tg(kL) = \kappa \quad (7)$$

para o sinal negativo.

A equação (6) é a equação transcendental para os estados ímpares do PQS com largura $2L$ (equação (1)) e a equação (7) é a equação transcendental para os estados pares do PQS com largura $2L$ (equação (2)), como deveria ser.

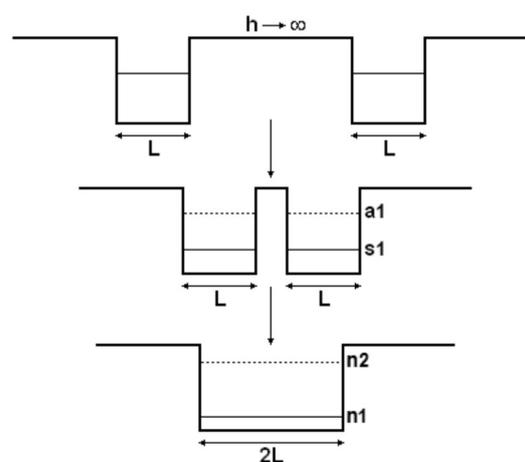


Figura 3. Esquema ilustrando os estados ligados do poço quando h diminui de infinito para zero.

No limite em que $h \rightarrow \infty$, a equação (3) deve resultar numa expressão para o PQS de largura L . Fazendo $h \rightarrow \infty$ na equação (3), obtém-se:

$$2 \cos kL + \left(\xi - \frac{1}{\xi}\right) \text{sen}kL = 0 \quad (8)$$

Esta equação é o produto da equação transcendental para os estados pares do PQS de largura L (equação (7)) pela equação transcendental para os estados ímpares do PQS de largura L (equação (6)):

$$[k \tg(kL/2) - \kappa] \times [k \cotg(kL/2) + \kappa] = 0 \quad (9)$$

Ou seja, a equação (8), que corresponde à equação (9), fornece todos os níveis pares e ímpares ao mesmo tempo para o PQS de largura L .

Solução exata para o poço quântico duplo acoplado

Nesta seção será apresentado o procedimento matemático para a obtenção da solução exata para o PQDA (equação (3)). Para tal, vamos considerar o movimento de uma partícula (um elétron ou um

¹ BASTARD (1988) não considera a diferença entre as massas dos portadores nas regiões das barreiras e dos poços, mas como iremos deduzir a equação (3) para a caso mais geral de um PQDA (seção 3), já apresentamos a expressão para ζ que se aplica a essa condição.

buraco) em uma estrutura de PQDA constituída por dois PQS de largura L e separados por uma barreira central de largura h (figura 4).

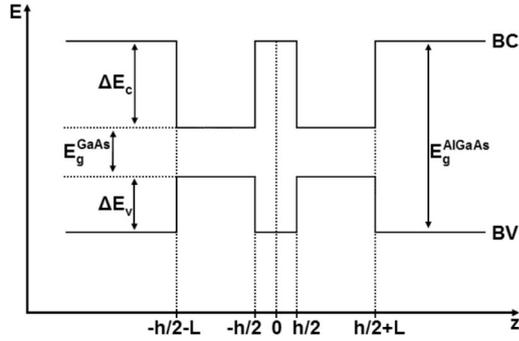


Figura 4. Representação do perfil de potencial de um PQDA com poços de largura L e barreira central de largura h .

Na aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano para uma partícula é dado por:

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \quad (10)$$

Aqui, o eixo z é tomado como sendo perpendicular à interface do poço quântico. A massa da partícula, m , é m_w na região do poço e m_b na região das barreiras. As componentes z da posição e do momento das partículas são denotadas, respectivamente, por z e p_z . O potencial de confinamento $V(z)$ é considerado como sendo:

$$V_z = \begin{cases} 0 & \text{se } \frac{h}{2} < |z| < \frac{h}{2} + L \\ V & \text{se } |z| < \frac{h}{2} \\ V & \text{se } \frac{h}{2} + L < |z| < \infty \end{cases} \quad (11)$$

A solução da equação de Schrödinger com o Hamiltoniano H_z pode ser facilmente obtida. A simetria do sistema fornece funções de onda $\psi(z)$ com paridade par e ímpar, ambas em relação à coordenada z (KAMIZATO; MATSUURA, 1989):

