

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**EFEITOS ELETRÔNICOS, ELÁSTICOS E ESTRUTURAIS EM
SISTEMAS SEMICONDUTORES NANOSCÓPICOS**

DANIEL FERREIRA CESAR

Tese Submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

ORIENTADOR: PROF. DR. VICTOR LÓPEZ-RICHARD

SÃO CARLOS, FEVEREIRO DE 2012

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

C421ee

Cesar, Daniel Ferreira.

Efeitos eletrônicos, elásticos e estruturais em sistemas semicondutores nanoscópicos / Daniel Ferreira Cesar. -- São Carlos : UFSCar, 2012.
133 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2012.

1. Física da matéria condensada. 2. Nanoestrutura - propriedades ópticas. 3. Semicondutores III-V. 4. Estrutura eletrônica. 5. Método k.p. I. Título.

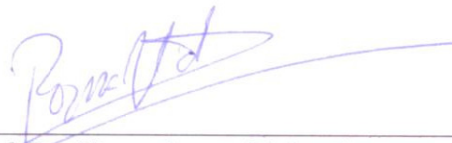
CDD: 530.41 (20^a)

DANIEL FERREIRA CESAR

Tese de Doutorado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da Universidade
Federal de São Carlos, como requisito
parcial para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Aprovado em 16 de fevereiro de 2012.

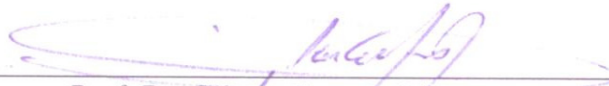
BANCA EXAMINADORA



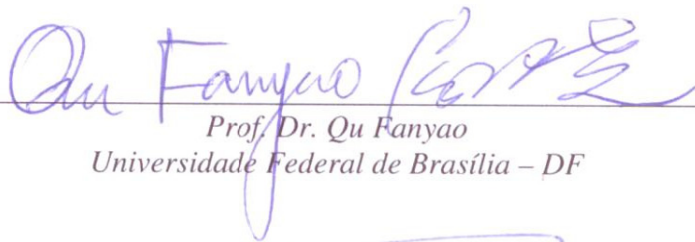
Prof. Dr. Victor Lopez Richard
Universidade Federal de São Carlos - DF



Prof. Dr. Carlos Luis Trallero Giner
Universidad de La Habana - DF



Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques
Universidade Federal de São Carlos - DF



Prof. Dr. Qu Fanyao
Universidade Federal de Brasília - DF



Prof. Dr. Paulo Sergio Pizani
Universidade Federal de São Carlos - DF

A quem for útil.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que de alguma forma colaboraram para que este trabalho pudesse ser realizado.

Ao professor Victor pela oportunidade de trabalho, amizade, paciência, valiosa orientação e discussões enriquecedoras, que certamente contribuíram muito para o meu aprendizado.

Ao professor Gilmar pela amizade, discussões dos trabalhos, correção da tese e por todo suporte que fornecido, sem o qual este trabalho não seria possível.

Aos colegas e amigos que fiz nestes quatro anos, pela boa convivência e discussões.

Aos amigos e colegas de sala, Márcio e Mariama, pela amizade e valiosas discussões.

Aos demais professores do grupo: Leonardo K. Castelano, Yara G. Gobato e Leonardo V. Lelovsky pelas discussões e aprendizado.

À minha família e meu Pai por tudo.

Além disso, cabe destacar que este trabalho só foi possível graças a uma rede de colaboradores, teóricos e experimentais, que foram fundamental importância para o desenvolvimento do mesmo.

Ao professor Carlos Trallero (Universidad de La Havana – UH) pela valiosa orientação na seção:

† Campo Magnético Perpendicular à direção de Quantização (Cap. 5.3).

Ao professor Euclides Marega Jr. (Instituto de Física de São Carlos – IFCS-USP) e equipe pela síntese das seguintes nanoestruturas:

† Poços quânticos crescidos ao longo das direções [001] e [113] (Cap.5-1).

† Pontos quânticos acoplados (Cap.7).

Ao professor Gregory Salamo (Arkansas University – UARK) e equipe pela caracterização das seguintes nanoestruturas:

† Poços quânticos crescidos ao longo das direções [001] e [113] (Cap.5-1).

† Pontos quânticos acoplados (Cap.7).

Ao professor Sidney A. Lourenço (Universidade Federal Tecnológica do Paraná – UFTPR) e equipe pela caracterização das seguintes nanoestruturas:

† Poços quânticos crescidos ao longo das direções [001] e [113] (Cap.5-1).

Ao professor José Pedro Rino (Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR) e equipe pelas simulações de dinâmica molecular:

† Poços quânticos crescidos ao longo das direções [001] e [113] (Cap.5-1).

† Fios quânticos *twin-planes* (Cap.6).

Aos professores Fernando Iikawa (Universidade de Campinas – UNICAMP) e Paulo Santos (Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik) e respectivas equipes pela síntese e caracterização da nanoestrutura:

† Poços quânticos crescidos ao longo das direções [110] (Cap.5-2).

Por fim, agradeço à CAPES pelo apoio financeiro e ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos pela oportunidade.

All in all, it's just another brick in the wall!

Resumo

Este trabalho visa o estudo das propriedades eletrônicas, elásticas e estruturais de toda uma classe de sistemas semicondutores denominada de nanoscópica, a qual abrange sistemas quase bidimensionais, unidimensionais e zero-dimensionais. Nos sistemas quase bidimensionais se investigou os efeitos que o *strain* e a temperatura provocam na estrutura eletrônica de poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo das direções cristalográficas [001] e [113]. A partir de espectros de fotoluminescência se obteve a dependência da diferença de energia entre os estados de buraco pesado e buraco leve em função da temperatura para as duas direções cristalográficas. Calculando a estrutura de bandas via método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ foi possível explicar fenomenologicamente os dados experimentais, e mostrar que a estrutura eletrônica do poço crescido ao longo da direção [113] é mais sensível aos efeitos da temperatura. Estudou-se também a resposta magnética de éxcitons neutros em poços quânticos simples de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo da direção cristalográfica [110]. Por meio da fotoluminescência com luz circularmente polarizada se obteve experimentalmente o desdobramento Zeeman e o grau de polarização circular (DCP). O cálculo da estrutura de bandas via $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ mostrou que neste sistema a banda de valência se mostra altamente sensível à hibridização dos estados de *spin*. Para simular a ocupação relativa destes estados hibridizados combinou-se um modelo dinâmico de taxas de relaxação de *spins* com cálculos de estrutura eletrônica. A partir dos resultados teóricos foi possível explicar de forma satisfatória o comportamento experimental tanto do desdobramento Zeeman quanto do DCP. Ainda nos sistema bidimensionais estudou-se também o efeito da aplicação do campo magnético perpendicular à direção de quantização na estrutura eletrônica de poços quânticos duplos acoplados de *AlGaAs/GaAs*. Como principal resultado se obteve a função envelope, necessária para um cálculo eficiente da estrutura eletrônica via $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ neste tipo de sistema. No estudo voltado para sistemas unidimensionais foram investigadas as propriedades estruturais de uma super-rede *twinning* em um nanofio de *InP*. O sistema foi simulado ao longo da direção [111] por dinâmica molecular, que forneceu, além da estrutura atômica do nanofio, os elementos do tensor de *stress* e as constantes elásticas a 0 K. A partir destes resultados obteve-se teoricamente os elementos do tensor de *strain* e o perfil de potencial gerado pelo campo de *strain*. Os cálculos mostraram que estes potenciais geram uma modulação na estrutura de bandas do nanofio, criando um perfil de potencial do tipo gerado por uma super-rede unidimensional. Por fim, em sistemas zero-dimensionais se estudou os efeitos dinâmicos detectados a partir da emissão resolvida no tempo de um *ensemble* de pontos quânticos

de *InAs*. Para explicar o comportamento experimental do tempo de decaimento óptico, em função da energia de emissão do sistema, foram feitos cálculos teóricos do tempo de decaimento levando-se em conta a interação elétron-fônon, por meio do Hamiltoniano de Fröhlich, e uma dinâmica de portadores, a qual inclui efeitos não lineares como o desbalanço de cargas. Os resultados mostraram que quando o sistema se apresenta como um *ensemble* os efeitos coletivos predominam, fazendo com que o sistema apresente propriedades diferenciadas com relação a um sistema de pontos quânticos isolados. Por meio dos cálculos teóricos foi possível explicar de maneira satisfatória os resultados experimentais.

Abstract

The present work aims the study of electronic, elastic and structural properties of a whole class of nanoscopic semiconductors systems, which include quasi-two-dimensional, one-dimensional and zero-dimensional confined systems. Within two-dimensional systems, the effects caused by strain and temperature on the electronic structure of *AlGaAs/GaAs* multiple quantum wells oriented along [001] and [113] crystallographic directions were studied. The energy difference between light- and heavy-hole states as a function of temperature, for both crystallographic directions, was obtained from photoluminescence spectra. Using $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ calculations, it was possible to phenomenologically explain experimental data and to show that electronic structure of quantum wells grown along [113] direction presents higher sensitivity to temperature variation. A second task in quasi-two-dimensional systems was the study of the magnetic response of neutral excitons in *AlGaAs/GaAs* simple quantum wells grown along [110] crystallographic direction. The Zeeman splitting and the degree of circular polarization (DCP) for the sample was extracted from circularly polarized photoluminescence spectra. Using $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ calculations, it was possible to show that the valence band presents a high hybridization of spin states in this kind of system. To simulate the relative occupation of hybridized states, a dynamic model for spin relaxation combined with electronic structure calculations was performed. Based on theoretical results, the experimental data of the Zeeman splitting and DCP were satisfactorily and phenomenologically explained. As the last task in quasi-two-dimensional systems, the effect of in-plane magnetic field in a *AlGaAs/GaAs* double quantum well system was studied. As the main result, the envelope functions required for an efficient $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ calculation in this kind of system was constructed. Concerning one-dimensional confined systems, structural properties of a twin-plane superlattice in *InP* nanowires were studied. The system was simulated along [111] crystallographic direction by molecular dynamics. The latter provided, besides nanowire atomic structure, stress tensor elements and elastic constants at $T = 0 K$. Giving the molecular dynamics results, it was possible to theoretically calculate strain tensor components and the potential profiles at the valence and conduction energy bands. The calculations showed how the strain potential profiles modulate the electronic band structure of the nanowire, generating a one-dimensional superlattice. Finally, within zero-dimensional confined systems, dynamic effects detected in the time-resolved emission from *InAs* quantum dots ensembles were studied. To explain the experimental behavior of the time decay as a function of quantum dots emission energy, the electron-phonon interaction, considering Fröhlich Hamiltonian model, and a

carrier dynamics, that takes in account nonlinear effects such as carrier imbalance, were included in theoretical calculations. The theoretical results show that, when the system behaves like an ensemble, collective effects predominate, and different relaxation processes stand out in the system, distinguishing it from that one of isolated quantum dots. By means of theoretical calculations it was possible to satisfactorily explain the experimental data.

SUMÁRIO

1. <i>Introdução</i>	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivos	3
1.3 Estruturação da Tese	5
2. <i>Estrutura Eletrônica de Sistemas Semicondutores Nanoscópicos</i>	10
2.1 Aspectos Qualitativos da Estrutura de Bandas	11
2.2 A Aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	12
2.3 Aproximação de Massa Efetiva: Modelo de uma Banda	16
2.4 Aproximação de Kane	17
2.5 O Hamiltoniano 4×4 de Luttinger	20
2.6 Aproximação de Função Envelope	21
3. <i>Estrutura Eletrônica de Sistemas Semicondutores Nanoscópicos Tensionados</i>	26
3.1 Propriedades Elásticas de Sistemas Cúbicos	27
3.2 Dependência Angular das Propriedades Elásticas	32
3.3 Potenciais de Deformação e o Hamiltoniano de <i>Strain</i>	34
4. <i>Excitações Elásticas Elementares: Fônons</i>	37
4.1 Fônons em Sistemas do tipo Blenda de Zinco	38
4.2 Fônon Ópticos Polares: Interação de Fröhlich	41
5. <i>Aplicação em Sistemas Quase-Bidimensionais: Poços Quânticos</i>	43
5.1 Poços Quânticos Tensionados	43
5.2 Estrutura Eletrônica com Campo Magnético Externo	56
5.3 Campo Magnético Perpendicular à Direção de Quantização	64

6. Aplicação em Sistemas Quase-Unidimensionais: Fios Quânticos	76
6.1 Estrutura Eletrônica para Sistemas com <i>Twin-Planes</i> Tensionados	76
6.2 Resultados e Discussão	79
7. Aplicação em Sistemas Quase Zero-dimensionais: Pontos Quânticos	87
8. Considerações Finais	110
Apêndice	113
A. Índices de Miller	114
B. O Tensor de Strain em Direção Cristalográfica Arbitrária	115
C. Hamiltoniano de Luttinger e Bir-Pikus em Direção Cristalográfica Arbitrária	119
D. Campo Magnético Orientado Perpendicularmente à Direção de Crescimento	123
E. Matriz Hamiltoniana de Luttinger na Presença do Campo Magnético	129

1. INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Quando sólidos são reduzidos a escalas nanométricas as interações de caráter fundamentalmente eletrostático, às quais estão submetidos os portadores de carga, são drasticamente afetadas. Como consequência os estados de energia se rearranjam em novas configurações, alterando assim as propriedades eletrônicas, ópticas e de transporte destes sistemas. Estes efeitos têm natureza quântica [1, 2], e o estudo e entendimento destas novas propriedades possibilitam tanto a compreensão microscópica da matéria condensada [3] quanto a utilização destas novas propriedades para aplicações tecnológicas [4, 5, 6, 7].

As propriedades exibidas por nanoestruturas semicondutoras são fortemente dependentes de elementos estruturais, os quais são definidos durante o processo de crescimento destes sistemas. Dentre estes elementos estruturais se destacam a geometria, as dimensões e a distribuição espacial dos sistemas nanoscópicos. Outro fator de grande importância é a direção de orientação do substrato sobre o qual estas nanoestruturas serão confeccionadas epitaxialmente. Essa importância advém dos efeitos anisotrópicos dos campos de *strain* que surgem nas interfaces. Além disso, os efeitos de anisotropia também são fortemente responsáveis por modificações na estrutura eletrônica destes sistemas [8, 9, 10, 11].

Quando, por exemplo, poços quânticos, que são sistemas que apresentam um regime de confinamento quase bidimensionais, são crescidos em planos não convencionais, algumas propriedades são profundamente alteradas [12, 13]. Em especial, poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* crescidos ao longo direção [113], quando comparados com amostras análogas crescidas ao longo da direção convencional [001], apresentam características singulares como, por exemplo, alta sensibilidade na resposta óptica devido ao *strain* e à temperatura [13]. Poços quânticos de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo da direção [110], e sujeitos a campos magnéticos aplicados paralelamente à direção de crescimento, tem como principal característica, quando comparados com sistemas crescidos ao longo da direção [001] [14], tempos de vida de *spins* relativamente longos. O grau de polarização circular de complexos excitônicos tem reve-

lado uma singular dinâmica de *spins* neste tipo de sistema, além de uma forte hibridização dos estados da banda de valência [15]. A compreensão detalhada destes mecanismos abre caminho tanto para o entendimento das interações da matéria a nível quântico como para potenciais aplicações tecnológicas na área da spintrônica [16].

Os nanofios semicondutores, por sua vez, que são sistemas que apresentam um regime de confinamento quase unidimensional, têm atraído muito interesse devido a suas potenciais aplicações como dispositivos optoeletrônicos [17]. E, assim como os poços quânticos, estas nanoestruturas também são altamente influenciados por sua direção de crescimento [18]. O alto grau de controle de sua geometria e, conseqüentemente, dos campos de *strain* [19, 20, 21, 22] possibilita a engenharia de bandas em nanofios com politipismo, os quais são formados de camadas alternadas de planos cristalizados nas formas *zinc-blend* e *wurtzita* [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]. Assim, novas descobertas relativas à síntese de nanofios abrem novas frentes de pesquisa teórica e, analogamente aos poços quânticos, a formação de interfaces e a modulação dos campos de *strain* criam condições para o surgimento de efeitos quânticos relevantes, e que serão explorados ao longo tese.

Da mesma forma que os poços quânticos e os nanofios, os pontos quânticos semicondutores, que são nanoestruturas que apresentam um regime de confinamento quase-zero dimensionais, possuem vasto potencial para aplicações tecnológicas [32, 6, 7]. Estas nanoestruturas representam a linha final no confinamento de portadores e, assim como átomos, possuem estados energéticos discretos. Esta forma peculiar dos estados energéticos é significativamente diferente daquelas provenientes de outros sistemas nanoscópicos com maior dimensionalidade, o que propicia aos portadores de carga propriedades diferenciadas, e não presentes em sistemas menos confinados. Neste contexto, a caracterização da emissão resolvida no tempo de pontos quânticos surge como uma ferramenta crucial no entendimentos de processos únicos sofridos por portadores em tais sistemas [33, 34, 35, 36]. Apesar da ampla gama de estudos que em sistemas de pontos quânticos, foram ressaltadas por nosso grupo questões fundamentais que permaneciam em aberto, tais como: por que sob certas condições há um aumento acentuado no tempo de decaimento radiativo [37]? Que mecanismos não lineares surgem a partir do desbalanço na ocupação de estados por elétrons e buracos, juntamente com acoplamentos eletrônicos, e quais efeitos teriam sobre os processos de recombinação [38, 39, 40]? Estas questões foram amplamente abordadas no trabalho, e procurou-se elucidá-las de maneira satisfatória.

Os sistemas nanoscópicos, construídos a partir de materiais semicondutores, mostram um

vasto potencial tanto do ponto de vista de aplicabilidade tecnológica como do ponto de vista da aquisição de conhecimentos fundamentais sobre a natureza quântica da matéria, constituindo uma rica fonte de motivação para pesquisa científica em todos os níveis, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Esta tese combina tanto o campo teórico como o experimental, sendo resultado de um trabalho em conjunto com colaboradores experimentais. Em alguns casos estes forneceram a motivação para a formulação do problema a ser resolvido e em outros a teoria serviu como elemento definidor da pauta experimental.

1.2 Objetivos

Diante das motivações apresentadas, este trabalho colocou como objetivo principal a investigação das propriedades eletrônicas, elásticas e estruturais em sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade. Várias configurações e combinações de sistemas foram estudados, visando a compreensão mais profunda de suas estruturas eletrônicas e das interações dos portadores confinados com campos externos e com aqueles de natureza intrínseca. Para tal, este trabalho abordou as seguintes linhas de estudo:

1. Efeitos do *strain* e da temperatura em poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo das direções cristalográficas [001] e [113].
2. Efeitos da hibridização do *spin* em complexos excitônicos neutros X^0 em poços simples de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo das direções cristalográficas [001] e [110].
3. Efeitos da aplicação de um campo magnético no plano em um sistema de poços quânticos duplos acoplados de *AlGaAs/GaAs*.
4. Efeitos estruturais e de *strain* em um nanofio *twin-plane* de *InP* na modulação da estrutura eletrônica.
5. Efeitos dos mecanismos de relaxação de portadores em um *ensemble* de pontos quânticos acoplados de *InAs*.
6. Desenvolvimento de ferramentas matemáticas para a análise dos sistemas nanoscópicos e suas propriedades eletrônicas, elásticas e estruturais.

O eixo conceitual central foi o desenvolvimento e adaptação, para cada nanoestrutura estudada, do método de cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de estrutura eletrônica e a aplicação de seus resultados para a

compreensão e elucidação de efeitos observados experimentalmente.

Os sistemas investigados são compostos de poços quânticos simples, duplos e múltiplos de *AlGaAs/GaAs*, fios quânticos de *InP* e pontos quânticos de *InAs*. Todos os sistemas foram construídos utilizando-se semicondutores da família *III-V*, cuja forma de se cristalizarem é a *zinc-blend*.

Dos problemas abordados nesta tese resultaram as seguintes publicações:

1. Cesar, D. F.; Teodoro, M. D.; Lopez-Richard, V.; Marques, G. E.; Marega Jr., E.; Dorogan, V. G.; Mazur, Yu. I.; Salamo, G. J. *Carrier transfer in the optical recombination of quantum dots*. **Physical Review B** **83**, 195307 (2011).
2. Tsuzuki, Helio; Cesar, D. F.; Rebello de Sousa Dias, Mariama; Castelano, Leonardo Kleber; Lopez-Richard, Victor; Rino, Jose Pedro; Marques, Gilmar Eugenio. *Tailoring Electronic Transparency of Twin-Plane 1D Superlattices*. **ACS Nano** **5**, 5519 (2011).
3. Castelano, Leonardo; Cesar, Daniel; Lopez-Richard, Victor; Marques, Gilmar; Couto, Odilon; Iikawa, Fernando; Hey, Rudolf; Santos, Paulo. *Zeeman splitting and spin dynamics tuning by exciton charging in two-dimensional systems*. **Physical Review B** **84**, 205332 (2011).
4. Galvao Gobato, Y.; Galeti, H. V. A.; dos Santos, L. F.; Lopez-Richard, V.; Cesar, D. F.; Marques, G. E.; Brasil, M. J. S. P.; Orlita, M.; Kunc, J.; Maude, D. K.; Henini, M.; Airey, R. J. *Spin injection from two-dimensional electron and hole gases in resonant tunneling diodes*. **Applied Physics Letters** **99**, 233507 (2011).
5. Cesar, D. F.; Teodoro, M. D.; Tsuzuki, H.; Lopez-Richard, V.; Marques, G. E.; Rino, J. P.; Lourenço, S. A.; Marega, E.; Dias, I. F. L.; Duarte, J. L.; Gonzalez-Borrero, P. P.; Salamo, G. J. *Contrasting LH-HH subband splitting of strained quantum wells grown along [001] and [113] directions*. **Physical Review B** **81**, 233301 (2010).
6. Mazur, Yu. I.; Dorogan, V. G.; Marega, E.; Cesar, D. F.; Lopez-Richard, V.; Marques, G. E.; Zhuchenko, Z. Ya.; Tarasov, G. G.; Salamo, G. J. *Cooperative Effects in the Photoluminescence of (In,Ga)As/GaAs Quantum Dot Chain Structures*. **Nanoscale Research Letters** **5**, 991 (2010).
7. Mazur, Yu. I.; Dorogan, V. G.; Marega Jr., E.; Tarasov, G. G.; Cesar, D. F.; Lopez-Richard, V.; Marques, G. E.; Salamo, G. J. *Mechanisms of interdot coupling in (In,Ga)As/GaAs quantum dot arrays*. **Applied Physics Letters** **94**, 123112 (2009).

A seguir é apresentado a estruturação do trabalho.

1.3 Estruturação da Tese

No Capítulo 2 é apresentada a fundamentação teórica do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, com e sem interação *spin*-órbita, o qual foi utilizado no cálculo e investigação das propriedades eletrônicas dos sistemas nanoscópicos estudados. Embora se tenha utilizado ao longo deste trabalho apenas o Hamiltoniano de Luttinger 4×4 , também são discutidos neste capítulo os Hamiltonianos de Kane 8×8 e o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn 6×6 , bem como a diferença entre estes três modelos. Ainda neste capítulo são apresentados outros elementos teóricos, como a aproximação de massa efetiva e a aproximação de função envelope, que, acoplados ao cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, fornecem uma descrição mais consistente da estrutura eletrônica dos sistemas estudados.

No Capítulo 3 é dada uma introdução a elementos da teoria de elasticidade usados nos cálculos, introduzindo os tensores de *stress*, *strain* e a relação entre eles. Descreve-se o efeito que o crescimento orientado ao longo de uma direção cristalográfica arbitrária $[hkl]$ possui sobre as propriedades dos sistemas cúbicos do tipo blenda de zinco, assim como a dependência angular que os tensores de *stress* e *strain* possuem com a direção de quantização. Discute-se, também, a teoria dos potenciais de deformação e o Hamiltoniano de Bir-Pikus, que permite introduzir os efeitos de *strain* no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

A propagação de excitações elementares elásticas será também introduzida. Assim, no Capítulo 4, é feita uma breve descrição, tanto clássica quanto quântica, dos fônons em sistemas do tipo blenda de zinco, além de uma discussão da interação elétron-fônon via modelo de Fröhlich (fônons ópticos).

No Capítulo 5 são estudadas as propriedades eletrônicas e/ou elásticas em três sistemas distintos com confinamento quase-bidimensional: (i) efeitos do *strain* e da temperatura em poços quânticos múltiplos tensionados de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo das direções $[001]$ e $[113]$; (ii) dinâmica de *spins* em um poço quântico simples de *AlGaAs/GaAs* orientado ao longo da direção de crescimento $[110]$ com campo magnético aplicado paralelamente à direção de crescimento; (iii) efeitos da orientação do campo magnético aplicado *in-plane* na estrutura eletrônica de poços quânticos duplos de *AlGaAs/GaAs*.

No Capítulo 6 são estudadas as propriedades estruturais, elásticas e eletrônicas de uma super-rede *twinning* em um nanofio de *InP*. Este capítulo apresenta um diferencial com relação aos outros: os cálculos teóricos referentes aos efeitos de *strain* no nanofio só foram possíveis graças aos resultados prévios obtidos via dinâmica molecular.

No Capítulo 7 são estudados os efeitos da relaxação de portadores assistido por fônons óp-

ticos em um sistema de pontos quânticos acoplados de *InAs*. Além de considerar a interação elétron-fônon no cálculo do tempo de decaimento óptico, levou-se em conta, também, o desbalanço de cargas que pode ocorrer neste tipo de sistema.

No início dos Capítulos 5, 6 e 7 é apresentada alguma teoria complementar, específica de cada problema apresentado dentro do capítulo. Além disso, a obtenção de alguns resultados utilizadas ao longo do texto, assim como alguma teoria complementar, deixou-se para os Apêndices. Para cada problema específico, apresentado nos referidos capítulos, há uma conclusão específica, pois os problemas são, de certa forma, tomados como independentes. Além disso, no Capítulo 4, onde estudou-se três sistemas distintos, e as conclusões também estão separadas pelas seções em que os problemas foram expostos, e aparecem subsequentemente às discussões dos resultados dos problemas propostos, ao invés de aparecerem todas juntas no fim do capítulo.

Ao fim do trabalho, no Capítulo 8, são apresentadas as considerações finais gerais, além das perspectivas futuras sobre o mesmo.

Algumas outras informações são relevantes para a leitura deste trabalho: (i) algumas palavras utilizadas ao longo do texto, embora possuam tradução para o português, preferiu-se deixá-las com a grafia original em inglês, de forma a não haver perda de significado, tais palavras estão destacadas em itálico. (ii) em algumas das descrições matemáticas de elementos tensoriais utilizou-se muitos índices para rotulá-los. Para não precisar descrever e especificar a cada momento todos os elementos tensoriais presentes em uma equação, o que tornaria confusa a leitura do texto, preferiu-se a utilização de índices mudos para especificar tais elementos. (iii) algumas notas de rodapé foram acrescentadas ao texto, seja para dar alguma informação complementar, seja para indicar algum apêndice. Para especificar as notas foram utilizados números diminutos. Entretanto, como as referências estão dadas entre colchetes, não há problemas de ambiguidade.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] H. Weller, *Adv. Mat.* **5**, 88 (1993).
- [2] D. E. Gallardo, C. Bertoni, S. Dunn, *Proceedings of SPIE* **5840**, 516 (2005).
- [3] M. R. Geller, arXiv:cond-mat/0106256v1 [cond-mat.mes-hall] (2001).
- [4] M. Razeghi, *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics* **6**,1344 (2000).
- [5] M. Amann, F. Capasso, A. Larsson and M. Pessa, *New J. Phys.* **11**, 125012 (2009).
- [6] D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38**, 2059 (2005).
- [7] P. Bhattacharya, D. Bimberg, Y. Arakawa, *Proceedings of the IEEE* **95**, 1718 (2007).
- [8] J. B. Xia, *Phys. Rev. B* **43**, 9856 (1991).
- [9] E. P. O'Reilly, *Semicond. Sci. Technol.* **4**, 121 (1989).
- [10] Calvin Yi-Ping Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **46**, 4110 (1992).
- [11] J. A. Porto and J. Sa'nchez-Dehesa, *Phys. Rev. B* **51**, 14 352 (1995).
- [12] M. P. Houng, Y. C. Chang and W. I. Wang, *J. Appl. Phys.*, **64**, 4609 (1988).
- [13] D. F. Cesar, M. D. Teodoro, H. Tsuzuki, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, J. P. Rino, S. A. Lourenço, E. Marega Jr., I. F. L. Dias, J. L. Duarte, P. P. González-Borrero and G. J. Salamo, *Phys. Rev. B* *81*, 233301 (2010).
- [14] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura and H. Ohno, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4196 (1999).
- [15] L. K. Castelano, D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, O. D. D. Couto Jr., F. Iikawa, R. Hey and P. V. Santos, *Phys. Rev. B* *84*, 205332 (2011).

-
- [16] H. Kawaguchi, *13th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON)*, 1-4 (2011).
- [17] X. Duan, Y. Huang, R. Agarwal, C. M. Lieber, *Nature* **421**, 241 (2003).
- [18] K. A. Dick, P. Caroff, J. Bolinsson, M. E. Messing, J. Johansson, K. Deppert, L. R. Wallenberg and L. Samuelson, *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 024009 (2010).
- [19] L. Villegas-Lelovsky, C. Trallero-Giner, M. Rebello Souza Dias, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, *Phys. Rev. B* **79**, 155306 (2009).
- [20] V. Lopez-Richard, J. C. Gonzalez, F. M. Matinaga, M. Rebello Souza Dias, L. Villegas-Lelovsky and G. E. Marques, *Nano Lett.* **9**, 3129 (2009).
- [21] P. Caroff, K. A. Dick, J. Johansson, M. E. Messing, K. Deppert and L. Samuelson, *Nat. Nanotechnol.* **4**, 50 (2009).
- [22] R. E. Algra, M. A. Verheijen, M. T. Borgström, L. F. Feiner, G. Immink, W. J. P. van Enckevort, E. Vlieg, E. P. A. M. Bakkers, *Nature* **456**, 369 (2008).
- [23] H. Tsuzuki, D. F. Cesar, M. Rebello Souza Dias, L. K. Castelano, V. Lopez-Richard, J. P. Rino and G. E. Marques, *ACS Nano* **5**, 5519 (2011).
- [24] T. M. Schmidt, R. H. Miwa, P. Venezuela, A. Fazio, *Phys. Rev. B* **72**, 193404 (2005).
- [25] R. H. Miwa, T. M. Schmidt, A. Fazio, *Phys. Rev. B* **75**, 165324 (2007).
- [26] T. M. Schmidt, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 123117 (2006).
- [27] T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, *Phys. Rev. B* **73**, 235308 (2006).
- [28] K. Sano, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, *J. Cryst. Growth* **301**, 862 (2007).
- [29] M. P. Persson, H. Q. Xu, *Phys. Rev. B* **73**, 125346 (2006).
- [30] T. Akiyama, T. Yamashita, K. Nakamura, T. Ito, *Nano Lett.* **10**, 4614 (2010).
- [31] D. Li, Z. Wang, F. Gao, *Nanotechnology* **21**, 505709 (2010).
- [32] M. Sugawara, T. Yamamoto, H. Ebe, *FUJITSU Sci. Tech. J.* **43**, 495 (2007).
- [33] U. Bockelmann, *Phys. Rev. B* **48**, R17637 (1993).

-
- [34] W. Yang, R. R. Lowe-Webb, H. Lee, P. C. Sercel, *Phys. Rev. B* **56**, 13314 (1997).
- [35] M. Paillard, X. Marie, E. Vanelle, T. Amand, V. K. Kalevich, A. R. Kovsh, A. E. Zhukov, V. M. Ustinov, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 76 (2000).
- [36] J. W. Tomm, T. Elsaesser, Yu. I. Mazur, H. Kissel, G. G. Tarasov, Z. Ya. Zhuchenko, W. T. Masselink, *Phys. Rev. B* **67**, 045326 (2003).
- [37] B. R. Wang, B. Q. Sun, Y. Ji, X. M. Dou, Z. Y. Xu, Zh.M. Wang, G. J. Salamo, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 011107 (2008).
- [38] M. Scheibner, T. Schmidt, L. Worschech, A. Forchel, G. Bacher, T. Passow, D. Hommel, *Nat. Phys.* **3**, 106 (2007).
- [39] Yu. I. Mazur, V. G. Dorogan, E. Marega Jr., G. G. Tarasov, D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, G. J. Salamo, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 123112 (2009).
- [40] Yu. I. Mazur, V. G. Dorogan, E. Marega Jr., D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, Z. Ya. Zhuchenko, G. G. Tarasov, G. J. Salamo, *Nanoscale Res. Lett.* **5**, 991 (2010).

2. ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SISTEMAS SEMICONDUTORES NANOSCÓPICOS

O interesse no estudo de semicondutores de baixa dimensionalidade advém de dois fatores principais, a saber: (i) a possibilidade de se obter e estudar novos sistemas físicos com efeitos quânticos; (ii) possíveis aplicações destes novos sistemas em dispositivos opto-eletrônicos [1, 2].

Naturalmente o segundo fator emerge como uma consequência do primeiro, e ambos estão diretamente relacionados à quantidade de parâmetros ajustáveis na construção de um sistema de baixa dimensionalidade. Com o desenvolvimento de técnicas cada vez mais avançadas de crescimento e manipulação de materiais semicondutores como, por exemplo, a técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy*–MBE), a criação de sistemas quânticos formados por estes materiais tem possibilitado uma diversificação grande de configurações de confinamento espacial de portadores. Nesse intuito, as propriedades quânticas fundamentais, reflexo das interações coletivas da matéria, se sobressaem, pois, além de criarem condições favoráveis à aplicação de teorias já existentes, principalmente relacionadas à mecânica quântica, também possibilitam o desenvolvimento de novas teorias sobre as interações elementares da matéria condensada, abrindo espaço para propostas de aplicabilidade tecnológica.

O estudo das propriedades eletrônicas descreve o modo como se distribuem energeticamente os portadores de carga. Estes interagem essencialmente de maneira eletrostática com o sistema onde encontram-se confinados. Assim, a geometria da rede cristalina e sua composição (que define o tipo de íons que a constitui) tornam-se elementos fundamentais para sua compreensão e manipulação. Para elucidar com acurácia os efeitos oriundos das propriedades eletrônicas de tais sistemas, e a influência das variações de um grande número de parâmetros, é preciso desenvolver ferramentas matemáticas eficientes. Também, em geral, deve-se implementar tratamentos numérico-computacionais eficazes, uma vez que a obtenção de soluções analíticas para problemas dessa natureza são menos prováveis à medida que sua complexidade aumenta.

Antes de fazer uma descrição quantitativa das propriedades eletrônicas de sistemas nanos-

cópicos, bem como das ferramentas matemáticas utilizadas para descrevê-los, é conveniente fazer uma descrição qualitativa dos materiais semicondutores que constituem tais sistemas. Os fundamentos teóricos desta análise serão a base dos formalismos utilizados para o estudo das nanoestruturas, e sua introdução facilitará o entendimento da descrição quantitativa dos problemas que serão expostos ao longo do trabalho.

2.1 Aspectos Qualitativos da Estrutura de Bandas

Neste trabalho foram estudados sistemas nanoscópicos compostos por materiais semicondutores da família *III-V*. A forma com que estes materiais cristalizam denomina-se blenda de zinco. Essa estrutura consiste de duas redes cúbicas de face centrada (*face-centered cubic-fcc*) interpenetradas e deslocadas de $a/4$ ao longo da diagonal principal do cubo (Fig.2.1-a). Neste esquema, uma das redes é composta por um elemento do grupo III, por exemplo, *Ga*, enquanto que a outra é composta por um material da família V, por exemplo, *As*. Além disso, esta estrutura é caracterizada por uma única constante de rede, a .

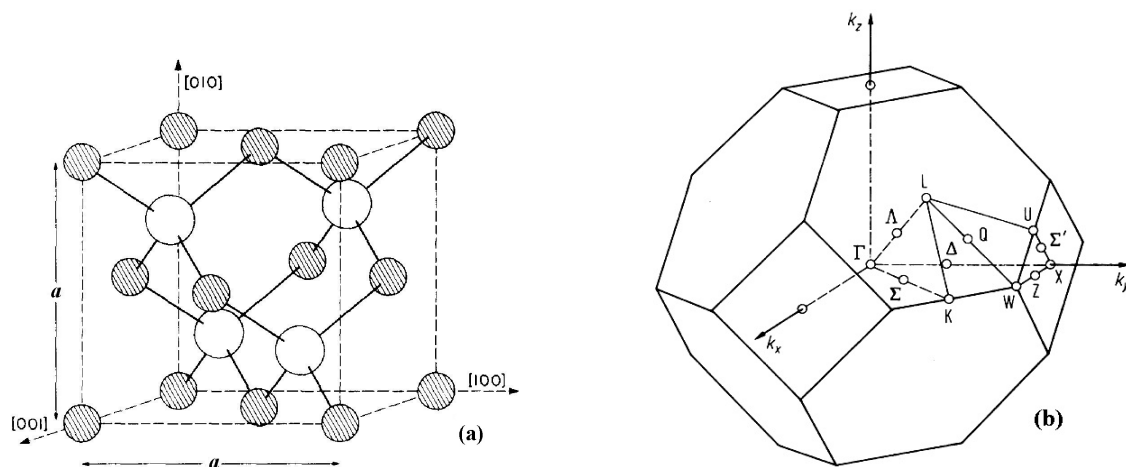


Fig. 2.1: a) Célula unitária com as principais direções cristalográficas mostradas de uma estrutura cristalina do tipo blenda de zinco. b) Primeira zona de *Brillouin* para uma estrutura fcc [3].

A simetria dos semicondutores da família *III-V* ocorre no grupo \mathcal{T}_d . As redes do tipo blenda de zinco se diferenciam das redes do tipo diamante (estruturas formadas, por exemplo, por Si ou Ge) na quebra do centro de simetria de inversão. A primeira zona de Brillouin (Fig.2.1-b) é um octaedro truncado, e tem seus principais pontos de simetria convencionalmente especificados como Γ , X e L . Em particular, os problemas tratados dentro deste trabalho estão relacionados ao comportamento de portadores em estados energéticos próximos ao ponto Γ da zona de *Brillouin*, para o qual a versatilidade e flexibilidade do formalismo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ no cálculo da

estrutura eletrônica se impõe. À continuação introduzir-se-á os fundamentos do método e sua extensão ao caso dos sistemas nanoestruturados.

2.2 A Aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é uma ferramenta poderosa para explorar com detalhes a estrutura de bandas de energia de um material semiconductor nas vizinhanças de um ponto arbitrário \mathbf{k}_0 . Dada sua versatilidade e fácil representação analítica, este torna-se muito útil para a simulação de propriedades ópticas e de transporte. Por ser um método de cálculo semi-empírico, é necessário conhecer, de antemão, um certo número de parâmetros como, por exemplo, as massas efetivas dos portadores e a energia de *gap*, os quais podem ser determinados experimentalmente ou por cálculos de primeiros princípios.

O procedimento básico de cálculo de bandas através do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ envolve dois passos principais, a saber: (i) transformação do Hamiltoniano do cristal para uma representação denominada $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, a qual incorpora detalhes da estrutura de bandas no ponto referência $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$; (ii) redução a um problema matricial de autovalores, usando como base as funções de onda naquele ponto para expressar formalmente a matriz (em princípio infinita) do Hamiltoniano obtido no passo (i). Após a construção formal da matriz Hamiltoniana é possível introduzir aproximações, que visam a utilização prática do método. Os passos (i) e (ii) fornecem ao método uma estrutura matemática sólida e consistente, enquanto que as aproximações que podem ser feitas incorporam ao método a realidade física dos sistemas em estudo.

O problema a ser abordado é o de um portador de carga movendo-se em uma rede cristalina sob a influência de um potencial de campo médio, $U(r)$, que inclui todas as interações com os íons e elétrons da rede, e possui a invariância translacional do cristal: $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$, sendo \mathbf{r} um vetor da rede e \mathbf{R} um vetor da rede de Bravais. A equação de autovalores para este problema é dada por:

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

sendo $\psi(\mathbf{r})$ a função de onda que descreve o movimento do portador, ε sua energia e \mathcal{H} o operador Hamiltoniano, dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

em que $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento e m_0 a massa do elétron livre.

Partindo do fato que a periodicidade do potencial da rede cristalina induz a formação de bandas de energia dentro do cristal, definir-se-á o índice n como sendo o indexador destas. Fazendo uso do teorema de Bloch [6], os autoestados ψ do Hamiltoniano (2.2) podem ser descritos como o produto de uma onda plana vezes uma função $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, a qual é conhecida como função de Bloch, e possui a periodicidade da rede:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Devido a esta propriedade, as autoenergias $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ do Hamiltoniano (2.2) serão periódicas no espaço- \mathbf{k} (espaço recíproco).

O ponto de partida do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, passo (i), consiste em transformar o Hamiltoniano convencional (2.2) para uma representação denominada representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Para tal substitui-se (2.3) em (2.1), obtendo-se:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

onde $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ passa a ter a forma:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}. \quad (2.5)$$

Escolhendo um dado vetor de onda, por exemplo, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, tal que o conjunto de funções $u_{n\mathbf{k}_0}$ forme uma base completa, tem-se que:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}_0)u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0)u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

com

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}_0) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_0^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p}. \quad (2.7)$$

A partir de (2.7) pode-se reescrever (2.4) como:

$$\left[\mathcal{H}(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.8)$$

A próxima etapa, passo (ii), consiste na redução para um problema matricial de autovalores, usando como base as funções de onda no ponto de referência $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. Para tal expandir-se-á $u_{n\mathbf{k}}$ em termos de $u_{n\mathbf{k}_0}$ da seguinte forma:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{n'n}(k) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

Substituindo-se (2.9) em (2.8) tem-se que:

$$\sum_{n'} \left[\mathcal{H}(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} \right] c_{nn'}(k) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} \varepsilon_n(\mathbf{k}) c_{nn'}(k) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

Tomando o produto escalar entre $u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ e $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$, e integrando sobre todo o volume da célula unitária da rede de Bravais, Ω , tem-se:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{nn'} \right\} c_{nn'} = \varepsilon_n(\mathbf{k}) c_{nn'}, \quad (2.11)$$

em que

$$\mathfrak{P}_{nn'} = \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.12)$$

e

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}_0) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

A Equação (2.11) define a representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, e relaciona a energia de uma certa banda n em um determinado ponto \mathbf{k} da rede recíproca, à matriz Hamiltoniana efetiva, cujos elementos são:

$$\left[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{nn'}. \quad (2.14)$$

Formalmente poder-se-ia expressar a Eq.(2.11) na forma de uma matriz infinita:

$$\begin{pmatrix} (\varepsilon_1^0 - \mathfrak{E}_{n\mathbf{k}}) + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{11} & \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{12} & \cdots \\ \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{21} & (\varepsilon_2^0 - \mathfrak{E}_{n\mathbf{k}}) + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c_1(\mathbf{k}) \\ c_2(\mathbf{k}) \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (2.15)$$

onde

$$\mathfrak{E}_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2). \quad (2.16)$$

Essa representação é geral, e permite o cálculo da energia de uma dada banda n em qualquer ponto \mathbf{k} da zona de Brillouin.

