Trindade, R. D.; Osório, F.A.P. Ressonância de Ciclotron em poços quânticos de Nitreto de Gálio. In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG - CONPEEX, 2., 2005, Goiânia. **Anais eletrônicos do XIII Seminário de Iniciação Cientifica** [CD-ROM], Goiânia: UFG, 2005. n.p.

Ressonância De Cíclotron em Poços Quânticos de Nitreto de Gálio

Trindade, Ranyere Deyler[1]; **Osório**, Francisco Aparecido Pinto[2]

Palavras-chave: cíclotron; nitreto de gálio.

1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho queremos calcular a massa de ciclotron de elétrons presentes em estruturas de poços quânticos de GaN-AlGaN com alturas das barreiras de potenciais infinitas para o confinamento eletrônico na banda de condução. Nós levaremos em comparação em nossos cálculos os efeitos de interação elétron-fonon LO (Longitudinais ópticos) via teoria de perturbação IWBPT e a dimensão finita da camada eletrônica na direção de crescimento da amostra e de aplicação do campo magnético uniforme. Também incluiremos um estudo dos efeitos da variação da densidade eletrônica sobre a massa efetiva de ciclotron de elétrons confinados no poço quântico. Primeiramente modularemos nossos poços como sendo retangulares e faremos um estudo do efeito da forma geométrica sobre a massa de ciclotron.

2. METODOLOGIA

Os cálculos dos deslocamentos das energias dos níveis de Landau devido ao acoplamento elétron-fonon serão realizados utilizando-se a teoria de perturbação de Wigner-Brilhouin melhorada (IWBPT). A interação elétron-fonon LO será considerada dentro da teoria de Frolich para acoplamento fraco. A espessura finita da camada eletrônica será considerada através do cálculo de um fator de forma quase-bidimensional com a função de onda de um elétron confinado em um poço quântico.

Feitos os cálculos teóricos e encontradas as expressões das energias dos níveis de Landau, usaremos um programa Fortran para o cálculo da freqüência de ciclotron e da massa efetiva do elétron.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 – Hamiltoniana do Sistema

Vamos considerar uma heterojunção composta de GaN-AlGaN, na qual somente a subbanda mais baixa está populada pelos elétrons. A interface entre os dois materiais coincide com o plano $z=0$ e os elétrons estão confinados na região $z>0$ no lado do GaN. A Hamiltoniana de ume elétron interagindo com os fônons longitudinais ópticos (LO) do GaN na presença de um campo magnético B uniforme aplicado na direção perpendicular a interface (direção z), pode ser escrita na forma:

$$H=\frac{P_z^2}{2m_b}+\frac{P_x^2}{2m_b}+\frac{m_b\omega_c^2}{2}\left(x-K_y\ell^2\right)^2+V(z)+\sum_{\vec{Q}}\hbar\omega_{LO}b_{\vec{Q}}^{\dagger}b_{\vec{Q}}+\sum_{\vec{Q}}\left(V_{\vec{Q}}e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}}b_{\vec{Q}}+V_{\vec{Q}}^{*}e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}b_{\vec{Q}}^{\dagger}\right) \quad (3.1)$$

Onde:

$$K_y=\frac{P_y}{\hbar} \quad , \quad \ell^2=\left(\frac{\hbar c}{eB}\right) \quad \text{e} \quad \omega_c=\frac{eB}{m_b c}$$

$b_{\vec{Q}}^{\dagger}$ e $b_{\vec{Q}}$ são os operadores criação e destruição e

$$V_{\vec{Q}}=-\frac{i\hbar\omega_{LO}}{\left|\vec{Q}\right|\varepsilon(q)}\left[\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)\left(\frac{\hbar}{2m_b\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

Em (3.1), os quatro primeiros termos correspondem a hamiltoniana de uma partícula em três dimensões na presença de um campo magnético na dimensão z, e na presença de um potencial externo V(z); o quinto termo corresponde aos fônons e, por fim, o sexto termo trata-se da interação elétron fônon e é conhecido como o Hamiltoniano de Fröhlich.