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_1 = D \exp(-\kappa z) & \text{se } z > \frac{h}{2} + L \\ \psi_2 = A \sin(kz) + B \cos(kz) & \text{se } \frac{h}{2} < z < \frac{h}{2} + L \\ \psi_3 = C [\exp(\kappa z) \pm \exp(-\kappa z)] & \text{se } \frac{h}{2} > |z| \\ \psi_4 = \mp A \sin(kz) \pm B \cos(kz) & \text{se } -\frac{h}{2} > z > -\frac{h}{2} - L \\ \psi_5 = \pm D \exp(\kappa z) & \text{se } z < -\frac{h}{2} - L \end{cases} \quad (12)$$

onde k e κ são os vetores de onda da partícula nas regiões do poço e das barreiras de potencial, respectivamente, e são dados pela equação (4).

Aplicando as condições de *continuidade* da função de onda e do *fluxo de partículas* através das barreiras obtém-se um conjunto de quatro equações, com quatro parâmetros (A , B , C e D) a serem determinados:

$$\begin{aligned} \text{I) } [\psi_2(z)]_{\frac{h}{2}} &= [\psi_3(z)]_{\frac{h}{2}} : \\ A \sin\left(k \frac{h}{2}\right) + B \cos\left(k \frac{h}{2}\right) &= \\ C \left[\exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \pm \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] & \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \text{II) } \left[\frac{1}{m_w} \frac{d\psi_2}{dz} \right]_{\frac{h}{2}} &= \left[\frac{1}{m_b} \frac{d\psi_3}{dz} \right]_{\frac{h}{2}} : \\ A \frac{k}{m_w} \cos\left(k \frac{h}{2}\right) - B \frac{k}{m_w} \sin\left(k \frac{h}{2}\right) &= \\ C \frac{\kappa}{m_b} \left[\exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) m \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] & \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \text{III) } [\psi_2(z)]_{\frac{h}{2}+L} &= [\psi_1(z)]_{\frac{h}{2}+L} : \\ A \sin\left[k\left(\frac{h}{2} + L\right)\right] + B \cos\left[k\left(\frac{h}{2} + L\right)\right] &= \\ D \exp\left[-\kappa\left(\frac{h}{2} + L\right)\right] & \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{IV) } \left[\frac{1}{m_w} \frac{d\psi_2(z)}{dz} \right]_{\frac{h}{2}+L} = \left[\frac{1}{m_b} \frac{d\psi_1(z)}{dz} \right]_{\frac{h}{2}+L} :$$

$$A \frac{k}{m_w} \cos \left[k \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] - B \frac{k}{m_w} \text{sen} \left[k \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] = \quad (16)$$

$$- D \frac{\kappa}{m_b} \exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right]$$

As equações (13), (14), (15) e (16) resultam em um sistema homogêneo de equações 4x4 em A, B, C e D, o qual apresentará solução não trivial quando o determinante da matriz formada pelos coeficientes das equações for igual a zero, ou seja:

$$\det M = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} = 0 \quad (17)$$

onde:

$$a_{11} = \text{sen} \left(k \frac{h}{2} \right), \quad a_{12} = \cos \left(k \frac{h}{2} \right),$$

$$a_{13} = - \left[\exp \left(\kappa \frac{h}{2} \right) \pm \exp \left(-\kappa \frac{h}{2} \right) \right], \quad a_{14} = 0,$$

$$a_{21} = \frac{k}{m_w} \cos \left(k \frac{h}{2} \right), \quad a_{22} = -\frac{k}{m_w} \text{sen} \left(k \frac{h}{2} \right),$$

$$a_{23} = -\frac{\kappa}{m_b} \left[\exp \left(\kappa \frac{h}{2} \right) \mp \exp \left(-\kappa \frac{h}{2} \right) \right], \quad a_{24} = 0,$$

$$a_{31} = \text{sen} \left[k \left(\frac{h}{2} + L \right) \right], \quad a_{32} = \cos \left[k \left(\frac{h}{2} + L \right) \right],$$

$$a_{33} = 0, \quad a_{34} = -\exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right],$$

$$a_{41} = \frac{k}{m_w} \cos \left[k \left(\frac{h}{2} + L \right) \right], \quad a_{42} = -\frac{k}{m_w} \text{sen} \left[k \left(\frac{h}{2} + L \right) \right],$$

$$a_{43} = 0 \quad \text{e} \quad a_{44} = \frac{\kappa}{m_b} \exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right]$$