Com Acoplamento Spin-Órbita

Até o momento o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ foi desenvolvido sem que fosse levado em conta o *spin* do portador de carga. Entretanto, a introdução do *spin*, por meio do acoplamento *spin*-órbita, provoca uma quebra de degenerescência dos níveis energéticos dos portadores, fazendo com que o espectro energético, considerando essa nova interação, seja muito diferente daquele sem a mesma.

Para introduzir a contribuição do *spin* ao Hamiltoniano (2.2) soma-se a este o termo referente ao acoplamento *spin*-órbita, dado por:

$$\mathcal{H}_{so} = \frac{\hbar}{4m_0c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}, \quad (2.17)$$

em que c é a velocidade da luz no vácuo, $\nabla U(\mathbf{r})$ é o gradiente do potencial cristalino $U(\mathbf{r})$ e σ é o operador de *spin* de Pauli, dado por:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Com o termo de *spin*-órbita sendo considerado o Hamiltoniano do problema assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}. \quad (2.19)$$

O procedimento utilizado para transformar (2.19) para a representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é o mesmo que foi utilizado para transformar o Hamiltoniano (2.2). Logo, repetindo tal procedimento se obtém:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \mathcal{H}_{so1} + \mathcal{H}_{so2}, \quad (2.20)$$

onde

$$\mathcal{H}_{so1} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\nabla U(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.21)$$

representa a interação do *spin* com o campo magnético interno, relativo ao movimento orbital dos elétrons, com momento \mathbf{p} , em torno do núcleo atômico. Já o termo

$$\mathcal{H}_{so2} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot [\nabla U(\mathbf{r}) \times \boldsymbol{\sigma}]. \quad (2.22)$$

representa a interação do *spin* com o campo magnético efetivo, produzido pelo movimento do elétron, com momento $\hbar\mathbf{k}$, no cristal.

Em \mathcal{H}_{so1} o termo \mathbf{p} é um operador que, quando atua nas funções de Bloch, acopla estados de diferente sub-bandas, inclusive no extremo da banda \mathbf{k}_0 . Já em \mathcal{H}_{so2} o termo \mathbf{k} não tem o caráter de operador, logo, no extremo da banda, anula-se. Por conseguinte, fazendo tal consideração, pode-se reescrever a Eq.(2.11), levando em conta o acoplamento *spin*-órbita, como:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathfrak{P}_{nn'} + \mathfrak{H}_{nn'} \right\} c_{nn'} = \varepsilon_n(\mathbf{k}) c_{nn'}, \quad (2.23)$$

em que

$$\mathfrak{P}_{nn'} = \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.24)$$

e

$$\mathfrak{H}_{nn'} = \int_{\Omega} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{so1} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.25)$$

Por meio dos passos (i) e (ii), descritos anteriormente, conclui-se a formulação matemática do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. O passo seguinte é introduzir aproximações que incorporem a realidade física do problema.

2.3 Aproximação de Massa Efetiva: Modelo de uma Banda

Quantificar o problema anterior é uma tarefa complexa, tamanho o número de interações que o portador de carga sofre ao se deslocar pela rede cristalina. Porém, sob certas condições, é plausível e conveniente derivar uma expressão em que todas essas interações apareçam embutidas em um único parâmetro, o qual denomina-se massa efetiva. Nessa aproximação, incluindo o acoplamento *spin*-órbita, pode-se tratar o Hamiltoniano (2.20) via teoria de perturbação, tal que:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}(\mathbf{k}) \quad (2.26)$$

onde

$$\mathcal{H}^{(0)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{H}^{(1)}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{2m_0} \mathbf{k} \cdot \vec{\pi} \quad (2.28)$$

e

$$\vec{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}). \quad (2.29)$$

Supondo que a banda não apresente degenerescência no ponto de expansão, \mathbf{k}_0 , e que este seja um extremo de banda, de forma que os termos lineares em k (correção de primeira ordem) se anulem, a expansão das autofunções e autoenergias em torno de \mathbf{k}_0 , até segunda ordem, fornece:

$$u_n(\mathbf{k}) = u_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}_0} | (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \vec{\pi} | u_{n'\mathbf{k}_0} \rangle}{\varepsilon_{n\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{n'\mathbf{k}_0}} \quad (2.30)$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n\mathbf{k}_0} | (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \vec{\pi} | u_{n'\mathbf{k}_0} \rangle|^2}{\varepsilon_{n\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{n'\mathbf{k}_0}} \quad (2.31)$$

Por meio de uma escolha apropriada dos eixos coordenados é possível expressar a energia como:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(k_i^2 - k_{0i}^2)}{m_i}, \quad (2.32)$$

onde o índice $i = 1, 2, 3$ numera as três direções cartesianas x, y, z e m_i é a massa efetiva do portador, dada por:

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{m_0} \left[1 + \frac{2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{|\kappa_i \cdot \vec{\pi}|^2}{\varepsilon_{n\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{n'\mathbf{k}_0}} \right], \quad (2.33)$$

com $\kappa_i = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$, sendo os vetores unitários ao longo destas direções.

As Expressões (2.32) e (2.33) definem a aproximação parabólica para a energia e a massa efetiva, respectivamente. A massa efetiva depende da direção em que o portador se movimenta

dentro do cristal, resultando, portanto, numa grandeza tensorial [7]. Esta aproximação é usada comumente para descrever a banda de condução de semicondutores de *gap* largo (*wide gap semiconductors*), onde os efeitos do acoplamento com as bandas de valência podem ser desprezados em primeira ordem. Tal aproximação será aplicada a alguns dos problemas tratados neste trabalho.

2.4 Aproximação de Kane

As Eqs.(2.11) e (2.23) podem ser usadas para calcular as bandas de energia em qualquer ponto da zona Brillouin, conforme feito por Cardona e Pollak [8]. Entretanto, para tal procedimento, é necessário conhecer preliminarmente os parâmetros de *input* requeridos pelas mesmas, ou seja, os elementos de matriz $\mathfrak{P}_{nn'}$ e $\mathfrak{S}_{nn'}$, e também $\epsilon_n(\mathbf{k}_0)$. Além destes parâmetros, supõe-se também que as funções $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ sejam conhecidas, ou pelo menos suas propriedades de simetria.

Tomando o ponto de referência $\mathbf{k}_0 = 0$ e desconsiderando, por hora, o acoplamento *spin*-órbita, o Hamiltoniano da Eq.(2.23) assume a forma:

$$\left[\epsilon_n(0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k}) \cdot \mathfrak{p}_{nn'}, \quad (2.34)$$

onde n e n' são os índices das bandas no ponto de referência.

Kane observou que uma escolha adequada de estados $u_{n\mathbf{k}_0}$ simplificaria o problema, de forma a restringi-lo na busca de soluções para uma matriz de dimensão finita. Dessa forma, ele tratou o Hamiltoniano (2.34) utilizando a teoria de perturbação desenvolvida por Löwdin [9]. Esta teoria consiste na separação do Hamiltoniano que descreve o sistema em duas partes: um Hamiltoniano \mathcal{H}^0 com autovalores $\epsilon_n^{(0)}$ e autofunções $\psi_n^{(0)}$ conhecidos, e um Hamiltoniano \mathcal{H}' , que é tratado como uma perturbação. Dessa forma:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 + \mathcal{H}' \quad (2.35)$$

Na Eq.(2.34) o termo fora da diagonal do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathfrak{p}$ a ser tratado perturbativamente é:

$$\mathcal{H}' = \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k}) \cdot \mathfrak{p}_{nn'} \quad (2.36)$$

Supor-se-á que o conjunto de autofunções pode ser dividido em dois subconjuntos, \mathcal{A} e \mathcal{B} . Além disso, supor-se-á, também, que os autoestados pertencentes ao subconjunto \mathcal{A} , por hipótese o mais importante, e que contém os autoestados de maior relevância para a descrição do problema, interagem fortemente entre si, porém fracamente com os estados do subconjunto

\mathcal{B} . Tendo em mente essa configuração, as interações entre os dois subconjuntos são removidas por um processo iterativo, obtendo-se, dessa forma, as interações entre os estados da categoria \mathcal{A} renormalizados até segunda ordem:

$$\mathcal{H}'_{nn'} = \mathcal{H}_{nn'} + \sum_m^{\mathcal{B}} \frac{\mathcal{H}_{nm}\mathcal{H}_{mn'}}{\mathcal{H}_{nn} - \mathcal{H}_{mm}}, \quad (2.37)$$

sendo que os estados rotulados n e n' são pertencentes à categoria \mathcal{A} enquanto que os estados rotulados m pertencem à categoria \mathcal{B} . Dessa forma, selecionando os estados de condução e valência como pertencentes aos estados do subconjunto \mathcal{A} , referido como subespaço hibridizado $S - P$, e utilizando a Eq.(2.37), se obtém a matriz das interações renormalizadas \mathcal{H}' .

Para completar a descrição do modelo de Kane é necessário incluir a interação *spin*-órbita. Uma forma simplificada de fazer isso é achar uma representação na qual a contribuição dos elementos de matriz, provenientes desta interação, sejam diagonais, de forma que entrem como uma parte não renormalizada na teoria de Löwdin. Isso pode ser obtido usando o conjunto de base $|\mathbf{J}, m_j\rangle$, com $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

As funções que descrevem a banda de condução (no ponto de alta simetria $\mathbf{k}_0 = 0$), $|S\rangle$, têm propriedades de simetria de um orbital com momento angular $L = 0$, enquanto que as funções de estado de *spin* são caracterizadas pelo momento angular intrínseco $S = 1/2$, logo, obtém-se dois estados possíveis: $|1/2, \pm 1/2\rangle$, os quais pertencem à representação Γ_6 . Já as funções que descrevem as bandas de valência (no ponto de alta simetria $\mathbf{k}_0 = 0$), $|X\rangle$, $|Y\rangle$ e $|Z\rangle$, têm propriedades de simetria de um orbital com momento angular $L = 1$. Logo, combinando-se o momento angular orbital, $L = 1$, com o momento angular intrínseco do *spin*, $S = 1/2$, obtém-se seis estados possíveis: $|3/2, \pm 3/2\rangle$ (buraco pesado), $|3/2, \pm 1/2\rangle$ (buraco leve) e $|1/2, \pm 1/2\rangle$ (*split-off*).

A seguir são apresentadas as combinações lineares, provenientes das oito funções pertencentes à base octodimensional, utilizadas para descrever os estados no topo da banda de valência e no fundo da banda de condução;

$$\begin{aligned} u_{\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |e \uparrow\rangle = |S \uparrow\rangle \\ u_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |e \downarrow\rangle = -|S \downarrow\rangle \\ u_{\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}} &= \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \rightarrow |hh \uparrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}|(X + iY) \uparrow\rangle \\ u_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \rightarrow |hh \downarrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}|(X - iY) \downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned}
u_{\frac{3}{2},+\frac{1}{2}} &= \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |lh \uparrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{2i}{\sqrt{6}}|Z \uparrow\rangle \\
u_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |lh \downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}|(X-iY) \uparrow\rangle + \frac{2i}{\sqrt{6}}|Z \downarrow\rangle \\
u_{\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |so \uparrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}|(X+iY) \downarrow\rangle + \frac{2i}{\sqrt{3}}|Z \uparrow\rangle \\
u_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |so \downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}|(X-iY) \uparrow\rangle - \frac{2i}{\sqrt{3}}|Z \downarrow\rangle.
\end{aligned}$$

Com a base construída dessa forma a contribuição da interação *spin*-órbita entra como um termo diagonal na teoria de Löwdin. Procedendo dessa forma Kane obteve em 1956 [10] a matriz Hamiltoniana (8×8), a qual envolve parâmetros ajustáveis que podem ser reduzidos por considerações de simetria.

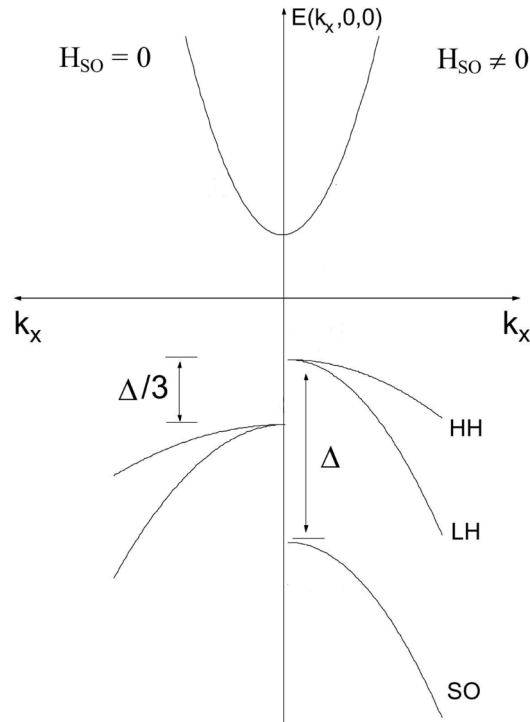


Fig. 2.2: Representação esquemática da estrutura de bandas dos materiais semicondutores *III-V*, que cristalizam na forma blenda de zinco, ao redor do ponto de alta simetria Γ [11].

Um esquema da estrutura de bandas dos materiais da família *III-V* é mostrada na Fig.2.2. Os ramos à esquerda do eixo da energia representam a configuração da estrutura de bandas quando o acoplamento *spin*-órbita é tomado como sendo nulo ($H_{SO} = 0$). Já os ramos à direita do eixo da energia representam a configuração da mesma quando o acoplamento *spin*-órbita é levando em conta ($H_{SO} \neq 0$). O *gap* fundamental é definido como sendo a diferença de energia entre o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução no ponto de alta simetria Γ ($\mathbf{k} = 0$). Materiais cujos extremos das bandas de valência e de condução ocorrem no ponto

de alta simetria Γ são denominados materiais de *gap* direto, tais como o *GaAs* e o *InAs* [4]. Quando os extremos das bandas de condução e valência não ocorrerem no mesmo ponto \mathbf{k} o material é denominado de *gap* indireto, tal como o *AlAs*, cujo extremo da banda de condução ocorre no ponto X da zona de Brillouin, ao invés de Γ .

Ainda na Fig.2.2 observa-se que para a banda de valência, na ausência do acoplamento *spin*-órbita, esta possui três ramos que são degenerados no ponto $\mathbf{k} = 0$ (Γ): *buraco pesado*, *buraco leve* e *split-off*, nomeados aqui *HH*, *LH* e *SO*, respectivamente. Com a introdução do acoplamento *spin*-órbita ocorre uma quebra da degenerescência no ponto Γ , e a banda de *split-off* se separa das demais bandas.

A matrix Hamiltoniana de Kane (8×8) é adequada para estudar semicondutores de *gap* estreito (*narrow gap semiconductors*), onde os efeitos do acoplamento entre as bandas de valência e condução não podem ser desprezados. Já para se estudar semicondutores de *gap* largo (*wide gap semiconductors*), quando tais efeitos podem ser desprezados, é comum a utilização dos modelos de Luttinger-Kohn [12] e Luttinger [13]. O primeiro deles consiste de uma matrix Hamiltoniana (6×6) que descreve apenas os efeitos de acoplamento entre os seis estados da banda de valência: $|hh \uparrow\rangle$, $|hh \downarrow\rangle$, $|lh \uparrow\rangle$, $|lh \downarrow\rangle$, $|so \uparrow\rangle$ e $|so \downarrow\rangle$. O segundo consiste de uma matrix Hamiltoniana (4×4) que descreve apenas os efeitos de acoplamento entre os quatro estados de buraco: $|hh \uparrow\rangle$, $|hh \downarrow\rangle$, $|lh \uparrow\rangle$ e $|lh \downarrow\rangle$. Portanto, o modelo de Luttinger é empregado quando a energia de *split-off* Δ é muito grande, diminuindo assim os efeitos de acoplamento entre os quatro estados de buraco e os dois estados da banda de *split-off* [Fig.(2.2)].

Nos sistemas estudados neste trabalho o modelo de Luttinger mostrou-se suficiente na descrição da estrutura de bandas e seus efeitos. Logo, é conveniente uma descrição mais completa deste modelo.

2.5 O Hamiltoniano 4×4 de Luttinger

O Hamiltoniano de Luttinger, na presença do acoplamento *spin*-órbita, leva em conta quatro estados degenerados no ponto de alta simetria Γ ($\mathbf{k}_0 = 0$): $|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$ e $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ [13].

Para um semicondutor com simetria $\mathcal{T}d$, o Hamiltoniano de um buraco na banda de valência

pode ser escrito na forma de uma matriz 4×4 , dada por:

$$\mathbb{H}_{\perp} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{H}}_{hh} & \hat{b} & \hat{c} & 0 \\ \hat{b}^* & \hat{\mathcal{H}}_{lh} & 0 & \hat{c} \\ \hat{c}^* & 0 & \hat{\mathcal{H}}_{lh} & -\hat{b} \\ 0 & \hat{c}^* & -\hat{b}^* & \hat{\mathcal{H}}_{hh} \end{pmatrix} \begin{matrix} \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \end{matrix}, \quad (2.39)$$

sendo que os vetores-*ket* à direita de (2.39) mostram a ordem das autofunções, a qual será mantida por todo o trabalho. Os termos $\hat{\mathcal{H}}_{hh}$, $\hat{\mathcal{H}}_{lh}$, b e c são dados por:

$$\hat{\mathcal{H}}_{hh} = \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2m_0} (\hat{p}_z^2) + \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2m_0} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2), \quad (2.40)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{lh} = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2m_0} (\hat{p}_z^2) + \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2m_0} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2), \quad (2.41)$$

$$\hat{b} = \frac{\gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} [(\hat{p}_y \hat{p}_z + \hat{p}_z \hat{p}_y) + i(\hat{p}_x \hat{p}_z + \hat{p}_z \hat{p}_x)], \quad (2.42)$$

$$\hat{c} = \frac{\sqrt{3}}{2m_0} [\gamma_2 (\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2) + i\gamma_3 (\hat{p}_x \hat{p}_y + \hat{p}_y \hat{p}_x)], \quad (2.43)$$

onde $\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j}$, com $j = x, y, z$, denota a componente correspondente do operador momento $\hat{\mathbf{p}}$. As quantidades γ_1 , γ_2 e γ_3 são conhecidas como parâmetros de Luttinger e são obtidos experimentalmente ou por cálculos de primeiros princípios, para cada material. Esses parâmetros são proporcionais à soma dos elementos de matriz do operador momento entre estados de diferentes bandas, e que não entram explicitamente no modelo 4×4 .

Na presença de um campo magnético externo, \mathbf{B} , é necessário substituir o operador momento $\hat{\mathbf{p}}$ por um operador momento efetivo $\hat{\mathbf{p}}$, dado por: $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$, onde e é a carga do elétron, c é a velocidade da luz e \mathbf{A} é o potencial vetor, o qual se relaciona com o campo magnético \mathbf{B} por meio da equação: $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$.

2.6 Aproximação de Função Envelope

Na revisão teórica feita até o momento tem-se considerando que o material em estudo consiste de um cristal perfeito, portanto infinito e perfeitamente periódico. Tal hipótese é viável caso se esteja lidando com um semicondutor *bulk* com alto grau de pureza e ausência de defeitos. Entretanto, o foco deste trabalho está no estudo de nanoestruturas semicondutoras na presença de campos externos e/ou *built-in*: magnético e tensões. Todas essas modificações provocam uma quebra na periodicidade do cristal e, por conseguinte, o teorema de Bloch, o qual é a base da fundamentação teórica apresentada até o momento, perde sua validade. Com

o propósito de tratar sistemas dessa natureza, onde há quebra da periodicidade do cristal, foi desenvolvida a Aproximação de Função Envelope (*Envelope Function Approximation*–EFA).

As hipóteses básicas para se aplicar essa aproximação em uma nanoestrutura semicondutora formada, por exemplo, por dois materiais semicondutores A e B, crescidos perfeitamente um sobre o outro, são:

1. Supor que as funções de onda nos materiais A e B sejam expandidas na forma:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}^{(A,B)}(\mathbf{r}) = \sum_n \mathcal{F}_n^{(A,B)}(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}_0}^{(A,B)}(\mathbf{r}), \quad (2.44)$$

onde $u_{n\mathbf{k}_0}^{(A,B)}(\mathbf{r})$ é a parte periódica da função de Bloch no ponto \mathbf{k}_0 da zona de Brillouin, ao redor do qual os estados da nanoestrutura são construídos; $\mathcal{F}_n^{(A,B)}(\mathbf{r})$ são as funções envelope a serem determinadas; a somatória em n abrange todos os estados considerados pela aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

2. Supor que a parte periódica da função de Bloch é a mesma nos materiais A e B, constituintes da nanoestrutura, tal que: $u_{n\mathbf{k}_0}^{(A)}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}_0}^{(B)}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$.
3. Supor que os potenciais gerados pela formação da nanoestrutura, ou pela eventual aplicação de campos externos, variem em uma escala de comprimento muito maior do que a do parâmetro de rede do material, podendo ser considerados constantes dentro de cada célula unitária. Dessa forma, a função de onda $\psi_{n\mathbf{k}}^{(A,B)}(\mathbf{r})$, que descreve os estados na nanoestrutura, é uma soma de produtos de funções que variam rapidamente, as funções de Bloch: $u_{n\mathbf{k}_0}^{(A,B)}(\mathbf{r})$, com funções que variam lentamente, as funções envelope: $\mathcal{F}_n^{(A,B)}(\mathbf{r})$.

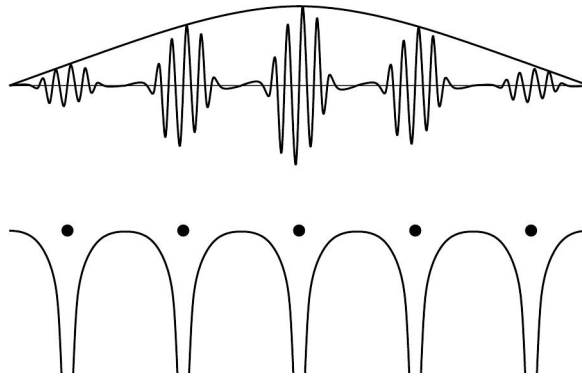


Fig. 2.3: Esquema qualitativo da função de onda $\psi_{n,\mathbf{k}}^{(A,B)}(\mathbf{r})$ na aproximação de função envelope[14].

A Figura (2.3) mostra um esquema simplificado da idéia por trás da EFA. A parte inferior da figura mostra o potencial $U(\mathbf{r})$ do cristal, enquanto que a parte superior mostra a lenta variação

da função envelope, $\mathcal{F}_n^{(A,B)}(\mathbf{r})$, modulando a parte periódica das funções de Bloch, $u_{n\mathbf{k}_0}^{(A,B)}(\mathbf{r})$, a qual varia rapidamente. A função de onda do portador no sistema seria uma expansão do produto desses dois tipos de função sobre os n estados envolvidos.

Considerando que a direção de crescimento da nanoestrutura seja o eixo $\hat{\mathbf{z}}$, denotar-se-á por $\mathbf{z} = z_0\hat{\mathbf{z}}$ a interface de separação entre os materiais A e B. Uma vez que as funções $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ formam um conjunto completo, e que $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ deve ser contínua na interface $\mathbf{z} = z_0\hat{\mathbf{z}}$, tem-se que:

$$\mathcal{F}_n^{(A)}(\mathbf{r}_\perp, z_0) = \mathcal{F}_n^{(B)}(\mathbf{r}_\perp, z_0), \quad (2.45)$$

onde \mathbf{r}_\perp é um vetor posição bidimensional. Supondo que a nanoestrutura apresente um casamento de rede perfeito, ela tornar-se-á translacionalmente invariante no plano- xy . Assim sendo, as funções envelope podem ser fatorizadas da seguinte forma:

$$\mathcal{F}_n^{(A,B)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{z}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) \chi_n^{(A,B)}(\mathbf{z}), \quad (2.46)$$

onde S é a área do plano perpendicular à direção de crescimento e $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$ é um vetor bidimensional, o qual se supõe que seja o mesmo nos materiais A e B, de forma a satisfazer a condição de invariância translacional no plano- xy . Desse modo, pode-se reescrever (2.44) como:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}^{(A,B)}(\mathbf{r}) = \sum_n \mathcal{F}_n^{(A,B)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{z}) u_{n,\mathbf{k}_0}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) \chi_n^{(A,B)}(\mathbf{z}) u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.47)$$

Escrevendo o Hamiltoniano da nanoestrutura como:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_A(\mathbf{r})Y_A + V_B(\mathbf{r})Y_B, \quad (2.48)$$

onde Y_A (Y_B) é uma função degrau unitária se \mathbf{r} corresponde ao material A (B). Atuando com \mathcal{H} na parte periódica das funções de Bloch, $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$, obtém-se:

$$\mathcal{H} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \left(\varepsilon_{n\mathbf{k}_0}^{(A)} Y_A + \varepsilon_{n\mathbf{k}_0}^{(B)} Y_B \right) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.49)$$

Atuando novamente com \mathcal{H} , agora na função de onda nanoestrutura $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ [Eq.(2.47)], multiplicando por $u_{m\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) \chi_{m\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{z})$ e integrando sobre todo o espaço obtém-se que as funções $\chi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{z})$ devem satisfazer o conjunto de equações de autovalores [7]:

$$\widetilde{\mathcal{H}}^{(0)} \left(\mathbf{z}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right) \chi = \varepsilon \chi, \quad (2.50)$$

onde χ é um vetor coluna de dimensão N e $\widetilde{\mathcal{H}}^{(0)}$ é uma matriz de dimensão $N \times N$, sendo N o número de estados considerados na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Os elementos da matriz $\widetilde{\mathcal{H}}^{(0)}$ e $\mathcal{H}_{nm}^{(0)}$ são funções dos operadores \mathbf{z} e $\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}}$, de forma que:

$$\mathcal{H}_{nm}^{(0)} \left(\mathbf{z}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right) = \left[\varepsilon_{n\mathbf{k}_0}^{(A)} Y_A + \varepsilon_{n\mathbf{k}_0}^{(B)} Y_B + \frac{\hbar^2}{2m_0} \mathbf{k}_\perp^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial}{\partial z} \right] \delta_{nm} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_\perp \cdot \langle n | \mathbf{p}_\perp | m \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle n | p_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.51)$$

onde

$$\langle n | \mathbf{p} | m \rangle = \int_{\Omega_0} u_{n\mathbf{k}_0}^* \mathbf{p} u_{m\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} \quad (2.52)$$

e Ω_0 é o volume da célula unitária pertencente ao material A ou B, de acordo com a posição que vetor \mathbf{r} na nanoestrutura.

Comparando as Eqs.(2.51) e (2.6), tem-se que a matriz $\widetilde{\mathcal{H}}^{(0)}$ nada mais é do que a matriz $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para materiais *bulk*, mas com as seguintes modificações:

- O termo k_z foi substituído pelo operador $-i \partial / \partial z$.
- Os extremos de banda, $\varepsilon_{n\mathbf{k}_0}$ agora apresentam dependência com a posição, variando nas interfaces.

De forma geral, se um potencial externo, $\varphi(\mathbf{r})$, o qual obedece a condição (3), for superposto ao potencial da nanoestrutura, a Eq.(2.50) pode ser reescrita como:

$$\left[\widetilde{\mathcal{H}}^{(0)} \left(\mathbf{r}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) + \varphi(\mathbf{r}) \mathbb{i} \right] \mathcal{G} = \varepsilon \mathcal{G}, \quad (2.53)$$

onde \mathbb{i} é a matriz identidade de ordem $N \times N$, \mathcal{G} são as funções envelope do sistema e os elementos da matriz $\mathcal{H}^{(0)} \left(\mathbf{r}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)$, também $N \times N$, são dados por:

$$\mathcal{H}_{nm}^{(0)} \left(\mathbf{r}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) = \left[\varepsilon_{n\mathbf{k}_0}^{(A)} + V_n(z) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \right] \delta_{nm} - \frac{i\hbar}{m_0} \langle n | \mathbf{p} | m \rangle \cdot \nabla \quad (2.54)$$

onde $V_n(z)$ corresponde ao deslocamento algébrico da energia do extremo da n -ésima banda, e define-se como: $V_n(z) = 0$ se $z \in A$ ou $V_n(z) = \varepsilon_n^{(B)} - \varepsilon_n^{(A)}$ se $z \in B$.

Esta metodologia será aplicada à análise de efeitos estruturais tais como presença de interfaces, modulação do potencial de confinamento e da sua geometria. Por sua vez, as interfaces, da forma como foram introduzidas aqui, induzem também alterações na estrutura cristalina, cujos efeitos (na aproximação elástica) serão discutidos à continuação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] M. Razeghi, IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics **6**,1344 (2000).
- [2] M. Amann, F. Capasso, A. Larsson, M. Pessa, New J. Phys. **11**, 125012 (2009).
- [3] J. S. Blakemore, J. Appl. Phys. **53**, R123 (1982).
- [4] L. Pavesi, M. Guzzi, J. Appl. Phys. **75**, 4779 (1994).
- [5] G. Dresselhaus, Phys. Rev.**100**, 580 (1955).
- [6] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*. (Holt, Rinehart and Winston, 1976) p. 133.
- [7] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure* (Les Ulis Cedex: Les Éditions de Physique, 1988).
- [8] M. Cardona, F. Pollak, Phys. Rev. **142**, 530 (1966).
- [9] P. O. Lowdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [10] E. O. Kane, J. Chem. Solids **1**, 249 (1957)
- [11] A. C. R. Bittencourt¹, *Propriedades Estáticas e Dinâmicas de Portadores em Heteroestruturas Semicondutoras*. (Tese de Doutorado, UFSCAR, 2002).
- [12] J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [13] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [14] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. (Springer, 2003).

3. ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SISTEMAS SEMICONDUTORES NANOSCÓPICOS TENSIONADOS

Durante a preparação de uma nanoestrutura, nas mais diversas geometrias, via técnicas de epitaxia, a intercalação de diferentes materiais apresenta-se como uma fonte de *strain*, uma vez que diferentes materiais possuem diferentes parâmetros de rede. O papel do *strain* em sistemas semicondutores é tão importante que algumas nanoestruturas como, por exemplo, pontos quânticos [1, 2, 3], têm sua formação induzida por estes mecanismos.

Como mencionado anteriormente, a estrutura eletrônica está vinculada às interações eletromagnéticas entre os portadores de carga e os íons da rede cristalina, logo, sua disposição espacial, como a geometria e a distância inter-atômica, é um elemento fundamental para a quantificação dos seus parâmetros fundamentais como, por exemplo, a energia de *gap*.

A Figura (3.1) mostra um gráfico do *gap* de energia versus o parâmetro de rede para diferentes materiais binários. Uma característica importante que a Fig.(3.1) ilustra é a modulação do *gap* de energia de uma liga ternária em função da concentração dos materiais binários que a compõem. Tomando, como exemplo, um poço de *InAs* com barreiras de *GaAs*, o *offset* das bandas de valência e condução, o qual determina, respectivamente, a profundidade dos potenciais de confinamento para buracos e elétrons, poderá ser modificado substituindo a barreira de *GaAs* por uma barreira de $In_xGa_{1-x}As$. Variando a concentração x de Índio na liga ternária é possível obter diferentes valores para a energia de *gap*, modulando, dessa forma, o *offset* do sistema. Pela figura também fica evidente que a escolha dos materiais na construção de um sistema nanoscópico poderá pronunciar os efeitos de *strain* gerados pelo descasamento do parâmetro de rede. Construindo-se, por exemplo, um poço quântico de *InAs* com barreiras de *GaAs* o sistema apresentará um grande descasamento do parâmetro de rede na interface entre os dois materiais, o que fará com que os efeitos de *strain* nesse sistema sejam proeminentes. Se, por outro lado, for construído um poço de *GaAs* com barreiras de *AlAs* o descasamento na interface entre os dois materiais será muito pequeno, e os efeitos do *strain* sobre o sistema serão mais fracos.

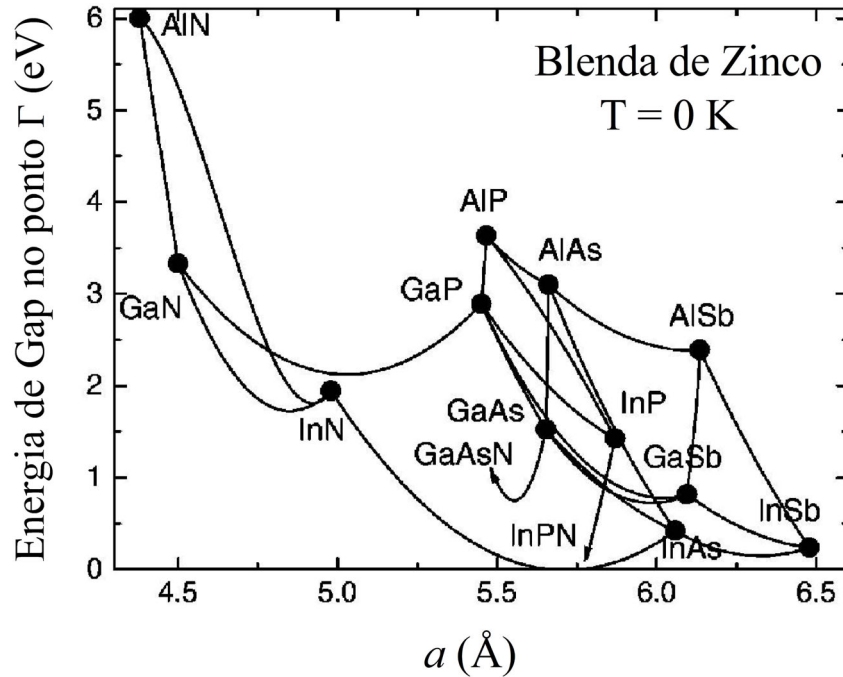


Fig. 3.1: Energia de *gap* no ponto Γ versus constante de rede para vários materiais binários. As curvas que conectam dois materiais representam a energia de *gap* para a liga ternária formada a partir dos mesmos [4].

3.1 Propriedades Elásticas de Sistemas Cúbicos

Antes de se analisar os efeitos do *strain* sobre a estrutura de bandas é conveniente uma descrição prévia de elementos da teoria de elasticidade, como os tensores de *stress* e *strain*, bem como a relação entre estes, a qual é dada por meio da lei de Hook dentro da aproximação linear.

Como os materiais de interesse neste trabalho são aqueles que se cristalizam na forma blenda de zinco, a descrição teórica será focada neste tipo de sistema cristalino. Uma descrição mais detalhada e completa da teoria de deformações em outros sistemas cristalinos pode ser encontrada em livros texto [5, 6, 7, 8].

O Tensor de Strain

Como ponto de partida para definir o tensor de *strain* em um sistema cristalino cúbico, definir-se-á um conjunto de vetores ortonormais \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} imersos em um sistema cristalino não tensionado. Por meio de uma deformação uniforme estes vetores são distorcidos, passando a assumir, respectivamente, os valores \hat{x}' , \hat{y}' e \hat{z}' . A relação entre estas duas bases de vetores, isto

é, entre a base deformada e a base não deformada, é dada pela seguinte relação:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}' &= (1 + \varepsilon_{xx})\hat{\mathbf{x}} + \varepsilon_{xy}\hat{\mathbf{y}} + \varepsilon_{xz}\hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\mathbf{y}}' &= \varepsilon_{yx}\hat{\mathbf{x}} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{\mathbf{y}} + \varepsilon_{yz}\hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\mathbf{z}}' &= \varepsilon_{zx}\hat{\mathbf{x}} + \varepsilon_{zy}\hat{\mathbf{y}} + (1 + \varepsilon_{zz})\hat{\mathbf{z}}\end{aligned}\quad (3.1)$$

onde os coeficientes ε_{ij} definem a deformação do sistema.

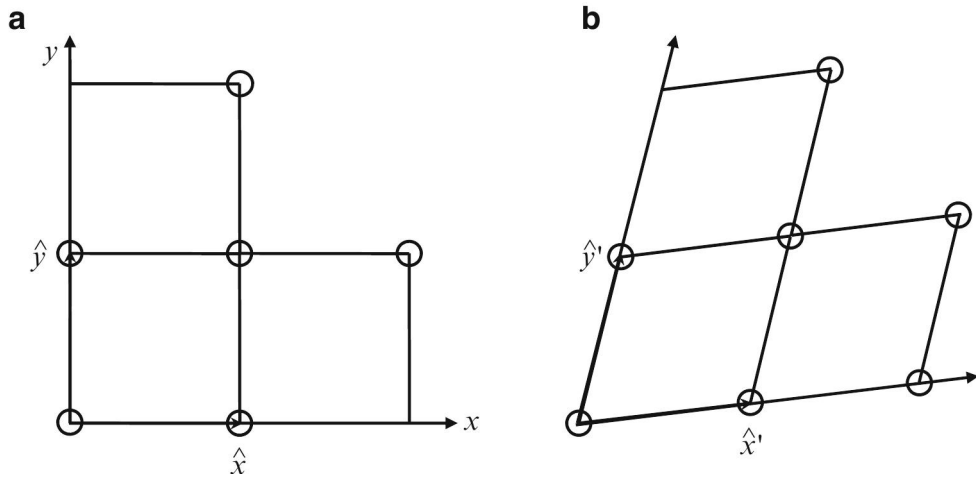


Fig. 3.2: Esquema simplificado de uma rede cristalina bidimensional (a) sem deformação e (b) com deformação. No caso em que há a deformação da rede, esta produz um *strain* no sistema [9].

A Figura (3.2) mostra um esquema simplificado de uma rede cristalina bidimensional com e sem deformação. É importante ressaltar que as deformações que induzem o surgimento de *strain* no sistema estão sendo tratadas dentro da aproximação linear. Isto implica que ao remover o agente causador da deformação o sistema tenderá a recuperar seu estado original.

Estabelecida a relação entre as bases dos dois sistemas cristalinos, com e sem *strain*, por meio da Eq.(3.1), é possível identificar qualquer vetor posição em um sistema sob efeitos de *strain*. Assim, se um ponto do sistema não tensionado estiver localizado em: $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$, no sistema tensionado esse mesmo ponto será localizado pelo vetor: $\mathbf{r}' = x\hat{\mathbf{x}}' + y\hat{\mathbf{y}}' + z\hat{\mathbf{z}}'$, e o deslocamento entre as posições \mathbf{r} e \mathbf{r}' fica definido como:

$$\begin{aligned}\mathbf{R} \equiv \mathbf{r}' - \mathbf{r} &= x(\hat{\mathbf{x}}' - \hat{\mathbf{x}}) + y(\hat{\mathbf{y}}' - \hat{\mathbf{y}}) + z(\hat{\mathbf{z}}' - \hat{\mathbf{z}}) \\ &= (x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{yx} + z\varepsilon_{zx})\hat{\mathbf{x}} \\ &+ (x\varepsilon_{xy} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{zy})\hat{\mathbf{y}} \\ &+ (x\varepsilon_{xz} + y\varepsilon_{yz} + z\varepsilon_{zz})\hat{\mathbf{z}}.\end{aligned}\quad (3.2)$$

De forma geral, o vetor deslocamento \mathbf{R} pode ser definido pela introdução de um vetor $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, de forma que:

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}) = u_x(\mathbf{r})\hat{\mathbf{x}} + u_y(\mathbf{r})\hat{\mathbf{y}} + u_z(\mathbf{r})\hat{\mathbf{z}}. \quad (3.3)$$

Expandindo o vetor deslocamento \mathbf{R} em série de Taylor até a primeira ordem, tomando $\mathbf{R}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ e comparando o resultado com a Eq.(3.2) obtém-se a seguinte relação:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial x} & \epsilon_{yx} &= \frac{\partial u_x}{\partial y} & \epsilon_{zx} &= \frac{\partial u_x}{\partial z} \\ \epsilon_{xy} &= \frac{\partial u_y}{\partial x} & \epsilon_{yy} &= \frac{\partial u_y}{\partial y} & \epsilon_{zy} &= \frac{\partial u_y}{\partial z} \\ \epsilon_{xz} &= \frac{\partial u_z}{\partial x} & \epsilon_{yz} &= \frac{\partial u_z}{\partial y} & \epsilon_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Portanto, o deslocamento pode ser expressado como: $\epsilon_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$, com $u_j = u_x, u_y, u_z$ e $x_i = x, y, z$. Os coeficientes ϵ_{ij} , denominados coeficientes de *strain*, são adimensionais e definem a deformação da rede cristalina. Já a matriz 3×3

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

define o tensor de *strain*, o qual é simétrico, isto é, suas componentes se relacionam entre si da seguinte maneira:

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji} = \frac{1}{2} (\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji}). \quad (3.6)$$

Os termos da diagonal deste tensor, ϵ_{ii} , definem o *strain* de alongamento, o qual está relacionado à mudança relativa no comprimento ao longo da direção x_i da rede cristalina. Já que os termos fora da diagonal, ϵ_{ij} ($i \neq j$), representam o *strain* de cisalhamento, o qual está relacionado com distorções angulares da rede cristalina.