3.2 – Ressonância de Ciclotron em um poço infinito de $Al_xGa_{1-x}N - GaN - Al_xGa_{1-x}N$

É fato que, a interação elétron-fonon LO (efeito polarônico), desloca a energia dos níveis de Landau pela quantidade ΔE_n, que no regime de acoplamento fraco ($\alpha < 1$) pode ser tratada através da teoria de perturbação de segunda ordem de Wigner-Brilluin melhorada (IWBPT). O deslocamento da energia ΔE_n, dos níveis de Landau $\varepsilon_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c$, onde $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ é a freqüência de ciclotron, pode ser escrito como:

$$\Delta E_n = -\alpha \int_0^\infty \frac{du\, e^{-\frac{u^2}{\lambda^2}}}{\varepsilon^2(u)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n_2!}{n_1!} \left[\frac{u^2}{\lambda^2}\right]^{n_1-n_2} \frac{F(u)\left\{L_{n_2}^{n_1}(\frac{u^2}{\lambda^2})\right\}^2}{1-\Delta n-(n-m)\lambda^2} \tag{3.3}$$

onde α é a constante adimensional de Fröhlich, $F(u)$ é o fator de forma escrito em unidades polarônicas e $L_{n_2}^{n_1}(\frac{u^2}{\lambda^2})$ é o polinômio associado de Laguerre também em unidades polarônicas.

O efeito polarônico desloca a freqüência de ciclotron do seu valor não perturbado ω_c pela quantidade $\Delta\omega$ dada pela equação:

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E_1 - \Delta E_0}{\hbar}(\hbar\omega_{LO}) \tag{3.4}$$

O deslocamento da freqüência de ciclotron pode ser entendido como uma variação da massa efetiva do polaron m^* como é descrita pela seguinte expressão depois de ajeitada:

$$m^* = m_b\left[1+\frac{\Delta E_{rc}}{\lambda^2}\right]^{-1} \tag{3.5}$$

onde:

$$\Delta E_{rc} = \Delta E_1 - \Delta E_0. \tag{3.6}$$

Introduzindo agora o potencial do poço infinito e em seguida calculando seu fator de forma temos:

$$\mathrm{V}(\mathrm{z}) = \begin{cases} \infty & |\mathrm{Z}| > \frac{\mathrm{L_z}}{2} \\ 0 & |\mathrm{Z}| < \frac{\mathrm{L_z}}{2} \end{cases} \tag{3.7}$$

E seu fator de forma:

$$\begin{aligned} F(q) = {}& \frac{2k_1^2 B_\infty}{q(q^2+4k_1^2)}\left[L_z + \frac{sen(k_1L_z)}{k_1}\right] + \frac{2qB_\infty}{q^2+4k_1^2}\left[\frac{3L_z}{8} + \frac{sen(k_1L_z)}{2k_1} + \frac{sen(2k_1L_z)}{16k_1}\right] + \\ & + \frac{2B_\infty A_1 e^{-q\frac{L_z}{2}}}{(q^2+4k_1^2)^2}\left[k_1 sen(k_1L_z) - \frac{2k_1^2}{q} - q\cos^2\left(\frac{k_1L_z}{2}\right)\right] \end{aligned} \tag{3.8}$$

onde:

$$B_\infty = \left(\frac{1}{2k_1}sen(k_1L_z) + \frac{L_z}{2}\right)^{-2} \tag{3.9}$$

e

$$A_1 = 2k_1 sen(k_1L_z)\cosh\left(q\frac{L_z}{2}\right) + senh\left(q\frac{L_z}{2}\right)\left(\frac{4k_1^2}{q} + 2q\cos^2\left(\frac{k_1L_z}{2}\right)\right), \tag{4.0}$$

Sendo q o vetor de onda dos fonons LO.

Usando um programa feito em fortran encontramos aquele que era o objetivo de nosso trabalho:

A figura (1) mostra o comportamento da função fator de forma em função do vetor de onda do polaron, para o poço de potencial infinito, para as duas massas ,que são valores obtidos experimentalmente para a massa de banda do elétron, $m_b = (0,22m_0)$ e $m_b = 0,223m_0$. Podemos observar que os valores diferentes para massa de banda praticamente não mudam o comportamento do fator de forma. Com a expressão do fator de forma podemos calcular o deslocamento da energia dos níveis da energia dos níveis de Landau e inferir o valor da massa efetiva de cíclotron neste sistema.

