



https://eventos.utfpr.edu.br//sicite/sicite2020

Caracterização experimental e modelagem teórica das propriedades ópticas de nanoestruturas semicondutoras

Experimental characterization and theoretical modelling of the optical properties of semiconductor nanostructures

RESUMO

No presente trabalho utilizamos parâmetros conhecidos de um poço quântico de GaAs com barreiras de AlGaAs para simular os níveis de energia, funções de onda e densidade de probabilidade, através de uma solução numérica da Equação de Schrödinger independente do tempo para um poço finito. A partir dos resultados da simulação foi possível calcular a energia de transição elétron-buraco entre o nível fundamental e os primeiros níveis excitados do poço. Com os resultados da interação elétron-buraco para os diferentes níveis energéticos do poço, foi possível confrontá-los com um espectro de fotoluminescência da amostra obtido à 8K e potência de 6 μ W, com o objetivo de identificar se o pico principal do espectro tem origem na transição do nível fundamental, primeiro nível excitado ou segundo nível excitado do poço.

PALAVRAS-CHAVE: Poço Quântico. Fotoluminescência. Modelagem.

ABSTRACT

In the present work, we used known parameters of a GaAs quantum well with AlGaAs barriers to simulate energy levels, wave functions and probability density, using a numerical solution of the time-independent Schrödinger equation for a finite quantum well. From the results of the simulation, it was possible to calculate the electron-hole transition energy between the fundamental level and the first excited levels of the well. With the results of the electron-hole interaction for the different energy levels of the well, it was possible to compare them with sample's photoluminescence spectrum obtained at 8K and power of 6 μ W, in order to identify whether the main peak of the photoluminescence spectrum is related to the transition from the fundamental level, the first excited level or the second excited level of the well.

KEYWORDS: Quantum Well. Photoluminescence. Modelling.





Página | 1

João Vitor de Souza Paz <u>i.vitor-quimica@outlook.com</u> Universidade Tecnológica Federal

do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil.

Leonardo Dias de Souza leonardod@utfpr.edu.br Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil.

Jesus Maria Herazo Warnes jesuswarnes @utfpr.edu.br Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil.

Recebido: 19 ago. 2020. **Aprovado:** 01 out. 2020.

Direito autoral: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.







INTRODUÇÃO

Nos dias atuais o estudo dos materiais semicondutores tem grande importância para o avanço da eletrônica e microeletrônica (DIAS, 1991). Os semicondutores podem ser construídos através de diferentes estruturas e combinações de ligas, podendo formar estruturas binárias, ternárias e até mesmo quartanárias (DIAS, 1991). Uma dessas estruturas é a estrutura de poço quântico, onde se tem um elétron confinado entre barreiras de potencial finitas ou infinitas. A construção desse sistema consiste em um material com um determinado *gap* entre duas camadas de outro material com um *gap* maior (MORAIS, 2009).

Conforme as características do poço como largura, potencial e material os poços quânticos apresentam níveis de energia diferentes, assim podendo obterse diferentes *gaps* para diferentes sistemas. O *gap* do material é de grande importância para determinar sua aplicabilidade, como por exemplo, com um *gap* de 0,953 *eV* e 0,799 *eV* (comprimento de onda de 1,3 e 1,55 μ m respectivamente) o material pode ser utilizado na construção de *laser* para transmissão de dados por fibra ótica.

Utilizando parâmetros da amostra é possível realizar uma modelagem teórica dos níveis de energia contidos na estrutura semicondutora, a fim de prever teoricamente o comportamento energético da mesma. Para realizar a simulação dos níveis de energia de um poço quântico finito é necessário resolver a Equação de Schrödinger, assim obtendo duas soluções que são utilizadas para obter de forma numérica os níveis de energia do poço.

A amostra estudada no presente trabalho trata-se de uma estrutura semicondutora de tipo poço finito feita de GaAs com barreiras de AlGaAs. Com as informações da amostra foi possível realizar a simulação dos níveis de energia possibilitando o cálculo teórico da energia de *gap* e com isso feito a análise do espectro de fotoluminescência da mesma.

MATERIAL E MÉTODOS

AMOSTRA

A amostra analisada neste trabalho foi crescida através da técnica de MBE (Molecular Beam Epitaxy), sobre um substrato semi-isolante de GaAs (001) seguido por uma camada buffer de 1 μ m de GaAs. Na sequência foi crescido uma super-rede com 30 repetições de [Al_{0,18}Ga_{0,82}As/GaAs (50 Å)], uma camada de 20 Å de AlAs e duas barreiras de 500 Å de espessura de Al_{0,18}Ga_{0,82}As confinando uma camada de GaAs de 150 Å. Uma camada final de AlAs de 20 Å e uma Cap Layer de GaAs com 50 Å fecha a estrutura. A amostra é um poço finito que é bem modelado pela mecânica quântica conforme o descrito a seguir.





MODELAGEM

Bem tradicionais na mecânica quântica os poços de potencias são problemas amplamente utilizados, pois podem ter suas construções modeladas de várias formas e com várias aplicações tanto do ponto de vista acadêmico quanto em aplicações tecnológicas.