O Tensor de Stress

O *stress* pode ser definido como a força por unidade de área que responde ao *strain*. A Figura (3.3) ilustra a força aplicada em um plano infinitesimal de área A , cuja normal está ao longo do eixo x do cubo. Para o caso esquematizado, a força se decompõe em três componentes: a componente normal ao plano, F_{xx} , e as componentes de cisalhamento, F_{xy} e F_{xz} . Portanto, para o plano mostrado na Fig.(3.3) as componentes do *stress* são definidas como:

$$\tau_{xx} = \frac{F_{xx}}{A}; \quad \tau_{yx} = \frac{F_{yx}}{A}; \quad \tau_{zx} = \frac{F_{zx}}{A}, \quad (3.7)$$

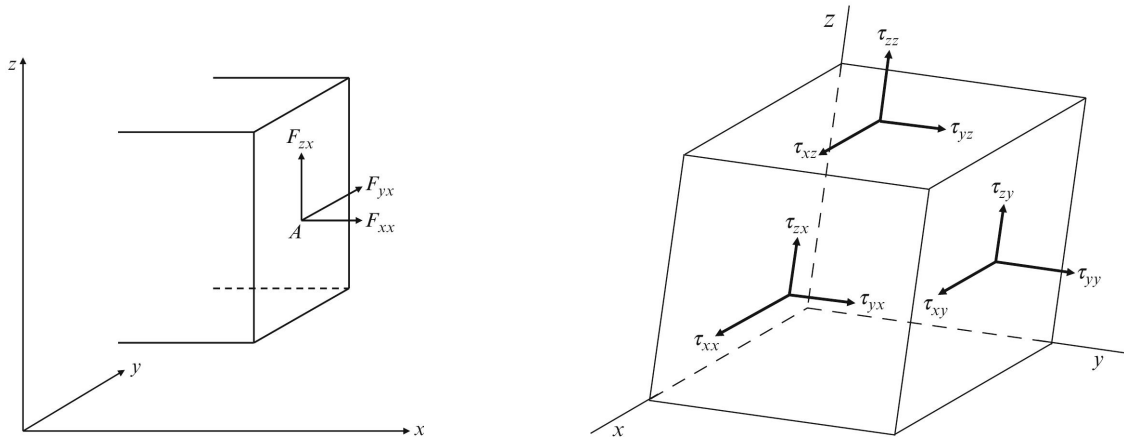


Fig. 3.3: Esquema ilustrativo do stress. (a) Força sendo aplicada em cubo cuja área da face é A . (b) Localização das componentes do tensor de *stress* nas superfícies de um cubo infinitesimal [9].

sendo que as outras componentes são obtidas fazendo a mesma análise para as outras faces do cubo. Dessa forma, o *stress* em um pequeno elemento de volume pode ser caracterizado por nove componentes, dando origem ao tensor de *stress*, definido pela matriz 3×3

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Da mesma forma que o tensor de *strain*, o tensor de *stress* também é simétrico, ou seja, $\tau_{ij} = \tau_{ji}$, condição que advém do equilíbrio estático do cristal. Por conseguinte, são necessárias apenas seis componentes: $\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{zz}, \tau_{yz}, \tau_{zx}$ e τ_{xy} para definir completamente este tensor.

A lei de Hook

Dentro do limite elástico (aproximação linear) ao se retirar a fonte de *stress* os átomos que compõem o cristal retornam às suas posições de origem. Dentro deste limite o *strain* é proporcional à magnitude do *stress* aplicado. A dependência entre a magnitude da força aplicada e a deformação causada pela mesma foi observada, primeiramente, por Robert Hook em 1678 [10], e a relação entre o *stress* aplicado e o *strain* é dada pela lei que leva seu nome, e que na sua forma tensorial pode ser expressa como:

$$\tau_{ij} = \sum_{kl} c_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (i, j, k, l = x, y, z), \quad (3.9)$$

onde τ_{ij} são as componentes do tensor de *stress*, ϵ_{kl} são as componentes do tensor de *strain* e c_{ijkl} são as componentes do tensor de elasticidade, o qual é um tensor de quarto *rank* e possui 81

componentes, as quais são únicas para cada material. Devido à simetria dos tensores de *stress* e *strain*, o tensor de elasticidade possui a seguinte propriedade de simetria:

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk}, \quad (3.10)$$

a qual reduz as componentes independentes deste tensor de 81 para 36.

Como os tensores de *stress*, *strain* e elasticidade possuem simetrias, é possível expressá-los de uma forma mais compacta, utilizando o esquema notação de Voigt [8]:

$$\begin{array}{l} \text{Tensor} \quad 11 \quad 22 \quad 33 \quad 23 \quad 32 \quad 13 \quad 31 \quad 12 \quad 21 \\ \\ \text{Matrix} \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 4 \quad 5 \quad 5 \quad 6 \quad 6 \end{array}$$

Com isso, é possível fazer a seguinte representação: $c_{ijkl} \rightarrow c_{mn}$, de modo que o tensor de elasticidade pode ser escrito na forma de uma matriz 6×6 . Além disso, para materiais que possuem simetria cúbica, como aqueles que se cristalizam na forma blenda de zinco, as componentes deste tensor se reduzem para apenas três componentes diferentes de zero: c_{11} , c_{12} e c_{44} , as quais são denominadas de constantes elásticas do cristal [11]. Portanto, a forma final do tensor de elasticidade para um sistema cúbico pode ser representada por:

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Os tensores de *stress* e *strain* são representados por matrizes que possuem 9 componentes cada uma. Utilizando o esquema de redução de índices de Voigt é possível expressar as matrizes que representam estes tensores por dois vetores de 6 componentes cada um:

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \tau_3 \\ \tau_4 \\ \tau_5 \\ \tau_6 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{e} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

O fato da representação tensorial ser feita apenas por 6 componentes e não 9, como esperado, advém do fato de seus respectivos tensores serem simétricos, como já discutido anteriormente.

Portanto, a lei de *Hook*, Eq.(3.9), pode ser reescrita como:

$$\begin{pmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \tau_3 \\ \tau_4 \\ \tau_5 \\ \tau_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

3.2 Dependência Angular das Propriedades Elásticas

É relevante para este trabalho a descrição dos tensores de *strain*, *stress* e elasticidade em planos não convencionais, orientados ao longo de diferentes direções cristalográficas $[hkl]$ ¹.

É importante ressaltar que as propriedades do sistema podem sofrer alterações drásticas de acordo com a direção de quantização, $[hkl]$, na nanoestrutura. Pois, de acordo com a orientação do substrato, e dos plano cristalino, (hkl) , sobre o que se crescerá a nanoestrutura, a configuração das ligações atômicas serão diferentes, logo, as propriedades de interface, entre estas o *strain*, serão totalmente distintas. Neste intuito, é de vital importância saber descrever corretamente os tensores de *strain*, *stress* e elasticidade ao longo de uma direção cristalográfica arbitrária $[hkl]$.

Assim, escolher-se-á um sistema cujos eixos x , y e z coincidam, respectivamente, com as direções cristalográfica $[100]$, $[010]$ e $[001]$. Ao representar os elementos do referido tensor em uma direção cristalográfica arbitrária $[hkl]$, o sistema de coordenadas passará de (x, y, z) para (x', y', z') , e os elementos de matriz dos tensores de *strain*, *stress* e elasticidade passarão, respectivamente, de ε_{ij} para ε'_{ij} , τ_{ij} para τ'_{ij} e $c_{\alpha\beta ij}$ para $c'_{\alpha\beta ij}$. Dessa forma, reescrevendo a lei de Hook, Eq.(3.9), neste novo sistema de eixos tem-se que:

$$\tau'_{ij} = \sum_{kl} c'_{ijkl} \varepsilon'_{kl} \quad (i, j, k, l = x, y, z) \quad (3.14)$$

O sistema em análise agora é aquele descrito pelas coordenadas (x', y', z') , cujo plano de crescimento é ortogonal ao eixo z' , a qual coincide com a direção de quantização da nanoestrutura. Este sistema se relaciona com o sistema cristalográfico primitivo do substrato, (x, y, z) , por

¹ Vide apêndice A para notação dos índices de Miller.

uma rotação descrita pela matriz \mathcal{U} , dado por:

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \theta & \sin \varphi & \cos \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi \cos \theta & \cos \varphi & \sin \varphi \sin \theta \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

onde φ e θ são, respectivamente, os ângulos azimutal e polar (Fig.3.4). A partir da figura é possível definir os ângulos φ e θ em função dos índices de Miller h , k e l :

$$\theta = \arccos \left(\frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \right) \quad (3.16)$$

$$\varphi = \arccos \left(\frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}} \right) \quad (3.17)$$

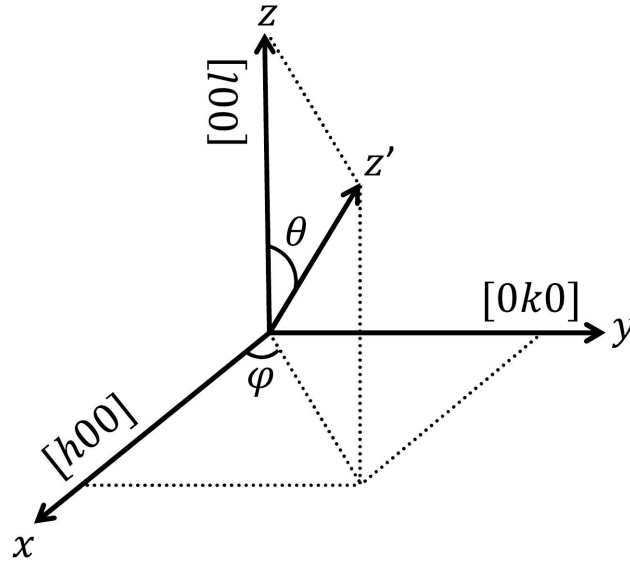


Fig. 3.4: Representação esquemática dos ângulos polar e azimutal, por meio dos quais é possível relacionar os sistemas cristalográficos (x', y', z') e (x, y, z) .

A regra geral para transformar os tensores de *stress*, *strain* e elasticidade entre os sistemas referenciais (x, y, z) e (x', y', z') é dada, respectivamente, por:

$$\tau'_{\alpha\beta} = u_{i\alpha} u_{j\beta} \tau_{ij}$$

$$\varepsilon'_{\alpha\beta} = u_{i\alpha} u_{j\beta} \varepsilon_{ij} \quad (3.18)$$

$$c'_{\gamma\delta kl} = u_{\alpha\gamma} u_{\beta\delta} u_{ik} u_{jl} c_{\alpha\beta ij},$$

onde u_{mn} são os elementos da matriz de rotação \mathcal{U} . Uma vez feita a conexão entre os dois sistemas coordenados por meio da matriz de rotação, basta inverter a Eq.(3.14) para obter os elementos do tensor de *strain* na nova direção cristalográfica.

Para obter os elementos do tensor de *strain* em uma direção arbitrária $[hkl]$ é necessário conhecer, de antemão, os elementos do tensor de *stress*. Assim sendo, a utilização de simetrias pode ajudar muito nessa tarefa. Entretanto, quando o problema abordado não é favorável simetricamente, a utilização de outras ferramentas como, por exemplo, a dinâmica molecular, podem ser muito valiosas. Neste trabalho utilizou-se tanto argumentos de simetrias, quando o problema mostrou-se favorável, quanto a dinâmica molecular para obter os elementos do tensor de *stress* e, com isso, calcular o tensor de *strain*.

Dependendo do sistema que se almeja estudar, a utilização de simetrias sempre é um ponto interessante a ser explorado, podendo facilitar a obtenção de resultados. No Apêndice B é discutido detalhadamente um procedimento para a obtenção dos elementos do tensor de *strain* para um caso particular de sistema, cujas simetrias reduziram de forma significativa o tratamento matemático, e os resultados foram utilizados na obtenção da estrutura eletrônicas de alguns sistemas.

3.3 Potenciais de Deformação e o Hamiltoniano de Strain

A teoria dos potenciais de deformação foi proposta por Bardeen e Shockley [12], dentro da aproximação de massa efetiva, e tinha o propósito investigar a interação de elétrons com fônons acústicos. Dentro desta teoria os modos acústicos de oscilação geram uma deformação local que induz uma modulação espacial do deslocamento das bandas de energia, acoplando, por conseguinte, elétrons e fônons. O deslocamento das bandas causado pelo *strain* homogêneo pode ser descrito usando a mesma teoria dos potenciais de deformação. Basicamente, o deslocamento de energia de uma banda e o *strain* estão relacionados pela expressão:

$$\Delta E^{(l)} = \sum_{ij} \Xi_{ij}^{(l)} \epsilon_{ij}, \quad (3.19)$$

onde ΔE^l é o deslocamento em energia da banda l , a partir do seu extremo, e Ξ é o potencial de deformação. A simetria do tensor de *strain* se reflete no potencial de deformação da seguinte forma: $\Xi_{ij}^{(l)} = \Xi_{ji}^{(l)}$. Assim, o número máximo de componentes independentes deste tensor é 6. Em sistemas semicondutores com simetria cúbica os extremos das bandas de condução e valência estão localizados em linhas de alta simetria, o que torna possível a descrição de um estado particular em termos de dois ou três potenciais de deformação [13, 7].

O Hamiltoniano atribuído ao *strain*, $\mathcal{H}(\epsilon)$, pode ser definido em termos do potencial de

deformação, com elementos de matriz tendo a forma:

$$\{\mathcal{H}(\boldsymbol{\varepsilon})\}_{mn} = \sum_{i,j} \Xi_{mn}^{ij} \varepsilon_{ij} \quad (3.20)$$

onde ε_{ij} são as componentes (ij) do tensor de *strain* e Ξ^{ij} é o operador deformação de potencial, usualmente escrito como:

$$\Xi_{mn}^{ij} = \left(-\frac{P_i P_j}{m_0} + V_{mn}^{ij} \right) \quad (3.21)$$

sendo V^{ij} é o potencial do cristal deformado. Os subíndices (mn) neste operador denotam os elementos de matriz do mesmo.

Considerando apenas os estados de buraco pesado e buraco leve, o Hamiltoniano de *strain* pode ser escrito como:

$$\mathbb{H}_{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{hh}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} & \mathcal{H}_{12}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} & \mathcal{H}_{13}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} & 0 \\ & \mathcal{H}_{lh}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} & 0 & \mathcal{H}_{13}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} \\ & & \mathcal{H}_{lh}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} & -\mathcal{H}_{12}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} \\ & & & \mathcal{H}_{hh}^{(\boldsymbol{\varepsilon})} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \end{array}, \quad (3.22)$$

onde os elementos de matriz são dados por [7]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{hh}^{\boldsymbol{\varepsilon}} &= a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - b \left[\varepsilon_{zz} - \frac{1}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \right] \\ \mathcal{H}_{hh}^{\boldsymbol{\varepsilon}} &= a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + b \left[\varepsilon_{zz} - \frac{1}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\mathcal{H}_{12}^{\boldsymbol{\varepsilon}} = -d (\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz})$$

$$\mathcal{H}_{13}^{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{xx}) + id \varepsilon_{xy}.$$

As quantidades a_v , b e d são os potenciais de deformação para a banda de valência. Da mesma forma que γ_1 , γ_2 e γ_3 são parâmetros de entrada para o Hamiltoniano de *Luttinger*, os potenciais de deformação são parâmetros de entrada para o Hamiltoniano de *strain*, sendo tabelados para cada material.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Ch. Heyn, Phys. Rev. B **64**, 165306 (2001).
- [2] F. Guffarth, R. Heitz, A. Schliwa, O. Stier, N. N. Ledentsov, A. R. Kovsh, V. M. Ustinov and D. Bimberg, Phys. Rev. B **64**, 085305 (2003).
- [3] K. Fu and Y. Fu, Appl. Phys. Lett. **94**, 181913 (2009).
- [4] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).
- [5] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain Induced Effects in Semiconductors*. (Wiley, New York, 1974).
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. (John Wiley & Sons, 7th, 1996).
- [7] J. Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*. (McGraw-Hill, 1993).
- [8] J. Nye, *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*. (Oxford University, 1957).
- [9] Y. Sun, S. E. Thompson, T. Nishida, *Strain Effect in Semiconductors: Theory and Device Applications*. (Springer, 2009).
- [10] R. Hook, *The Potentia Restitutiva* (1678).
- [11] J. M. Hinckley and J. Singh, Phys. Rev. B **42**, 3546 (1990).
- [12] J. Bardeen and W. Shockley, Phys. Rev. **80**, 72 (1950).
- [13] C. Herring and E. Vogt, Phys. Rev., **101**, 944 (1956).
- [14] P. Vogl, J. Olajos and W. Wegscheider, Surf. Sci. **267**, 83 (1992).
- [15] A. D. Andreev, E. P. O'Reilly, A. R. Adams and T. Ashley, Appl. Phys. Lett. **78**, 2640 (2001).

4. EXCITAÇÕES ELÁSTICAS ELEMENTARES: FÔNONS

Como visto no capítulo anterior, além das deformações elásticas estáticas que podem ocorrer nos sistemas cristalinos, há deformações que podem se propagar pela rede cristalina, sendo quantificadas em forma de excitações elementares denominadas de fônons. Neste capítulo irá se fazer uma introdução sobre os fônons e seus efeitos em materiais semicondutores do tipo blenda de zinco.

De forma sucinta, pode-se definir os fônons como sendo modos de vibração quantizados. Dentro do panorama da segunda quantização pode-se falar de um gás de fônons composto por quase-partículas que obedecem a estatística de Bose-Einstein e possuem energia $\hbar\omega$ e quase-momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$, sendo ω a frequência do modo de vibração e \mathbf{q} o vetor de onda associado à sua propagação. Portanto, a caracterização do fônon é feita obtendo a relação de dispersão $\omega(\mathbf{q})$.

A importância dos fônons advém de sua ampla manifestação nas várias propriedades dos materiais, a saber: fônons óticos e acústicos limitam a condutividade elétrica [1]; fônons óticos influenciam fortemente as propriedades óticas dos semicondutores, enquanto que fônons acústicos são predominantemente responsáveis por efeitos térmicos [1].

Dentro deste trabalho será de interesse apenas o acoplamento de portadores com fônons óticos longitudinais por meio da interação de Fröhlich¹. A introdução aos conceitos sobre fônons aqui apresentada será básica, no entanto, em livros texto, tais como: Blakmore [2], Kittel [3], Singh [4], Strocio [5] e Mahan [6], o tema em questão se encontra expandido em maiores detalhes.

A introdução aos fônons, e aos conceitos fundamentais ligados ao mesmos, será importante mais adiante, na análise de alguns efeitos envolvendo fônons e sua interação com portadores da rede cristalina.

¹ Herbert Fröhlich foi o primeiro a dar uma descrição formal dessa interação.

4.1 Fônons em Sistemas do tipo Blenda de Zinco

Descrição Clássica

Um modelo simples para introduzir a propagação de oscilações elásticas é a rede unidimensional de osciladores harmônicos, como ilustrado na Fig.(4.1). Nessa configuração a célula

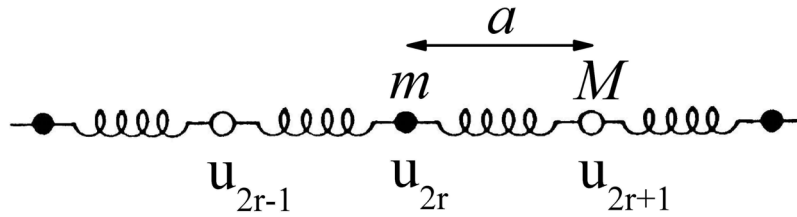


Fig. 4.1: Representação esquemática de uma rede cristalina diatômica unidimensional ligada por molas [5].

unitária é constituída de dois átomos com massas M e m , localizados ao longo da cadeia unidimensional de molas. Nesta cadeia diatômica as massas estão situadas de forma alternada ao longo da cadeia, e separadas uma da outra de uma distância a .

Para este modelo o deslocamento das massas m e M pode ser dado por [5]:

$$\begin{aligned} u_{2r} &= A_1 e^{i(2rqa - \omega t)} \\ u_{2r+1} &= A_2 e^{i[(2r+1)qa - \omega t]} \end{aligned} \quad , \quad (4.1)$$

onde A_1 e A_2 são as amplitudes de oscilação dos átomos localizados nos sítios $2r$ e $2r+1$, q é o vetor de onda do fônon e ω é sua frequência de oscilação. Na aproximação de primeiros vizinhos o deslocamento dos dois átomos da base satisfaz o seguinte conjunto de equações:

$$m \frac{d}{dt^2} u_{2r} = \alpha (u_{2r+1} + u_{2r-1} - 2u_{2r}) \quad (4.2)$$

$$M \frac{d}{dt^2} u_{2r+1} = \alpha (u_{2r+2} + u_{2r} - 2u_{2r+1})$$

onde α é constante de mola do sistema. Portanto, por meio das Eqs. (4.1) e (4.2) obtém-se a relação de dispersão para o sistema diatômico:

$$\omega_{\pm}^2 = \alpha \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \alpha \left[\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(qa)}{mM} \right]^{1/2}. \quad (4.3)$$

A partir da solução (4.3) é possível analisar os deslocamentos u_{2r} e u_{2r+1} . Assim, para $q = 0$,

se obtém a seguinte relação:

$$u_{2r} \propto -u_{2r+1} \quad \text{para } \omega_+ \quad (4.4)$$

$$u_{2r} \propto u_{2r+1} \quad \text{para } \omega_-.$$

A solução para ω_+ é conhecida como modo óptico, enquanto a solução ω_- é conhecida como modo acústico. Como apenas o deslocamento longitudinal foi modelado, estas soluções são conhecidas como longitudinais-ópticas (LO) e longitudinais-acústicas (LA). Além disso, a solução mostra ainda que as oscilações são periódicas, e possuem valores distintos para q apenas no intervalo $[-\pi/2a, \pi/2a]$. À parte das oscilações longitudinais, um sistema tridimensional apresentaria oscilações transversais, o que daria origem aos fônons transversais ópticos (TO) e acústicos (TA). Entretanto, estes últimos não serão considerados nas discussões ao longo do trabalho. A Figura (4.2) mostra um esquema simplificado dos modos de vibração acústico e

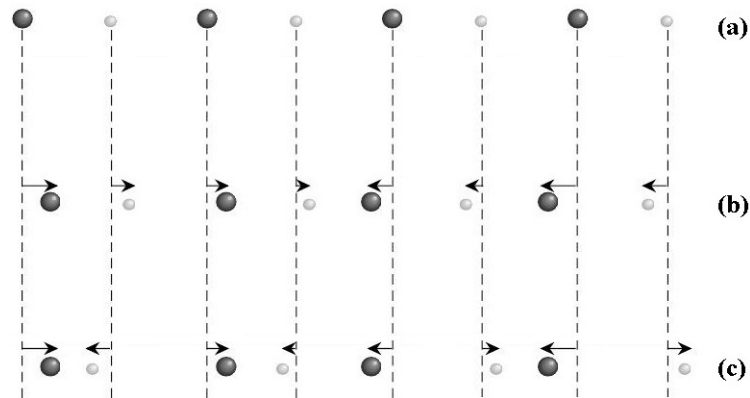


Fig. 4.2: Na situação (a) tem-se os átomos da base em situação de equilíbrio. Na situação (b) tem-se os átomos vibrando no mesmo sentido, caracterizando o modo acústico. Já na situação (c) os átomos vibram em sentidos opostos, caracterizando o modo óptico [4].

óptico. No modo óptico os átomos da base vibram em sentidos opostos, enquanto que no modo acústico os átomos da base vibram no mesmo sentido.

A seguir dar-se-á uma descrição quântica dos fônons.

Descrição Quântica

Na descrição quântica dos fônons as variáveis de posição e momento são substituídas pelo operadores de criação e aniquilação. Dessa forma, a descrição quântica dos fônons é tratada dentro do panorama da segunda quantização. Nesse panorama os fônons são descritos como

partículas, e o Hamiltoniano que as descrever pode ser escrito como [6]:

$$\mathcal{H}_q = \frac{\hat{p}_q^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_q^2\hat{u}_q^2 = \hbar\omega_q \left(\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \right), \quad (4.5)$$

onde ω_q é a frequência do fônon com vetor de onda q , e os operadores de criação \hat{a}_q^\dagger e aniquilação \hat{a}_q são definidos por [6]:

$$\hat{a}_q^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}}\hat{u}_q - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}}\hat{p}_q \quad (4.6)$$

$$\hat{a}_q = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}}\hat{u}_q + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_q}}\hat{p}_q.$$

Para o Hamiltoniano (4.5) as autoenergias serão dadas por [6]:

$$\mathcal{E}_{n_q} = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), \quad (4.7)$$

onde n_q representa o número de fônons com vetor de onda q , ou seja, o número de fônons que oscilam com frequência ω_q .

Um fônon com vetor de onda \mathbf{q} , cujo momento é $\hbar\mathbf{q}$, irá interagir com portadores de carga como, por exemplo, elétrons, cujo momento ao se deslocar pela rede cristalina é $\hbar\mathbf{k}$, e alterar este valor. Quando há a interação entre elétron e fônons reais as leis de conservação de momento e energia devem ser mantidas:

$$\hbar\mathbf{k}_i = \hbar\mathbf{k}_f + \hbar\mathbf{q} \quad (4.8)$$

$$\mathcal{E}_f = \mathcal{E}_i \pm \hbar\omega_q,$$

onde $\hbar\mathbf{k}_i$ e $\hbar\mathbf{k}_f$ são, respectivamente, os momenta inicial e final do elétron, e $\hbar\mathbf{q}$ é o momento do fônon. \mathcal{E}_i e \mathcal{E}_f são, respectivamente, as energias inicial e final do elétron e $\hbar\omega_q$ é a energia do modo do fônon. A Figura (4.3) mostra um esquema da emissão e absorção de fônons via

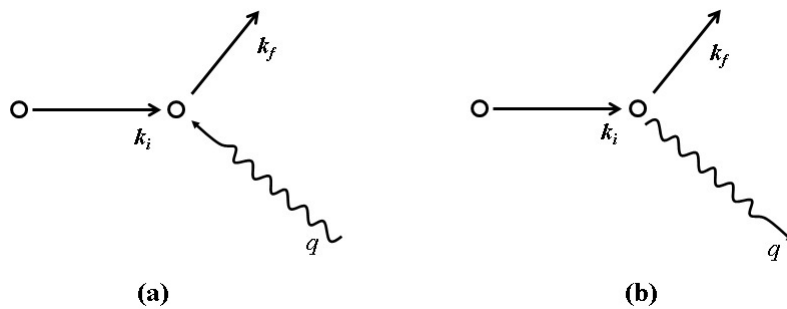


Fig. 4.3: a) Esquema diagramático da absorção (a) e emissão (b) de fônons via interação elétron-fônon.

interação elétron-fônon. Os fônons correspondentes ao modo óptico interagem com os elétrons por meio da interação de Fröhlich. Tal interação será discutida a seguir.

4.2 Fônons Ópticos Polares: Interação de Fröhlich

A interação do elétron com fônons da rede, a qual irá ser considerada neste trabalho, foi descrita originalmente por Fröhlich [7]. O Hamiltoniano proposto por ele para descrever a interação elétron-fônon pode ser escrito como [6]:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{\mathcal{M}_0}{v^{1/2} |q|} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger) \quad (4.9)$$

onde \mathbf{r} e \mathbf{p} são as coordenadas de posição e momento para o elétron, \mathbf{q} é o vetor de onda do fônon, v é o volume do sistema e \mathcal{M}_0 é definido como:

$$\mathcal{M}_0^2 = \frac{4\pi\alpha(\hbar\omega_0)^{3/2}}{(2m_0)^{1/2}}, \quad (4.10)$$

onde m_0 é a massa do elétron, ω_0 é a frequência do fônon e α é a constante que quantifica o acoplamento elétron-fônon, sendo definida como ²:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m_0}{2\hbar\omega_0} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right), \quad (4.11)$$

onde e é a carga do elétron, ε_0 e ε_∞ são as constantes dielétricas para baixas e altas frequências, respectivamente.

Voltando ao Hamiltoniano apresentado em (4.9), tem-se que: o primeiro termo descreve o movimento de um elétron livre de massa m_0 ; o segundo termo descreve um conjunto de osciladores harmônicos que possuem vetor de onda q e oscilam todos com frequência ω_0 ; o terceiro termo descreve a interação entre o elétron e o fônon.

Em semicondutores polares, como, por exemplo, *GaAs*, um dos íons da base está carregado positivamente, enquanto que o outro está carregado negativamente. Como visto pela Fig.(4.2) os fônons ópticos são caracterizados pela oscilação fora de fase entre os átomos da base. Assim, quando os íons oscilam em sentidos opostos, há a criação de um campo de polarização local. Este produz um campo elétrico, que é o responsável pelo espalhamento dos portadores de carga. Este tipo de interação também é denominado acoplamento polar [8].

Dentro deste quadro, quando um portador de carga é colocado em um meio polarizado ele é blindado. A teoria dielétrica descreve esse fenômeno pela indução de polarização ao redor do portador, e esta indução irá acompanhá-lo quando este se movimentar pelo meio cristalino. O conjunto *portador de carga mais polarização induzida* pode ser tratado como uma única entidade a qual denomina-se *polaron* [9].

² Embora se tenha usado a letra grega α para definir a constante de mola no sistema clássico, nesta seção sua definição é diferente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] A. A. Balandin, E. P. Pokatilov, D. L. Nika, *J. of Nanoelectron. Optoelectron.* **2**, 140 (2007).
- [2] J. S. Blakemore, *Solid State Physics*. (Cambridge University Press, 2th, 1985).
- [3] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. (John Wiley & Sons, New York, 1976).
- [4] J. Singh, *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*. (McGraw-Hill, New York, 5th, 1993).
- [5] M. A. Stroscio, M. Dutta, *Phonons in Nanostructures*. (Cambridge University Press, 2001).
- [6] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*. (Plenum Press, New York and London, 2th, 1990).
- [7] H. Fröhlich, *Adv. Phys.* **3**, 325 (1954).
- [8] G. D. Mahan, *Polarons and Ionic Crystals and Polar Semiconductors*. (North-Holland, Amsterdam, 1972).
- [9] L. D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* **3**, 664 (1933).

5. APLICAÇÃO EM SISTEMAS QUASE-BIDIMENSIONAIS: POÇOS QUÂNTICOS

Neste capítulo serão descritas as aplicações dos cálculos de estrutura eletrônica, introduzidos anteriormente, a problemas específicos em sistemas quase-bidimensionais de confinamento de portadores, em particular em sistemas de poços quânticos simples e poços quânticos duplos.

Foram desenvolvidas três linhas principais de investigação de propriedades eletrônicas e estruturais, a saber: (i) Estudou-se os efeitos da orientação cristalográfica sobre a estrutura eletrônica de poços quânticos. Em particular, investigou-se um sistema de poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo das direções cristalográficas [100] e [113]. Utilizando o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ foi possível incluir efeitos de *strain* e da temperatura no cálculo da estrutura eletrônica dos poços quânticos e, assim, fazer uma comparação entre as duas diferentes orientações cristalográficas consideradas. (ii) Estudou-se a dinâmica de relaxação de *spin* em um poço quântico simples de *AlGaAs/GaAs* orientado ao longo da direção [110] submetidos a campo magnético aplicado paralelamente à direção de crescimento do poço. A partir desta dinâmica foi possível obter, teoricamente, o grau de polarização circular em função do campo magnético. (iii) Estudou-se os efeitos sobre a estrutura eletrônica da aplicação de um campo magnético orientado perpendicularmente à direção de crescimento de poços quânticos simples e duplos infinitos de *AlGaAs/GaAs*. Foram desenvolvidas ferramentas teóricas para a análise das modificações da estrutura eletrônica.

5.1 Poços Quânticos Tensionados

Como descrito no Capítulo 3, um filme epitaxial que apresenta um descasamento de rede com seu substrato sofrerá uma deformação biaxial uniforme $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{||}$ definida como:

$$\epsilon_{||} = \frac{a_s}{a_l} - 1, \quad (5.1)$$

onde a_s e a_l são, respectivamente, os parâmetros de rede do substrato e do filme epitaxial depositado sobre o mesmo. Com o avanço das técnicas de crescimento por epitaxia as nanoestruturas

semicondutoras passaram a ser crescidas não apenas sob substratos orientados ao longo do plano convencional $\{100\}$, mas em planos cristalinos com altos índices de Miller como, por exemplo, o plano (113) . Dessa forma, a obtenção do tensor de *strain* nestes planos torna-se crucial na investigação dos sistemas em estudo.

Para as direções de interesse, $[100]$ e $[113]$, os elementos do tensor de *strain* são dados por¹:

Direção $[100]$:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{||} \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

onde se pode definir: $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{||}$.

Direção $[113]$:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & \varepsilon'_{xz} \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ \varepsilon'_{zx} & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

onde

$$\varepsilon'_{zz} = \varepsilon'_{\perp} = -\frac{198c_{11}^2 - 45c_{11}c_{12} - 374c_{11}c_{44} - 153c_{12}^2 + 124c_{12}c_{44} - 44c_{44}^2}{11(9c_{11}^2 + 9c_{11}c_{12} + 9c_{11}c_{44} - 18c_{12}^2 - 34c_{12}c_{44} + 4c_{44}^2)}\varepsilon_{||} \quad (5.4)$$

$$\varepsilon'_{xz} = \varepsilon'_{zx} = \varepsilon'_{13} = -\frac{12\sqrt{2}}{11} \frac{11c_{11}^2 + 2c_{11}c_{12} - 22c_{11}c_{44} - 13c_{12}^2 - 26c_{12}c_{44}}{(9c_{11}^2 + 9c_{11}c_{12} + 9c_{11}c_{44} - 18c_{12}^2 - 34c_{12}c_{44} + 4c_{44}^2)}\varepsilon_{||}.$$

Portanto, os elementos do tensor de *strain* ficam definidos, exclusivamente, pelas componentes do tensor de elasticidade c_{11} , c_{12} e c_{44} , próprias de cada material, e pela componente no plano, $\varepsilon_{||}$, do tensor de *strain*, definida pela Eq.(5.1).

As Equações (5.2) e (5.3) mostram, de forma clara, a complexidade assumida pelos dois elementos do tensor de *strain* conforme os índices de Miller assumem valores não convencionais. Outro fator importante que também pode ser usado para modular o valor das componentes do *strain* é a concentração dos materiais binários que compõem uma liga ternária. Se o material depositado sob o substrato for do tipo: $A_{1-x}B_xC$, onde x é a porcentagem do material B na liga, este se torna um novo parâmetro de ajuste. Como visto na Fig.(3.1), o valor de x interfere na constante de rede da liga ternária, que por sua vez modula o valor de $\varepsilon_{||}$, alterando as outras componentes do tensor.

Da mesma forma que o tensor de *strain* depende da direção cristalográfica (direção de quantização), o Hamiltoniano de Luttinger e o Hamiltoniano de Bir-Pikus também o dependerão,

¹ Para detalhes do cálculo vide apêndice B.

uma vez que a banda de valência apresenta auto grau de anisotropia com a direção cristalo-gráfica. Logo, antes de proceder com o cálculo da estrutura de bandas, é necessário obter os elementos das matrizes destes dois Hamiltonianos nas direções [001] e [113]. Reescrevendo estes dois Hamiltonianos na forma:

$$\mathbb{H}_L = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_L + \mathcal{Q}_L & -\mathcal{S}_L & \mathcal{R}_L & 0 \\ & \mathcal{P}_L - \mathcal{Q}_L & 0 & \mathcal{R}_L \\ & & \mathcal{P}_L - \mathcal{Q}_L & \mathcal{S}_L \\ & & & \mathcal{P}_L + \mathcal{Q}_L \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

e

$$\mathbb{H}_{BP} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{BP} + \mathcal{Q}_{BP} & -\mathcal{S}_{BP} & \mathcal{R}_{BP} & 0 \\ & \mathcal{P}_{BP} - \mathcal{Q}_{BP} & 0 & \mathcal{R}_{BP} \\ & & \mathcal{P}_{BP} - \mathcal{Q}_{BP} & \mathcal{S}_{BP} \\ & & & \mathcal{P}_{BP} + \mathcal{Q}_{BP} \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

onde os índices “L” e “BP” apenas rotulam os elementos das duas matrizes.

Para as direções de interesse, [001] e [113], os elementos das matrizes de Luttinger, na representação \mathbf{k} , e Bir-Pikus são dados por²:

Direção [100]:

Luttinger

$$\mathcal{P}_L \pm \mathcal{Q}_L = \frac{1}{2}(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)k_z^2 + \frac{1}{2}(\gamma_1 \pm \gamma_2)k_{\parallel}^2,$$

$$\mathcal{S}_L = \sqrt{3}\gamma_3 k_{-} k_z, \quad (5.7)$$

$$\mathcal{R}_L = -\frac{\sqrt{3}}{2}\gamma k_{-}^2 - \frac{\sqrt{2}}{3}\gamma_{\delta} k_{+}^2,$$

Bir-Pikus

$$\mathcal{P}_{BP} \pm \mathcal{Q}_{BP} = \frac{1}{2}[\beta_1(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})] \pm \beta_2(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}),$$

$$\mathcal{S}_{BP} = 0, \quad (5.8)$$

$$\mathcal{R}_{BP} = 0.$$

² Para detalhes do cálculo vide apêndice C.

Direção [113]:

Luttinger

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_L \pm \mathcal{Q}_L &= \frac{1}{2}(\gamma_1 \pm 2\gamma_{57:64})k_{\parallel}^2 + \frac{1}{2}(\gamma_1 \mp \gamma_{57:64})k_z^2 \pm \frac{24}{121}\gamma_{\delta}[-6\sqrt{2}k_x k_y + (k_x^2 - k_y^2)], \\ \mathcal{S}_L &= \sqrt{3}\gamma_{83:38}k_- k_z + \frac{\sqrt{3}}{121}\gamma_{\delta}[-12\sqrt{2}(k_{\parallel}^2 - 4k_z^2 + k_-^2)] - 32k_+ k_z + 21\sqrt{2}k_+^2, \\ \mathcal{R}_L &= -\frac{\sqrt{3}}{2}\gamma_{70:51}k_-^2 + \frac{2\sqrt{3}}{121}\gamma_{\delta}[12\sqrt{2}k_- k_z - 4(k_{\parallel}^2 + 2k_z^2 - 21\sqrt{2}k_+ k_z - 24k_+^2)],\end{aligned}\quad (5.9)$$

Bir-Pikus

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{BP} \pm \mathcal{Q}_{BP} &= \frac{1}{2}(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon'_{\perp})\beta_1 \pm (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon'_{\perp})\beta_{57:64} \mp \frac{144\sqrt{2}}{121}\beta_{\delta}\varepsilon'_{13}, \\ \mathcal{S}_{BP} &= \sqrt{3}\beta_{67:54}\varepsilon'_{13} - \frac{48\sqrt{6}}{121}(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon'_{\perp})\beta_{\delta}, \\ \mathcal{R}_{BP} &= -2\sqrt{3}[9\sqrt{2}\varepsilon'_{13} + 8(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon'_{\perp})]\beta_{\delta}.\end{aligned}\quad (5.10)$$

onde

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad \mathbf{k} = -i\nabla, \quad (5.11)$$

$$\gamma_{\delta} = \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{2}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\gamma_3 + \gamma_2}{2}, \quad \gamma_{n:p} = \frac{n\gamma_3 + p\gamma_2}{n+p}, \quad (5.12)$$

sendo γ_1 , γ_2 e γ_3 os parâmetros de Luttinger. Para os elementos da matriz de Bir-Pikus tem-se que:

$$\beta_{\delta} = \frac{\beta_3 - \beta_2}{2}, \quad \bar{\beta} = \frac{\beta_3 + \beta_2}{2}, \quad \beta_{n:p} = \frac{n\beta_3 + p\beta_2}{n+p}, \quad (5.13)$$

$$\beta_1 = 2a_v, \quad \beta_2 = b, \quad \beta_3 = \frac{d}{\sqrt{3}}, \quad (5.14)$$

Com as matrizes Hamiltonianas obtidas para as direções [001] e [113], basta agora obter as autofunções que descrevam, de modo satisfatório, a banda de valência.

O sistema de interesse constitui-se um poço quântico múltiplos de *GaAs* com barreiras de *AlGaAs*. Pelas barreiras entre os poços serem espessas, utilizar-se-á as autofunções de um poço quântico infinito para simular a estrutura eletrônica dos poços múltiplos, o que é uma aproximação razoável. Por conseguinte, na aproximação de função envelope, as autofunções são obtidas por meio de uma somatória do produto entre as funções de Bloch, $u_n(\mathbf{r})$, e funções envelope com diferentes paridades, $f_i^{(n)}$, tal que:

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = f_{\ell}^{(n)} u_n(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}}{\sqrt{A}} \left[\sqrt{\frac{2}{L_w}} \sin(k_z z) \right] u_n(\mathbf{r}) \quad (5.15)$$

onde L_w é a largura do poço quântico, A é a área da interface do poço e o índice n indexa os estados da banda de valência. No poço infinito supõe-se que as funções envelope se anulem fora da região do poço, o que implica que a componente z do vetor de onda do *bulk* fique restrita a valores dados por: $k_z = \ell\pi/L_w$, com $\ell = 1, 2, 3, \dots$. Portanto, definidas as autofunções do problemas, basta resolver a equação de autovalores:

$$(\mathbb{H}_L + \mathbb{H}_{BP})\psi_n(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_n\psi_n(\mathbf{r}) \quad (5.16)$$

para se obter a estrutura eletrônica dos poços quânticos orientados ao longo das direções [001] e [113].

Resultados e Discussão

A aplicação da metodologia descrita acima foi motivada por resultados experimentais disponíveis, que indicavam diferenças importantes da modulação da estrutura eletrônica de poços quânticos sob tensão, segundo diferentes direções cristalográficas. O sistema em análise consiste de poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* crescidos por *MBE* em um substrato de *GaAs* orientados ao longo das direções [001] e [113](A). A nanoestrutura crescida ao longo da direção [001] é composta por poços quânticos de *GaAs*, com espessura de $(55 \pm 2 \text{ \AA})$, separados por barreiras de *AlGaAs*, com espessura de $(285 \pm 11 \text{ \AA})$, e concentração de alumínio de (0.36 ± 0.01) . Para a direção [113](A) a nanoestrutura é composta de poços quânticos de *GaAs*, com espessura de $(52 \pm 1 \text{ \AA})$, separados por barreiras de *AlGaAs*, com espessura de $(256 \pm 5 \text{ \AA})$, e concentração de alumínio de (0.33 ± 0.01) . Dada a largura das barreiras é plausível supor que os poços estejam eletronicamente desacoplados. Assim, justifica-se a aproximação de barreiras infinitas nas simulações da estrutura eletrônica.

Na Figura (5.1) é mostrado o espectro de fotoluminescência (*PL*) dos dois sistemas de poços quânticos para várias temperaturas, bem como a diferença em energia entre os picos de buraco pesado (*HH*) e buraco leve (*LH*) em função da temperatura.