A solução para o determinante acima pode ser dada, por exemplo, pela seguinte expressão:

$$\det M = (-1)^{3+1} \times \left[\exp \left(\kappa \frac{h}{2} \right) \pm \exp \left(-\kappa \frac{h}{2} \right) \right] \times \det N \quad (18)$$

$$+ (-1)^{2+3} \times \left(-\frac{\kappa}{m_b} \right) \times \left[\exp \left(\kappa \frac{h}{2} \right) \mp \exp \left(-\kappa \frac{h}{2} \right) \right] \times$$

$$\det O + (-1)^{3+3} \times 0 \times \det P + (-1)^{4+3} \times 0 \times \det Q = 0$$

onde:

$$\det N = \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} ; \quad \det O = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{14} \\ a_{31} & a_{32} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} ; \quad (19)$$

$$\det P = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} ; \quad \det Q = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{34} \end{vmatrix}$$

Os determinantes P e Q não precisam ser calculados, visto que estão multiplicados por zero (equação (18)). Os determinantes N e O são de ordem 3 e, portanto, podem ser facilmente obtidos pelo método de Sarrus.

Para o determinante N:

$$\det N = \exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] \times$$

$$\left[\left(\frac{k}{m_w} \frac{\kappa}{m_b} \right) \cos(kL) - \left(\frac{k}{m_w} \right)^2 \text{sen}(kL) \right] \quad (20)$$

Para o determinante O:

$$\det O = -\exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] \times$$

$$\left[\frac{\kappa}{m_b} \text{sen}(kL) + \left(\frac{k}{m_w} \right) \cos(kL) \right] \quad (21)$$

Substituindo (20) e (21) em (18):

$$\det M = \left[\exp \left(\kappa \frac{h}{2} \right) \pm \exp \left(-\kappa \frac{h}{2} \right) \right] \times \exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] \times$$

$$\left[\left(\frac{k}{m_w} \frac{\kappa}{m_b} \right) \cos(kL) - \left(\frac{k}{m_w} \right)^2 \text{sen}(kL) \right] + (-1) \times \left(\frac{\kappa}{m_b} \right) \times \quad (22)$$

$$\left[\exp \left(\kappa \frac{h}{2} \right) \mp \exp \left(-\kappa \frac{h}{2} \right) \right] \times (-1) \times$$

$$\exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] \times \left[\frac{\kappa}{m_b} \text{sen}(kL) + \left(\frac{k}{m_w} \right) \cos(kL) \right] = 0$$

Dividindo (22) por

$$\exp \left[-\kappa \left(\frac{h}{2} + L \right) \right] \quad (23)$$

e agrupando os termos em $\cos(kL_w)$ e $\text{sen}(kL_w)$, tem-se:

$$\begin{aligned} & -\cos(kL) \left\{ \left(\frac{k}{m_w} \frac{\kappa}{m_b} \right) \left[\exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \pm \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] + \right. \\ & \quad \left. \left(\frac{k}{m_w} \frac{\kappa}{m_b} \right) \left[\exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \mp \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] \right\} \\ & + \text{sen}(kL) \left\{ \left(\frac{k}{m_w} \right)^2 \left[\exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \pm \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] - \right. \\ & \quad \left. \left(\frac{k}{m_w} \frac{\kappa}{m_b} \right) \left[\exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \mp \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

Neste ponto, deve-se escolher os sinais que levam as equações separadas para o estado com paridade *par* e para o estado com paridade *ímpar*. Para o estado com paridade *par*, deve-se escolher na equação (24) os sinais superiores (+), (-), (+) e (-), respectivamente, e dividindo a mesma por:

$$\left(\frac{k}{m_w} \frac{\kappa}{m_b} \right) \exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \quad (25)$$

têm-se que:

$$\begin{aligned} & \cos(kL) \left[2 \exp\left(\kappa \frac{h}{2}\right) \right] + \text{sen}(kL) \times \\ & \left\{ \left(\frac{k}{m_w} \frac{m_b}{\kappa} \right) \left[-1 - \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] - \right. \\ & \quad \left. \left(\frac{m_w}{k} \frac{\kappa}{m_b} \right) \left[-1 + \exp\left(-\kappa \frac{h}{2}\right) \right] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