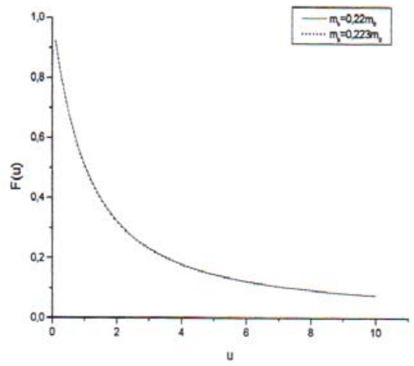
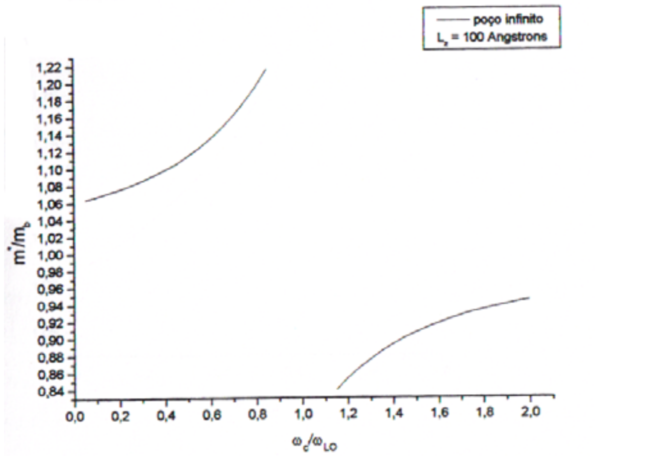


Figura 1 - Fator de forma em função do vetor de onda do polaron para um poço quântico com altura das barreiras de potenciais infinitas com largura de 100Å

A figura (2) mostra o comportamento da massa efetiva de cíclotron de elétrons confinados num poço infinito com largura de 100Å em termos da massa de banda.



A partir deste ponto, compararemos os sistemas: heterojunção composta de $GaNAl_xGa_{1-x}N$ e poço infinito com largura de 100Å composto de $Al_xGa_{1-x}N - GaN - Al_xGa_{1-x}N$. Constatamos que o valor da massa de ciclotron para o poço infinito é bem menor que para a heterojunção. O efeito do fator de forma para o poço quântico infinito é dmininuir o valor da massa efetiva dos elétrons que ele confina com relação à heterojunção.

4. CONCLUSÃO

calculamos a freqüência de ciclotron de elétrons confinados em um poço de potencial de barreiras infinitas de $Al_xGa_{1-x}N - GaN - Al_xGa_{1-x}N$ em função do campo magnético. Nossos cálculos foram feitos usando a teoria de perturbação de segunda ordem de Wigner-Brillouin melhorada (IWBPT) e inferimos o valor da massa de ciclotron calculando o deslocamento da energia

entre os níveis de Landau 0 e 1. Calculamos também a massa efetiva de cíclotron em função do campo magnético para elétrons confinados no poço infinito, para várias larguras do poço. Observamos que o valor da massa de ciclotron para o poço infinito é bem menor que para a heterojunção.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Osório, F.A.P. Dissertação de Mestrado, IFQSC, USP, 1988

[2] Oliveira S.S. Dissertação de Mestrado, IF, UFG, 2000

[3] Oliveira, S.S.; Souza, M.A.R.; Borges, A. N. e **Osório, F. A P**.- Brazilian Journal of Phys. 29, 4, 675 (1999)

[4] Osório, F. A P.; Efeitos Polarônicos em estruturas semicondutoras em uma e duas dimensões.

---

[1] Bolsista de iniciação científica. Instituto de Física – Grupo de Semicondutores, ranyere@gmail.com

[2] Orientador/Instituto de Física/UFG, fosorio@fis.ufg.br