Até 90 K os espectros de *PL* são caracterizados por um único pico, atribuído à transição elétron-buraco pesado. Acima de 90 K aparece um ombro, proveniente da transição elétron-buraco leve [1]. A tarefa teórica proposta para este problema constitui-se em elucidar as razões para este comportamento contrastante entre as duas curvas da Fig.(5.1-c).

Ainda pela análise da Fig.(5.1-c) fica evidente que o aumento da temperatura provoca mudanças significativas na estrutura de bandas dos dois conjuntos de amostras, ocorrendo de modo

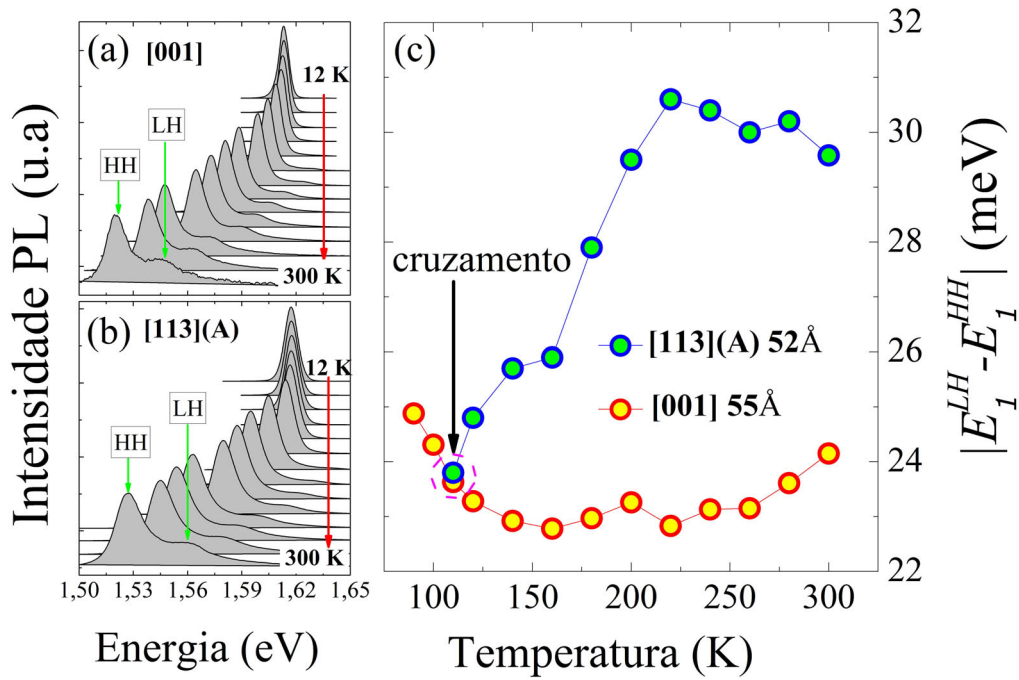


Fig. 5.1: Espectro de PL para diferentes temperaturas das amostras de (a) poços quânticos múltiplos de $Al_{36}Ga_{64}As/GaAs$ com $(55 \pm 2 \text{ \AA})$ de espessura crescida ao longo da direção [001]. (b) Poços quânticos múltiplos de $Al_{33}Ga_{67}As/GaAs$ com $(52 \pm 2 \text{ \AA})$ de espessura crescida ao longo da direção [113]. A intensidade de excitação do laser foi de 16 W/cm^2 . (c) Dependência com a temperatura da diferença absoluta, em energia, dos picos de buraco pesado (HH) e buraco leve (LH), $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$, para as direções [001] e [113].

distinto para as direções [001] e [113]. Acima de $\approx 100 \text{ K}$, temperatura a partir da qual o pico de buraco leve fica mais evidente, a diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$ para a direção [001] permanece praticamente constante, entretanto, para a direção [113] há um aumento significativo da diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$ quando comparado ao caso [001]. Como as duas amostras possuem características semelhantes, tal como largura do poço e concentração e alumínio, as quais, por si só, não seriam suficientes para justificar a diferença de comportamento mostrada na Fig.(5.1-c), faz-se necessário a investigação de fatores estruturais da amostra, fundamentalmente ligados ao “empilhamento” das camadas atômicas e suas ligações, que são diferenciadas para as direções [001] e [113] [Fig.(5.2)].

Para estudar os efeitos estruturais das duas amostras de poços múltiplos, duas amostras de poços quânticos simples de $AlAs/GaAs$, com as mesmas larguras das amostras reais, foram simuladas por colaboradores por meio da dinâmica molecular. A Figura (5.2) mostra o esquema de crescimento dos poços múltiplos ao longo das direções de crescimento [001] e [113]. Os parâmetros de rede dos materiais $GaAs$ e $AlAs$, extrapolados para 0 K , são: 5.64162 \AA e 5.6524 \AA

[2], respectivamente. Embora sejam muito próximos, ainda assim, quando há o crescimento da nanoestrutura, ocorre o descasamento de rede na interface do poço quântico, fazendo com que apareça *stress* nas interfaces entre os materiais *AlAs* e *GaAs*.

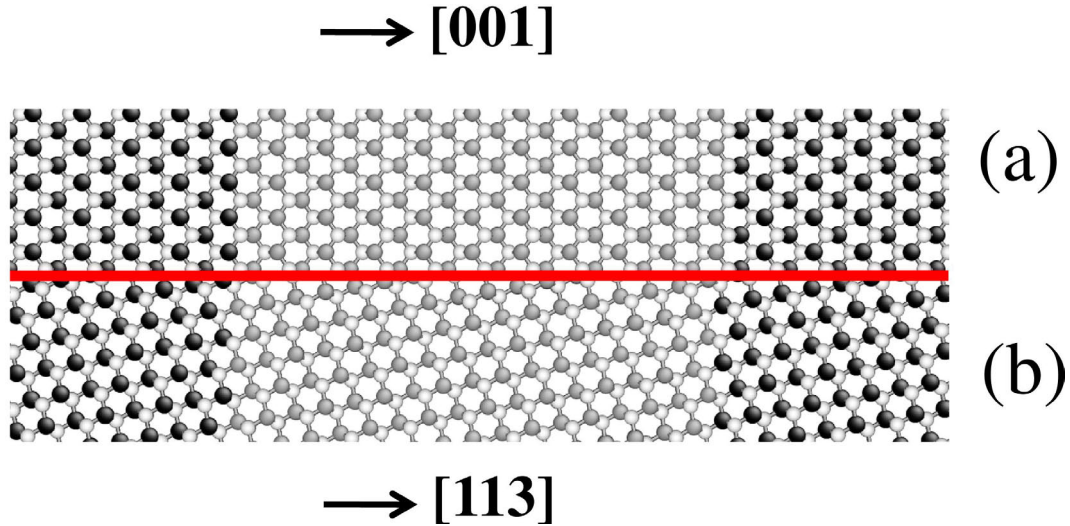


Fig. 5.2: Visualização da estrutura atômica dos poços quânticos crescidos via dinâmica molecular. Os pontos pretos representam átomos de *Al*, os pontos brancos átomos de *As* e os pontos cinzas átomos de *Ga*. (a) Poço quântico orientado ao longo da direção [001] com 56.2 Å de espessura. Os eixos x , y e z estão orientados paralelamente às direções [100], [010] e [001], respectivamente. (b) Poço quântico orientado ao longo da direção [113] com (56.0 Å) de espessura. Os eixos x , y e z estão orientados paralelamente às direções $[33\bar{2}]$, $[\bar{1}10]$ e [113], respectivamente.

Dos resultados provenientes da dinâmica molecular foi possível obter as componentes do tensor *stress* nas interfaces do poço quântico. Para a estrutura mostrada na Fig.(5.3-a), orientada ao longo da direção [001], são mostradas as seis componentes do tensor de *stress*. Por esta figura fica claro que na região central do poço quântico apenas as componentes τ_{11} e τ_{22} são diferentes de zero (≈ -0.23 GPa). Já nas interfaces o *stress*, para as mesmas componentes, pode chegar a atingir ± 3 GPa. A Figura (5.3-b) mostra o mesmo esquema, porém, com a estrutura orientada ao longo da direção [113]. Similarmente à direção [001], na região central do poço apenas as componentes τ_{11} e τ_{22} apresentam valores diferentes de zero: ≈ -0.25 GPa e ≈ -0.28 GPa, respectivamente. Já nas interfaces o *stress*, para as mesmas componentes, pode chegar a atingir ± 4 GPa. Este resultado mostra que o poço orientado ao longo da direção [113] é mais sensível ao *stress* nas interfaces do poço quântico.

Para analisar os efeitos que o *stress* gera na estrutura eletrônica da nanoestrutura fez-se um cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com *strain* incorporado. Utilizando a equação de autovalores (5.16) juntamente com a função envelope dada por (5.15), foram simuladas as estruturas eletrônicas em função do

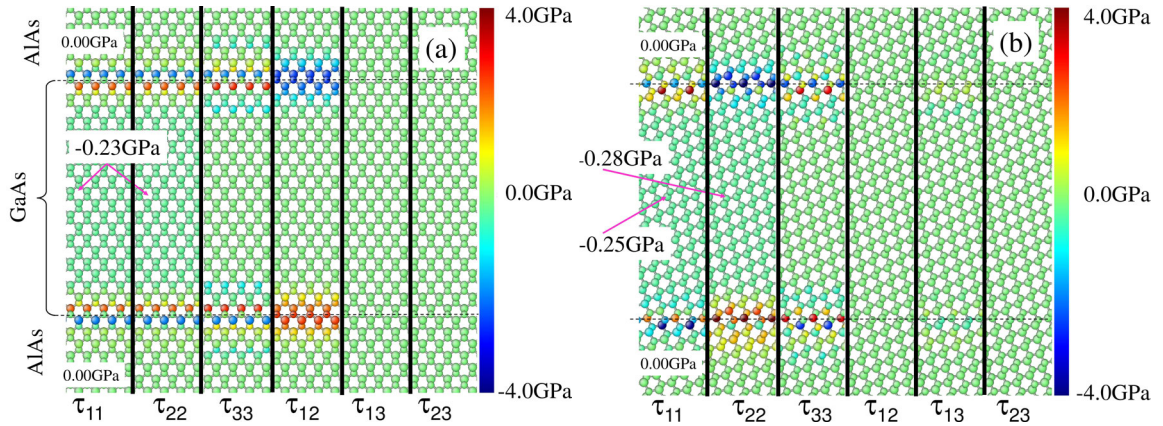


Fig. 5.3: Visualização das componentes do tensor de *stress*, τ_{ij} , ao longo da direção de crescimento dos poços quânticos: (a) [001] e (b) [113].

strain para poços quânticos infinitos de *GaAs*, orientados ao longo das direções [001] e [113]. Os resultados são mostrados nas Figs.(5.4-a) e (5.4-b). Os parâmetros do *GaAs*, necessários para a simulação, foram retirados da Ref.[2].

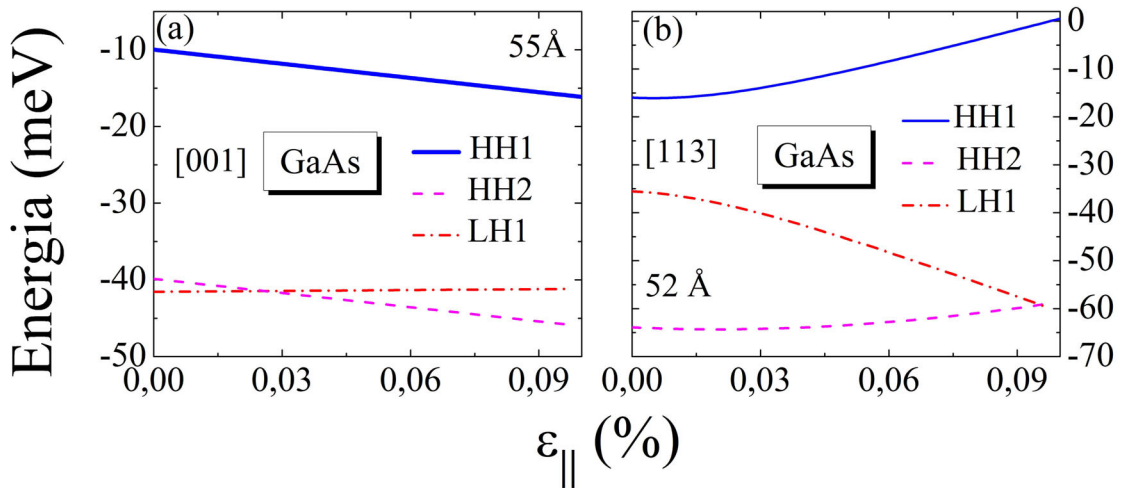


Fig. 5.4: Dependência da estrutura de bandas com a componente *in-plane* $\epsilon_{||}$ do *strain* para as direções: (a) [100] com 55 Å de espessura e (b) [113] com 52 Å de espessura.

Pela figura pode-se inferir que o efeito do *strain* no poço quântico orientado ao longo da direção [113] é mais pronunciado do que aquele presente no poço quântico orientado ao longo da direção [001]. Essa modificação drástica que ocorre na estrutura de bandas advém dos elementos não-diagonais do Hamiltoniano de Bir-Pikus. Estes, para a direção [113], Eq.(5.10), são diferentes de zero, enquanto que para a direção [001], são nulos, Eq.(5.8). Os termos não diagonais são responsáveis por acoplar diferentes estados da banda de valência, logo, como evidenciado pela Fig.(5.4), o sistema crescido ao longo da direção [113] apresenta uma grande sensibilidade à variação do *strain* no plano.

Outro fator importante a ser considerado é o aparecimento da componente ε'_{13} nos elementos $\mathcal{P}_{BP} \pm \mathcal{Q}_{BP}$ do Hamiltoniano orientado ao longo da direção [113]. Esse termo é responsável por afastar ou aproximar, em energia, os estados da banda de valência. Quando os estados estão mais próximos o acoplamento entre eles torna-se mais efetivo.

Baseado no cálculo dos estados da banda de valência como função do *strain in-plane* [Fig.5.4], foi possível obter a dependência da diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$, para as orientações [001] e [113], em função de $\varepsilon_{||}$. O resultado é mostrado na Fig.(5.5-a). A característica predominante nesta figura é o crescimento monotônico da diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$ para a direção [113], enquanto que para a direção [001] tal a diferença é praticamente constante. Esse comportamento contrastante das duas curvas é principalmente devido ao aparecimento do elemento ε'_{13} do tensor de *strain* no termo $\mathcal{P}_{BP} \pm \mathcal{Q}_{BP}$ [Eq.(5.10)]. Ainda na Fig.(5.5-a), observa-se que quando o valor do *strain* paralelo é de $\approx 0,037\%$ ocorre um cruzamento entre estas duas curvas. Com o propósito de investigar este ponto de cruzamento, onde os efeitos da tensão nos dois sistemas são equivalentes, foi feito um cálculo da posição deste ponto de cruzamento, para cada valor de $\varepsilon_{||}$, em função da largura do poço quântico, Fig.(5.5-b).

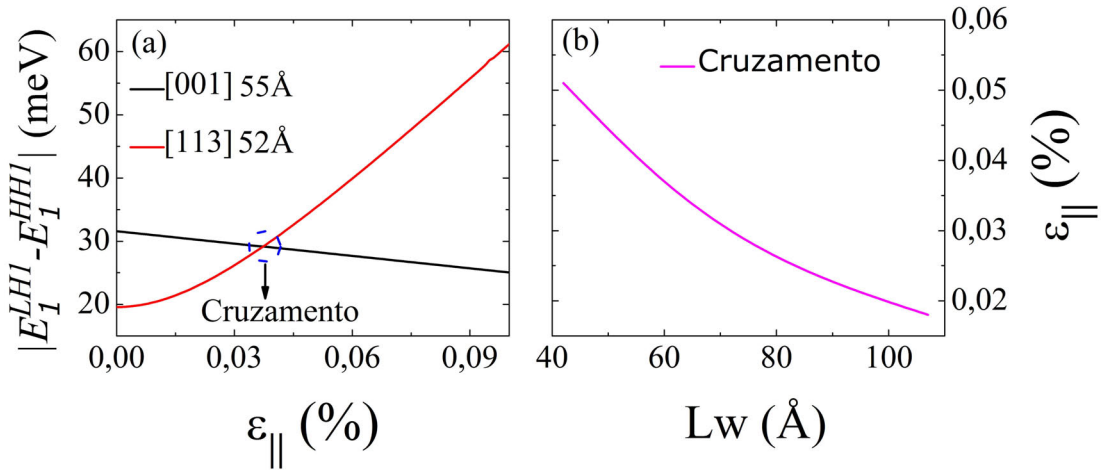


Fig. 5.5: (a) Dependência da diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$ com o $\varepsilon_{||}$. (b) Dependência do ponto de cruzamento em função da largura do poço quântico e do $\varepsilon_{||}$.

Como pode ser observado pela Fig.(5.5), à medida que a largura do poço diminui o ponto de cruzamento ocorre para valores de $\varepsilon_{||}$ cada vez maiores. Este comportamento advém do fato de que, conforme a largura L_w do poço é reduzida, o *strain* necessário para compensar o deslocamento dos estados da banda de valência deve ser maior. Em contrapartida, conforme a largura L_w do poço é aumentada, os termos \mathcal{S}_{BP} e \mathcal{R}_{BP} [Eq.(5.10)], responsáveis pelo acoplamento dos estados da banda de valência, se tornam mais efetivos no acoplamento, e o valor

de $\varepsilon_{||}$, necessário para compensar o deslocamento dos estados de buraco, torna-se menor. Por conseguinte, a Fig.(5.5-b) caracteriza o balanço entre a variação de $\varepsilon_{||}$ e L_w competindo pela variação da posição relativa dos estados da banda de valência.

Comparando as Figuras (5.5-a) e (5.1-c) observa-se comportamentos similares. Portanto, é de se esperar que haja alguma dependência funcional do tipo: $\varepsilon_{||} = \varepsilon_{||}(T)$. Para expressar tal dependência é necessário obter uma relação funcional entre a constante de rede dos materiais *AlGaAs* e *GaAs* com a temperatura: $a = a(T)$. Na Fig.(5.6) é mostrada a dependência do parâmetro de rede do *GaAs* [3] e do *AlGaAs* [4] com a temperatura. Para obter a relação funcional $a = a(T)$ foram ajustados dados experimentais utilizando-se um polinômio de grau três:

$$a(T) = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3, \quad (5.17)$$

onde os coeficientes a_0 , a_1 , a_2 e a_3 , obtidos por meio dos ajustes mostrados na Fig.(5.6), para os materiais *GaAs* e *AlGaAs*, são mostrados na Tabela 5.1.

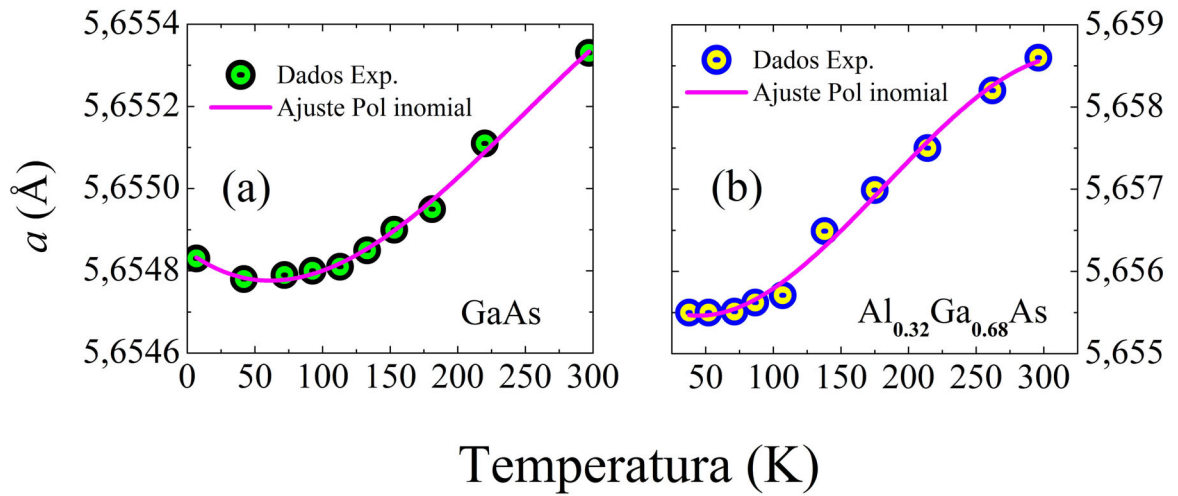


Fig. 5.6: Dependência do parâmetro de rede do (a) *GaAs* e (b) *AlGaAs* com a temperatura. Os dados experimentais foram ajustados por um polinômio de terceiro grau.

Uma vez obtida a dependência $a(T)$, basta reescrever a Eq.(5.1) como:

$$\varepsilon_{||}(T) = \frac{a_{AlGaAs}(T)}{a_{GaAs}(T)} - 1, \quad (5.18)$$

onde $a_{AlGaAs}(T)$ e $a_{GaAs}(T)$ são dados pela Eq.(5.17).

Utilizando $\varepsilon_{||}(T)$ como *input* para o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, foi possível simular a estrutura eletrônica em função da temperatura para os poços quânticos infinitos de *GaAs* orientados ao longo das direções [001] e [113]. Os resultados são mostrados na Fig.(5.7).

Tab. 5.1: Coeficientes que descrevem a dependência do parâmetro de rede com a temperatura do *GaAs* [3] e do *AlGaAs* [4].

coeficiente \ material	<i>GaAs</i>	<i>Al_{0.32}Ga_{0.68}As</i>
$a_0(\text{Å})$	5.65485	5.65574
$a_1(10^{-5}\text{ÅK}^{-1})$	-0.247485	-1.30541
$a_2(10^{-7}\text{ÅK}^{-2})$	0.230188	1.65932
$a_3(10^{-10}\text{ÅK}^{-3})$	-0.309327	1.65932

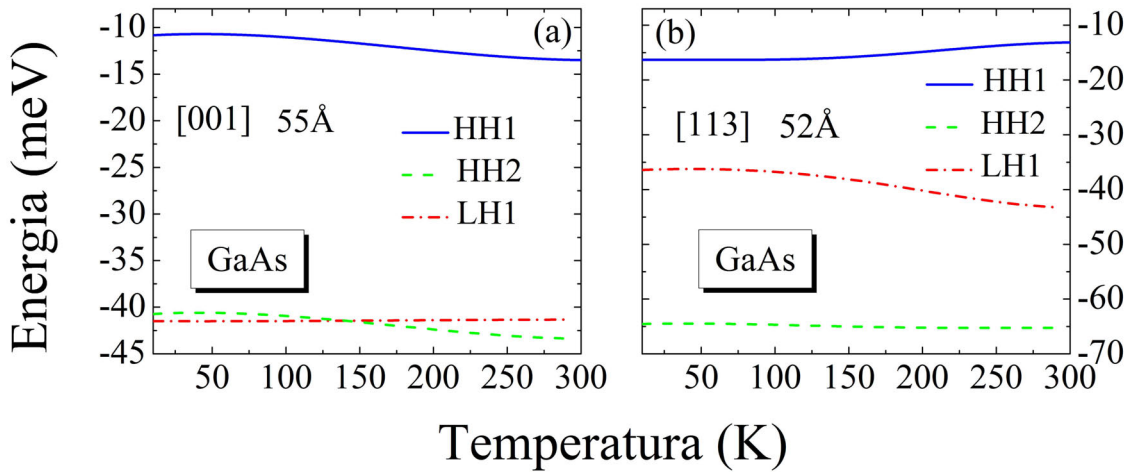


Fig. 5.7: Dependência da estrutura eletrônica dos poços quânticos com a temperatura para as direções: (a) [001] com 55 Å de espessura e (b) [113] com 52 Å de espessura.

Comparando a estrutura de bandas para os poços ao longo das direções [001] e [113] fica evidente a sensibilidade que a orientação [113] apresenta com a temperatura. Tal sensibilidade nada mais é do que um reflexo do efeito do *strain* atuando sobre o sistema. Embora a variação do parâmetro de rede com a temperatura seja da ordem de 10^{-3}Å , esta já é suficiente para causar modificações significativas na estrutura eletrônica do sistema. Analisando as Figs.(5.4-b) e (5.7-b) vê-se que os estados mais sensíveis à temperatura são o primeiro estado de buraco pesado (*HH1*) o primeiro estado de buraco leve (*LH1*).

A dependência do parâmetro de rede com a temperatura, $a(T)$, faz com que: $0.012\% < \varepsilon_{\parallel}(T) < 0.058\%$. Desse modo, uma pequena variação no parâmetro de rede, da ordem de

10^{-3}\AA , já é suficiente para produzir uma variação acentuada no parâmetro $\varepsilon_{||}$, o qual, por sua vez, causa mudanças drásticas na estrutura eletrônica do poço quântico de *GaAs* orientado ao longo da direção [113]. Pela discussão feita até aqui fica evidente que a validade do cálculo da estrutura eletrônica em função da temperatura depende da acurácia da relação funcional $a = a(T)$, obtida a partir de dados experimentais para o *GaAs* e *AlGaAs*.

A partir da Fig.(5.7) é possível construir a dependência com a temperatura da diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$. Os resultados são mostrados na Fig.(5.8). Analisando esta figura é possível notar

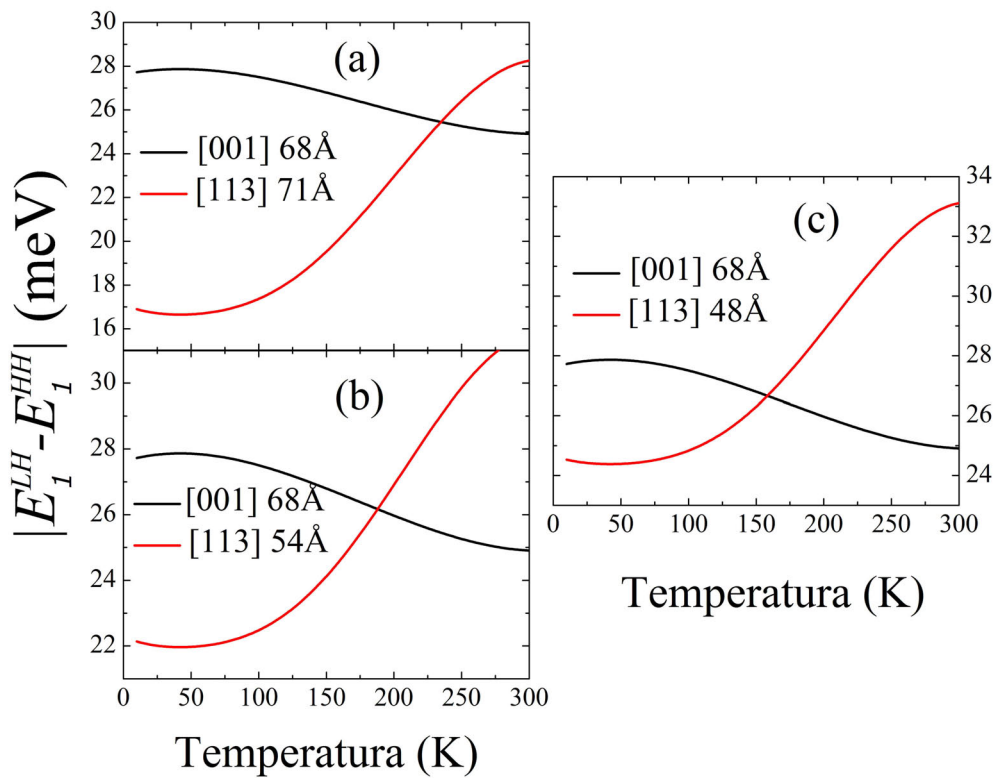


Fig. 5.8: Em (a), (b) e (c) é mostrado o cálculo teórico da diferença $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$ com a temperatura para diferentes larguras de poços quânticos infinitos de *GaAs*.

que as curvas mostradas possuem comportamento similar às curvas experimentais mostradas na Fig.(5.1-c). Além disso, o ponto de cruzamento apresenta forte dependência com a largura dos poços, evidenciando o efeito competitivo entre a largura L_w e o *strain* $\varepsilon_{||}$ pela posição relativa dos estados de buraco, já discutido.

Portanto, é razoável atribuir o comportamento descrito por $|E_1^{LH} - E_1^{HH}|$ em função da temperatura, T , para o sistema de poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo da direção [113], como sendo, em grande parte, devido ao *strain* presente no sistema.

Conclusão

A partir dos cálculos de estrutura eletrônica com diferentes configurações foi possível elucidar a natureza de resultados experimentais de fotoluminescência, os quais mostraram um forte contraste na dependência, com a temperatura, da diferença, em energia, entre o primeiro estado de buraco leve e primeiro estado de buraco pesado, em sistemas de poços quânticos múltiplos de *AlGaAs/GaAs* orientados ao longo das direções cristalográficas [001] e [113].

Cálculos de dinâmica molecular revelaram, por meio do comportamento do tensor de *stress*, que estruturalmente os poços quânticos orientados ao longo da direção [113] são mais propensos a sofrerem *stress* nas interfaces quando da sua formação.

Utilizando os Hamiltonianos de Luttinger e Bir-Pikus, foi possível obter a estrutura eletrônica de poços quânticos infinitos de *GaAs* ao longo das duas direções cristalográficas em questão. A partir destes cálculos pode-se inferir que o contraste da resposta óptica observado pelos dados experimentais advém da alta sensibilidade que os poços quânticos orientados ao longo da direção [113] apresentam com temperatura e *strain*.

Este resultado é importante, pois, controlando externamente a diferença, em energia, entre os estados de buraco leve e buraco pesado seria, em princípio, possível modulá-la para induzir mecanismos de acoplamento entre os estados, por exemplo via fônons ópticos (LO). Este processo pode ser possível se a diferença, em energia, entre os estados de buraco leve e buraco pesado for a energia correspondente à energia do fônon ($\hbar\omega_{LO} \approx 36 \text{ meV GaAs}$). Além disso, esta análise pode ser estendida para outros sistemas nanoscópicos [5], dando continuidade a esta linha de pesquisa, tanto por empenhos teóricos como experimentais.

5.2 Estrutura Eletrônica com Campo Magnético Externo

Até o momento não se discutiram os efeitos oriundos da presença de campos eletromagnéticos externos sobre a estrutura eletrônica. Assim, discutir-se-á o efeito gerado por um campo magnético externo aplicado à nanoestrutura.

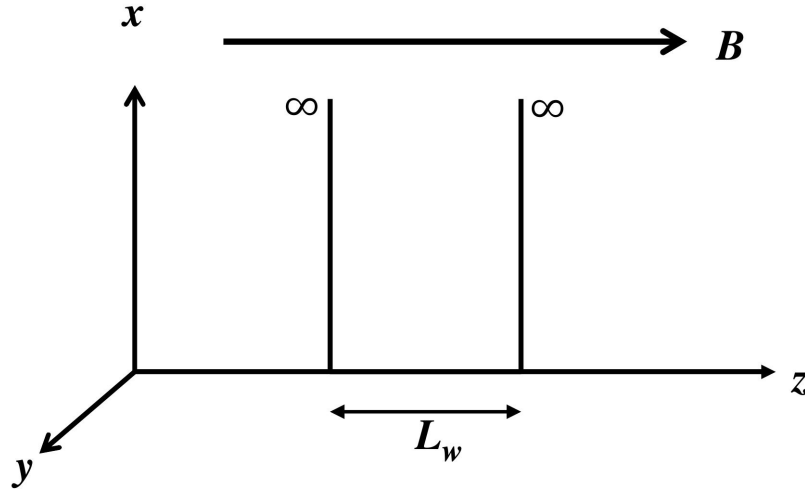


Fig. 5.9: Esquema ilustrativo de um poço quântico simples infinito com campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento, z .

Supondo que o campo magnético esteja aplicado ao longo da direção z (Fig.5.9), a qual coincide com a direção de crescimento da nanoestrutura, resulta que o efeito exercido por este sobre os portadores de carga se dá apenas no plano- xy , perpendicular à direção z . Dessa forma, os potenciais provenientes do campo magnético e do confinamento geométrico da nanoestrutura são independentes, logo o problema é separável em dois: um no plano- xy e outro ao longo da direção de crescimento z .

Ao longo da direção de crescimento, o potencial de confinamento fica definido pela geometria da nanoestrutura. Sendo o sistema em análise um poço quântico simples de $AlGaAs/GaAs$, as autofunções de um poço infinito, dadas pela Eq.(5.15), descrevem de maneira satisfatória o problema. Já no plano- xy o problema se reduz ao problema de um oscilador harmônico [6, 7], cujas autofunções são bem conhecidas, e podem ser dadas por [8]:

$$\phi_{mn}(r, \theta) = \frac{(-1)^{\min(m,n)}}{\sqrt{2\pi\ell_b^2}} \sqrt{\frac{\min(n,m)}{\max(n,m)}} \left(\frac{r}{\sqrt{2\ell_b^2}} \right)^{|n-m|} e^{-\frac{r^2}{4\ell_b^2}} \mathcal{L}_{\min(n,m)}^{|n-m|} \left(\frac{r^2}{2\ell_b^2} \right) e^{i|n-m|\theta}, \quad (5.19)$$

onde \mathcal{L} designa as funções polinomiais generalizadas de Laguerre e $\ell_b = \sqrt{\hbar c / eB}$ é o comprimento magnético.

Dessa forma, na aproximação de função envelope, a base de funções que descreve o sistema é uma combinação das funções que descrevem os níveis de Landau no plano- xy , expressas em coordenadas polares (r, θ) , as funções de um poço quântico infinito ao longo da direção de quantização z e as funções de Bloch.

Para introduzir os efeitos do campo magnético externo na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é necessário fazer a seguinte substituição:

$$\mathbf{k} = -i\nabla \implies \mathbf{k} = -i\nabla + \frac{e\mathbf{A}}{\hbar c} \quad (5.20)$$

onde \mathbf{A} é o potencial vetor, o qual relaciona-se com o campo magnético por meio da relação $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Utilizando o fato do sistema no plano- xy se apresentar como um oscilador harmônico, é possível reescrever k_x , k_y e k_z como:[9]

$$\begin{aligned} k_x &= \left(\frac{eB}{2\hbar c}\right)^{1/2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \\ k_y &= i\left(\frac{eB}{2\hbar c}\right)^{1/2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$k_z = -i\frac{\partial}{\partial z},$$

onde \hat{a} e \hat{a}^\dagger são os operadores de criação e aniquilação.

Além das mudanças na estrutura dos elementos da matriz de Luttinger, é preciso considerar o efeito Zeeman dos portadores. Na presença do campo magnético há a quebra da degenerescência dos estados de *spin up* e *spin down* nas bandas de condução e valência. Por ser um termo diagonal [10], sua inclusão na matriz Hamiltoniana se torna imediata, de forma que esta passa a ter agora a forma:

$$\mathbb{H}_{\mathbb{L}} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_L + \mathcal{Q}_L + \frac{3}{2}(\kappa + \frac{9}{4}q)\hbar\omega_c & -\mathcal{S}_L & \mathcal{R}_L & 0 \\ & \mathcal{P}_L - \mathcal{Q}_L + \frac{1}{2}(\kappa + \frac{1}{4}q)\hbar\omega_c & 0 & \mathcal{R}_L \\ & & \mathcal{P}_L - \mathcal{Q}_L - \frac{1}{2}(\kappa + \frac{1}{4}q)\hbar\omega_c & \mathcal{S}_L \\ & & & \mathcal{P}_L + \mathcal{Q}_L - \frac{3}{2}(\kappa + \frac{9}{4}q)\hbar\omega_c \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

onde $\mathcal{P}_L \pm \mathcal{Q}_L$, \mathcal{S}_L e \mathcal{R}_L são dados pela Eq.(5.7), porém com k_x , k_y e k_z dados pela Eq.(5.21) e $\hbar\omega_c$ é a frequência ciclotrônica, com $\omega_c = eB/(m^*c)$. κ e q são dois novos parâmetros descobertos por Luttinger [10] e, da mesma forma que γ_1 , γ_2 e γ_3 são constantes e característicos de cada material. A forma matricial explícita das matrizes Hamiltonianas na presença do campo magnético, utilizadas nessa seção, estão reportadas no Apêndice E.

Dinâmica de Spin em Poços Quânticos com Campo Magnético Externo

Devido à modulação do desdobramento dos estados de *spin* com o campo aplicado, a ocupação destes também será afetada. Experimentalmente este efeito pode ser confirmado usando a emissão de luz circularmente polarizada.

Para simular a ocupação relativa dos estados de *spin* foi implementado o seguinte modelo dinâmico para a relaxação de portadores [11, 12], dado por:

$$\begin{aligned} P_+ &= \frac{n_+}{\tau} + \frac{n_+}{\tau_s} - \frac{n_-}{\tau_s} e^{-\frac{\Delta E}{k_b T}} \\ P_- &= \frac{n_-}{\tau} - \frac{n_+}{\tau_s} + \frac{n_-}{\tau_s} e^{-\frac{\Delta E}{k_b T}} \end{aligned}, \quad (5.23)$$

onde P_+ e P_- são as taxas de geração de *spins*, n_+ e n_- são as ocupações dos estados de *spins* de maior e menor energia, respectivamente, τ e τ_s são, respectivamente, os tempos de recombinação óptica e de relaxação de *spin*, T é a temperatura e k_b é a constante de Boltzmann. O *spin-splitting*, $\Delta E = E_+ - E_- > 0$, se obtém por meio da diagonalização da Matriz de Luttinger (5.22).

Em termos da ocupação relativa dos estados de *spin*, n_\uparrow e n_\downarrow , o grau de polarização circular (Degree of Circular Polarization–DCP) pode ser dado por:

$$DCP = \frac{\left(\frac{n_+}{\tau} - \frac{n_-}{\tau}\right)}{\left(\frac{n_+}{\tau} + \frac{n_-}{\tau}\right)} = \frac{\left(\frac{n_\uparrow}{\tau} - \frac{n_\downarrow}{\tau}\right)}{\left(\frac{n_\uparrow}{\tau} + \frac{n_\downarrow}{\tau}\right)}. \quad (5.24)$$

Considerando as taxas de geração de *spins* iguais, $P_+ = P_-$, tem-se que:

$$DCP = \frac{\Delta E_{\uparrow\downarrow}}{|\Delta E_{\uparrow\downarrow}|} \frac{e^{-\frac{|\Delta E_{\uparrow\downarrow}|}{k_b T}} - 1}{\left(1 + \frac{\tau_s}{\tau}\right) + e^{-\frac{|\Delta E_{\uparrow\downarrow}|}{k_b T}}}, \quad (5.25)$$

onde $\Delta E_{\uparrow\downarrow}$ é o desdobramento de Zeeman. Estas equações, da forma como foram construídas, permitem a inversão do sinal do *DCP*. Outro fator importante a ser considerado é a hibridização dos estados da banda de valência com o campo magnético. Se está for levada em conta será necessário fazer a seguinte substituição: $n_\uparrow/\tau \implies |C_1(B)|^2 n_\uparrow/\tau$, uma vez que o estado não é mais puro [8]. Essa consideração gera correções no *DCP*.

Resultados e Discussão

O sistema em análise consiste de um poço quântico de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ crescido por *MBE* sobre um substrato de *GaAs* orientado ao longo da direção [110]. O poço quântico de

GaAs possui espessura nominal de 18.2 nm e as barreiras de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ possuem espessura nominal de 150 nm . Na Figura (5.10) são mostrados os espectros de magnetofotoluminescência (*MPL*) para as emissões com polarização σ^+ e σ^- . A Figura é caracterizada por dois picos bem definidos em 15 T , e vão perdendo a definição conforme o campo vai diminuindo de intensidade. Estes dois picos foram identificados: (i) pico de menor intensidade atribuído à emissão de X^- (tríon carregado negativamente). (ii) pico de maior intensidade atribuído à emissão de X^0 (éxciton neutro) [8]. Além disso, para os dois picos, à medida que a intensidade do campo magnético é aumentada, de 0 T para 15 T , os picos se deslocam para regiões de maior energia, como era de se esperar. Neste trabalho será analisado e discutido apenas o complexo X^0 . O complexo X^- está analisado na Ref. [8].

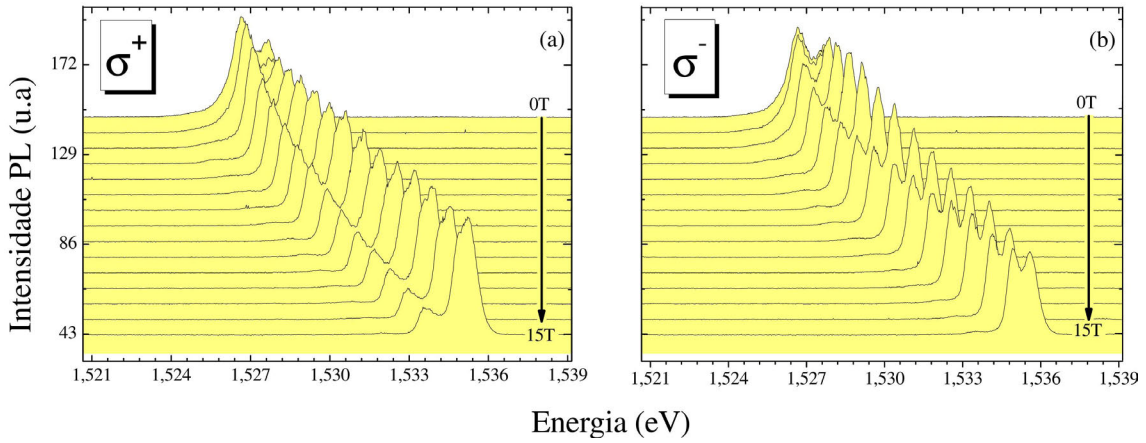


Fig. 5.10: Espectros de *MPL* para diferentes valores de campo magnético a 2 K e com potência de excitação de 5 nW : (a) emissão com polarização σ^+ e (b) emissão com polarização σ^- .