Fazendo a mudança:

$$\xi = \frac{m_w}{k} \frac{\kappa}{m_b} \quad (27)$$

e substituindo em (27), após rearranjar os termos, tem-se que:

$$\begin{aligned} & 2 \cos kL + \left(\xi - \frac{1}{\xi} \right) \text{sen} kL - \\ & \quad \left(\xi + \frac{1}{\xi} \right) \text{sen} kL \exp(-\kappa h) = 0 \end{aligned} \quad (28)$$

Para obter a equação para os estados com paridade *ímpar*, escolhe-se, na equação (24), os

sinais inferiores (-), (+), (-) e (+), respectivamente, e procede-se da mesma forma como foi feito para os estados pares.

De posse das expressões para os estados com paridades pares e ímpares, pode-se escrever solução exata geral para os níveis de energia em um PQDA simétrico (equação (3)):

$$\begin{aligned} & 2 \cos kL + \left(\xi - \frac{1}{\xi} \right) \text{sen} kL \pm \\ & \quad \left(\xi + \frac{1}{\xi} \right) \text{sen} kL \exp(-\kappa h) = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

onde os sinais (+) e (-) referem-se aos estados com paridade *ímpar* e *par*, respectivamente.

A equação (29) foi obtida considerando-se a diferença entre as massas dos portadores nas regiões das barreiras e dos poços (equação (27)) e, portanto, pode ser aplicada para PQDAs de uma maneira geral.

Aplicação

Nesta seção serão apresentados alguns resultados experimentais e teóricos a fim de ilustrar a discussão sobre PQDAs e verificar a validade da equação (29).

Detalhes experimentais

Com o objetivo de comparar os resultados obtidos através da equação (29) com resultados experimentais, foram realizadas medidas de fotoluminescência (PL) à baixa temperatura (10 K) em duas amostras, crescidas pela técnica de MBE, cada uma contendo duas heteroestruturas formadas por poços de GaAs e barreiras de $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$: a amostra A contém um PQS de 80 Å e um PQDA com mini-poços de 40 Å e barreira central de 15 Å (PQDA15); a amostra B contém um PQDA com mini-poços e 40 Å e barreira central de 5 Å (PQDA5) e outro PQDA com mini-poços de 40 Å e barreira central de 30 Å (PQDA30).

O PQS serve de referência para a avaliação das mudanças ocorridas com a inclusão da barreira

central no poço e, também, com o aumento da espessura da mesma. Vale ressaltar que as barreiras centrais são constituídas do mesmo material que compõe as barreiras laterais, $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$.

As medidas de PL foram realizadas utilizando-se como fonte de excitação a linha 5145 Å de um laser de Ar^+ . Nessa técnica obtém-se uma medida direta da energia de recombinação entre os níveis fundamentais (primeiro nível de elétrons (n_1) e primeiro nível de buracos pesados (hh_1)) da amostra em análise. Um espectrômetro de rede (Jarrel Ash 600 1/mm) com distância focal de 0.5 m foi utilizado para a análise espectral da luminescência, a qual foi detectada por uma fotomultiplicadora de GaAs utilizando-se a técnica “lock-in” padrão. As medidas foram realizadas a 10 K, utilizando um criostato acoplado a um circuito fechado de He. A potência do laser utilizada para excitação da amostra foi de 2 mW, sendo o diâmetro do “spot” do feixe do laser de $\sim 260 \mu\text{m}$.

Resultados e discussão

A figura 5 mostra os espectros de PL para as quatro estruturas analisadas, obtidos a 10 K. Na figura 6 são mostradas as variações (experimentais) do pico de energia de PL (E_{PL}) e da largura de linha a meia altura (FWHM, do inglês: Full Width at Half Maximum) em função da espessura da barreira central.