O poço finito é um sistema quântico onde temos uma partícula confinada em um potencial (força atrativa exercida sobre a partícula) finito, em que o poço apresenta a característica de ser quadrado (EISBERG; RESNICK, 1994). Ao explorar esse problema bastante conhecido da mecânica quântica, podemos observar e modelar fenômenos muito interessantes como, por exemplo: a discretização e a quantização de energia do poço. Semicondutores podem ser utilizados para produzir estruturas com potencial tipo poço quântico (FILHO; ALEXANDRINO; CABRAL, 2018).

O ponto de partida para determinar os níveis de energia quantizados do problema de poço finito é a equação de Schrödinger, para o nosso caso a mesma será unidimensional e independente do tempo (FILHO; ALEXANDRINO; CABRAL, 2018).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x),$$
(1)

$$V(x) = \begin{cases} V_0, x < -L/2 \text{ ou } x > L/2 \\ 0, -L/2 < x < L/2 \end{cases}$$
(2)

A partir da equação (1) com um potencial descrito pela equação (2), é possível obter duas soluções para Equação de Schrödinger:

$$\sqrt{\frac{\mathrm{m}^{*}\mathrm{E}\mathrm{L}^{2}}{2\hbar^{2}}} \operatorname{Tan}\left(\sqrt{\frac{\mathrm{m}^{*}\mathrm{E}\mathrm{L}^{2}}{2\hbar^{2}}}\right) = \sqrt{\frac{\mathrm{m}^{*}(\mathrm{V}_{0}-\mathrm{E})\mathrm{L}^{2}}{2\hbar^{2}}},$$
(3)

$$-\sqrt{\frac{m^* E L^2}{2\hbar^2}} \operatorname{Cot}\left(\sqrt{\frac{m^* E L^2}{2\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{m^* V_0 L^2}{2\hbar^2} - \frac{m^* E L^2}{2\hbar^2}},$$
(4)

A solução referente aos níveis de energia fundamental e pares é dada pela equação (3) e a outra solução para os níveis de energia impar é dada pela equação (4) (EISBERG; RESNICK, 1994). Tais níveis de energia serão utilizados posteriormente para o cálculo do *gap* teórico da amostra.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na figura (1) apresentamos o espectro de fotoluminescência (PL) obtido a temperatura de 8 K e potência de 6 μW . Podemos notar a presença de um pico de maior intensidade luminosa, denominado pico principal.

O pico principal apresentado na figura (1) é a representação da energia de *gap* de um poço quântico de GaAs com barreiras de $AI_{0,18}Ga_{0,82}As$.

Os *gaps* dos materiais que compões o poço são possíveis de calcular através de equações com dependência da temperatura (BLAKEMORE, 1982).

$$E_{g}(T) = 1,519 - \frac{5,405 \cdot 10^{-4} T^{2}}{(T+204)} (eV),$$
(5)





$$E_g(T) = 1,519 + 1,155x + 0.37x^2 - \frac{5,41.10^{-4} \text{ T}^2}{(T+204)}$$
 (eV), (6)

Figura 1 – Espectro de fotoluminescência à temperatura de 8 K.



Fonte: Autoria própria (2020).

A equação (5) é utilizada para calcular o gap do GaAs, enquanto para o cálculo do qap do Al_xGa_{1-x}As utilizamos a equação (6). Nestas equações T é a temperatura do material e o parâmetro x na equação (6) é a concentração de Al (alumínio) na liga ternária Al_xGa_{1-x}As. Utilizando a equação (5) com uma temperatura de 8 K a energia de gap do GaAs é 1,51884 eV e utilizando a equação (6), com a mesma temperatura e concentração de 18% de alumínio (x =0,18) a energia de *gap* para o Al_{0.18}Ga_{0.82}As é 1,73872 *eV*.

Para poder obter teoricamente os valores dos níveis de energia do poco quântico (níveis de energia pares), foi utilizada a equação (3) resolvendo-a de forma numérica, onde m^* é a massa efetiva do elétron (0,067 m_0), L a largura do poço quântico, \hbar é a constante de Planck dividido por 2π , V_0 a intensidade do potencial do poço quântico e E o nível de energia. Devido aos valores extremamente pequenos da constante de Planck, largura do poço e da intensidade do potencial é necessário reescrever estes parâmetros em termos de outras grandezas conhecidas, de modo a facilitar os cálculos numéricos. Assim a largura do poço foi reescrita em termos do raio do átomo de hidrogênio (a_0 = 0,53 Å), a constante de Planck dividida por 2π foi normalizada (\hbar =1), os offsets das bandas de valência e de condução que são equivalentes ao potencial do poço quântico foram convertidos em função da energia do átomo de Hidrogênio (ε_0 = 27,2 eV, é duas vezes a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio) e a massa do elétron também é unitária ($m_0 = 1$).

Para a determinação dos níveis de energia na banda de condução e de valência foram utilizados os parâmetros da tabela (1).