A partir da Fig.(5.10) foi possível extrair, em função do campo magnético B , o desdobramento Zeeman, $\Delta E_{\uparrow\downarrow}$, que é a diferença, em energia, entre os picos com emissão σ^+ e σ^- para cada valor de campo, e *DCP*, definido como:

$$DCP = \frac{I(\sigma^+) - I(\sigma^-)}{I(\sigma^+) + I(\sigma^-)}, \quad (5.26)$$

onde $I(\sigma^+)$ e $I(\sigma^-)$ são as intensidades integradas do complexo excitônico X^0 para cada valor de B . Os resultados são mostrados na Fig. (5.11). Observa-se que tanto para o desdobramento Zeeman como para o *DCP* há uma inversão de sinal com o campo magnético B . No caso do $\Delta E_{\uparrow\downarrow}$ a inversão ocorre em $B \approx 10.5 \text{ T}$, já para o *DCP* ocorre para $B \approx 13.5 \text{ T}$.

A partir destes resultados, a tarefa teórica consiste em elucidar as razões para estas inversões de sinal, e por qual motivo os valores de campo onde estas inversões acontecem diferem para o *DCP* e o $\Delta E_{\uparrow\downarrow}$.

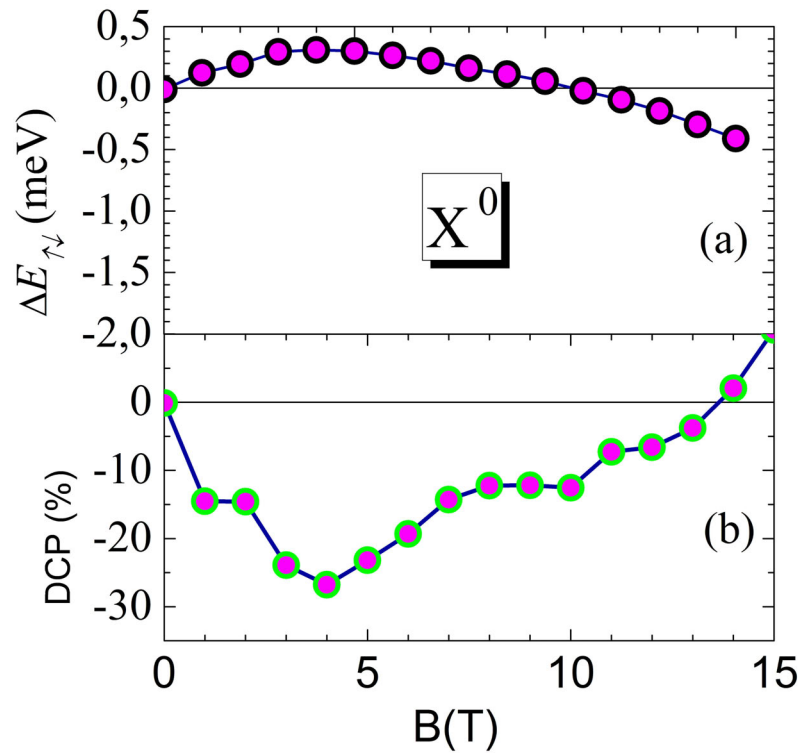


Fig. 5.11: (a) Zeeman *splitting* do complexo excitônico X^0 em função do campo magnético aplicado. (b) DCP do complexo excitônico X^0 em função do campo magnético aplicado. Os dados foram extraídos dos espectros da Fig.(5.10).

Com isso em mente, foi feito um cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ simulando um poço quântico infinito de *GaAs* orientado ao longo da direção [110] e com campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento da amostra. Para efeitos de comparação, foi feito o mesmo cálculo para um poço similar, porém orientado ao longo da direção [100]. Os resultados são mostrados na Fig.(5.12). Os poços simulados têm 30 nm, pois, como a base utilizada para expandir os autoestados são a de um poço infinito, as larguras do poço nominal e do poço infinito precisaram ser ajustadas, de forma que o poços simulado equivale ao poço e largura nominal 18.2 nm. Pela figura fica bem evidente que, para os dois poços simulados, o desdobramento Zeeman do buraco é o responsável pela inversão do sinal do desdobramento Zeeman total.

O fato da banda de valência ter maior peso no comportamento do desdobramento Zeeman advém da hibridização que os estados sofrem com o campo magnético. Abaixo são escritas as funções de estado para o elétron e o buraco [8]:

$$\left| \psi_{\uparrow(\downarrow)}^e \right\rangle \approx |s \uparrow (s \downarrow)\rangle \quad (5.27)$$

$$\left| \psi_{\downarrow}^{hh} \right\rangle \approx |hh \downarrow\rangle \quad (5.28)$$

$$\left| \psi_{\uparrow}^{hh} \right\rangle \approx C_1 |hh \uparrow\rangle + C_2 |lh \uparrow\rangle + C_3 |lh \downarrow\rangle + C_4 |hh \downarrow\rangle, \quad (5.29)$$

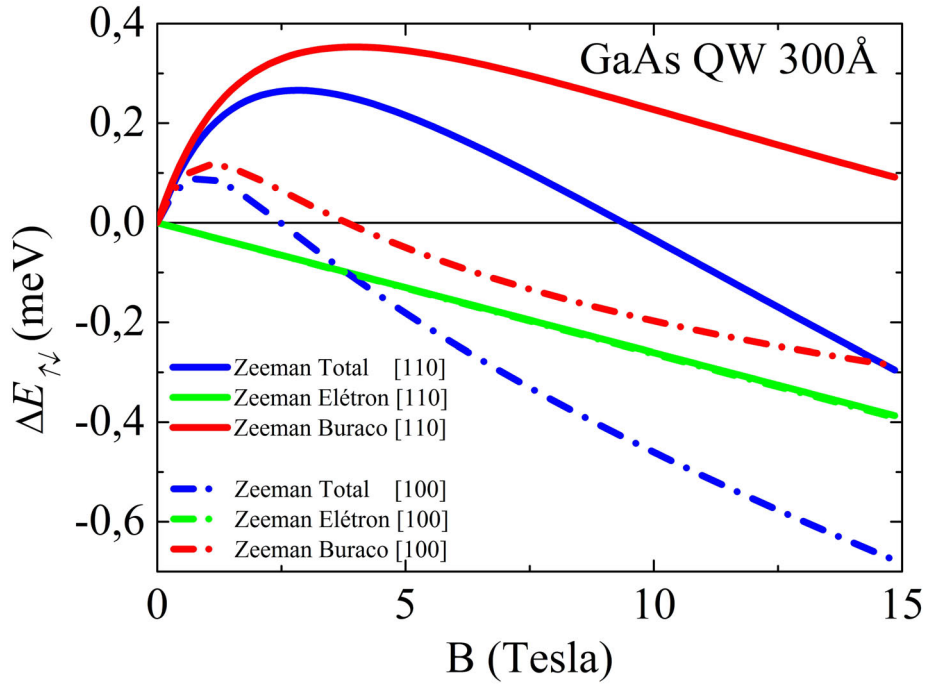


Fig. 5.12: Desdobramento Zeeman do estado fundamental para elétron, buraco e o total, o qual corresponde ao complexo X^0 . As linhas sólidas são referentes ao poço orientado ao longo da direção [110], já as linhas tracejadas-pontilhadas são referentes ao poço orientado ao longo da direção [100]. No cálculo não se levou em consideração os efeitos da interação de Coulomb.

onde $|\psi_{\uparrow(\downarrow)}^e\rangle$ e $|\psi_{\uparrow(\downarrow)}^{hh}\rangle$ são as funções que denotam o estado fundamental para elétrons e buracos com *spin-up* (\uparrow) e *spin-down* (\downarrow), e são escritas, dentro da aproximação de função envelope, como:

$$|\ell, n, m\rangle = f_\ell(z)\phi_{n,m}(r, \theta) |u\rangle \quad (5.30)$$

onde $f_\ell(z)$ está dada em (5.15), $\phi_{n,m}(r, \theta)$ está dada em (5.19) e $|u\rangle$ são as funções usuais de Bloch: $|s \uparrow\rangle$, $|s \downarrow\rangle$, $|hh \uparrow\rangle$, $|hh \downarrow\rangle$, $|lh \uparrow\rangle$, $|lh \downarrow\rangle$, dadas pela Eq.(2.38).

Assim, de acordo com (5.27), conforme o campo magnético vai ficando mais intenso o estado $|\psi_{\uparrow}^{hh}\rangle$ vai se tornando mais hibridizado e menos puro em seu caráter. Por conseguinte, os coeficientes C_i , que pesam o caráter dos demais estados na função $|\psi_{\uparrow}^{hh}\rangle$, passam a apresentar uma dependência com o campo magnético: $C_i = C_i(B)$.

A partir da obtenção teórica do desdobramento Zeeman, $\Delta E_{\uparrow\downarrow}$, é possível obter o DCP por meio da Eq.(5.25). Entretanto, como discutido anteriormente, a hibridização dos estados da banda de valência com o campo magnético é relevante na descrição fenomenológica do problema, e deve ser considerada. Logo, para que esta seja incorporada à Eq.(5.25), é necessário fazer a seguinte substituição: $n_{\uparrow}/\tau \implies |C_1(B)|^2 n_{\uparrow}/\tau$, uma vez que o estado não é mais puro.

A Figura (5.13) mostra o cálculo teórico do DCP em função do campo magnético para vários valores de τ_s/τ . Como pode ser inferido, o efeito da hibridização mostra-se relevante à medida que o campo magnético aumenta a intensidade. É possível observar, também, que o comportamento do DCP é influenciado pelo sinal do desdobramento Zeeman, uma vez que a inversão dos estados de $spin$ muda a ocupação relativa dos estados $|\psi_{\uparrow}^{hh}\rangle$ e $|\psi_{\downarrow}^{hh}\rangle$.

Outro ponto importante a ser considerado é o conjunto de valores τ_s/τ utilizados. Na Figura (5.13) não houve pretensão de se fazer um ajuste dos dados experimentais, mas, apenas elucidar, qualitativamente e não quantitativamente, o comportamento dos dados experimentais e a fenomenologia do problema. Nesse intuito, para uma melhor compreensão do significado relativo da relação τ_s/τ , foram utilizados vários valores para esta relação.

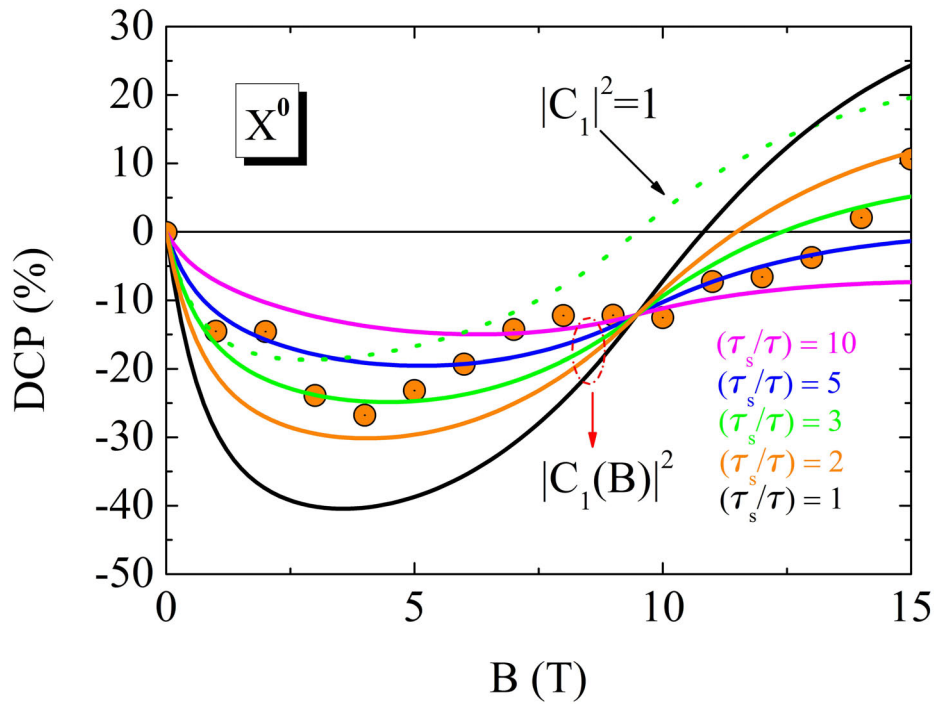


Fig. 5.13: Cálculos teóricos do DCP para o complexo excitônico X^0 , tomando vários valores de τ_s/τ .

A curva pontilhada denota o cálculo sem considerar a hibridização da banda de valência, enquanto que as curvas sólidas levam em conta a hibridização.

Para uma dada temperatura T , a natureza predominante dos processos de relaxação de $spins$ depende de algumas propriedades do sistema como, por exemplo, densidade efetiva de portadores e largura do poço quântico, afetando diretamente o valor de τ_s . Se for tomado, por exemplo, um valor de $\tau = 0.3 \text{ ns}$ [13], a relação τ_s/τ , para os valores utilizados na Fig.(5.13) fornece: $\tau_s = 3 \text{ ns}$, $\tau_s = 1.5 \text{ ns}$, $\tau_s = 0.9 \text{ ns}$, $\tau_s = 0.6 \text{ ns}$ e $\tau_s = 0.3 \text{ ns}$. Sob diferentes condições de densidade de elétrons, encontra-se na literatura valores que estão dentro desta faixa: $\tau_s \approx 0.3 \text{ ns}$

[14, 15] e $\tau_s \approx 1.0 \text{ ns}$ [16]. Além disso, de acordo com a estrutura morfológica da amostra e as condições de excitação, o tempo de recombinação óptica pode aumentar para valores próximos de $\tau \approx 1.0 \text{ ns}$ [17]. Por conseguinte, os valores $(\tau_s/\tau) = 1$, $(\tau_s/\tau) = 2$ e $(\tau_s/\tau) = 3$ estão todos dentro de uma margem aceitável de valores para descrever o sistema, e corroboram o comportamento experimental do *DCP*. O fato do estado fundamental da banda de valência ser híbrido ($|C_1|^2 \neq 1$) permite explicar o deslocamento do valor para o qual ocorre a troca de sinal do *DCP* para campos maiores.

Conclusão

A partir de espectros de *MPL*, com polarizações σ^+ e σ^- , de um sistema de poço quântico de *AlGaAs/GaAs* orientado ao longo da direção cristalográfica [110], foi possível estudar o comportamentos do desdobramento Zeeman e do grau de polarização circular (*DCP*) em função do campo magnético.

Simulando um poço quântico infinito de *GaAs*, com largura renormalizada, foi possível, por meio de um modelo dinâmico para o tempo de relaxação de *spins* combinado com um cálculo de estrutura eletrônica $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, determinar teoricamente, tanto o desdobramento Zeeman quanto o grau de polarização circular do sistema para o complexo X^0 .

Os resultados teóricos apontaram que este sistema é sensível à hibridização dos estados da banda de valência. As simulações mostram que a inversão do sinal do desdobramento Zeeman e do *DCP* estão diretamente relacionadas com a inversão dos estados de *spin-splitting*, $|hh \uparrow\rangle$ e $|hh \downarrow\rangle$, e que o *DCP* é diretamente afetado pela hibridização dos estados da banda de valência.

Além disso, sob determinadas circunstâncias estruturais, o *DCP* do complexo excitônico pode ser efetivamente modulado pelo campo magnético externo e de acordo com a intensidade do campo o caráter do estado fundamental de *spin* pode ser invertido.

5.3 Campo Magnético Perpendicular à Direção de Quantização

Nesta seção se estudará o efeito que o campo magnético exerce sobre os portadores de carga confinados em um sistema de poços quânticos duplos acoplados de *AlGaAs/GaAs*. Diferente do que foi discutido na seção 5.2, aqui o campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento na nanoestrutura, tomada como z .

Assim sendo, o problema a ser abordado consiste de um poço quântico duplo infinito com uma barreira interna de altura V_0 entre os poços. O campo magnético é aplicado ao longo da direção y , perpendicular à direção de quantização (Fig.5.14), tomada aqui como sendo ao longo da direção z .

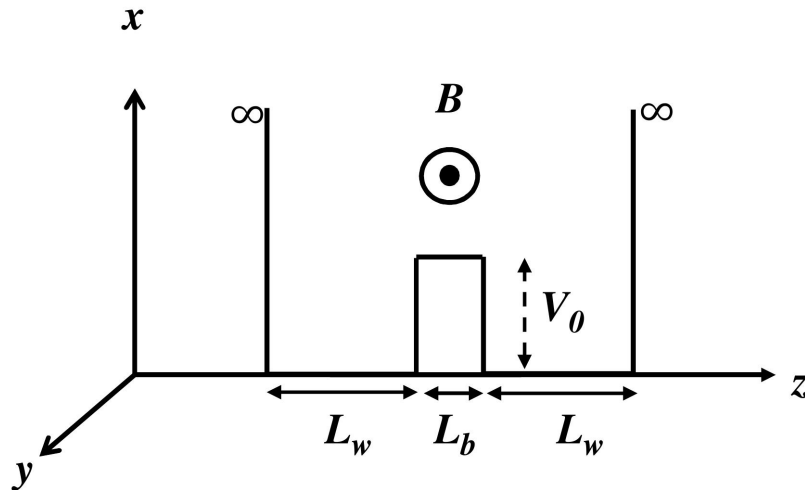


Fig. 5.14: Esquema ilustrativo de um poço quântico duplo infinito com campo magnético aplicado perpendicularmente à direção de crescimento, z .

O ponto de partida será a aproximação parabólica introduzida no Capítulo 2. O Hamiltoniano do problema é descrito por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(z) \quad (5.31)$$

onde m^* é a massa efetiva do portador, e a carga do elétron, c a velocidade da luz, \mathbf{p} o operador momento, \mathbf{A} o potencial vetor e $V(z)$ o potencial de confinamento, dado por:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } -\frac{L_w}{2} \leq z \leq \frac{L_b}{2} \\ V_0 & \text{se } -\frac{L_b}{2} \leq z \leq \frac{L_b}{2} \\ 0 & \text{se } \frac{L_b}{2} \leq z \leq \frac{L_w}{2} \\ \infty & \text{se } |z| \geq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (5.32)$$

O potencial vetor \mathbf{A} para esse problema será definido através do seguinte *gauge*: $\mathbf{A} = (Bz, 0, 0)$, de forma que $\nabla \times \mathbf{A} = Bz\hat{j}$.

A partir da definição do potencial do sistema, $V(z)$, e do *gauge* para o potencial vetor \mathbf{A} , o Hamiltoniano (5.31) toma a seguinte forma³:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d^2}{dz^2} \right) + \frac{m^* \omega_0^2}{2} (z + z_0)^2 + V(z) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (5.33)$$

onde k_y é a componente \hat{j} do vetor de onda \mathbf{k} . A frequência ciclotrônica ω_0 e o centro da órbita z_0 são definidos, respectivamente, como:

$$\omega_0 = \frac{eB}{m^*c} \quad (5.34)$$

$$z_0 = \ell_b k_x, \quad (5.35)$$

onde k_x é a componente \hat{i} do vetor de onda \mathbf{k} e ℓ_B denomina-se comprimento magnético, definido como:

$$\ell_b = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}, \quad (5.36)$$

sendo B a intensidade do campo magnético aplicado.

A função de onda que descreve o sistema pode ser escrita na forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) \varphi(z) \quad (5.37)$$

Novamente, a simetria do problema permite que este seja tratado de forma independente no plano- xy e ao longo direção de confinamento z . Portanto, a equação de autovalores que descreve o problema pode ser dada por:

$$\mathcal{H} \varphi(z) = E \varphi(z) \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d^2}{dz^2} \right) + \frac{m^* \omega_0^2}{2} (z + z_0)^2 + V(z) \right] \varphi(z) = \mathcal{E} \varphi(z), \quad (5.38)$$

onde \mathcal{E} é definido como: $\mathcal{E} = E - \hbar^2 k_y^2 / 2m^*$.

Fazendo sucessivas mudanças de variável é possível reescrever a Eq.(5.38) como⁴:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2}{dw^2} y(w) - \left(\frac{w^2}{4} + a_1 \right) y(w) \quad \text{se} \quad \sqrt{2} \left(-\frac{L_w}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \leq w \leq \sqrt{2} \left(-\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \\ \frac{d^2}{dw^2} y(w) - \left(\frac{w^2}{4} + a_2 \right) y(w) \quad \text{se} \quad \sqrt{2} \left(-\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \leq w \leq \sqrt{2} \left(\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \\ \frac{d^2}{dw^2} y(w) - \left(\frac{w^2}{4} + a_1 \right) y(w) \quad \text{se} \quad \sqrt{2} \left(\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \leq w \leq \sqrt{2} \left(\frac{L_w}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \end{array} \right. \quad (5.39)$$

³ Para detalhes do cálculo vide apêndice D

⁴ Para detalhes do cálculo vide apêndice D

onde a_1 e a_2 ficam definidos como:

$$\begin{cases} a_1 = -\frac{\lambda_1}{2} = \frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_0} & \text{se } \sqrt{2}\left(-\frac{L_w}{2\ell_b} + \ell_b k_x\right) \leq w \leq \sqrt{2}\left(-\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x\right) \\ a_2 = -\frac{\lambda_2}{2} = \frac{\mathcal{E}-V_0}{\hbar\omega_0} & \text{se } \sqrt{2}\left(-\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x\right) \leq w \leq \sqrt{2}\left(\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x\right) \\ a_1 = -\frac{\lambda_1}{2} = \frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_0} & \text{se } \sqrt{2}\left(\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x\right) \leq w \leq \sqrt{2}\left(\frac{L_w}{2\ell_b} + \ell_b k_x\right) \end{cases} \quad (5.40)$$

O conjunto de equações (5.39) possui a forma geral:

$$\frac{d^2 y(w)}{dw^2} - \left(\frac{w^2}{4} + a\right) y(w), \quad (5.41)$$

cujas soluções, pares e ímpares, são bem conhecidas, e recebem o nome de *Funções Cilíndricas Parabólicas* [18]:

$$y(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \mathcal{M}\left(\frac{a}{2} + \frac{1}{4} \middle| \frac{1}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) \quad \text{soluções pares} \quad (5.42)$$

$$y(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} w \mathcal{M}\left(\frac{a}{2} + \frac{3}{4} \middle| \frac{3}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) \quad \text{soluções ímpares}$$

em que \mathcal{M} é a *Função Hipergeométrica Confluente* [18]. Portanto, as soluções para o conjunto (5.39) podem ser reescritas como uma combinação linear das soluções pares e ímpares:

$$\Psi(w) = \begin{cases} y_I(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \middle| \frac{1}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \middle| \frac{3}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) \right] \\ y_{II}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_2 \mathcal{M}\left(\frac{a_2+1}{4} \middle| \frac{1}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_2 w \mathcal{M}\left(\frac{a_2+3}{4} \middle| \frac{3}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) \right] \\ y_{III}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_3 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \middle| \frac{1}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_3 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \middle| \frac{3}{2} \middle| \frac{w^2}{2}\right) \right] \end{cases} \quad (5.43)$$

onde y_I , y_{II} e y_{III} são as soluções para as regiões *I*, *II* e *III* mostradas na Fig.(5.15). Fixando o centro da órbita ciclotrônica, z_0 , na origem do sistema (para tal toma-se $k_x = 0$) o problema se reduz ao caso em que o potencial total do sistema é simétrico com relação à origem, logo, é possível separar as autofunções em dois subespaços distintos: par e ímpar. A partir das condições de contorno para a função de onda, isto é, continuidade desta e do fluxo de partículas através das interfaces do sistema [Fig.(5.15)], é possível mostrar que as equações transcendentais, as quais fornecem os autovalores para estados dos subespaços par e ímpar, são dadas, respectivamente, por⁵:

$$m_1^* \mathcal{G}_{1p} \mathcal{F}_{2p} = m_2^* \mathcal{G}_{2p} \mathcal{F}_{1p}, \quad m_1^* \mathcal{G}_{1i} \mathcal{F}_{2i} = m_2^* \mathcal{G}_{2i} \mathcal{F}_{1i} \quad (5.44)$$

⁵ Para detalhes do cálculo vide apêndice D

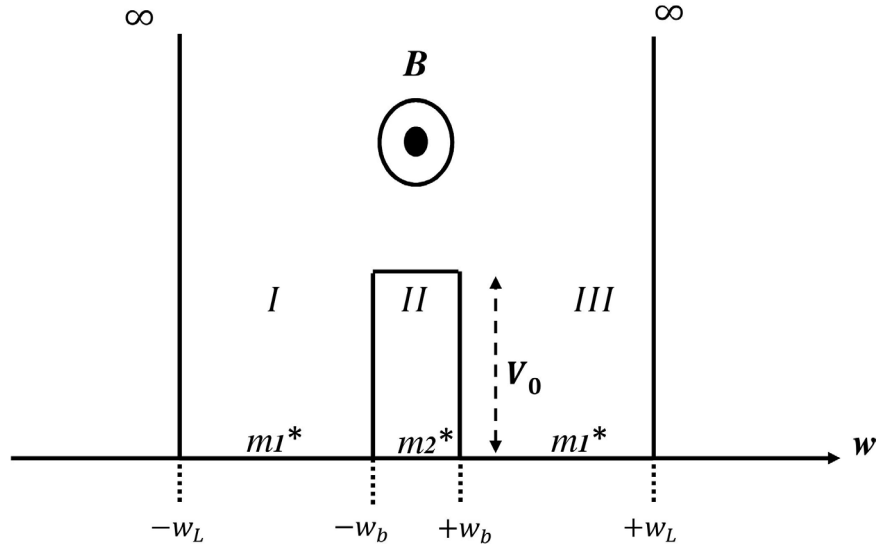


Fig. 5.15: Esquema ilustrativo das regiões do poço duplo na variável w , onde se definem as funções $y_I(w)$, $y_{II}(w)$ e $y_{III}(w)$. Nesta variável, as posições da interface são dadas na escala do comprimento magnético ℓ_b .

onde

$$\mathcal{G}_{1p}(a_{1p}) = e^{-w_b^2/4} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) - \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right]$$

$$\mathcal{G}_{2p}(a_{2p}) = e^{-w_b^2/4} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{2p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right]$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{1p}(a_{1p}) = e^{-w_b^2/4} & \left\{ -\frac{w_b}{2} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) - \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right. \\ & + \frac{w_b}{2} (a_{1p}+1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) - \frac{\beta}{w_L} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right. \\ & \left. \left. + \frac{w_b^2}{6} (a_{1p}+3) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+7}{4} \left| \frac{5}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\mathcal{F}_{2p}(a_{2p}) = e^{-w_b^2/4} \left[-\frac{w_b}{2} \mathcal{M} \left(\frac{a_{2p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \frac{w_b^2}{2} (a_{2p}+1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{2p}+5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right]$$

$$\mathcal{G}_{1i}(a_{1i}) = e^{-w_b^2/4} \left[-\mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right]$$

$$\mathcal{G}_{2i}(a_{2i}) = e^{-w_b^2/4} \left[w_b \mathcal{M} \left(\frac{a_{2i}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right]$$

$$\mathcal{F}_{1i}(a_{1i}) = e^{-w_b^2/4} \left\{ -\frac{w_b}{2} \left[-\mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{w_b}{2}(a_{1i} + 1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i} + 5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1i} + 3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right. \\
& \left. + \frac{w_b^2}{6}(a_{1i} + 3) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i} + 7}{4} \left| \frac{5}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \Big\} \\
\mathcal{F}_{2i}(a_{2i}) & = e^{-w_b^2/4} \left[\left(1 - \frac{w_b^2}{2} \right) \mathcal{M} \left(\frac{a_{2i} + 3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right. \\
& \left. + \frac{w_b^2}{2}(a_{2i} + 1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{2i} + 5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right], \tag{5.45}
\end{aligned}$$

onde a w_b e w_L são as posições da barreira central e da interface do poço na variável w , e são dados por: $w_b = \sqrt{2}L_b/(2\ell_B)$ e $w_L = \sqrt{2}L_w/(2\ell_B)$. O parâmetro β , dado por:

$$\beta = \frac{\mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_L^2}{2} \right)}{\mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_L^2}{2} \right)}, \tag{5.46}$$

advém da condição de contorno $\Psi_{I(III)}(w = -(+)w_L) = 0$. Além disso, as variáveis a_1 e a_2 possuem a seguinte relação: $a_2 = a_1 - V_0$. É importante apontar também que, da forma como o parâmetro a_1 se relaciona com os autovalores \mathcal{E} , as equações construídas acima só serão válidas quando $a_1 < 0$.

A partir da equação de autovalores e da relação entre os coeficientes é possível⁶ mostrar que as funções de onda assumem a forma:

$$\Psi_{3p}(w) = \begin{cases} \Psi_{3I}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \\ \Psi_{3II}(w) = \mathcal{A}_1 \frac{\mathcal{G}_{1p}}{\mathcal{G}_{2p}} e^{-\frac{w^2}{4}} \mathcal{M} \left(\frac{a_2}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \\ \Psi_{3III}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) - \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right]. \end{cases} \tag{5.47}$$

para estados pares, e:

$$\Psi_{3i}(w) = \begin{cases} \Psi_{3I}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \\ \Psi_{3II}(w) = \mathcal{A}_1 \frac{\mathcal{G}_{1i}}{\mathcal{G}_{2i}} e^{-\frac{w^2}{4}} w \mathcal{M} \left(\frac{a_2}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \\ \Psi_{3III}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[-\mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1 + 3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \end{cases} \tag{5.48}$$

para estados ímpares. O coeficiente \mathcal{A}_1 , tanto para estados pares como para estados ímpares pode ser determinado via normalização das autofunções: $\int \Psi_{3p(i)}^* \Psi_{3p(i)} dw = 1$.

⁶ Para detalhes do cálculo vide Apêndice D

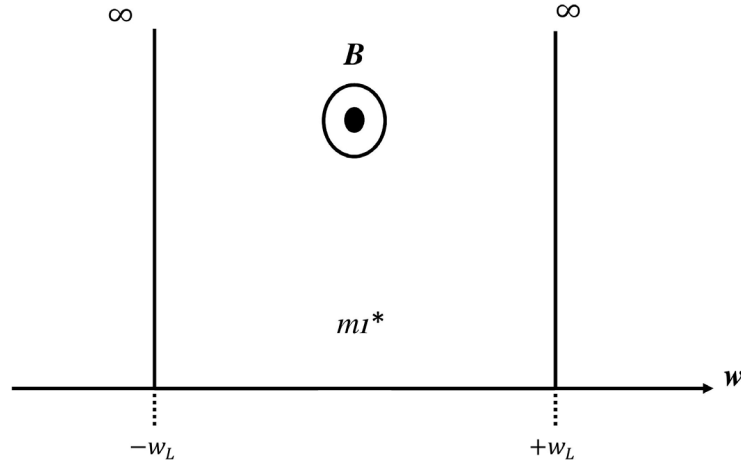


Fig. 5.16: Esquema ilustrativo do poço infinito na variável w . A largura w_L possui a mesma definição do caso anterior.

No limite em que a espessura da barreira de separação entre os poços vai a zero ($w_b \rightarrow 0$) o poço duplo infinito se reduz a um poço infinito de largura $2L_w$ [Fig.(5.16)], e as equações transcendentais para os autovalores, (5.44), se reduzem às equações:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_L^2}{2} \right) &= 0 && \text{(soluções pares)} \\ \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_L^2}{2} \right) &= 0 && \text{(soluções ímpares)} \end{aligned} \quad (5.49)$$

com autofunções dadas por:

$$\Psi_{p(i)}(w) = \tilde{\mathcal{A}} e^{-\frac{x^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p(i)}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} x \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p(i)}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \quad (5.50)$$

onde os subíndices “p” e “i” diferenciam os valores de a_1 para estados dos dois subespaços, e $\tilde{\mathcal{A}}$ é uma constante a ser determinada via normalização da função de onda: $\int \Psi_{p(i)}^* \Psi_{p(i)} dw = 1$.

As soluções (5.44) e (5.49) são dependentes do campo magnético B por meio do parâmetro a_1 , o qual fornece os autovalores do sistema, e possui a seguinte dependência com o campo magnético: $a_1 \propto 1/B$. Logo, torna-se conveniente analisar o comportamento assintótico das soluções em função de B .

Como as soluções (5.44) e (5.49) dependem explicitamente da função $\mathcal{M}(a_1|b|w)$, bastar-se-á fixar b e w , e analisar apenas o comportamento assintótico do parâmetro a_1 .

Segundo Abramowitz & Stegun [18] $\mathcal{M}(a_1|b|w)$ apresenta comportamentos assintóticos bem definidos:

- (i) a é muito grande (b e w fixos). Essa situação ocorre quando $B \rightarrow 0$ e, conseqüentemente,

$a_1 \rightarrow \infty$; de forma que $\mathcal{M}(a_1|b|w)$ pode ser expressada como:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(a_1|b|w) &= \Gamma(b)e^{\frac{w}{2}} \left(\frac{bw}{2} - a_1w \right)^{\frac{1}{4} - \frac{b}{2}} \pi^{-\frac{1}{2}} \cos \left(\sqrt{2bw - 4a_1w} - \frac{b\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \\ &\times \left[1 + \mathcal{O} \left(\left| \frac{b}{2} - a_1 \right|^{-\frac{1}{2}} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.51)$$

e, conforme $a \rightarrow -\infty$, para b fixo, w torna-se real.

Para o problema do poço simples infinito, a partir de (5.51), com $b = 1/2$ para estados pares e $b = 3/2$ para estados ímpares, e $w = w_L^2/2$, chega-se a expressões analíticas para o parâmetro a_1 , dadas por:

$$\left. \begin{aligned} -a_{1p} &= \frac{1}{2w_L^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \pi^2 - \frac{1}{4} \quad (\text{estados pares}) \\ -a_{1i} &= \frac{1}{2w_L^2} (n+1)^2 \pi^2 - \frac{3}{4} \quad (\text{estados ímpares}) \end{aligned} \right\} (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (5.52)$$

Ainda para o problema do poço simples infinito, a partir de (5.51), com $b = 1/2$; $a_1 = (1 - \lambda)/4$ para estados pares, e $b = 3/2$; $a_1 = (3 - \lambda)/4$ para estados ímpares, é trivial mostrar que os autovalores do sistema se reduzem às expressões:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{E}_n &= \frac{(2n+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^* L_w^2} \quad \text{estados pares} \\ \mathcal{E}_n &= \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^* L_w^2} \quad \text{estados ímpares} \end{aligned} \right\} (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (5.53)$$

Como era de se esperar, as Eqs.(5.53) são as expressões para os autovalores de um poço infinito sem campo magnético. A obtenção de (5.53) a partir de (5.49) quando $B \rightarrow 0$ demonstra a validade das soluções construídas até o momento para o poço simples infinito.

Outro ponto importante a ser abordado é referente ao domínio de validade da expressão (5.51) com o campo magnético. Um método simples para determinar até que valor de campo tal aproximação é válida consiste em definir o range de campo a ser explorado, por exemplo, $B \in [B_{min}, B_{int}]$. A partir de tal range, se obtém os valores de a_{1p} e a_{1i} , por meio da Eq.(5.52) começando com valores de B próximos ao valor de B_{min} . Em contrapartida, se obtém os valores de a_{1p} e a_{1i} pela Eq.(5.49) começando com valores de B próximos ao valor de B_{int} . Em algum valor de campo, por exemplo, B_1 ($B_{min} < B_1 < B_{int}$), os valores obtidos pelas Eq.(5.50) e (5.52) convergirão (dentro de um δB que estipulará a precisão desejada). Logo, esse valor de campo marcará a região de transição entre os dois conjuntos de soluções. Por conseguinte, em $B = 0$, utiliza-se a solução analítica (5.53); para $B \in]0, B_{int}]$ utiliza-se a solução (5.52) e para $B > B_1$ utiliza-se a solução (5.49).

(ii) a_1 é muito pequeno (b e w fixos). Essa situação ocorre quando $B \rightarrow \infty$ e, consequentemente, $a_1 \rightarrow 0$; na situação $a \rightarrow 0$, $\mathcal{M}(a_1|b|w)$ pode ser aproximada por [18]:

$$\mathcal{M}(a_1|b|w) \approx 1. \quad (5.54)$$

Impondo essa condição, é trivial mostrar que os autovalores da Eq.(5.50) passam a ser determinados por:

$$\mathcal{E}_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (5.55)$$

que, como era de se esperar, são os níveis de Landau. Novamente a obtenção de (5.55) a partir de (5.49) comprova a validade das soluções construídas até o momento para o poço simples infinito.

Para determinar o range de validade do conjunto de soluções (5.50) na situação de $B \rightarrow \infty$, adota-se procedimento semelhante ao adotado no caso anterior, só que agora o range de trabalho do campo magnético deve ser definido como $B \in [B_1, B_{max}]$. Assim, obter-se-á um B_2 ($B_1 < B_2 < B_{max}$), que marcará a região de transição entre o campo intermediário B_1 e o campo máximo B_{max} .

Olhando de forma mais qualitativa para o sistema, tem-se três regiões distintas de campo: $0 < B < B_1$, $B_1 < B < B_2$ e $B_2 < B < B_{max}$. Na primeira região o potencial gerado pelo campo magnético é apenas uma perturbação ao potencial $V(z)$; na segunda região estes dois potenciais são competitivos; na terceira região o potencial magnético supera o potencial $V(z)$. Essa competição entre os potenciais pode ser entendida analisando o comprimento magnético ℓ_B , o qual, de acordo com a intensidade do campo magnético, controla o raio da órbita ciclotrônica dos portadores, fazendo com que estes “enxerguem” de modo mais ou menos efetivo a barreira de potencial criada por $V(z)$.

Resultados e Discussões

Como resultados apresentar-se-á simulações feitas para um poço quântico infinito de *GaAs* com largura de 240 Å.

A Figura (5.17) mostra uma comparação entre o cálculo analítico, obtido por meio da Eq.(5.52) e o cálculo numérico, obtido por meio da Eq.(5.49). Na figura a_{1p} e a_{1i} são, respectivamente, os autovalores do primeiro estado par e do primeiro estado ímpar do sistema e $w_0 = (w_L^2/2) = (L_w^2 e B / 4 \hbar c) \propto B$. Como pode ser observado, à medida que $1/w_0$ diminui (B aumenta), e a curva teórica diverge da curva analítica. Para o sistema em questão, com

$L_w = 240 \text{ \AA}$, este valor ocorre para $B = B_1 \approx 0.8 T$. Este valor de campo magnético marca o a transição entre o regime em que o campo deixa de ser considerado perturbativo e o regime em o campo passa a competir com o potencial $V(z)$. É interessante notar também que a divergência se torna mais efetiva conforme a energia do sistema vai aumentando.

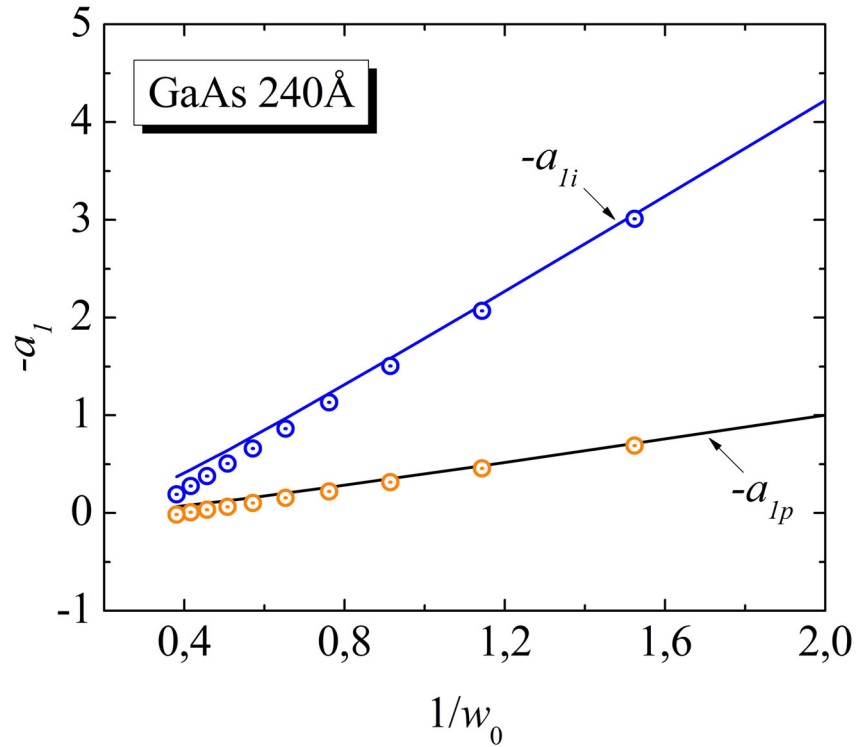


Fig. 5.17: Comparação entre os resultados obtidos pela Eq.(5.52)(pontos circunscritos) e a Eq.(5.49) (linha contínua).

Tomando por base os dois métodos de cálculos discutidos na Fig.(5.17), foram calculados os primeiros dois níveis de energia para elétron, buraco pesado e buraco leve. Os resultados são mostrados na Fig.(5.18). Na é mostrado o cálculo dos níveis de energia, tanto analítico como numérico, para os dois primeiros estados de elétron, buraco pesado e buraco leve. A figura reflete a discussão da Fig.(5.17), isto é: para baixos campos os valores obtidos pelos dois tipos de cálculo, analítico e numérico, se aproximam; entretanto, conforme o campo vai se tornando mais intenso, os resultados divergem. Além disso, para cada portador a divergência, entre os resultados analítico e numérico, ocorre para um valor de campo diferente, pois, quanto mais energético o estado do portador, menor o campo magnético em que ocorre a divergência.

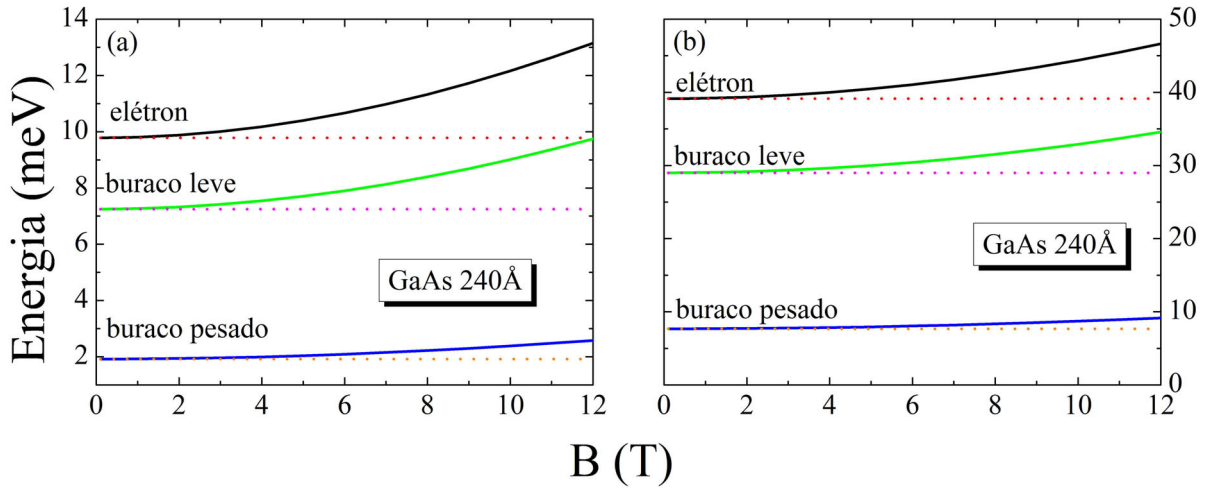


Fig. 5.18: Níveis de energia para elétron, buraco pesado e buraco leve calculados utilizando-se as Eq.(5.52) (linha pontilhado) e a Eq.(5.49) (linha contínua). Em (a) é feito o cálculo para o primeiro estado de paridade par, e em (b) é feito o cálculo para o primeiro estado de paridade ímpar.