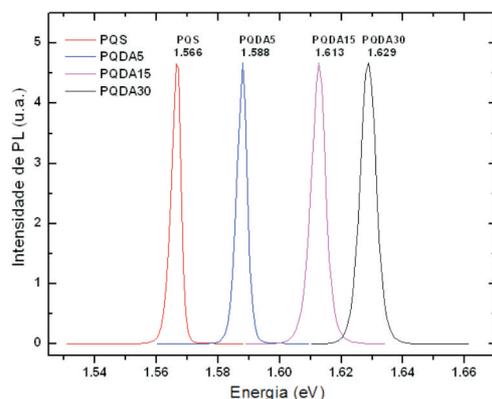


Figura 5. Espectros de PL para o PQS, PQDA5, PQDA15 e PQDA30, obtidos a 10 K. Os valores indicam a energia na qual ocorre o pico de PL.

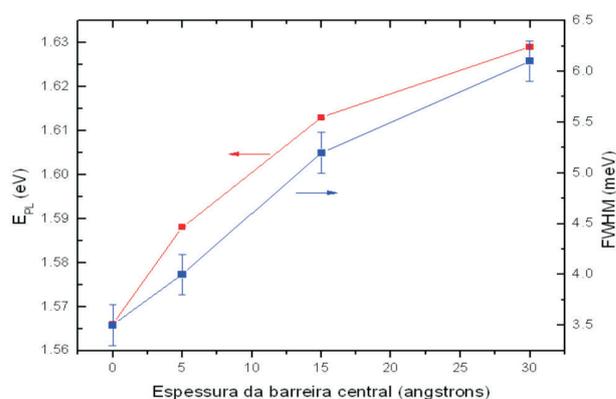


Figura 6. Energia do pico de PL (E_{PL}) e da largura de linha a meia altura (FWHM), em função da espessura da barreira central, relacionadas às escalas da esquerda e da direita, respectivamente (as barras de erro de E_{PL} são menores que os pontos utilizados na figura).

Como discutido anteriormente, com o aumento da espessura da barreira central ocorre uma redução na interação entre as funções de onda de cada mini-poço de um PQDA, resultando em um aumento na energia de recombinação n_1 - hh_1 . Nas figuras 5 e 6 é possível observar esse efeito: quanto maior a espessura da barreira central, maior a energia na qual se observa o pico de PL, sendo que para o PQS obtém-se o pico de menor valor em energia.

Na figura 7 são mostrados os resultados dos cálculos da energia dos níveis eletrônicos s_1 (simétrico) e a_1 (anti-simétrico) em função da espessura do “spike” (h), para um PQDA com mini-poços de 40 Å de espessura (L). Nessa figura, os valores de energia se referem ao “zero” de potencial no fundo do poço, como mostrado na figura 2c. Para $h = 0$ obtém-se uma condição onde os níveis de energia estão bastante separados e se referem ao primeiro e segundo níveis eletrônicos de um PQS isolado de 80 Å. Com o aumento da espessura da barreira central esses níveis aproximam-se até o ponto onde a espessura da barreira central é suficientemente grande ($\sim 100 \text{ Å}$) para que não haja, praticamente, efeito de tunelamento através da mesma, ocasionando o isolamento dos mini-poços. Nesse caso, os níveis eletrônicos s_1 e a_1 do PQDA se degeneram e formam o primeiro nível eletrônico de um PQS de 40 Å.

Em materiais semicondutores, especialmente a baixas temperaturas, o elétron (excitado na BC) e o buraco (remanescente na BV) podem se ligar e, devido à força de atração coulombiana, formar um estado ligado, chamado de éxciton. Pode-se entender o éxciton como um átomo composto por uma carga positiva, fornecida pelo buraco e uma carga negativa, fornecida pelo elétron. A energia de ligação coulombiana entre essas duas cargas no caso do GaAs “bulk”, por exemplo, é da ordem de 5 meV. Recombinações ópticas originadas a partir de estados excitônicos são observadas, portanto, alguns meVs abaixo das recombinações pares dos elétron-buraco não interagentes (recombinações BC→BV). Em estruturas como os poços quânticos, que confinam elétrons e buracos em uma determinada região espacial, há um aumento da interação coulombiana entre as cargas, de tal modo que o raio do éxciton diminui e a energia de ligação aumenta.