Parâmetros	Valores para banda de condução	Valores para banda de valência
L	283,01886 a ₀	283,01886 a ₀
V	0,695882 . $10^{-3}~arepsilon_0$	1,125 . 10^{-3} ϵ_0
m^{*}	0,067 m _o	0,053 <i>m</i> ₀

Tabela 1 – Parâmetros para determinar os níveis de energia

Fonte: Autoria própria (2020).





Usando os parâmetros anteriores nas equações (9) e (10) foi possível obter os resultados apresentados na tabela 2.

TILO 1/1 1/1	/ • • • •	
Tabela 2 – Valores feoricos r	para os niveis de energia do	noco e para banda de valencia
		poço e para banda de falencia.

Nível	Ε(ε ₀)	E(eV)
1° nível do poço (E ₀)	0,000603	0,016401
2° nível do poço (E ₁)	0,002365	0,064330
3° nível do poço (E ₂)	0,005072	0,137960
Nível da Banda de Valencia (E _{hh})	0,000079	0,002170

Fonte: Autoria própria (2020).

A partir dos níveis de energia demonstrados na tabela (2) juntamente com a energia de *gap* do GaAs, é possível determinar o valor teórico para a energia de recombinação elétron-buraco para o nível fundamental e os níveis excitados do poço através da equação (7).

$$E_{g(en)} = E_n + E_{hh} + E_{g(GaAs)}$$
(7)

$$E_{g(e0)} = 0,016401 \text{ eV} + 0,0021698 \text{ eV} + 1,51884 \text{ eV} = 1,53741 \text{ eV}$$

$$E_{g(e1)} = 0,064330 \text{ eV} + 0,0021698 \text{ eV} + 1,51884 \text{ eV} = 1,58534 \text{ eV}$$

$$E_{g(e2)} = 0,13796 \text{ eV} + 0,0021698 \text{ eV} + 1,51884 \text{ eV} = 1,65897 \text{ eV}$$

A partir do espectro de fotoluminescência apresentado na figura (1) é possível obter a energia do pico principal que é de 1,5322 *eV*. Ao compararmos com o valor teórico de 1,53741 *eV* temos uma boa concordância entre o valor teórico e experimental, de maneira que a diferença mínima apresentada entre os dois resultados pode ser devida á sensibilidade do equipamento ou flutuações na própria amostra, essas flutuações representam um erro relativo de 0,34%. No regime de potência trabalhado (6 μ W) não foi possível observar ás transições elétron-buraco para o primeiro e segundo nível excitado.

Utilizando os parâmetros experimentais foi possível obter numericamente as funções de onda ilustradas na figura (2.a). Na figura estão representados os níveis pares e impares. A partir das funções de onda ao quadrado é possível obter a densidade de probabilidade para os níveis energéticos, mostrados na figura (2.b).



Figura 2 – (a) Funções de onda para os três níveis de energia contidos no poço (b) Funções de densidade de probabilidade para os três níveis do poço.

Podemos ver pela figura (2.b) que o pico que representa o nível fundamental do poço (n=0) é maior em relação aos picos para os níveis excitados e isso





significa que a probabilidade de encontrar o elétron no seu estado fundamental é maior quando comparado aos estados excitados devido a menor quantidade energética que este demanda. Como a densidade de probabilidade para o nível fundamental é maior comparada aos demais níveis, significa que o pico principal apresentado na PL representa a recombinação elétron-buraco no nível fundamental do poço.

CONCLUSÕES

No presente trabalho realizou-se o cálculo teórico dos níveis de energia de um poço de GaAs com barreiras de AlGaAs. Foram obtidos os valores teóricos das energias para transição elétron-buraco, possibilitando obter as funções de onda e as densidades de probabilidade. Comparando o valor de energia do pico principal do espectro PL da amostra com as possíveis transições calculadas foi possível identificar que o pico principal com energia de 1,5322 *eV* (valor experimental) representa a interação elétron-buraco do nível fundamental da banda de condução com energia de 1,53741 *eV* (valor teórico). Analisando as funções densidade de probabilidade, notamos que a curva que representa o nível fundamental é maior em comparação com os outros níveis, indicando que é mais provável o elétron estar no nível fundamental. Este resultado está de acordo com a interpretação de que o pico principal tem origem na transição do nível fundamental.

REFERÊNCIAS

BLAKEMORE, J. S. Semiconducting and other major properties of gallium arsened. **Journal of Applied Physics**. v. 53, May 1982.

DIAS, I. F. L. Novos materiais e estruturas semicondutoras. Semina, v. 12, n. 4, p.265-274, dez. 1991.

EISBERG,R.; RESNICK,R. Física **Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos Partículas**. 9. ed. Rio de Janeiro: Editora Campus,1994.

FILHO, G. M. R.; ALEXANDRINO, C. H.; CABRAL, S. C. O poço de potencial quântico infinito: um estudo usando o método de fatoração. **Revista Vozes dos Vales**: Publicações acadêmicas. n.14, out, 2018.

MORAIS, R. R. O. **Efeito de confinamento em poços quânticos de Al0,18Ga0,82As/GaAs**. Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Londrina. Londrina. 2009.