Conclusão

Estudou-se um sistema de poço quântico simples infinito de *GaAs* e um sistema de poços quânticos duplos de *AlGaAs/GaAs*, orientado ao longo da direção [001] com campo magnético *in-plane*.

Simulando um poço quântico infinito de *GaAs* com 240 Å foi possível comparar os resultados obtidos por meio da expressa analítica e da expressão numérica para a_{1p} e a_{1i} . Os cálculos mostram que o limite em que o sistema passa de um regime em que o potencial magnético é considerado perturbativo, para um regime em que ele compete com o potencial $V(z)$ varia de portador para portador. Além disso, quanto mais energético for o estado do portador, menor será o campo necessário para ocorrer a transição entre os dois regimes.

Com as funções envelope e o intervalo de validade da mesma com o campo magnético obtidos, tornar-se-á possível obter o cálculo da estrutura de bandas via método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] S. A. Lourenço, I. F. L. Dias, E. Laureto, J. L. Duarte, D. O. Togino Filho, E. A. Meneses, J. R. Leite, *Eur. Phys. J. B* **21**, 11 (2001).
- [2] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [3] G. Clec'h, G. Calvarin, P. Auvray, M. Baudet, *Journal Applied Crystallographic* **22**, 372 (1989).
- [4] M. Leszczynski, V. B. Pluzhnikov, A. Czopnik, J. Bak-Misiuk, T. Slupinski, *J. App. Phys.* **82**, 4678 (1997).
- [5] V. Lopez-Richard, J. C. Gonzalez, F. M. Matinaga, C. Trallero-Giner, E. Ribeiro, M. Rebello Sousa Dias, L. Villegas-Lelovsky, G. E. Marques, *Nanolett.* **9**, 3129 (2009).
- [6] A. Ballentine, *Quantum Mechanics: A Modern Development*. (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.) (2000).
- [7] D. F. Cesar, *Cálculo e Determinação da Energia de Ligação Excitônica em Poços Quânticos Simples e Duplos de AlGaAs/GaAs*. (Dissertação de Mestrado, UEL, 2008).
- [8] L. K. Castelano, D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, O. D. D. Couto Jr., F. Iikawa, R. Hey, P. V. Santos, *Phys. Rev. B* **84**, 205332 (2011).
- [9] L. R. Ram-Mohan, K. H. Yoo, R. L. Aggarwal, *Phys. Rev. B* **38**, 6151 (1988).
- [10] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [11] S. Mackowski, T. A. Nguyen, H. E. Jackson, L. M. Smith, J. Kossut, G. Karczewski, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 5524 (2003).
- [12] E. Margapoti, L. Worschech, S. Mahapatra, K. Brunner, A. Forchel, F. M. Alves, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, C. Bougerol, *Phys. Rev. B.* **77**, 073308 (2008).

-
- [13] J. Martinez-Pastor, A. Vinattieri, L. Carraresi, M. Colocci, Ph. Roussignol, G. Weimann, Phys. Rev. B **47**, 10456 (1993).
- [14] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, H. Ohno, Phys. Rev. Lett. **83**, 4196 (1999).
- [15] S. Koh, K. Ikeda, H. Kawaguchi, J. Appl. Phys. **110**, 043516 (2011).
- [16] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, M. Oestreich, Phys. Rev. Lett. **93**, 147405 (2004).
- [17] N. Yokota, K. Ikeda, Y. Nishizaki, S. Koh, H. Kawaguchi, IEEE Photonic. Tech. L. **22**, 1689 (2010).
- [18] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. (Dover Publications, INC., New York) (1972).

6. APLICAÇÃO EM SISTEMAS QUASE-UNIDIMENSIONAIS: FIOS QUÂNTICOS

Sistemas com interfaces não se limitam apenas a duas dimensões. Ver-se-á como é possível aplicar com sucesso as técnicas descritas nos capítulos anteriores a outros tipos de nanoestruturas. Nesse capítulo será feito um estudo das propriedades do *strain* sobre a estrutura eletrônica de uma super-rede *twinning* em nanofios de *InP*. Este trabalho contou com o suporte fundamental de resultados prévios de dinâmica molecular, obtidos a partir de colaboradores.

A vantagem de se utilizar um método de cálculo de estrutura eletrônica multibandas acoplado à dinâmica molecular, advém do fato de que esta última consegue extrair propriedades mecânicas da nanoestrutura como, por exemplo, o tensor de *stress*, necessário para obter o tensor de *strain*, que, por sua vez, é um parâmetro de entrada para o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, como descrito no Capítulo 3.

Tendo como motivação descobertas experimentais recentes, sobre o controle da síntese de nanofios e de seus parâmetros estruturais, tentou-se responder questões fundamentais sobre sua estrutura eletrônica, em particular, sobre o perfil de potencial para elétrons e buracos, pesados e leves, devido ao campo de *strain* presente no nanofio quando aparecem os chamados *twin-planes*.

6.1 Estrutura Eletrônica para Sistemas com Twin-Planes Tensionados

A construção de nanofios, assim como de outras nanoestruturas, exige um elevado grau de controle da estrutura cristalina. Nanofios construídos a partir de materiais da família *III-V* frequentemente apresentam *twin-planes*, os quais são distribuídos randomicamente ao longo do mesmo [1]. A direção de crescimento [111], que é a mais frequente para crescimento dos nanofios, apresenta uma alta densidade de *twin-planes* perpendiculares à direção de crescimento, o que pode comprometer as propriedades da nanoestrutura [3, 4, 5]. Contudo, o controle seletivo destes pode ser vantajoso. Assim, quando se consegue ter um controle sobre a formação dos

mesmos, e estes apresentam um espaçamento constante dentro do nanofio, há a formação de uma super-rede *twinning* (*twinning superlattice*–TSL), o que leva a modificações na estrutura de bandas do nanofio [6, 7, 8]. As questões fundamentais a serem abordadas são: de que maneira a modulação estrutural do nanofio afeta o perfil de potencial enxergado pelos portadores ao longo da direção de crescimento da nanoestrutura? A estrutura eletrônica resultante poderia simular uma super-rede?

A Figura (6.1) mostra um esquema da formação dos “*twin-planes*”. Em nanofios que cristalizam na forma blenda de zinco o desalinhamento de uma única camada dupla, composta por um par de átomos da família *III* e um par de átomos da família *V*, cria um *twin-plane*, definido como um plano espelhado entre dois segmentos rotacionados de 60° um do outro. Devido à própria natureza desta nanoestrutura, é de esperar que os campos de *strain* presentes no nanofio sejam de crucial importância para a estrutura eletrônica do mesmo.

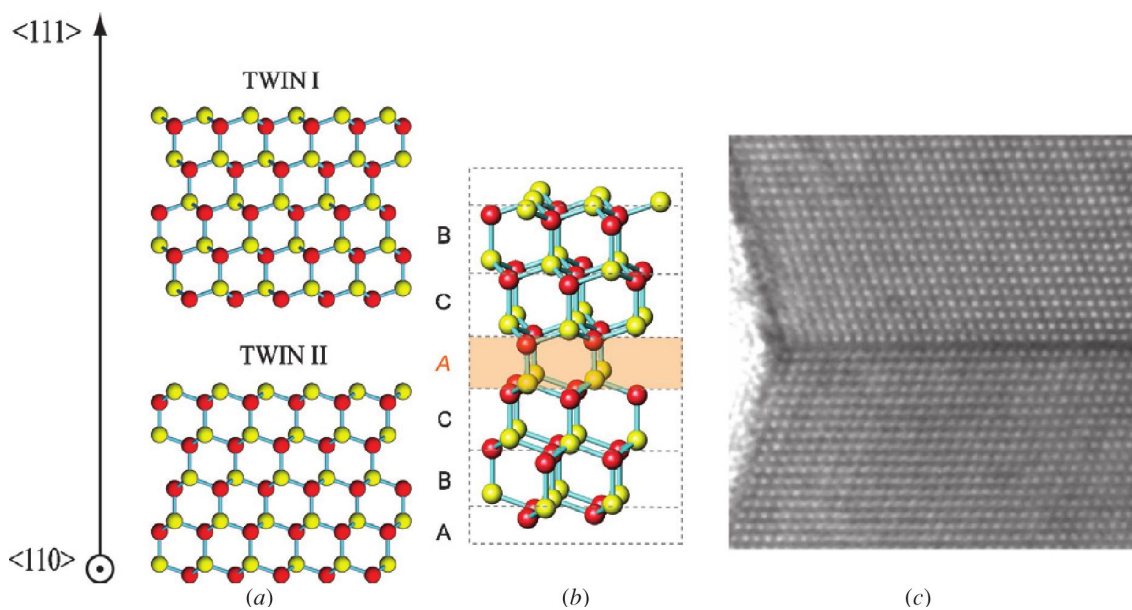


Fig. 6.1: Esquema de crescimento de um nanofio *twin-plane*. Na figura (a) tem-se dois planos cristalinos com diferentes orientações que, quando crescidos sequencialmente, originam os *twin-planes*. Em (b) tem-se um detalhamento da ligação entre os dois planos cristalinos. Os *twin-planes* se formam quando a sequência natural de camadas atômicas ABCABC é quebrada, dando origem à sequência ABCACBA. Em (c) tem-se o resultado estrutural oriundo desta quebra no sequenciamento [9].

Como visto no Capítulo 3 os tensores de *stress* e *strain* se relacionam por meio da equação

matricial:

$$\begin{pmatrix} \tau'_1 \\ \tau'_2 \\ \tau'_3 \\ \tau'_4 \\ \tau'_5 \\ \tau'_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c'_{11} & c'_{12} & c'_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c'_{12} & c'_{11} & c'_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c'_{12} & c'_{12} & c'_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c'_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c'_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon'_1 \\ \varepsilon'_2 \\ \varepsilon'_3 \\ 2\varepsilon'_4 \\ 2\varepsilon'_5 \\ 2\varepsilon'_6 \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

onde τ'_{ij} são os elementos do tensor de *stress*, ε'_{ij} são os elementos do tensor de *strain* e c'_{ij} os elementos do tensor de elasticidade. Uma vez obtidos os elementos τ'_{ij} , via dinâmica molecular, bastar-se-á resolver a Eq.(6.1) para os elementos ε'_{ij} , uma vez que as constantes elásticas c'_{11} , c'_{12} e c'_{44} são tabeladas para cada material. Assim procedendo tem-se que:

$$\varepsilon'_1 = \frac{\tau'_1 c_{11} - \tau'_2 c_{12} + \tau'_1 c_{12}}{c_{11}^2 + 2c_{12}^2 + c_{11} c_{12}}, \quad \varepsilon'_2 = -\frac{-\tau'_2 c_{11} + \tau'_3 c_{12} + \tau'_1 c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}, \quad \varepsilon'_3 = -\frac{\tau'_1 c_{12} - \tau'_3 c_{11} - \tau'_3 c_{12} + \tau'_2 c_{12}}{c_{11}^2 - 2c_{12}^2 + c_{11} c_{12}} \quad (6.2)$$

$$\varepsilon'_4 = \frac{1}{2} \frac{\tau'_4}{c_{44}}, \quad \varepsilon'_5 = \frac{1}{2} \frac{\tau'_5}{c_{44}}, \quad \varepsilon'_6 = \frac{1}{2} \frac{\tau'_6}{c_{44}}$$

Como o nanofio foi crescido ao longo da direção [111], é preciso obter corretamente o tensor de elasticidade ao longo desta direção, uma vez que as constantes elásticas c_{11} , c_{12} e c_{44} são dadas para sistemas crescidos ao longo de direções convencionais $\langle 100 \rangle$. Tal procedimento está descrito no Apêndice B.

A dinâmica molecular fornece, também, o *stress* ao longo da posição de crescimento do nanofio, logo, tem-se que: $\tau'_{ij} = \tau'_{ij}(z)$, e o conjunto de Eqs.(6.2) assume a forma: $\varepsilon'_{ij} = \varepsilon'_{ij}(z)$, tornando possível construir o perfil de potencial de cada componente do tensor de *strain* ao longo da direção de crescimento da nanoestrutura. Como consequência imediata, havendo variação destes elementos com a posição do nanofio, é de se supor que esta variação das componentes do tensor de *strain* se reflita na estrutura eletrônica do material, ou pelo menos, que esta seja modulada pela energia provenientes dos campos de *strain* com a posição.

Como discorrido no Capítulo 3, o efeito gerado pelo *strain* sobre as bandas de condução e valência é descrito em termos dos potenciais de deformação: a , b e d . Pelo fato da banda de condução ser isotrópica, o efeito sobre esta é mais simples de ser obtido, e pode ser determinado pela expressão [10]:

$$\mathcal{H}_c^e = a_c(\varepsilon'_{11} + \varepsilon'_{22} + \varepsilon'_{33}). \quad (6.3)$$

onde a_c é o potencial de deformação da banda de condução ε'_{11} , ε'_{22} e ε'_{33} são as componentes do tensor de *strain*. Em contrapartida, na banda de valência tal efeito não é trivial, uma vez

que essa banda é anisotrópica com a direção de crescimento. Estando o nanofio orientado ao longo da direção $[111]$, é necessário fazer uma rotação no Hamiltoniano de *strain* (3.22) para descrever corretamente a banda de valência ao longo da direção $[111]$. Seguindo o mesmo procedimento descrito no Capítulo 5, assim como no Apêndice C, o efeito do campo de *strain* sobre os estados de buraco pesado e leve, ao longo da direção cristalográfica $[111]$, podem ser dados, respectivamente pelas expressões:

$$\mathcal{H}_{hh}^{\varepsilon} = -a_v(\varepsilon'_{11} + \varepsilon'_{22} + \varepsilon'_{33}) - \frac{d}{\sqrt{3}}(\varepsilon'_{11} + \varepsilon'_{22} - \varepsilon'_{33}) \quad (6.4)$$

$$\mathcal{H}_{lh}^{\varepsilon} = -a_v(\varepsilon'_{11} + \varepsilon'_{22} + \varepsilon'_{33}) + \frac{d}{\sqrt{3}}(\varepsilon'_{11} + \varepsilon'_{22} - \varepsilon'_{33})$$

onde a_v e d são os potenciais de deformação da banda de valência, ε'_{11} , ε'_{22} e ε'_{33} são as componentes do tensor de *strain*.

Dessa forma, por meio das Eqs.(6.3) e (6.4) é possível calcular o efeito que o campo de *strain* exerce sobre a estrutura eletrônica do nanofio.

6.2 Resultados e Discussão

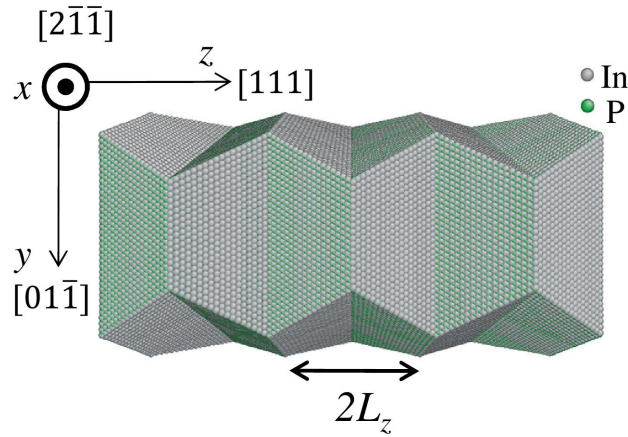


Fig. 6.2: Nanofio de *InP* crescido na direção $[111]$ por dinâmica molecular. A seção cruzada do nanofio possui 30973.4 \AA^2 e segmento periódico $2L_z = 122.364 \text{ \AA}$. Os pontos cinza (verde) representam átomos de *In* (*P*).

O sistema simulado é um nanofio de *InP* e possui a mesma forma dos nanofios reportados nas Refs.[1] e [2]. A Figura (6.2) mostra a configuração geométrica do nanofio simulado via dinâmica molecular. Como pode ser observado pela na figura o nanofio permanece coeso mesmo após ter sido submetido a processos de relaxação e termalização, o que confirma a estabili-

dade desta nanoestrutura. Outros detalhes sobre o crescimento da nanoestrutura por dinâmica molecular são dados na Ref.[11].

A partir da simulação computacional da estrutura atômica do nanofio foi possível a obtenção das constantes elásticas em $T = 0K$ (Tabela 6.1). Em geral, os valores encontrados na literatura são referentes apenas à temperatura ambiente [12].

Tab. 6.1: Constantes elásticas c_{11} , c_{12} e c_{44} , dadas em GPa e em $T = 0K$.

Material \ Cte. Elástica	c_{11}	c_{12}	c_{44}
<i>InP</i>	107.68	60.65	41.10

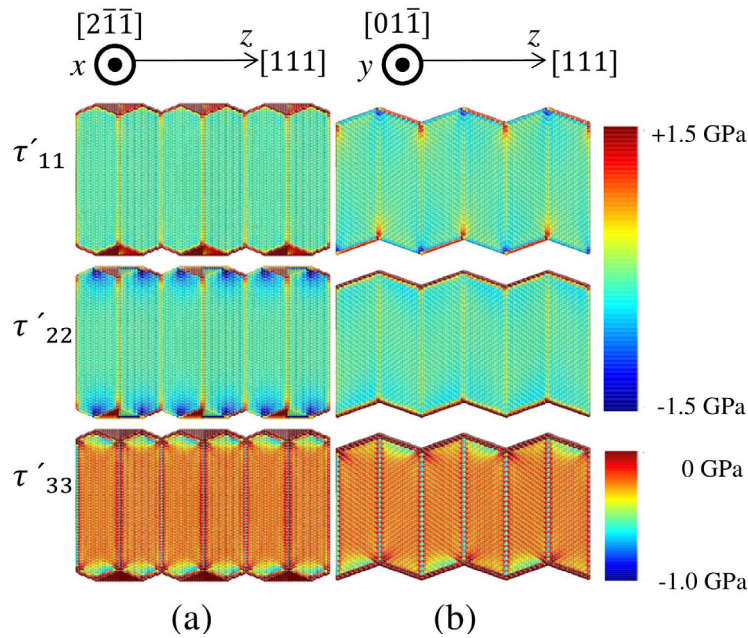


Fig. 6.3: Visualização das componentes diagonais do tensor de *stress* do nanofio para dois cortes distintos: (a) no plano $(2\bar{1}\bar{1})$ e (b) no plano $(01\bar{1})$.

A Figura (6.3) mostra a distribuição do *stress* ao longo da direção de crescimento do nanofio, $[111]$, para dois cortes laterais distintos. Já a figura (6.4) mostra a distribuição do *stress* no plano perpendicular à direção de crescimento, com cortes feitos em L_z (*twin-plane*), e $L_z/2$ (meio do segmento) [Fig.(6.2)]. Das nove componentes do tensor de *stress* apenas as componentes diagonais, τ'_{11} , τ'_{22} e τ'_{33} são mostradas, pois são as únicas que contribuem efetivamente para este tensor, sendo as outras componentes desprezíveis e tomadas como zero.

Fica evidente nas figuras que o *stress* se concentra na superfície do nanofio, apresentando valores de contração e expansão bem acentuados nessas regiões. Já o centro do nanofio é caracterizado por um *stress* homogêneo e menos intenso. Na região entre os *twin-planes* o *stress*

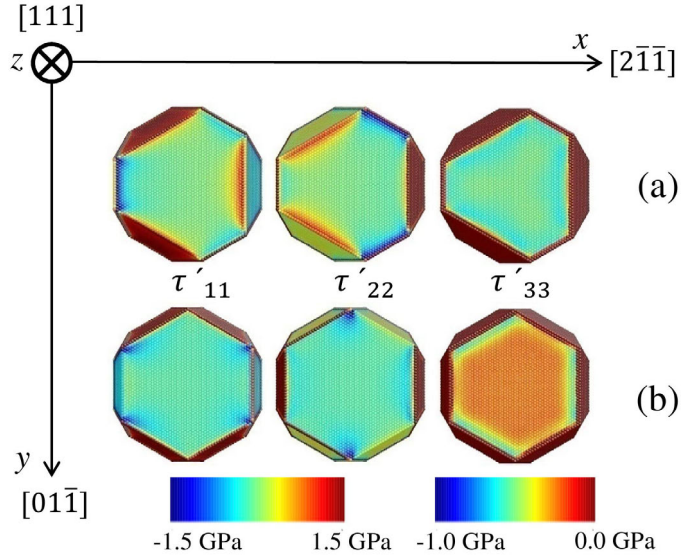


Fig. 6.4: Visualização das componentes diagonais do tensor de *stress* no plano perpendicular à direção de crescimento do nanofio. Em (a) o corte foi feito exatamente no *twin-plane* (L_z). Em (b) o corte foi feito no meio do segmento ($L_z/2$).

apresenta forte dependência com o tamanho da seção cruzada do nanofio. Um aumento desta seção faz com que os efeitos de superfície se tornem menos efetivos [11]. Como pode ser observado pelas Figs.(6.3) e (6.4), a dinâmica molecular fornece o *stress* com a posição, permitindo sua caracterização ao longo da nanoestrutura: $\tau'_{ij} = \tau'_{ij}(z)$. Logo, o conjunto de Eqs.(6.2) assume a forma: $\epsilon'_{ij} = \epsilon'_{ij}(z)$, tornando possível construir o perfil de cada componente do tensor de *strain* ao longo da direção [111] do nanofio. Como consequência imediata, se havendo variação dos elementos $\epsilon'_{ij}(z)$ com a posição, é de se esperar que este efeito se propague para a estrutura eletrônica do material, a qual será modulada pelos potenciais gerados pelos campos de *strain*.

A partir dos valores de $\tau'_{ij}(z)$ foi possível, por meio das Eqs.(6.2), obter a dependência $\epsilon'_{ij}(z)$ para $T = 0$ K. Na Figura (6.5) é mostrada a distribuição das componentes diagonais do *strain* ao longo da direção [111]. Como apenas as componentes τ'_{11} , τ'_{22} e τ'_{33} predominam, conseqüentemente, apenas as componentes ϵ'_{11} , ϵ'_{11} e ϵ'_{11} predominarão, sendo as outras tomadas como nulas. Duas características ficam bem evidenciadas na Fig.(6.5): (i) o valor positivo das três componentes de *strain* (platôs) na região dos núcleos, (ii) uma variação brusca na região da interface *twin-plane*. Este resultado já era previsto, pois, como visto anteriormente, nas interfaces o valor das componentes do tensor de *stress* adquirem valores acentuados. Pela figura ainda fica claro que a componente ϵ'_{33} apresenta uma flutuação maior do que para as componentes ϵ'_{11} e ϵ'_{22} , as quais apresentam flutuações da mesma ordem por evidentes critérios de simetria.

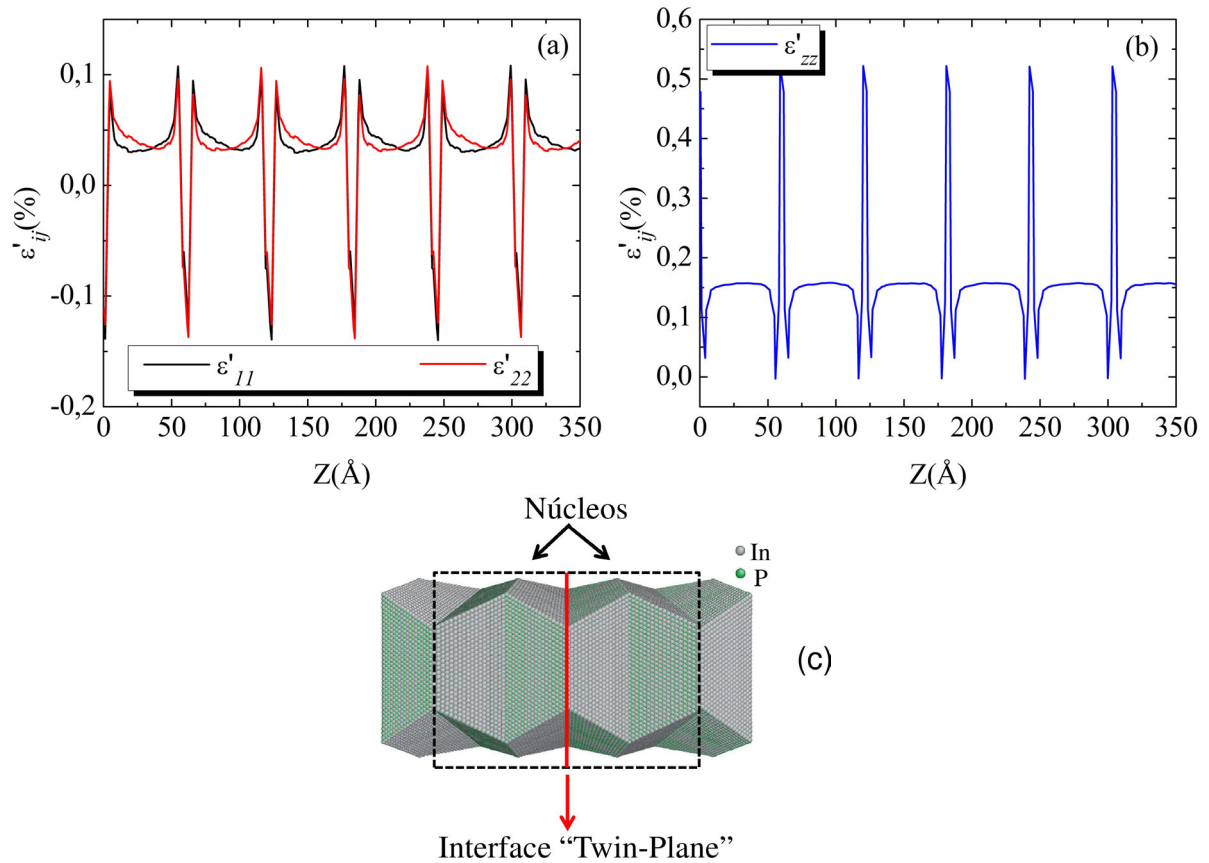


Fig. 6.5: Perfil das componentes diagonais do *strain*: (a) ϵ'_{11} e ϵ'_{22} , (b) ϵ'_{33} ao longo da direção de crescimento [111] do nanofio, o qual não está sujeito a deformações externas. Em (c) é mostrado o nanofio com dois núcleos e a interface *twin-plane* entre eles. A orientação do nanofio é a mesma da Fig.(6.2).

Para investigar o efeito gerado por um campo externo de deformação foram aplicadas as seguintes tensões externas: compressão e expansão de $\pm 1\%$ ao longo da direção de crescimento do nanofio. Os resultados são mostrados na Fig.(6.6). Analisando a figura nota-se que os campos de *strain* sofrem deslocamentos com aplicações de tensões externas: (i) na compressão, Fig.(6.6-a), as componentes ϵ'_{11} e ϵ'_{22} , quando comparadas com o caso sem tensão externa, apresentam um leve deslocamento para valores positivos, enquanto que a componente ϵ'_{33} sofre um deslocamento acentuado para valores negativos. (ii) na expansão, Fig.(6.6-b), as componentes ϵ'_{11} e ϵ'_{22} apresentam um deslocamento para valores negativos, enquanto que a componente ϵ'_{33} se desloca para valores positivos.

Tanto a compressão quanto a expansão são mecanismos úteis, e que podem ser utilizados para modular as componentes do tensor de *strain*. Na aproximação elástica o campo de *strain* gerado pela componente ϵ'_{33} atua de forma contrastante com os campos gerados pelas compo-

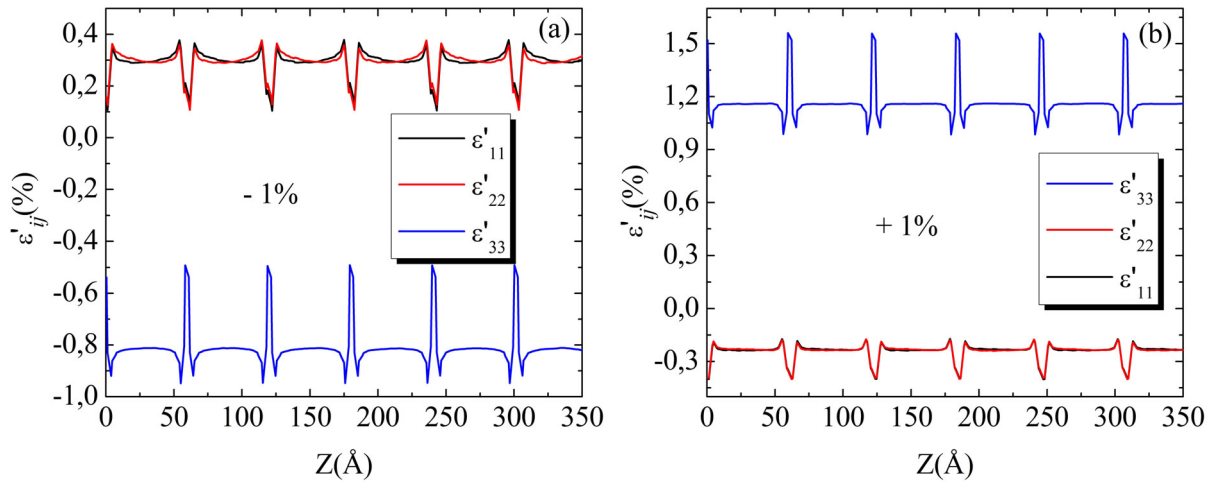


Fig. 6.6: Perfil das componentes diagonais do *strain* ε'_{11} , ε'_{22} e ε'_{33} com deformações externas: (a) compressão de 1% e (b) expansão de 1%.

mentes ε'_{11} e ε'_{22} .

A partir dos valores das componentes ε'_{11} , ε'_{22} e ε'_{33} é possível obter, por meio das Eqs.(6.3) e (6.4) os potenciais gerados pelos campos de *strain*. A Figura (6.7-a) mostra o perfil de potencial enxergado por elétrons na banda de condução, enquanto que a figura (6.7-b) mostra o perfil enxergado pelos buracos, pesado e leve, na banda de valência. Como era esperado, o perfil de potencial induzido pelo campo de *strain* é um reflexo do comportamento das componentes do tensor de *strain*; assim, há regiões com platôs, correspondentes aos núcleos do nanofio, onde o *strain* é homogêneo, e regiões com mudanças abruptas, correspondentes à região da interface *twin-plane*, onde o *strain* se evidencia de forma mais proeminente. A flutuação do potencial, tanto para elétrons como para buracos, pode ser modelado por um potencial do tipo de super-rede semicondutora unidimensional, com um sequenciamento alternado de barreiras e poços.

Diferente da banda de condução, onde há apenas um tipo de portador, a banda de valência apresenta comportamento distinto para os dois tipos de portadores. O perfil de potencial a que fica submetido buraco pesado é similar àquele enxergado por elétrons, ou seja, segue uma sequência de poços quânticos separados por barreiras nas interfaces. Em contrapartida, o perfil de potencial a que fica submetido o buraco leve constitui-se de poços quânticos nas interfaces, separado por barreiras nos núcleos do nanofio. Assim, para a banda de valência há duas possibilidades de confinamento para os portadores, enquanto que para a banda de condução há apenas uma.

Como discutido anteriormente, as tensões externas constituem mecanismos pelos quais as

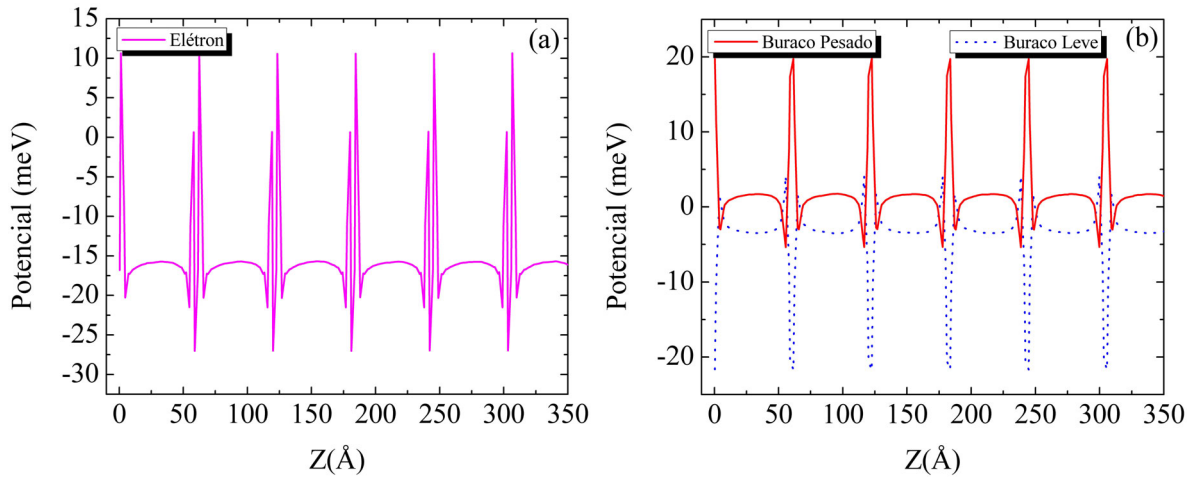


Fig. 6.7: Perfil de potencial induzido pelos campos de *strain* ao longo da direção de crescimento [111] do nanofio sem aplicação de tensões externas. Em (a) é mostrado o perfil de potencial enxergado por elétrons. Em (b) é mostrado o perfil de potencial enxergado pelos buracos. As linhas sólidas descrevem o potencial para o buraco pesado e as linhas pontilhadas descrevem o potencial para o buraco leve.

componentes do tensor de *strain* podem ser moduladas. Na Figura (6.8) é mostrado o perfil de potencial, para elétrons e buracos, com a aplicação de campos de compressão e expansão de $\pm 1\%$ ao longo da direção de crescimento da nanoestrutura. Como se pode observar, os mecanismos de compressão e expansão são responsáveis por provocar um deslocamento do fundo das bandas de condução e valência. Na Figura (6.8-a) é mostrado o efeito provocado pela compressão e expansão na banda de condução. Na compressão, o fundo da banda, em relação ao caso sem tensão externa, sofre um deslocamento positivo de $\approx 25.5 \text{ meV}$, enquanto que na situação de expansão o fundo da banda se desloca negativamente em $\approx -32.5 \text{ meV}$.

Para a banda de valência o efeito provocado pelas tensões externas mostra-se mais interessante, pois, uma vez que há dois perfis de potencial, o efeito das tensões externas se torna mais drástico. Na Figura (6.8-b) são mostrados os perfis de potencial para os dois tipos de portadores, buraco pesado e buraco leve. Observa-se que o estado fundamental da banda de valência pode ser modulado de acordo com a aplicação de tensões externas. O estado fundamental referente à expansão de $+1\%$ possui o caráter de buraco pesado do estado fundamental [Fig.(6.7-b)]. Em contrapartida, quando a tensão externa é de -1% o estado fundamental possui o caráter de buraco leve [Fig.(6.7-b)].

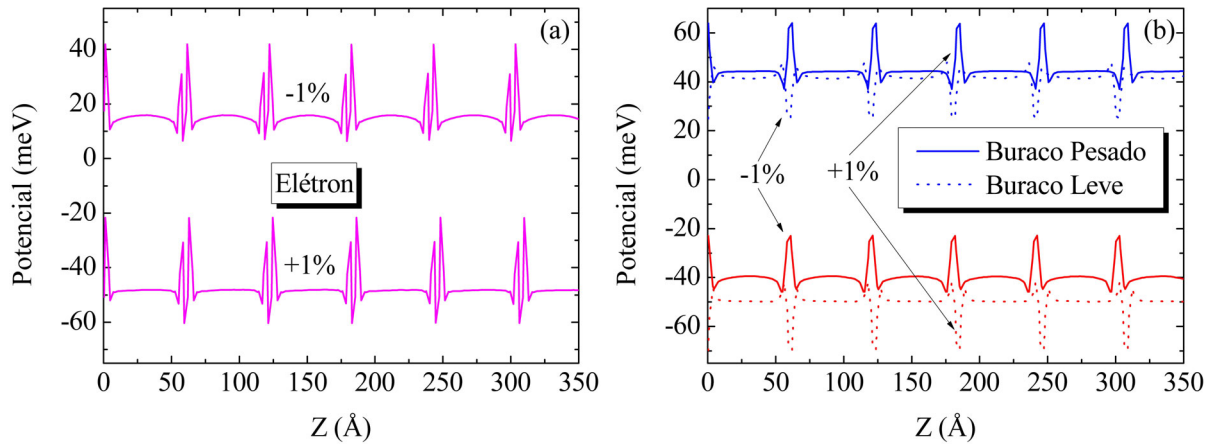


Fig. 6.8: Perfil de potencial gerado pelo *strain* ao longo da direção de crescimento [111] do nanofio, o qual está submetido a *stress* externo. Em (a) é mostrado o perfil de potencial enxergado por elétrons quando o nanofio na configuração de compressão e expansão, já em (b) é mostrado o perfil de potencial enxergado pelo buraco pesado (linha sólida) e buraco leve (linha pontilhada) nas configurações de compressão e expansão de $\pm 1\%$.

Conclusão

Estudou-se os efeitos eletrônicos, elásticos e estruturais em uma rede *twinning* em um nanofio de *InP*. A partir de combinação de simulações de dinâmica molecular com cálculo multibandas mostrou-se que os potenciais devido aos campos de *strain* podem modular o potencial eletrônico do sistema, produzindo um potencial do tipo super-rede unidimensional, que pode ser facilmente manipulado por mecanismos de compressão e contração externos.

A aplicação de *stress* externo tem a capacidade de deslocar o fundo das bandas de energia. Em contraste com a banda de condução, que tem apenas um tipo de portador de carga, na banda de valência o *stress* externo se mostrou mais drástico, uma vez que existem dois tipos de portadores de carga. Nesta banda os mecanismos de *strain* possibilitam confinamentos diferentes para buraco pesado e buraco leve e, além disso, de acordo com o tipo do *stress* externo, compressão ou expansão, é possível alterar o caráter do estado fundamental.

Como já discutido no capítulo precedente, dentre os mecanismos que podem induzir e alterar o perfil de *strain*, a temperatura mostra-se como um importante fator [13] podendo, para o caso dos nanofios, apresentar-se, também, como um mecanismo eficiente de modulação da estrutura de bandas, abrindo possibilidades para aplicação das super-redes *twin-plane* como parte ativa em nanocircuitos [11].

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] P. Caroff, K. A. Dick, J. Johansson, M. E. Messing, K. Deppert, L. Samuelson, *Nat. Nanotechnol.* **4**, 50 (2009).
- [2] R. E. Algra, M. A. Verheijen, M. T. Borgström, L. F. Feiner, G. Immink, W. J. P. van Enckevort, E. Vlieg, E. P. A. M. Bakkers, *Nature* **456**, 369 (2008).
- [3] M. D. Stiles, D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **38**, 2021 (1988).
- [4] M. D. Stiles, D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **41**, 5280 (1990).
- [5] J. Bao, D. C. Bell, F. Capasso, J. B. Wagner, T. Mårtensson, J. Trägårdh, L. Samuelson, *Nano Lett.* **8**, 836 (2008).
- [6] Z. Ikonic, G. P. Srivastava, J. C. Inkson, *Phys. Rev. B* **48**, 17181 (1993).
- [7] Z. Ikonic, G. P. Srivastava, J. C. Inkson, *Surf. Sci.* **307**, 880 (1994).
- [8] Z. Ikonic, G. P. Srivastava, J. C. Inkson, *Phys. Rev. B* **52**, 14078 (1995).
- [9] K. A. Dick, P. Caroff, J. Bolinsson, M. E. Messing, J. Johansson, K. Deppert, L. R. Wallenberg, L. Samuelson, *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 024009 (2010).
- [10] K. L. Janssens, B. Partoens, F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **67**, 235325 (2003).
- [11] H. Tsuzuki, D. F. Cesar, M. Rebello Souza Dias, L. K. Castelano, V. Lopez-Richard, J. P. Rino, G. E. Marques, *ACS Nano* **5**, 5519 (2011).
- [12] O. Madelung, U. Rössler, M. Landolt-Börnstein Schultz, *Groupe III Condensed Matter Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology* (Springer, New York, Vol. 41A1a, 2001).
- [13] D. F. Cesar, M. D. Teodoro, H. Tsuzuki, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, J. P. Rino, S. A. Lourenço, E. Marega Jr., I. F. L. Dias, J. L. Duarte, P. P. González-Borrero, G. J. Salamo, *Phys. Rev. B* **81**, 233301 (2010).

7. APLICAÇÃO EM SISTEMAS QUASE ZERO-DIMENSIONAIS: PONTOS QUÂNTICOS

As metodologias desenvolvidas até aqui, as quais consistem na caracterização de sistemas confinados com acoplamento lateral, dinâmica de portadores e efeitos de acoplamento com perturbações elásticas da rede serão combinadas neste capítulo. Tratar-se-á aqui de aplicações desenvolvidas em sistemas quase zero-dimensionais para o estudo dos efeitos dinâmicos existentes entre pontos quânticos acoplados. Para o estudo dessa dinâmica foram tomadas duas linhas principais, a saber: (i) acoplamento entre pontos quânticos via interação elétron-fônon e (ii) dinâmica de portadores nos processos de relaxação.

Dentro da primeira linha investigou-se os efeitos que a separação entre os pontos quânticos têm sobre seu acoplamento, o qual foi suposto ser mediado pela interação elétron-fônon. Essa interação, e por conseguinte seus efeitos, foi incluída no cálculo do tempo de decaimento de portadores no sistema em questão.