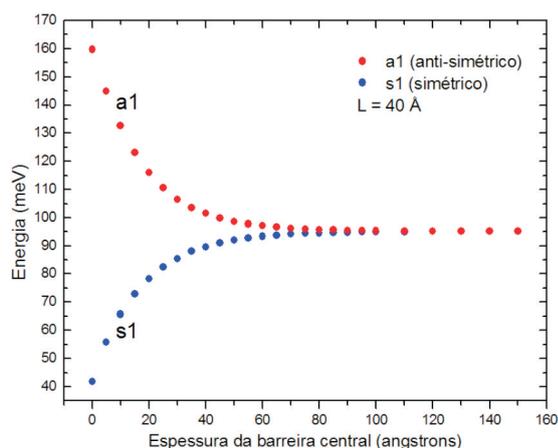


Figura 7. Energia dos níveis eletrônicos s1 (simétrico) e a1 (anti-simétrico) em função da espessura da barreira central (h) para um PQDA com mini-poços de 40 Å. A escala de energia refere-se aos valores dos níveis de energia considerados a partir do zero de potencial no fundo do poço.

Cálculos teóricos² mostraram que, para nossas estruturas, a energia de ligação excitônica varia

² Para o cálculo da energia de ligação excitônica teórica de cada sistema foi utilizado o método MLC (MATHIEU et al., 1992), que se baseia na ideia de espaço dimensional fracionário, juntamente com aproximação proposta por Zhao et al. (1994), que estende o método MLC para sua aplicação em sistemas de PQDAs.

entre aproximadamente 10 meV (para o PQS) e 11 meV (para o PQDA30). Como essa energia não é considerada na equação (29), ela deve ser descontada dos valores teóricos obtidos através desta equação para que os mesmos possam ser comparados com os resultados experimentais de maneira adequada.

Na Tabela 1 são mostrados os valores experimentais e teóricos para a energia de recombinação n_1 -hh₁ dos quatro PQDAs analisados. Os valores experimentais foram obtidos através de medidas de PL a baixas temperaturas, enquanto que os valores teóricos foram obtidos através da equação (29), já descontando a energia de ligação excitônica calculada para cada estrutura.

Tabela 1 – Valores experimentais e teóricos obtidos para a energia de recombinação n_1 -hh₁ dos quatro PQDAs.

Resultado (meV)	PQS	PQDA 5	PQDA 15	PQDA 30
Exp.	1.566	1.588	1.613	1.629
Teor.	1.562	1.584	1.607	1.622

Observa-se, a partir da Tabela 1, que a energia obtida teoricamente é, em todos os casos, alguns meV inferior ao valor encontrado experimentalmente. Entretanto, os valores apresentam uma concordância muito boa entre si, levando-se em consideração as incertezas com relação às medidas, aos parâmetros utilizados nos cálculos (os valores dos parâmetros utilizados nos cálculos realizados nesse trabalho foram obtidos a partir do trabalho de Zhao et al. (1994)) e, principalmente, às dimensões nominais dos poços e barreiras centrais, que comumente diferem das dimensões reais (especialmente em amostras produzidas através de técnicas epitaxiais). Além disso, o aumento sistemático na diferença entre os valores experimentais e teóricos, observado quando se aumenta a espessura da barreira central (4 meV para o PQS até 7 meV para o PQDA30), demonstra o fato de que a equação (29) deixa de fornecer bons resultados para barreiras centrais relativamente espessas.

A largura de linha à meia altura (FWHM) dos picos de emissão também aumenta com o aumento da espessura da barreira central, sendo de 3.5 meV para o PQS e 6.1 meV para o PQDA30, como pode ser observado na figura 6. Este aumento na FWHM do pico de PL está relacionado à intensificação dos efeitos relacionados às flutuações no potencial de confinamento com o aumento na espessura da barreira central (LOPES et al., 2010; POÇAS et al., 2006). Essas flutuações de potencial surgem devido às variações aleatórias na espessura dos mini-poços (rugosidades de interface) e/ou na composição química da liga (desordem composicional) que constitui as barreiras laterais e central, as quais perturbam os níveis de energia. Aumentando-se a espessura da barreira central, dois fatores importantes devem ser considerados:

i) o aumento da interação das funções de onda dos portadores com as barreiras laterais e com a própria barreira central, as quais são constituídas pelo ternário AlGaAs e são fontes de desordem composicional devido à variação na composição de Al. Nesse aspecto, quanto maior a espessura da barreira central, maior a flutuação nos níveis de energia da estrutura e, portanto, maior a FWHM;

ii) além disso, um PQDA pode ser aproximado, em alguns casos, por um PQS de largura efetiva reduzida (ZHAO et al., 1994), sendo que quanto maior a espessura da barreira central menor a largura efetiva do PQS equivalente. Em poços mais estreitos há uma maior contribuição dos efeitos das rugosidades de interface para as flutuações de potencial (LOPES et al., 2010; POÇAS et al., 2006), o que também contribui para que a FWHM aumente à medida que a barreira central se torna mais espessa.