Dentro da segunda linha, que complementa a primeira, investigou-se os efeitos do desbalanço de carga no sistema. Elétrons e buracos, em um sistema que está sofrendo relaxação, podem ser encontrados fora do equilíbrio térmico, assim, um desbalanço local de cargas deve ser levado em conta na análise da dinâmica da recombinação óptica resolvida no tempo. Para incluir este efeito sobre o tempo de recombinação óptica utilizou-se uma simulação da dinâmica de portadores, baseada em um sistema de equações de taxas.

Antes de entrar propriamente nas duas linhas de estudo mencionadas acima, convém dar uma breve descrição dos pontos quânticos e sua estrutura eletrônica.

Estrutura Eletrônica

Nanoestruturas semicondutoras quase zero-dimensionais, tais como pontos quânticos, têm como característica fundamental o confinamento espacial de portadores de carga ao longo das três direções espaciais. Na aproximação de banda parabólica, o Hamiltoniano que descreve o

problema pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \mathcal{E} \psi(\mathbf{r}) \quad (7.1)$$

onde m^* é a massa efetiva do portador, \mathbf{p} é o seu momento, $V(\mathbf{r})$ é o potencial de confinamento, e \mathcal{E} é o autovalor do sistema.

Supor-se-á que o potencial de confinamento efetivo, $V(\mathbf{r})$, possa ser dividido em duas partes: (i) confinamento no plano- xy , o qual é perpendicular à direção de crescimento, (ii) confinamento ao longo da direção de crescimento, z . Portanto, está se supondo que o potencial efetivo do sistema possa ser escrito na forma: $V(\mathbf{r}) = V(x, y) + V(z)$. O potencial de confinamento dos pontos quânticos depende fortemente da sua geometria, assim sendo, neste trabalho considerar-se-á que $V(x, y)$ é parabólico, ou seja, pode ser descrito por um potencial do tipo oscilador harmônico [1]:

$$V(\mathbf{r}) = V(x, y) = \frac{1}{2} m^* \Omega^2 (x^2 + y^2), \quad (7.2)$$

onde Ω é um parâmetro que tem relação com o diâmetro efetivo do ponto quântico D , [14]:

$$\hbar \Omega = \frac{4\hbar^2}{m^* D^2}, \quad (7.3)$$

Já o potencial $V(z)$, o qual responde pelo confinamento ao longo da direção de crescimento, tem a forma de um potencial do tipo poço quântico:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ V_0 & \text{se } |z| > \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (7.4)$$

onde a largura L_w do poço quântico representa a altura do ponto quântico. a escolha deste perfil de potencial ficará claro mais adiante.

Como está se supondo que o potencial efetivo no plano- xy é independente daquele ao longo da direção de crescimento z , é razoável supor também que as autofunções e os autovalores sejam independentes. Logo, é plausível supor que:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{xy}(x, y) \psi_z(z), \quad (7.5)$$

e:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{xy} + \mathcal{E}_z. \quad (7.6)$$

Por conseguinte, o Hamiltoniano geral do problema, Eq.(7.1), pode ser desacoplado e escrito na forma:

$$\mathcal{H}_{xy} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega^2(x^2 + y^2) \right] \psi_{xy}(x, y) = \mathcal{E}_{xy} \psi_{xy}(x, y) \quad (7.7)$$

$$\mathcal{H}_z = \left[\frac{p_z^2}{2m^*} + V_0 \right] \psi_z(z) = \mathcal{E}_z \psi_z(z).$$

O problema descrito pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_{xy} é o de um oscilador harmônico bidimensional, e possui autofunções e autovalores dados, respectivamente, por [2]:

$$\psi_{xy}(x, y) = \frac{1}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{n!m!2^{m+n}\pi}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\lambda^2}} \mathcal{H}_n\left(\frac{x}{\lambda}\right) \mathcal{H}_m\left(\frac{y}{\lambda}\right) \quad (7.8)$$

$$\mathcal{E}_{xy} = \hbar\Omega(n + m + 1),$$

onde $n, m = 0, 1, 2, \dots$ são números inteiros, $\mathcal{H}_n\left(\frac{x}{\lambda}\right)$ e $\mathcal{H}_m\left(\frac{y}{\lambda}\right)$ são os polinômios de Hermite, $\lambda^2 = \hbar/(m^*\Omega)$ e Ω é a frequência angular correspondente à do oscilador clássico.

Já o problema descrito pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_z é o de um poço quântico simples, e também possui solução bem conhecida. Na aproximação de barreiras infinitas, isto é, $V_0 = \infty$, as autofunções e autovalores serão dados por:

$$\psi_z(z) = \begin{cases} \psi_z^{(+)} = \sqrt{\frac{2}{L_w}} \cos\left(\frac{k\pi}{L_w}z\right) & (k = 1, 3, 5, \dots, 2k + 1) \quad \text{estados pares} \\ \psi_z^{(-)} = \sqrt{\frac{2}{L_w}} \sin\left(\frac{k\pi}{L_w}z\right) & (k = 2, 4, 6, \dots, 2k) \quad \text{estados ímpares} \end{cases} \quad (7.9)$$

$$\mathcal{E}_z = \frac{\hbar^2 \pi^2 k^2}{2m^* L_w}, \quad (7.10)$$

onde L_w é a largura do poço quântico e $k = 1, 2, 3, \dots$ é um número inteiro e, de acordo com seu valor, define a paridade do estado: $\psi_z^{(+)}$ ou $\psi_z^{(-)}$. Se o potencial de confinamento for finito, então as autofunções e que descrevem o movimento do portador na região do poço e das barreiras são dadas por [3]:

$$\psi_z(z) = \begin{cases} \psi_{z1} = \mathcal{A}_1 e^{k_b z} & z < -\frac{L_w}{2} \\ \psi_{z2} = \mathcal{A}_2 \sin(k_w z) + \mathcal{B}_2 \cos(k_w z) & -\frac{L_w}{2} < z < \frac{L_w}{2} \\ \psi_{z3} = \mathcal{A}_3 e^{-k_b z} & z > \frac{L_w}{2} \end{cases}, \quad (7.11)$$

e as autoenergias, para estados pares e ímpares, são dadas, respectivamente, por¹ [3]:

$$m_w^* k_b = m_b^* k_w \tan\left(k_w \frac{L_w}{2}\right) \quad \text{estados pares} \quad (7.12)$$

$$-m_w^* k_b = m_b^* k_w \cot\left(k_w \frac{L_w}{2}\right) \quad \text{estados ímpares,}$$

onde os $\mathcal{A}'s$ e os $\mathcal{B}'s$ são coeficientes a serem determinados², L_w é a largura do poço quântico, m_w^* e m_b^* são, respectivamente, as massas efetivas do portador na região do poço e das barreiras, k_w e k_b são, respectivamente, os vetores onda na região do poço e das barreiras, e são dados por³ [3]:

$$k_w = \sqrt{\frac{2m_w^* \mathcal{E}_z}{\hbar^2}} \quad (7.13)$$

$$k_b = \sqrt{\frac{2m_b^*(V_0 - \mathcal{E}_z)}{\hbar^2}},$$

onde \mathcal{E}_z é a autoenergia e V_0 a altura, em energia, do poço de potencial. As Equações (7.12) são equações transcendentais, e só podem ser resolvidas numericamente.

Para o caso de pontos quânticos acoplados, modificar-se-á apenas o potencial ao longo da direção de crescimento, z . A Figura (7.1) mostra um esquema deste potencial, o qual pode ser por:

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & \text{se } |z| < \frac{L_b}{2} \\ 0 & \text{se } \frac{L_b}{2} < |z| < \frac{L_b}{2} + L_w \\ V_0 & \text{se } \frac{L_b}{2} + L_w < |z| < \infty \end{cases} \quad (7.14)$$

A partir deste perfil de potencial, as autofunções que descrevem o movimento do portador ao

¹ Na referência [3] o autor considerou a massa efetiva do portador nas regiões das barreiras e do poço como sendo as mesmas, o que não está sendo suposto aqui.

² Embora, aqui, as autofunções tenham sido escritas de forma geral, é sempre possível usar argumentos de simetria, assim como fez o referido autor, para reduzir os números de coeficientes a serem determinados via normalização.

³ Na referência [3] o autor tomou o zero da energia no topo do poço, e aqui o zero da energia foi tomado no fundo do poço.

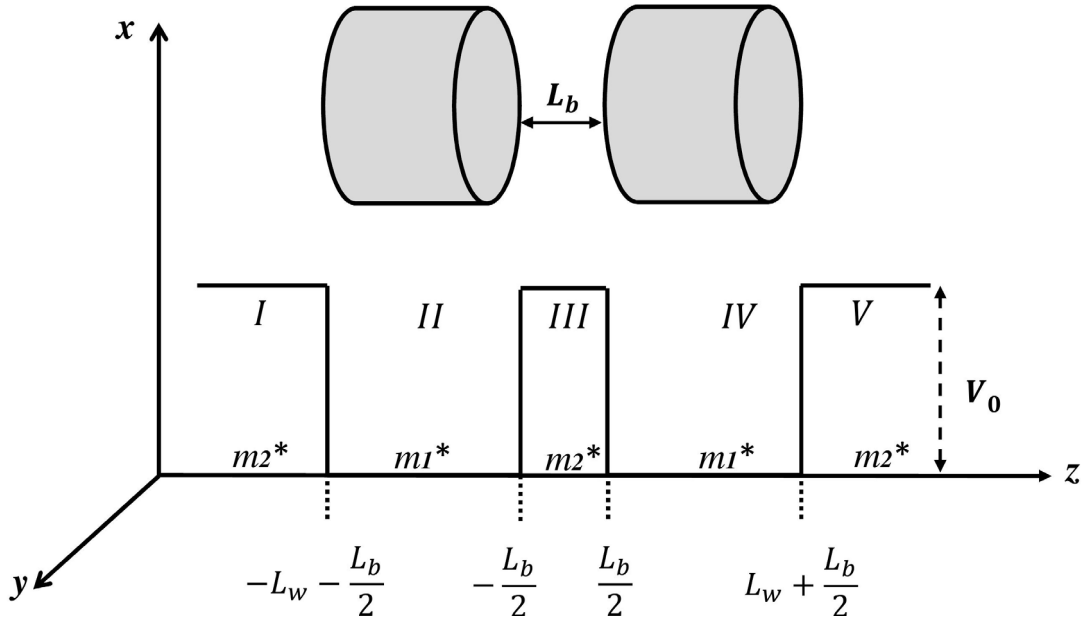


Fig. 7.1: Esquema ilustrativo do potencial, ao longo da direção z , gerado por de dois pontos quânticos acoplados.

longo da direção z podem ser dadas por [4]:

$$\psi_z(z) = \begin{cases} \psi_{zI} = \mathcal{A}_1 e^{k_b z} & z < -\frac{L_b}{2} - L_w \\ \psi_{zII} = \mathcal{A}_2 \sin k_w z + \mathcal{B}_2 & -\frac{L_b}{2} - L_w < z < -\frac{L_b}{2} \\ \psi_{zIII} = \mathcal{A}_3 e^{k_b z} + \mathcal{B}_3 e^{-k_b z} & -\frac{L_b}{2} < z < \frac{L_b}{2} \\ \psi_{zIV} = \mathcal{A}_4 \sin k_w z + \mathcal{B}_4 & \frac{L_b}{2} < z < \frac{L_b}{2} + L_w \\ \psi_{zV} = \mathcal{A}_5 e^{-k_b z} & z > \frac{L_b}{2} + L_w \end{cases}, \quad (7.15)$$

onde os $\mathcal{A}'s$ e os $\mathcal{B}'s$ são coeficientes a serem determinados⁴, L_w e L_b são, respectivamente, as larguras dos poços e da barreira de separação entre estes (barreira central), k_w e k_b são, respectivamente, os vetores de onda na região do poço e das barreiras, e são dados pela Eq.(7.13). Para esta configuração de potencial as autoenergias, para os estados pares e ímpares, são dadas,

⁴ Embora, aqui, as autofunções tenham sido escritas de forma geral, é sempre possível usar argumentos de simetria, assim como fez o autor da citada referência, para reduzir os números de coeficientes a serem determinados via normalização.

respectivamente, por [4]:

$$\begin{aligned} \mathcal{X}[1 - \mathcal{X} \tan(k_w L_w)] + \tanh\left(k_b \frac{L_b}{2}\right) [\mathcal{X} + \tan(k_w L_w)] &= 0 \quad (\text{estados pares}) \\ \mathcal{X} + \tan(k_w L_w) + \tanh\left(k_b \frac{L_b}{2}\right) \mathcal{X}[1 - \mathcal{X} \tan(k_w L_w)] &= 0 \quad (\text{estados ímpares}) \end{aligned} \quad (7.16)$$

onde \mathcal{X} é dado por⁵:

$$\mathcal{X} = \frac{m_b^* k_w}{m_w^* k_b}. \quad (7.17)$$

Uma vez obtido o espectro energético dos portadores em um sistema de pontos quânticos acoplados, o passo seguinte é introduzir o efeitos que a interação elétron-fônon causa sobre este espectro.

Acoplamento entre Pontos Quânticos via Interação com Fônons

Para calcular o tempo de relaxação óptica, τ_p , entre dois estados quânticos, k e k' , assistida por fônons, utilizar-se-á a regra de ouro de Fermi, a qual é dada por [9, 10, 7]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |\langle \psi_k | \mathcal{H}_{e-ph} | \psi_{k'} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'} \pm \hbar\omega_{LO}) \quad (7.18)$$

onde q é o vetor de onda do *phonon*, \mathcal{E}_k , $\mathcal{E}_{k'}$ são, respectivamente, as energias dos estados envolvidos na transição, e $\hbar\omega_{LO}$ é a energia do fônon que assiste a mesma. O sinal (+) denota um fônon absorvido pelo portador, enquanto que o sinal (−) denota um fônon emitido pelo portador. A função delta, $\delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'} \pm \hbar\omega_{LO})$, que assegura a conservação de energia, será substituída por uma função do tipo [11, 12, 13]:

$$\rho = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{LO}}{(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'} - \hbar\omega_{LO})^2 + \Gamma_{LO}^2} \quad (7.19)$$

onde Γ_{LO} depende de cada material [29] e responde pelo alargamento energético dos estados. Por conseguinte, se a diferença em energia, $\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'}$, entre os estados ψ_k e $\psi_{k'}$ for exatamente $\hbar\omega_{LO}$, então: $\rho = 1/(\pi\Gamma_{LO})$.

Voltando à Eq.(7.18), o elemento de matriz na mesma é dado por:

$$|\langle \psi_k | \mathcal{H}_{e-ph} | \psi_{k'} \rangle|^2 = \frac{\mathcal{M}_0^2}{q^2 v} |P_{kk'}(\mathbf{q})|^2, \quad (7.20)$$

⁵ Como se está considerando o mesmo potencial de confinamento em todas as barreiras, um único parâmetro, definido aqui como \mathcal{X} , é suficiente para descrever a solução, ao invés de dois parâmetros, S_1 e S_2 , como descrito na citada referência.

onde $\mathcal{P}_{kk'}$ é definido por,

$$\mathcal{P}_{kk'} = \int_0^\infty dq_z |I_{kk'}(q_z)|^2 \left\{ -e^{\frac{q_z^2}{2}} \mathcal{E}_i \left(-\frac{q_z^2}{2} \right) \right\}, \quad (7.21)$$

onde $\mathcal{E}_i \left(-\frac{q_z^2}{2} \right)$ é a função exponencial integral [8], q_z é o vetor de onda do *phonon* ao longo da direção z e $I_{kk'}$ é dado por:

$$I_{kk'} = \int_{-\infty}^\infty dz \psi_k(z) e^{iq_z z} \psi_{k'}(z), \quad (7.22)$$

onde k e k' são os índices que rotulam os estados do poço quântico e \mathcal{M}_0 é definido como

$$\mathcal{M}_0^2 = \frac{4\pi\alpha(\hbar\omega_{LO})^{3/2}}{(2m^*)^{1/2}} \alpha. \quad (7.23)$$

Aqui, m^* é a massa do elétron e α é a constante de Fröhlich.

Transformando $\sum_q \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q$, é possível mostrar que o tempo de relaxação, τ_p , pode ser dado por [14]:

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} \alpha \left(\frac{\hbar\Omega}{\hbar\omega_{LO}} \right)^2 (\hbar\omega_{LO})^2 \mathcal{P}_{kk'}. \quad (7.24)$$

Dinâmica de Portadores

Descrever-se-á a dinâmica de portadores por meio de três processos, a saber: (i) a excitação, a qual é feita por um pulso óptico de curta duração, o qual promove portadores de um estado fundamental para um estado excitado. Neste processo o sistema é tirado do equilíbrio; (ii) a relaxação de portadores, que é o processo pelo qual os portadores relaxam para o estado de menor energia antes da recombinação óptica; (iii) recombinação óptica entre o par elétron-buraco.

A dinâmica fica assim resumida: a partir de uma excitação ultra rápida, oriunda de um pulso óptico de curta duração, portadores são removidos da banda de valência e promovidos para estados da banda de condução, os quais se tornam “instantaneamente” ocupados com uma densidade inicial de portadores $\delta\mathcal{N}^{max}$ no tempo $t = 0$. Posteriormente, os portadores relaxam para um estado opticamente ativo, caracterizado por um tempo de relaxação τ^R e uma densidade de ocupação $n(t)$. Por último, ocorre a emissão óptica, a qual é caracterizada por um tempo de emissão óptica τ_0 . Essa dinâmica pode ser modelada pelo seguintes conjunto de equações acopladas:

$$\frac{dn^x(t)}{dt} = -\frac{n^x(t)}{\tau^R} \quad (7.25)$$

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{n^x(t)}{\tau^R} - \frac{n(t)}{\tau_0}$$

com as condições iniciais: $n^x(0) = \delta\mathcal{N}^{max}$ e $n(0) = 0$, cuja solução é dada por:

$$n(t) = \frac{\delta\mathcal{N}^{max}}{1 - \frac{\tau^R}{\tau_0}} \left[e^{-t/\tau_0} - e^{-t/\tau^R} \right]. \quad (7.26)$$

O modelo descrito pelo conjunto de Eqs.(7.25) é referido como um modelo linear, uma vez que ele não considera os efeitos do desbalanço de cargas que podem ocorrer no sistema.

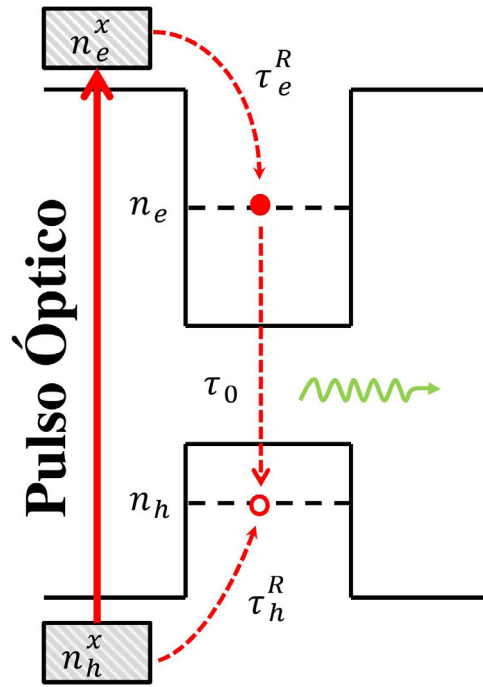


Fig. 7.2: Diagrama que ilustra os processos envolvidos na dinâmica de portadores. No sistema apresentado é considerando apenas um nível na banda de condução e um nível na banda de valência.

Um modelo mais realista, representado pela Figura (7.2), que incorpora esse desbalanço de carga, é dado pelo seguinte conjunto de equações acopladas:

$$\begin{aligned} \frac{dn_e^x(t)}{dt} &= -\frac{n_e^x(t)}{\tau_e^R} \\ \frac{dn_e(t)}{dt} &= \frac{n_e^x(t)}{\tau_e^R} - \frac{n_e(t) \cdot f_h(n_h)}{\tau_0} \\ \frac{dn_h(t)}{dt} &= \frac{n_h^x(t)}{\tau_h^R} - \frac{n_h(t) \cdot f_e(n_e)}{\tau_0} \\ \frac{dn_h^x(t)}{dt} &= -\frac{n_h^x(t)}{\tau_h^R} \end{aligned} \quad (7.27)$$

com a condição $n_{e(h)} < 1$ e distribuição de ocupação $f_{e(h)}$, sendo dada por⁶:

$$f_{e(h)}(n_{e(h)}) = \begin{cases} \frac{n_{e(h)}}{2} & n_{e(h)} < 2 \\ 1 & n_{e(h)} \geq 2 \end{cases}. \quad (7.28)$$

Este sistema tem como condição inicial: $n_e(0) = n_h(0) = 0$; $n_e^x(0) = \delta \mathcal{N}_e^{max}$; $n_h^x(0) = \delta \mathcal{N}_h^{max}$. O Modelo descrito por (7.27) denomina-se modelo não linear.

Elétrons e buracos, que estão sofrendo processos de relaxação, podem ser encontrados fora do equilíbrio térmico, por conseguinte, um desbalanço de carga, local e temporal, deve ser levado em conta neste processo, o que justifica a utilização de equações acopladas de taxas para a modelagem do problema. As causas deste desbalanço podem estar ligadas à assimetria dos processos de relaxação.

Em sistemas do tipo *bulk* ou poços quânticos, o processos de relaxação via a emissão de fônons longitudinais ópticos (LO) pela interação de Fröhlich são muito fortes [15, 16]. Entretanto, em pontos quânticos este processo é menos provável. Tendo em vista que os fônons ópticos longitudinais são quase não dispersivos, ou seja, possuem uma energia praticamente constante ($\hbar\omega_{LO} \approx 36 \text{ meV}$ para o *GaAs* e $\hbar\omega_{LO} \approx 30 \text{ meV}$ para o *InAs*), é extremamente difícil satisfazer a condição ressonante de conservação de energia em um sistema de estados discretos. Uma relaxação eficiente por fônons só pode ser obtida quando a separação, em energia, entre estados discretos do ponto quântico for igual a energia do fônons longitudinal óptico, ou estiver dentro de um pequeno range de energias ao redor deste valor [16].

Resultados e Discussão

Os tópicos recém descritos foram usados como base para a análise de fenômenos “anômalos”, observados em experimentos de PL resolvida no tempo de amostras de pontos quânticos sob diferentes combinações de parâmetros estruturais. Na Figura (7.3) é mostrada uma imagem de Microscopia de Força Atômica (*Atomic Force Microscopy*–AFM) para o sistema de pontos quânticos acoplados. Esta amostra, que será rotulada Amostra 1, foi crescida por *MBE* sobre um substrato de *GaAs* orientado ao longo da direção [100]. A amostra é constituída por 15 períodos (2.5 nm) de $In_{0.4}Ga_{0.6}As$ /(60 monocamadas) *GaAs* crescidas usando *background* de *As₄*.

⁶ A condição $n_{e(h)} \geq 2$ é necessária apenas para fins de cálculo computacional. Fisicamente não tem sentido,

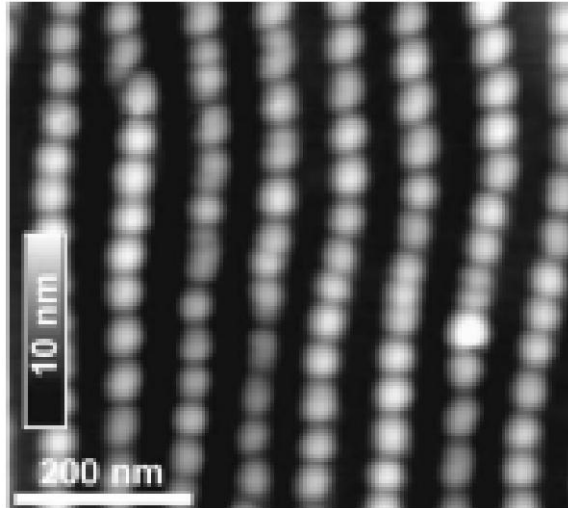


Fig. 7.3: Imagem de *AFM* da Amostra 1, a qual é constituída de pontos quânticos acoplados e em cadeia de *InAs* [14, 17].

Os detalhes do crescimento da Amostra 1 encontram-se nas Refs.[17, 18]. A imagem de *AFM* revela que as cadeias de pontos quânticos estão orientadas ao longo da direção $[0\bar{1}1]$, e o espaçamento entre os pontos quânticos da mesma cadeia é de $\approx 45 \text{ nm}$, enquanto que o espaçamento entre as cadeias é de $\approx 90 \text{ nm}$ [17]. Devido ao fato do tamanho lateral do ponto quântico ser comparável ao espaçamento entre os pontos, espera-se que qualquer acoplamento eletrônico que seja observado no plano será predominantemente entre pontos quânticos dentro da mesma cadeia, de forma que o acoplamento entre pontos de cadeias diferentes serão desprezados [19].

Na Figura (7.4) são mostrados os tempos de decaimento em função da energia de emissão dos pontos quânticos da Amostra 1. O tempo de decaimento óptico da Amostra 1 é comparado com resultados análogos de outras amostras, cujos resultados foram extraídos da literatura. Para a Amostra 1 o tempo de decaimento foi obtido a partir do procedimento descrito na Ref.[19].

Quando a intensidade de excitação óptica é baixa, a interação dos portadores com a radiação pode ser tratada perturbativamente, e o tempo de emissão óptico τ_0 , em função da energia de emissão $\hbar\omega$, poder ser calculado utilizando a regra de ouro de Fermi [22]:

$$\tau_0(\hbar\omega) = \frac{3 \hbar c m_0 c^2}{4 e^2 \eta} \frac{1}{|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2 E_p} \frac{\hbar}{\hbar\omega}, \quad (7.29)$$

onde η é o índice de refração do material, E_p é a energia de Kane [23], e $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$ responde pelo *overlap* entre as funções de onda do elétron e do buraco. A expressão (7.29) sugere uma dependência do tipo $\tau_0 \propto 1/\hbar\omega$, que, a princípio, é monotônica, como pode ser inferido pelas linhas sólidas da Fig.(7.4-a), para o *InGaAs*, e da Fig.(7.4-b), para o *CdZnSe*.

pois viola o princípio de exclusão de Pauli.

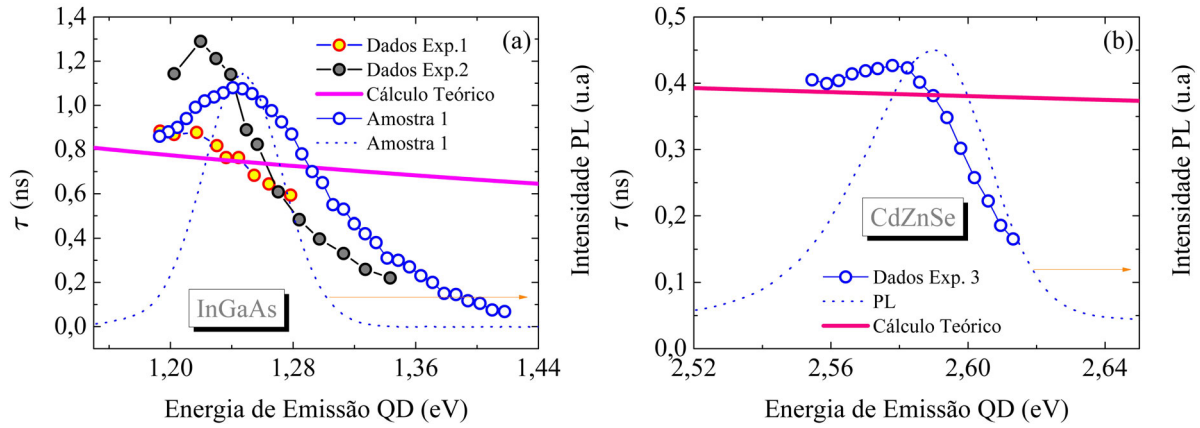


Fig. 7.4: Tempo de decaimento em função da energia de emissão do ponto quântico. As linhas sólidas representam o cálculo teórico, já os pontos e pontilhados representam dados experimentais. Em (a) os Dados Exp. 1 e 2 foram retirados da Ref.[20], já em (b) os Dados Exp. foram retirados da Ref.[21].

Fica evidente na Fig.(7.4) um grande contraste entre a curva teórica, obtida por meio da expressão (7.29), e os dados experimentais, tanto para os pontos de *InGaAs* quanto para os de *CdZnSe*. Como pode ser observado, a curva teórica, que foi construída considerando-se $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2 = 1$, fica mais próxima apenas dos dados denotados como Exp.1, provenientes de uma amostra de pontos quânticos desacoplados. Para todos os outros dados experimentais a curva teórica falha. Logo, desta perspectiva, resulta que os sistemas de pontos quânticos acoplados (Amostra 1) e desacoplados (Dados Exp.1) apresentam comportamentos contrastantes. Portanto, conclui-se que o sistema de pontos quânticos em cadeia (Amostra 1) não se comporta como um sistema de pontos individuais e desacoplados, mas se comporta como um *ensemble*, evidenciando assim o comportamento coletivo do sistema de pontos quânticos, efeito este que não pode ser desprezado na análise dos resultados experimentais.

Ainda na Fig.(7.4-a), os dados referentes à Amostra 1 exibem dois comportamentos distintos: (i) para baixas energias o tempo de decaimento óptico situa-se acima da curva teórica predita pela Eq.(7.29), e exibe um comportamento não-monotônico com a energia. Em contrapartida, para altas energias os dados experimentais situam-se abaixo da curva teórica predita por (7.29).

Na Ref.[24], a forma de decaimento de τ_0 é atribuída exclusivamente à modulação do parâmetro $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$ com as variações estruturais dos pontos quânticos, as quais se refletem na sua energia de emissão (variação do tamanho). Assim o valor da integral de *overlap* foi usado como sendo um parâmetro de ajuste livre, cujos resultados são mostrados na Fig.(7.5). Porém,

o tratamento teórico apresentado a seguir indica claras discrepâncias com esta hipótese.

No intuito de compreender o efeito do *overlap* entre as funções de onda do elétron e do buraco pesado, fez-se um cálculo teórico de $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$ em função da energia de emissão do ponto quântico, e o resultado está mostrado, também, na Fig.(7.5). Como pode ser percebido

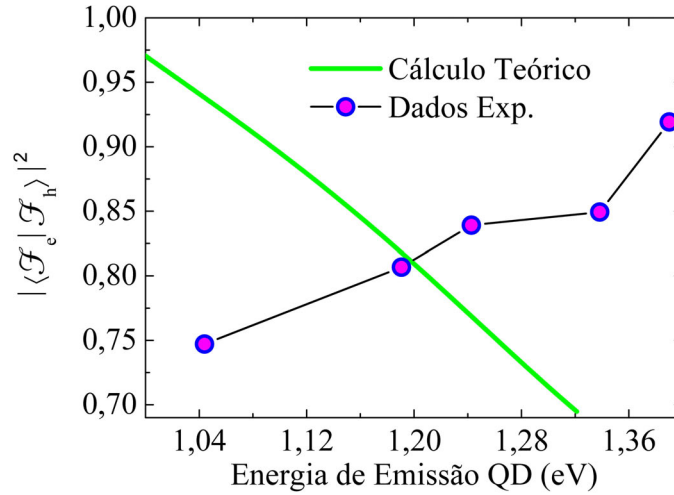


Fig. 7.5: Comparação entre os dados experimentais e o cálculo teórico do *overlap* das funções de onda dos estados de elétron e buraco pesado, $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$, versus a energia de emissão do ponto quântico. Os dados experimentais foram retirados da Ref.[24].

pela figura, o comportamento entre a curva teórica e os dados obtidos a partir da Ref. [24] são discrepantes, de forma que a dependência funcional do tempo de decaimento com a energia de emissão dos pontos quânticos não pode ser exclusivamente atribuída ao *overlap* entre as funções de onda do par elétron-buraco pesado.

Para compreender o resultado teórico mostrado na Fig.(7.5), ilustrar-se-á na Fig.(7.6) um cálculo de $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$ em função do tamanho lateral do ponto quântico, L_w . Pela figura é possível inferir que, conforme o ponto quântico torna-se menor e, conseqüentemente, sua energia de emissão torna-se maior, o valor do *overlap* diminui. Esse comportamento advém do fato da massa efetiva do elétron ser relativamente menor à massa do buraco pesado, o que faz com que as funções de onda destes dois portadores penetrem de forma diferente nas barreiras finitas de potencial à medida que o confinamento aumenta. Enquanto a função de onda do buraco pesado penetra pouco nas barreiras, ficando mais localizada no centro do poço de potencial, a função de onda do elétron penetra mais nas barreiras, sendo mais deslocalizada. No sentido oposto, isto é, à medida que o ponto quântico torna-se maior e, conseqüentemente, sua energia de emissão torna-se menor, as funções de onda penetram menos nas barreiras de potencial, sendo mais localizadas na região do poço quântico, gerando assim um maior *overlap* entre as funções do

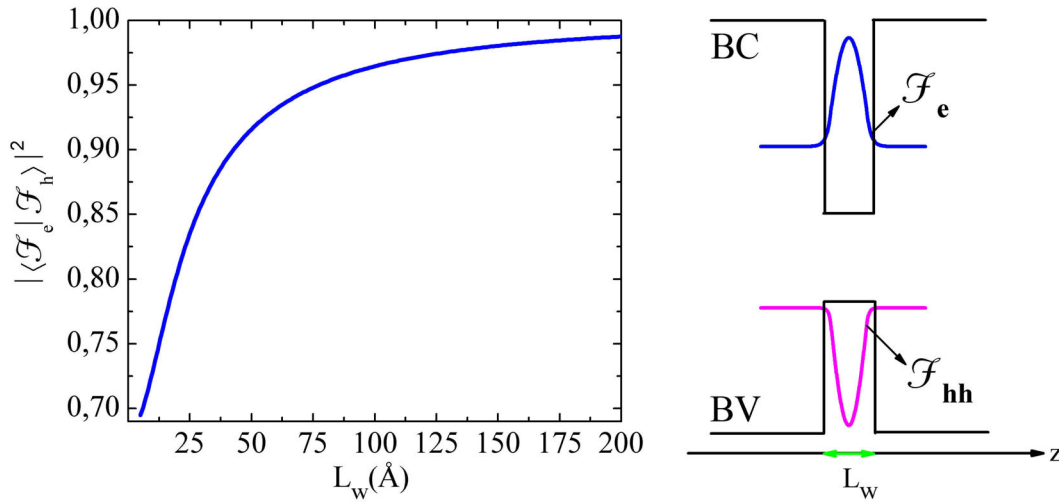


Fig. 7.6: Cálculo teórico do *overlap* das funções de onda dos estados de elétron e buraco pesado, $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$, versus o tamanho lateral do ponto quântico, L_w . Na figura também é mostrada um esquema da estrutura de potencial ao longo da direção z , juntamente com as funções de onda do elétron e do buraco.

par elétron-buraco pesado. Portanto, é incorreta a hipótese da Ref.[24] de atribuir o comportamento funcional de τ_0 , com a energia de emissão do ponto quântico, à variação do parâmetro de *overlap*. Mesmo considerando $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2 = 1$, máximo valor possível, não se pode atribuir a este parâmetro o decaimento apresentado pelos dados experimentais abaixo da curva teórica τ_0 .

Além do *overlap*, outros fatores, tais como a geometria do ponto quântico e os campos de *strain*, criados durante o processo de formação do ponto, possuem impacto direto na resposta óptica do sistema. No primeiro caso, a geometria anisotrópica do ponto quântico pode levar à hibridização dos estados de buraco da banda de valência, que poderiam, por sua vez, afetar o valor do elemento de matriz da transição óptica. No segundo caso, a intensidade dos campos de *strain* no sistema, que depende da formação da cadeia de pontos quânticos e da separação entre estes, afetam a taxa de transição óptica por meio da separação que ocorre entre os estados de buraco pesado e buraco leve, os quais estão acoplados [25]. As características da banda de valência podem ser efetivamente alteradas pela relaxação dos campos de *strain*, o que pode ser conseguido por *annealing* térmico [26], por exemplo. Porém, todos estes efeitos de hibridização reduzem efetivamente o valor de $|\langle \mathcal{F}_e | \mathcal{F}_h \rangle|^2$, tornando menos eficiente o processo de recombinação óptica e induzindo um aumento de τ_0 . Explicar a diminuição do valor deste parâmetro para altas energias de emissão tornou-se assim um desafio.

Quando os pontos quânticos possuem tamanho reduzido e, conseqüentemente, uma energia

de emissão relativamente maior, acontece a ativação de canais de relaxação não radiativos [27]. Este processo ocorre por meio da transferência de portadores entre pontos quânticos adjacentes com diferentes tamanhos, onde portadores migram dos pontos quânticos menores (mais energéticos), os pontos quânticos maiores (menos energéticos). A ocorrência deste processo pode ser potencializada por meio da emissão de fônons longitudinais ópticos (LO) em um *ensemble* de pontos quânticos [28].

Utilizando a Eq.(7.24) foi possível calcular o tempo de relaxação em função da separação entre os pontos quânticos, que nada mais é do que a separação L_b entre dois poços quânticos ao longo da direção z . Os resultados são mostrados na Fig.(7.7). A partir do valor do tempo

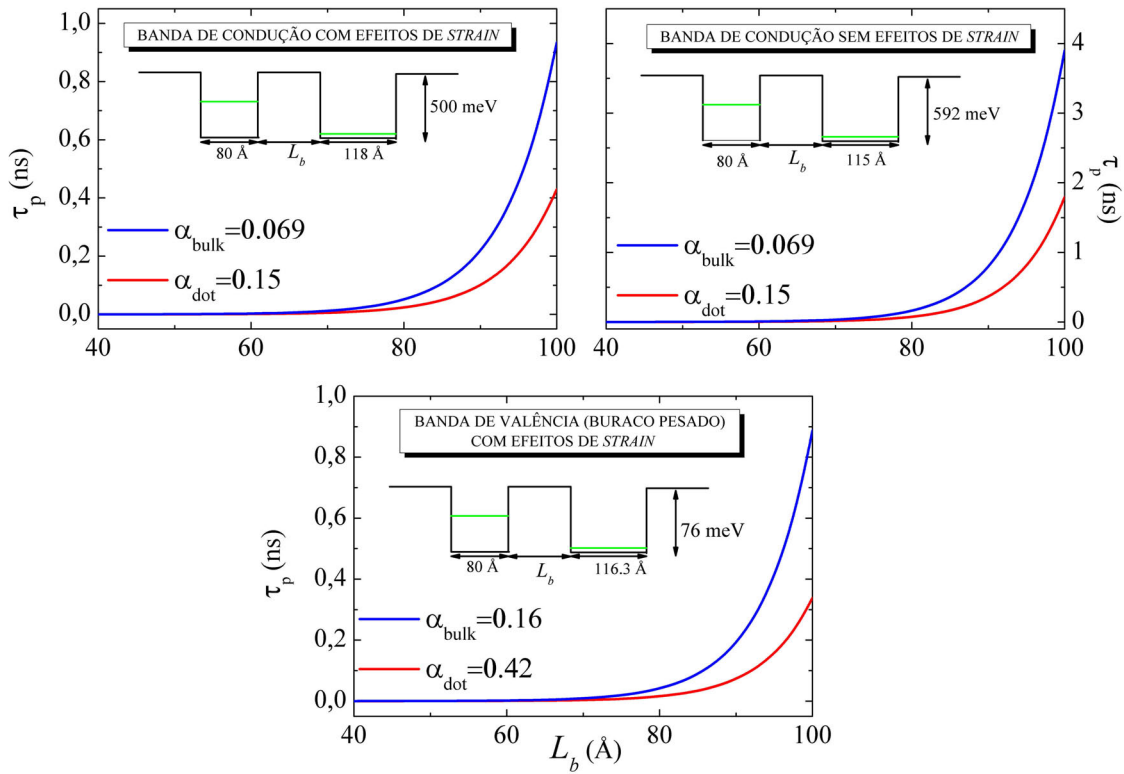


Fig. 7.7: Tempo de relaxação em função da distância de separação entre pontos quânticos. Em (a) e (b) são mostrados os resultados para elétrons, sem efeito de *strain* e com efeito de *strain*, respectivamente, e em (c) é mostrado o efeito para buraco pesado com efeito de *strain*. No sistema simulado considerou-se pontos quânticos de *InAs*.

de vida dos fônons para o *InAs*, calculou-se o valor de $\Gamma_{LO} \approx 0.0409 \text{ meV}$ [29]. Além disso, a constante de Fröhlich da forma como foi definida no Capítulo 3:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_{LO}} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad (7.30)$$

não incorpora efeitos de confinamento, sendo apropriada para materiais *bulk*. Como o sistema

em estudo apresenta confinamento nas três direções espaciais, é interessante utilizar uma constante de Fröhlich renormalizada, α_{dot} , a qual responde pelo confinamento dos portadores de carga no sistema, dada por [30]:

$$\alpha_{dot} = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}'} \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^3 \omega_{LO}}}, \quad (7.31)$$

onde $\tilde{\epsilon}'$ é definido como:

$$\frac{1}{\tilde{\epsilon}'} = \frac{1 - \frac{L_b}{D}}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} + \frac{L_b}{D}, \quad (7.32)$$

sendo L_b é a separação entre os pontos quânticos e D é o diâmetro médio dos pontos quânticos. Nos cálculos considerou-se $D = 20 \text{ nm}$. O efeito relativo à renormalização da interação de Fröhlich está ilustrado em todos os painéis da Fig.(7.7).

Como pode ser observado pela Fig.(7.7), a transferência de cargas entre pontos quânticos assistida por fônons induz a redução do tempo decaimento em pontos quânticos menores (mais energéticos), dado por: $1/\tau_p + 1/\tau_0$. A probabilidade de encontrar uma configuração de pontos menores com um ponto adjacente maior e com um nível em mais baixa energia, separado de uma energia igual a $\hbar\omega_{LO}$, é elevada. Isto pode ser constatado nos espectros de PL na Fig.(7.4), cuja morfologia responde à distribuição de tamanhos dos pontos quânticos em cada amostra caracterizada.