Conclusão

Neste trabalho foram apresentadas algumas propriedades básicas dos poços quânticos duplos acoplados, os quais são estruturas de grande interesse para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos. A equação que fornece

a solução exata para os níveis de energia de elétrons e de buracos em um PQDA foi obtida em detalhes. Medidas experimentais de fotoluminescência são mostradas a fim de se discutir a dependência da energia de emissão e da largura de linha de PL em função da espessura “spike”. Resultados teóricos e experimentais obtidos para a energia de emissão dos PQDAs são comparados, comprovando a validade da teoria.

Referências

- BASTARD, G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Les Ulis: Les Editions de Physique, 1988.
- BUTOV, L. V.; GOSSARD, A. C.; CHEMLA, D. B. Macroscopically ordered state in an exciton system. *Nature*, London, v. 418, p. 751-754, 2002.
- BUTOV, L. V.; IVANOV, A. L.; IMAMOGLU, A.; LITTLEWOOD, P. B.; SHASHKIN, A. A.; DOLGOPOLOV, V. T.; CAMPMAN, K. L.; GOSSARD, A. C. Stimulated scattering of indirect excitons in coupled quantum wells: signature of a degenerate Bose-gas of excitons. *Physical Review Letters*, New York, v. 86, n. 24, p. 5608-5611, 2001.
- DREMIN, A. A.; TIMOFEEV, V. B.; LARIONOV, A. V.; HVAN, J.; SOERENSEN, K. Phase diagram of the Bose condensation of interwell excitons in GaAs/AlGaAs double quantum wells. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, Moscow, v. 76, n. 7, p. 450-455, 2002.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
- GAZIOROWICZ, S. *Física quântica*. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1979.
- GRISH, X. G. P. *Terahertz plasmon modes in grating coupled double quantum well field effect transistors*. 2002. Tese (Doutorado em Física) – University of California, Santa Barbara.
- JÄNES, P.; HOLMSTRÖM, P.; EKENBERG, U. A high-speed intersubband modulator based on quantum interference in double quantum wells. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, New York, v. 38, n. 2, p. 178-184, 2002.
- KAMIZATO, T.; MATSUURA, M. Excitons in double quantum wells. *Physical Review B*, New York, v. 40, n. 12, p. 8378-8384, 1989.

- KIM, T. W.; LEE, D. U. Enhancement of the intersubband Stark effect in strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ asymmetric coupled double quantum wells. *Applied Surface Science*, Amsterdam, v. 153, p. 96-101, 2000.
- LARIONOV, A. V.; BISTI, V. E.; BAYER, M.; HVAN, J.; SOERENSEN, K. Coherent spin dynamics of an interwell excitonic gas in GaAs/AlGaAs coupled quantum wells. *Physical Review B*, New York, v. 73, n. 23, p. 1-6, 2006.
- LARIONOV, A. V.; TIMOFEEV, V. B. Condensation of interwell excitons in GaAs/AlGaAs double quantum wells. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, Moscow, v. 73, n. 6, p. 301-308, 2001.
- LARIONOV, A. V.; TIMOFEEV, V. B.; NI, P. A.; DUBONOS, S. V.; HVAN, J.; SOERENSEN, K. Bose condensation of interwell excitons in double quantum wells. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, Moscow, v. 75, n. 11, p. 570-574, 2002.
- LOPES, E. M.; DUARTE, J. L.; POÇAS, L. C.; DIAS, I. F. L.; LAURETO, E.; QUIVY, A. A.; LAMAS, T. E. Exciton behavior in GaAs/AlGaAs coupled double quantum wells with interface disorder. *Journal of Luminescence*, Amsterdam, v. 130, p. 460-465, 2010.
- LOURENÇO, S. A.; DIAS, I. F. L.; LAURETO, E.; DUARTE, J. L.; TOUGINHO FILHO, D. O.; MENESES, E. A.; LEITE, J. R. Influence of Al content on temperature dependence of excitonic transitions in quantum wells. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 21, p. 11-17, 2001a.
- LOURENÇO, S. A.; DIAS, I. F. L.; DUARTE, J. L.; LAURETO, E.; MENESES, E. A.; LEITE, J. R.; MAZARO, I. Temperature dependence of optical transitions in AlGaAs. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 89, p. 6159-6164, 2001b.
- MATHIEU, M.; LEFEBVRE, P.; CHRISTOL, P. Simple analytical method for calculating exciton binding energies in semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, New York, v. 46, p. 4092-4101, 1992.
- MIURA, M.; KATAYAMA, S. Electric-field effects on intersubband Raman laser gain in modulation-doped GaAs/AlGaAs coupled double quantum wells. *Science and Technology of Advanced Materials*, Tsukuba, v. 7, p. 286-289, 2006.
- PERALTA, X. G.; ALLEN, S. J.; WANKE, M. C.; HARFF, N. E.; SIMMONS, J. A.; LILLY, M. P.; RENO, J. L.; BURKE, P. J.; EISENSTEIN, J. P. Terahertz photoconductivity and plasmon modes in double-quantum-well field-effect transistors. *Applied Physics Letters*, New York, v. 81, n. 9, p. 1627-1629, 2002.
- POÇAS, L. C.; DUARTE, J. L.; LOPES, E. L.; DIAS, I. F. L.; LAURETO, E.; CÉSAR, D. F.; HARMAND, J. C. The effect of potential fluctuations on the optical properties of InGaAs/InGaAlAs single and coupled double quantum wells. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 100, p. 053519-1, 2006.
- RIOS, C. L. B.; PORRAS-MONTENEGRO, N. Pressure and magnetic field effects on the binding energy of excitonic states in single and coupled GaAs-AlGaAs quantum wells. *Microelectronics Journal*, London, v. 36, p. 369-373, 2005.
- RISTIC, S.; JAEGER, N. A. F. Push-pull polarization conversion using novel asymmetric coupled quantum-well structures. *IEEE Photonics Technology Letters*, New York, v. 18, n. 2, p. 316-318, 2006.
- RYCZKO, K.; SEK, G.; MISIEWICZ, J. Exciton binding energy in a double quantum well: effect of the barrier shift. *Superlattices and Microstructures*, London, v. 32, n. 1, p. 73-77, 2002.
- SAHU, T. Intersubband-coupling and screening effects on the electron subband mobility in a GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ delta-doped double quantum well system. *Journal of Applied Physics*, New York, v. 96, n. 10, p. 5576-5581, 2004.
- SNOKE, D. Spontaneous bose coherence of excitons and polaritons. *Science*, Washington, v. 298, p. 1368-1372, 2002.
- SNOKE, D.; DENEV, S.; LIU, Y.; PFEIFFER, L.; WEST, K. Long-range transport in excitonic dark states in coupled quantum wells. *Nature*, London, v. 418, p. 754-757, 2002.
- VALADARES, E. C.; MOREIRA, M. B. V.; BEZERRA, J. C.; DIAS, I. F. L. Super-redes – harmonia das bandas cristalinas. *Ciência Hoje*, São Paulo, v. 6, n. 35, p. 45-52, 1987.
- WEI-HUAI, X.; JIN-HUI, W.; JIN-YUE, G. Gain spectrum in asymmetric double quantum well. *Chinese Physics Letters*, Beijing, v. 22, n. 3, p. 599-602, 2005.
- YOSHIDA, H.; SIMOYAMA, T.; GOPAL, V. A.; KASAI, J.; MOZUME, T.; ISHIKAWA, H. Ultrafast all-optical switching and modulation using intersubband transitions in coupled quantum well structures. *IEICE Transactions on Electronics*, Tokio, n. 7, p. 1134-1141, 2004.
- ZHAO, Q. X.; MONEMAR, B.; HOLTZ, P. O.; WILLANDER, M.; FIMLAND, O.; JOHANNESSEN, K. Binding energies and diamagnetic shifts for free excitons in symmetric coupled double quantum wells. *Physical Review B*, New York, v. 50, n. 7, p. 4476-4481, 1994.

Recebido em 10 Fevereiro, 2010 – Received on February 10, 2010.
Aceito em 25 Outubro, 2010 – Accepted on October 25, 2010.