Na Fig. (7.7) é ilustrado também o efeito relativo do *strain* nos processo de relaxação. Nos pontos quânticos tensionados acontece uma diminuição relativa das barreiras, o que contribui para uma diminuição adicional do tempo de relaxação, e tal efeito mostra-se mais efetivo para elétrons, Fig.(7.7-a) e Fig.(7.7-b), do que para buracos, Fig.(7.7-c). Estes valores de tempos de relaxação para os pontos quânticos mais energéticos levam necessariamente a uma redução do tempo de decaimento óptico, $\tau_0(E)$, para valores abaixo da curva teórica. Assim, para valores altos de energia de emissão, o comportamento detectado do tempo de decaimento pode ser atribuído ao escape de portadores de pontos mais energéticos para pontos menos energéticos por meio da emissão de fônons longitudinais ópticos (LO).

Uma evidência adicional importante que pode-se extrair da Fig.(7.7) é a diferença entre os tempos de vida de elétrons e buracos, Fig.(7.7-a) e Fig.(7.7-c). Se um sistema estiver sujeito a esta configuração, o processo de relaxação pode levar a um desbalanço de portadores, local e temporal, no processo de recombinação em pontos quânticos maiores (menos energéticos). Como será discutido a seguir, este efeito pode ajudar a explicar o comportamento não monotônico anômalo observado para energias de emissão próximas ao valor máximo de PL .

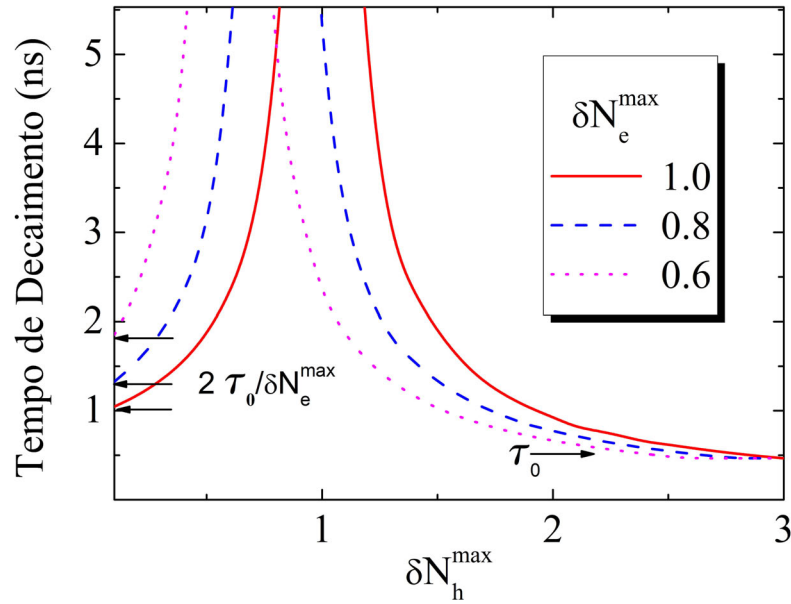


Fig. 7.8: Tempo de decaimento calculado de acordo com a Eq.(7.27)

Portadores de carga em um sistema que está relaxando podem ser encontrados localmente fora do equilíbrio térmico [31], logo, este desbalanço de cargas entre elétrons e buracos deve ser levado em conta. O modelo que da conta deste efeito está descrito pela Eq.(7.27). Na Figura (7.8) são mostrados resultados obtidos a partir da referida equação para vários valores da densidade inicial de elétrons. Pela figura fica claro que o efeito líquido do desbalanço de carga provoca um aumento do tempo de decaimento acima de τ_0 . Portanto, diferentes regimes de excitação de cada ponto quântico podem levar a diferentes valores do tempo de decaimento. Pela Figura (7.8) se observa também que quando as densidades iniciais de portadores são iguais o tempo de decaimento atinge um valor máximo. Isso mostra que o sistema é altamente sensível às condições iniciais.

No intuito de correlacionar os efeitos da condição inicial, vinculados à densidade de portadores nas bandas de condução e valência, com a energia de emissão do ponto quântico, supor-se-á que o número total de portadores por ponto quântico, $\delta N^{max}(E)$, que representam o número de fótons emitidos com energia E , seja proporcional ao número de fótons absorvidos, N_{ab} , de forma que: $\delta N^{max}(E) = N_{abs}/N_{dot}(E)$. A distribuição dos pontos quânticos por tamanho implica na distribuição de estados por energia, detectado pelo espectro de PL da Fig.(7.4). Dessa forma, pela Fig.(7.9-b) observa-se que a distribuição de pontos quânticos, N_{dot} , segue uma distribuição gaussiana. A distribuição de tamanho (energia) dos pontos quânticos determinará a sequência de passos nos processos de relaxação e de transferência assimétrica de portadores, que levará ao desbalanço de carga entre elétrons e buracos.

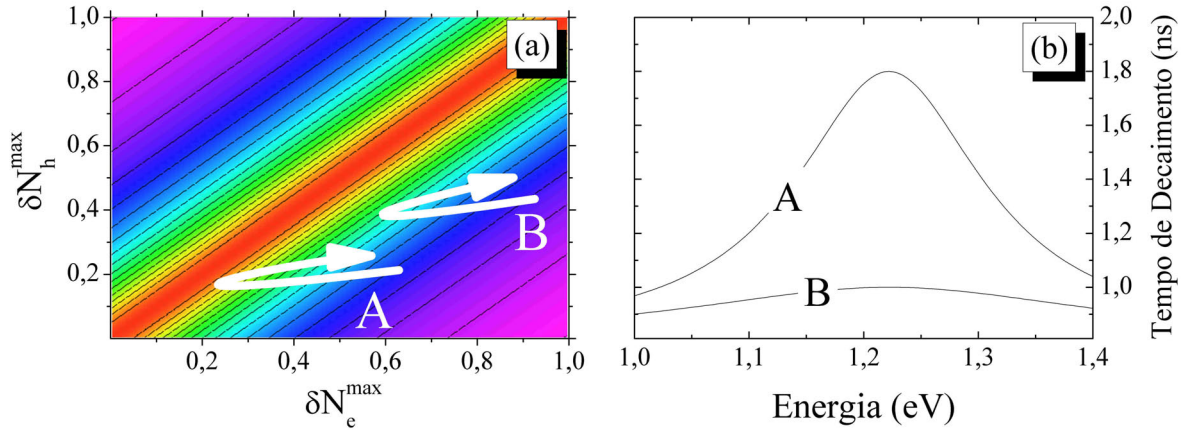


Fig. 7.9: (a) Esquema tridimensional do tempo de decaimento representado pela Fig.(7.8). (b) Tempo de decaimento versus energia de emissão para os dois caminhos hipotéticos mostrados em (a).

Supondo um desbalanço de cargas que leve à condição $\delta N_e^{\max}(E) > \delta N_h^{\max}(E)$, implica que: $\delta N_e^{\max}(E) = \xi \delta N_h^{\max}(E)$, com $\xi < 1$. Logo, por construção, $\delta N_h^{\max}(E) \propto N_{abs}/N_{dot}(E)$, e o número total de portadores iniciais por ponto quântico, conforme a energia aumenta, segue um padrão análogo àqueles rotulado por A ou B mostrado [Fig.(7.9-a)]. O reflexo das diferentes condições iniciais no tempo de decaimento é mostrado na Fig.(7.9-b). Como pode ser observado, há regiões de energia que o tempo de decaimento exibe um comportamento não monotônico, assim como os dados experimentais da Fig.(7.4). Isso evidencia a alta sensibilidade apresentada por este tipo de sistema às condições iniciais.

Tais previsões teóricas criaram a pauta para novos experimentos que foram executados por colaboradores. Para testar os efeitos da condição inicial do sistema de pontos quânticos com relação à densidade de portadores, foram estudadas adicionalmente duas amostras de pontos quânticos, rotuladas Amostra 2 e Amostra 3. As amostras são de pontos quântico de $In_{0.4}Ga_{0.6}As$, e ambas estão descritas estruturalmente na Ref.[25]. Enquanto na Amostra 2 os pontos quânticos estão quase alinhados (ao longo da direção $[1\bar{1}0]$), na Amostra 3 a distribuição é mais aleatória e dispersa, Fig.(7.10).

Para energias de excitação distantes da condição ressonante, Figs.(7.10-a) e (7.10-b), o tempo de decaimento, perto da região onde a PL é máxima, é diferente para cada amostra. Devido à distribuição distinta dos pontos quânticos nas duas amostras, a transferência de portadores dos pontos mais energéticos para os menos energéticos ocorre de forma diferente nos dois sistemas, afetando a população de portadores dos pontos quânticos predominantes, e que emitem próximos à posição do máximo da PL. O processo de transferência de cargas pode ocorrer de forma assimétrica para elétrons e buracos, como mostrado na Fig(7.7), criando, dessa forma,

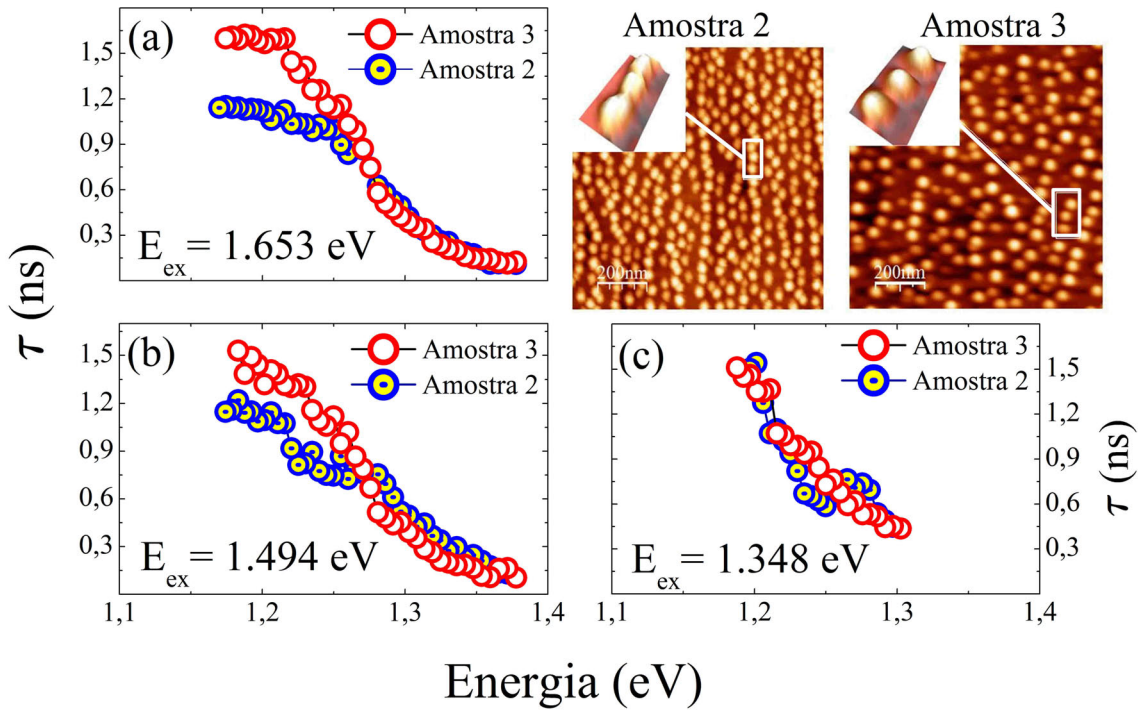


Fig. 7.10: Imagem de AFM das Amostras 2 e 3 são mostradas na parte superior da figura. Em (a), (b) e (c) são mostrados os tempos de decaimento em função da energia de emissão dos pontos quânticos, para as Amostras 2 e 3, com diferentes energias de excitação, E_{ex} .

um desbalanço de cargas que, por sua vez, gera uma queda no tempo de decaimento óptico, como visto na Fig(7.7). Assim, espera-se que na Amostra 2 este efeito seja mais pronunciado, devido ao forte acoplamento que esta amostra exibe entre os pontos, do que na Amostra 3, onde os pontos se apresentam distribuídos aleatoriamente. De fato, como se observa na Figs.(7.10-a) e (7.10-b), a Amostra 2 apresenta menor tempo de decaimento do que a amostra 3. Conforme a energia de excitação se aproxima do valor do máximo de *PL*, os tempos de decaimento das duas amostras se tornam equivalentes, mostrando que, na condição de ressonância, o efeito de transferência de carga se torna menos efetivo, levando assim a um aumento do tempo de decaimento da Amostra 2.

Sob a condição de excitação quase-ressonante, quando a interferência dos pontos quânticos mais energéticos é inibida, a Amostra 2 apresenta um comportamento peculiar, mostrado pelos pontos experimentais da Fig.(7.11-a). Uma curva aparece a uma distância, em energia, de um fônon ($\hbar\omega_{LO}$) do máximo da *PL*. Na Figura (7.11-b) é mostrado o cálculo teórico levando-se em conta o tempo de decaimento óptico, com e sem a contribuição da emissão de fônons ópticos *LO* [28], para uma distribuição de pontos quânticos que segue o padrão gaussiano do espectro de emissão da *PL*. Essa figura mostra a importância da inclusão dos processos de fônons na

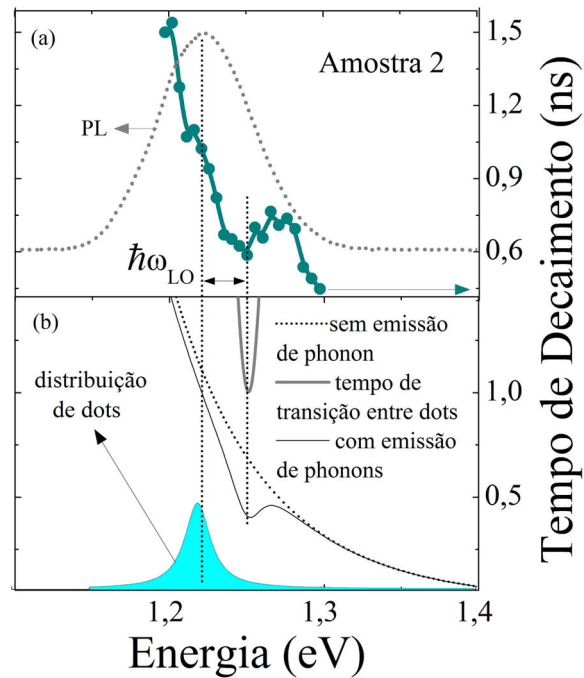


Fig. 7.11: (a) Tempo de decaimento da Amostra 2 com excitação quase-ressonante. (b) Valores calculados do tempo de decaimento óptico durante a transferência de cargas entre pontos quânticos assistida pela emissão de fônons.

transferência de portadores de cargas em sistemas de pontos quânticos acoplados.

Conclusão

Foram investigados processos dinâmicos em um sistema de pontos quânticos acoplados de *InAs*. Por meio de medidas de *PL* resolvida no tempo foi possível extrair o tempo de decaimento em função da energia de emissão do sistema de pontos acoplados. Os dados experimentais mostraram um comportamento peculiar do tempo de decaimento em função da energia. Para energias superiores à energia do pico central de *PL* o tempo de decaimento mostrou-se abaixo da curva teórica, a qual foi obtida via regra de ouro de Fermi. Em contrapartida, para energias inferiores à energia do pico de *PL*, o tempo de decaimento mostrou-se acima da curva teórica.

Para explicar esses dois comportamentos contrastantes do tempo de decaimento com a energia de emissão do sistema de pontos quânticos, foram feitos cálculos do tempo de decaimento considerando-se a influência do acoplamento elétron-fônon. Os cálculos mostram que a transferência de cargas induzida por emissão de fônon ópticos (*LO*) induz a redução do tempo de decaimento em pontos quânticos mais energéticos. Além disso, o *strain* mostrou-se como um mecanismo que pode ocasionar uma queda adicional no valor deste tempo.

Os cálculos provenientes da interação elétron-fônon em sistemas de pontos quânticos tensionados mostram que é possível haver certas configurações da estrutura eletrônica que propiciem tempos de relaxação diferentes para elétrons e buracos, criando assim condições propícias para que haja um desbalanço de cargas no sistema. Nesse sentido, fez-se uma dinâmica de portadores que incorporou este efeito. Os resultados mostraram que diferentes condições iniciais de densidades de portadores nos pontos quânticos podem levar a valores diferentes do tempo de decaimento óptico. O cálculo teórico é corroborado por dados experimentais provenientes de duas amostras de pontos quânticos que apresentam características e condições iniciais diferentes.

Com isso, foi possível explicar de maneira satisfatória o comportamento experimental do tempo de decaimento óptico em função da energia de emissão de um sistema de pontos quânticos acoplados. Outro fator importante que ficou caracterizado foi o efeito que o comportamento coletivo tem sobre o sistema, evidenciando novos mecanismos não presentes para pontos quânticos isolados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] S. M. Reimann and M. Manninen, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- [2] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*. (McGraw-Hill Book Company, Inc, New York, 1th, 1949).
- [3] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure* (Les Ulis Cedex: Les Éditions de Physique, 1988).
- [4] T. Kamizato and M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **40**, 8378 (1989).
- [5] V. López-Richard, S. S. Oliveira and G. -Q. Hai, *Phys. Rev. B* **71**, 075329 (2005).
- [6] K. Král and Z. Khás, *Phys. Rev. B* **57**, R2061 (1998).
- [7] T. Inoshita and H. Sakaki, *Phys. Rev. B* **56**, R4355 (1997).
- [8] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, (Dover Publications, INC., New York) (1972).
- [9] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*. (Oxford University Press, 2th, 1983).
- [10] P. Harrison, *Quantum Well, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductors Nanostructures*. (John Wiley & Sons, LTD, 2th, 2005).
- [11] V. Vurgaftman and J. Singh, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 232 (1994).
- [12] V. A. Kharchenko and M. Rosen, *J. Lumin.* **70**, 158 (1996).
- [13] J. M. Bergues, R. Betancourt-Riera, J. L. Marin and R. Riera, *Phys. Low-Dim. Struct.* **70**, 158 (1996).
- [14] D. F. Cesar, M. D. Teodoro, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, E. Marega Jr., V. G. Dorgan, Yu. I. Mazur and G. J. Salamo, *Phys. Rev. B* **83**, 195307 (2011).

-
- [15] U. Bockelmann and G. Bastard, *Phys. Rev. B* **42**, 8947 (1990).
- [16] T. Inoshita and H. Sakaki, *Phys. Rev. B* **46**, 7260 (1992).
- [17] Yu. I. Mazur, W. Q. Ma, X. Wang, Z. M. Wang, G. J. Salamo, M. Xiao, T. D. Mishima and M. B. Johnson, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 987 (2003).
- [18] Yu. I. Mazur, V. G. Dorogan, E. Marega Jr., D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, Z. Ya. Zhuchenko, G. G. Tarasov and G. J. Salamo, *Nanoscale Res. Lett.* **5**, 991 (2010).
- [19] Yu. I. Mazur, V. G. Dorogan, E. Marega Jr., G. G. Tarasov, D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques and G. J. Salamo, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 987 (2009).
- [20] B. R. Wang, B. Q. Sun, Y. Ji, X. M. Dou, Z. Y. Xu, Zh. M. Wang and G. J. Salamo, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 011107 (2008).
- [21] M. Scheibner, T. Schimidt, L. Worschech, A. Forchel, G. Bacher, T. Passow and D. Hommel, *Nat. Phys.* **3**, 106 (2006).
- [22] U. Bockelmann, *Phys. Rev. B* **48**, R17637 (1993).
- [23] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [24] S. Malik, E. C. Le Ru, D. Childs, and R. Murray, *Phys. Rev. B* **63**, 155313 (2001).
- [25] L. Villegas-Lelovsky, M. D. Teodoro, V. Lopez-Richard, C. Calseverino, A. Malachias, E. Marega Jr., B. L. Liang, Yu. I. Mazur, G. E. Marques, C. Trallero-Giner and G. J. Salamo, *Nanoscale Res. Lett.* **6**, 56 (2011).
- [26] E. Margapoti, Fabrizio M. Alves, S. Mahapatra, T. Schmith, V. Lopez-Richard, C. Destefani, E. Menendez-Proupin, Fanyao Qu, C. Bougerol, K. Brunner, A. Forchel, G. E. Marques and L. Worschech, *Phys. Rev. B* **82**, 205318 (2010).
- [27] A. Tackeuchi, Y. Nakata, S. Muto, Y. Sugiyama, T. Usuki, Y. Nishikama, N. Yokoyama and O. Wada, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L1439 (1995).
- [28] V. Lopez-Richard, S. S. Oliveira and G. -Q. Hai, *Phys. Rev. B* **71**, 075329 (2005).
- [29] A. Debernardi, *Phys. Rev. B* **57**, 12847 (1998).
- [30] L. Jacak, J. Krasnyj e W. Jacak, *Phys. Lett. A* **304**, 168 (2002).

- [31] W. shockley and W. T. Read Jr., Phys. Rev. **87**, 835 (1952).

8. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Diante dos objetivos propostos para este trabalho cabe, ao fim do mesmo, destacar algumas considerações gerais e perspectivas futuras.

Diferentemente de trabalhos que se fixam dentro de um único problema específico, este trabalho apresentou como diferencial a não fixação em uma linha exclusiva de investigação, e abrangeu vários temas complementares dentro do tópico da estrutura eletrônica de sistemas nanoscópicos.

Flexibilizar o horizonte de metas a serem atingidas permitiu a familiarização com variadas ferramentas teóricas e desafiantes problemas práticos como, por exemplo, fenômenos induzidos pelo *strain* e *stress* externo, efeitos estruturais relacionados à distribuição espacial das nanoestruturas, efeitos de temperatura, acoplamento com *phonons*, dinâmica de portadores e dinâmica de *spins* sob campos magnéticos.

Outra característica atraente deste trabalho foi a utilização de ferramentas análogas na investigação dos diversos tipos de nanoestruturas como, por exemplo, poços quânticos simples, duplos e múltiplos com orientação de crescimento tanto convencionais como não convencionais, fios quânticos *twin-planes* e pontos quânticos crescidos em cadeias. Embora sejam sistemas que aparentemente apresentem configurações diferenciadas, e que por si só dariam material suficiente para uma tese, o estudo dos sistemas nanoscópicos com interfaces e acoplados propiciou uma visão mais ampla do efeito do confinamento sobre a estrutura eletrônica de portadores, bem como da atuação de certos mecanismos nestes sistemas, como, por exemplo o *strain*, que são extremamente úteis na modulação da estrutura de bandas. A modulação destes parâmetros propicia uma “sintonia fina” para a engenharia da estrutura eletrônica, o que sempre resulta de interesse do ponto de vista de potenciais aplicações tecnológicas destas estruturas.

Outro fator que merece uma consideração relevante é referente às ferramentas matemáticas expostas ao longo do trabalho. Embora não se tenha proposto nenhuma descrição matemática nova e revolucionária, o trabalho teve méritos em utilizar ferramentas já existentes, porém com modificações e adequações próprias para cada sistema em particular, e mostraram-se gerais,

sendo possível sua aplicação no estudo de sistemas tanto quase-2D, 1D e 0D.

A colaboração inter-disciplinar foi um fator determinante para conseguir atingir objetivos tão ambiciosos. Dentre as ferramentas complementares utilizadas, uma que se mostrou extremamente poderosa e importante no estudo de sistemas nanoscópicos foi a dinâmica molecular. Embora baseada em conceitos semi-clássicos de interações atômicas, mostrou-se muito útil na descrição mecânica de alguns sistemas estudados, fornecendo uma visão diferenciada do problema em si, corroborando para uma conclusão mais sólida da fenomenologia estudada e complementando com os parâmetros necessários para os cálculos de estrutura eletrônica. A complementação experimental dos resultados teóricos apresentados foi, também, sem dúvidas, um elemento que agregou um valor inestimável ao trabalho, validando muitas hipóteses propostas teoricamente.

Parte destes tópicos terão sua continuidade garantida a partir de novos desafios que apareceram durante o processo de elaboração desta tese. Outros não foram ainda executados completamente pelo tempo limitado disponível. Assim, como perspectivas futuras pode-se destacar:

- Cálculo da estrutura eletrônica, com campo magnético *in-plane*, de sistemas de poços quânticos simples e duplos de *AlGaAs/GaAs* via método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.
- Caracterização e compreensão do nano-magnetismo e do diamagnetismo anômalo detectado na emissão de fotoluminescência pontos quânticos acoplados verticalmente.
- Caracterização e compreensão do nano-magnetismo e do diamagnetismo anômalo detectado na emissão de fotoluminescência de anéis quânticos acoplados verticalmente.
- Efeitos da incorporação de íons de *Mn* na dinâmica da fotoluminescência de pontos quânticos de *CdSe* resolvida no tempo.
- Caracterização do processo de carga e descarga de pontos quânticos acoplados eletronicamente a um gás de elétrons bi-dimensional.

APÊNDICE

A. ÍNDICES DE MILLER

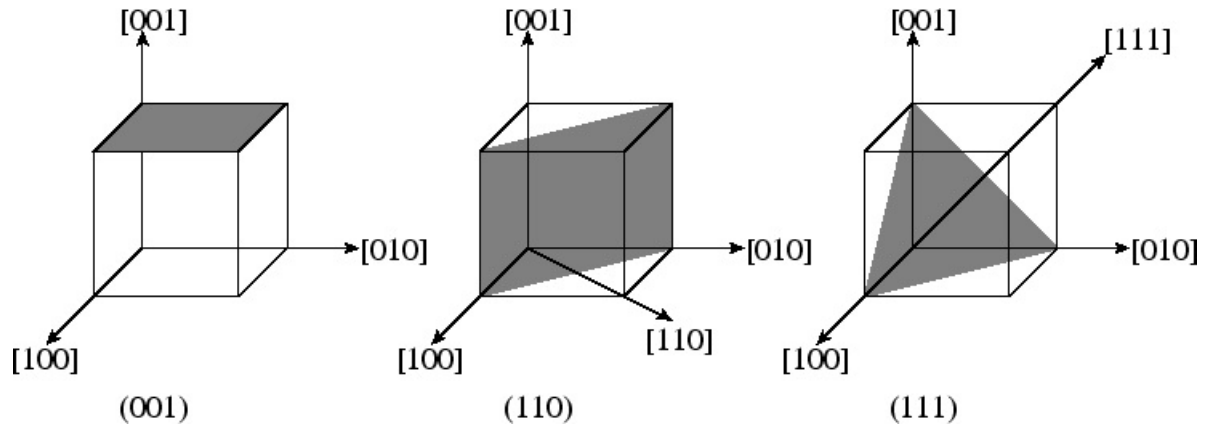


Fig. A.1: Figura esquemática representando planos e direções e cristalográficas por meio dos índices de Miller.

Os índices de Miller podem ser usados para especificar direções e planos em um cristal [1] (Fig.A.1). Para definir os índices de Miller é necessário definir previamente três vetores, os quais, para sistemas cristalinos cúbicos, coincidem com os eixos principais da célula unitária do cristal. Dessa forma, qualquer plano cristalino interceptará pelo menos um desses vetores em um determinado ponto. Assim, define-se os índices de Miller como sendo três números inteiros: h , k e l , obtidos tomando-se o inverso dos interceptos fracionais que o plano faz com os três vetores. Se o valor do índice de Miller for 0 significa que o plano em questão é paralelo ao respectivo eixo cristalográfico. Índices negativos são, em geral, representados por uma barra horizontal sobre o número. Se os índices de Miller estiverem representados entre parenteses, tal como: (hkl) , representarão um plano cristalográfico. Se estiverem representados entre colchetes, tal como: $[hkl]$, representarão uma direção cristalográfica. Se estiverem apresentados entre chaves, tal como: $\{hkl\}$, representarão planos equivalentes ao plano (hkl) . E se estiverem representados por $\langle hkl \rangle$ representarão direções que são equivalentes à direção $[hkl]$.

B. O TENSOR DE STRAIN EM DIREÇÃO CRISTALOGRÁFICA ARBITRÁRIA

Ao representar os elementos do tensor *strain* em uma direção cristalográfica arbitrária $[hkl]$, o sistema de coordenadas passará de (x, y, z) para (x', y', z') , e os elementos de matriz dos tensores de *strain*, *stress* e elasticidade passarão, respectivamente, de ε_{ij} para ε'_{ij} , τ_{ij} para τ'_{ij} e $c_{\alpha\beta ij}$ para $c'_{\alpha\beta ij}$.

Considerando um filme epitaxial, o qual não está perfeitamente casado com o substrato, este estará, no plano da interface entre os materiais constituintes do substrato e do filme, sob uma contração biaxial uniforme ($\varepsilon_{||} < 0$) ou sob uma dilatação biaxial uniforme ($\varepsilon_{||} > 0$). O *strain* no plano é definido como [2]:

$$\varepsilon_{||} = \frac{a_s}{a_l} - 1. \quad (\text{B.1})$$

onde a_s e a_l são, respectivamente, os parâmetros de rede do material do substrato e do material do filme epitaxial.

O substrato é suposto ser suficientemente espesso, de modo que seu espaçamento de rede seja mantido constante. Dessa forma, não há distorções biaxiais no plano (os ângulos entre as ligações dos íons no plano são preservados). Os elementos do tensor *strain* responsáveis por essas distorções são aqueles fora da diagonal principal. Portanto, a partir das suposições feitas pode-se inferir que:

$$\varepsilon_{||} = \varepsilon'_{11} = \varepsilon'_{22} \quad (\text{contração ou dilatação biaxial}) \quad (\text{B.2})$$

$$\varepsilon'_{12} = \varepsilon'_{21} = 0 \quad (\text{sem } \textit{strain} \text{ de cisalhamento}).$$

Dessa forma, considerando a simetria deste tensor, restam apenas três componentes a serem determinadas: ε'_{13} , ε'_{23} , e ε'_{33} .

Por ser suficientemente espesso para manter o espaçamento de rede, o substrato, sobre o qual o filme está depositado, aplica um *stress* uniforme em todo plano- xy , que é o plano da interface entre os materiais. Este é o único *stress* externo aplicado sobre o filme. Por conseguinte,

$$\tau'_{33} = \tau'_{23} = \tau'_{13} = 0 \quad (\text{B.3})$$

e, considerando a simetria do tensor de *stress*, restam apenas três componentes a serem determinadas: τ'_{11} , τ'_{22} e τ'_{12} .

Utilizando a lei de Hook, dentro da aproximação linear, para relacionar os tensores de *stress* e *strain* tem-se que:

$$\tau'_{\alpha\beta} = \sum_{i,j}^3 c'_{\alpha\beta ij} \varepsilon'_{ij}. \quad (\text{B.4})$$

com $(\alpha, \beta) = 1, 2, 3$. Da Equação (B.3) implica que: quando $(\alpha\beta) = (33)$, (23) e (13) , tem-se que $\tau'_{\alpha\beta} = 0$; portanto, considerando os valores de α e β indicados acima, a Eq.(B.4) assume a forma:

$$\sum_{i,j}^3 c'_{\alpha\beta ij} \varepsilon'_{ij} = 0. \quad (\text{B.5})$$

Expandindo a somatória (B.5), utilizando as simetrias dos tensores de *strain* e elasticidade, juntamente com a Eq.(B.2), chega-se à equação:

$$c'_{\alpha\beta 33} \varepsilon'_{33} + 2c'_{\alpha\beta 31} \varepsilon'_{31} = - \left(c'_{\alpha\beta 11} c'_{\alpha\beta 22} \right) \varepsilon_{||}. \quad (\text{B.6})$$

Substituindo $(\alpha, \beta) = (3, 3)$, $(2, 3)$ and $(1, 3)$ é possível expressar a Eq.(B.6) em uma forma matricial:

$$\begin{pmatrix} c'_{3333} & c'_{3323} & c'_{3331} \\ c'_{2333} & c'_{2323} & c'_{2331} \\ c'_{3133} & c'_{3123} & c'_{3131} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon'_{33}}{2} \\ \varepsilon'_{23} \\ \varepsilon'_{31} \end{pmatrix} = -\frac{\varepsilon_{||}}{2} \begin{pmatrix} c'_{3311} + c'_{3322} \\ c'_{2311} + c'_{2322} \\ c'_{3111} + c'_{3122} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

O sistema em análise é aquele descrito pelas coordenadas (x', y', z') , cujo plano de crescimento é ortogonal ao eixo z' . Este sistema se relaciona com o sistema cristalográfico primitivo do substrato, (x, y, z) , por uma rotação descrita pela matriz \mathcal{U} , dado por:

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \theta & \sin \varphi & \cos \varphi \sin \theta \\ \sin \varphi \cos \theta & \cos \varphi & \sin \varphi \sin \theta \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

onde φ e θ são, respectivamente, os ângulos azimutal e polar (Fig.3.4). A partir da figura é possível definir os ângulos φ e θ em função dos índices de Miller h , k e l :

$$\begin{aligned} \theta &= \arccos \left(\frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \right) \\ \varphi &= \arccos \left(\frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

A regra geral para transformar os tensores de *strain* e elasticidade entre os sistemas referenciais (x, y, z) e (x', y', z') é dada, respectivamente, por [2]:

$$\varepsilon'_{\alpha\beta} = u_{i\alpha}u_{j\beta}\varepsilon_{ij} \quad (\text{B.10})$$

$$c'_{\gamma\delta kl} = u_{\alpha\gamma}u_{\beta\delta}u_{ik}u_{jl}c_{\alpha\beta ij},$$

onde u_{mn} são elementos da matriz de rotação \mathcal{U} . Em sistemas cúbicos o tensor de elasticidade é determinado por apenas três elementos independentes: c_{11} , c_{12} e c_{44} , os quais são tabelados para cada material. Dessa forma, levando em conta tal simetria, este tensor, no sistema referencial (x', y', z') , pode ser expresso como[2]:

$$\begin{aligned} c'_{\gamma\delta kl} &= c_{11} \sum_{\alpha=1}^3 u_{\alpha\gamma}u_{\alpha\delta}u_{\alpha k}u_{\alpha l} \\ &+ c_{12} \sum_{\beta=2}^3 \sum_{\alpha=1}^{\beta-1} (u_{\alpha\gamma}u_{\alpha\delta}u_{\beta k}u_{\beta l} + u_{\beta\gamma}u_{\beta\delta}u_{\alpha k}u_{\alpha l}) \\ &+ c_{44} \sum_{\beta=2}^3 \sum_{\alpha=1}^{\beta-1} (u_{\alpha\gamma}u_{\beta\delta} + u_{\beta\gamma}u_{\alpha\delta}) \times (u_{\alpha k}u_{\beta l} + u_{\beta k}u_{\alpha l}). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Uma vez que os elementos $c'_{\gamma\delta kl}$ foram determinados, basta resolver o sistema de equações (B.7) e determinar os elementos restantes do tensor de *strain* ε'_{13} , ε'_{23} e ε'_{33} . A partir do que foi proposto foram determinados os tensores de *strain* orientados ao longo de algumas direções particulares:

Direção [100]:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{||} \end{pmatrix} \quad (\text{B.12})$$

Direção [110]:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2c_{44}-c_{11}-3c_{12}}{c_{11}+c_{12}+2c_{44}}\varepsilon_{||} \end{pmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Direção [111]:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2(c_{11}+2c_{12}-2c_{44})}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}\varepsilon_{||} \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

Direção [112]:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & \varepsilon'_{xy} \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ \varepsilon'_{yx} & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{B.15})$$

onde

$$\varepsilon'_{xz} = \varepsilon'_{zx} = \varepsilon'_{13} = -\frac{3\sqrt{2}}{2} \frac{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{11}c_{44} - 2c_{12}^2 - 4c_{12}c_{44}}{2c_{11}^2 + 13c_{11}c_{44} + 2c_{11}c_{12} + 2c_{44}^2 - 4c_{12}^2 - 7c_{12}c_{44}} \varepsilon_{||} \quad (\text{B.16})$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon'_{33} = -\frac{4c_{11}^2 + 4c_{11}c_{12} - 7c_{11}c_{44} - 8c_{12}^2 + 19c_{12}c_{44} - 2c_{44}^2}{2c_{11}^2 + 13c_{11}c_{44} + 2c_{11}c_{12} + 2c_{44}^2 - 4c_{12}^2 - 7c_{12}c_{44}} \varepsilon_{||}.$$

Direção [113]:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{||} & 0 & \varepsilon_{xz} \\ 0 & \varepsilon_{||} & 0 \\ \varepsilon_{zx} & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{B.17})$$

onde

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp} = -\frac{198c_{11}^2 - 45c_{11}c_{12} - 374c_{11}c_{44} - 153c_{12}^2 + 124c_{12}c_{44} - 44c_{44}^2}{11(9c_{11}^2 + 9c_{11}c_{12} + 9c_{11}c_{44} - 18c_{12}^2 - 34c_{12}c_{44} + 4c_{44}^2)} \varepsilon_{||} \quad (\text{B.18})$$

$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{13} = -\frac{12\sqrt{2}}{11} \frac{11c_{11}^2 + 2c_{11}c_{12} - 22c_{11}c_{44} - 13c_{12}^2 - 26c_{12}c_{44}}{(9c_{11}^2 + 9c_{11}c_{12} + 9c_{11}c_{44} - 18c_{12}^2 - 34c_{12}c_{44} + 4c_{44}^2)} \varepsilon_{||}.$$

Portanto, os elementos do tensor de *strain* ficam definidos, exclusivamente, pelas componentes do tensor de elasticidade: c_{11} , c_{12} e c_{44} , as quais são constantes e próprias de cada material, e pela componente *in-plane* do tensor de *strain*: $\varepsilon_{||}$, definida pela Eq.(B.1).

C. HAMILTONIANO DE LUTTINGER E BIR-PIKUS EM DIREÇÃO CRISTALOGRÁFICA ARBITRÁRIA

O procedimento aqui descrito, para a obtenção das matrizes Hamiltonianas de Luttinger e Bir-Pikus ao longo da direções cristalográfica arbitrária $[h h k]$, foi baseado no mesmo procedimento da Ref.[3]. Entretanto, aqui, procurou-se esmiuçar o procedimento, de forma a torná-lo mais simples e direto.

É conveniente, de antemão, fazer as seguintes definições:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad k_{||}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad k_{\pm} = k_x \pm i k_y, \quad \mathbf{k} = -i\nabla \quad (\text{C.1})$$

$$\gamma_{\delta} = \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{2}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\gamma_3 + \gamma_2}{2}, \quad \gamma_{n:p} = \frac{n\gamma_3 + p\gamma_2}{n+p}, \quad (\text{C.2})$$

sendo k_i ($i = x, y, z$) os componentes do vetor de onda \mathbf{k} , e γ_1 , γ_2 e γ_3 os parâmetros ordinários de Luttinger.

O Luttinger usual é escrito como:

$$\mathcal{H}_L[001] = \frac{1}{2} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - \gamma_2 [k_x^2 J_x^2 + c \cdot p] - \gamma_3 [k_x k_y (J_x J_y + J_y J_x) + c \cdot p], \quad (\text{C.3})$$

em que $c \cdot p$ significa permutação cíclica das componentes x , y e z , as quais estão definidas paralelamente às direções $[100]$, $[010]$ e $[001]$, respectivamente.

Para representar o Hamiltoniano de Luttinger em uma direção arbitrária $[h h k]$, é preciso, por meio de uma rotação, representar o sistema, que está definido inicialmente no referencial (x, y, z) , no novo referencial (x', y', z') . Assim, se a direção inicial de quantização do Hamiltoniano de Luttinger é $[001]$ (eixo- z), a direção arbitrária $[h h k]$ (eixo- z') definirá o novo eixo de quantização do sistema.

No desenvolvimento matemático proposto pela Ref.[3] o autor utiliza tensores para exprimir a rotação do sistema entre as coordenadas (x, y, z) e (x', y', z') . Assim, o Hamiltoniano de Luttinger (C.3), expresso na direção arbitrária $[h h k]$, assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H}_L[001] = \mathcal{H}_s + \gamma_s \left[\sum_{M=0}^4 c_M t_M \right], \quad (\text{C.4})$$

onde c_M são coeficientes que dependem da direção de quantização, e são definidos por:

$$\begin{aligned}
c_0 &= \frac{1}{5}(1 + 60\xi^4\eta^4 - 20\xi^2\eta^2) \\
c_1 &= 2\sqrt{14}\xi\eta(\xi^2 - \eta^2)(1 - 6\xi^2\eta^2) \\
c_2 &= 4\sqrt{7}\xi^2\eta^2(1 - 6\xi^2\eta^2) \quad , \\
c_3 &= 2\sqrt{2}\xi\eta(\xi^2 - \eta^2)(1 + 6\xi^2\eta^2) \\
c_4 &= 12\xi^4\eta^4 + 4\xi^2\eta^2 - 1
\end{aligned} \tag{C.5}$$

onde $\xi = \cos(\beta/2)$ e $\eta = \sin(\beta/2)$. α , β , e γ são os ângulos de Euler, os quais podem ser expressos em termos dos índices de Miller, os quais definem a nova direção de quantização $[h h k]$, como:

$$\alpha = \frac{\pi}{4}; \quad \beta = \arccos\left[\frac{k}{\sqrt{k^2+2h^2}}\right]; \quad \gamma = 0. \tag{C.6}$$

A Tabela (C.1) mostra os valores assumidos pelos coeficientes c_M para algumas direções. O

Tab. C.1: Valores dos coeficientes c_M para diferentes direções de quantização.

$c_M \setminus [h h k]$	[001]	[110]	[111]	[112]	[113]
c_0	$\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{20}$	$-\frac{2}{15}$	$-\frac{1}{20}$	$\frac{26}{615}$
c_1	0	0	0	$\frac{\sqrt{7}}{3}$	$\frac{48\sqrt{7}}{121}$
c_2	0	$-\frac{\sqrt{7}}{2}$	0	$\frac{\sqrt{7}}{6}$	$\frac{16\sqrt{7}}{121}$
c_3	0	0	$\frac{4}{3}$	1	$\frac{84}{121}$
c_4	-1	$\frac{3}{4}$	0	$-\frac{7}{12}$	$-\frac{96}{121}$

termo \mathcal{H}_s é a parte “esférica” do Hamiltoniano, e é invariante sob rotação, ou seja, independe da direção de quantização:

$$\mathcal{H}_s = \frac{1}{2}\gamma_1 k^2 + \gamma_s t_s. \tag{C.7}$$

Os termos t_s e t_M , os quais os são tensores responsáveis por descrever corretamente os termos “esférico” e “não esféricos” do Hamiltoniano de Luttinger no novo sistema coordenado (x', y', z') , possuem a forma:

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} p^+ & -s & r & 0 \\ & p^- & 0 & r \\ & & p^- & s \\ & & & p^+ \end{pmatrix} \tag{C.8}$$

Tab. C.2: Elementos de matriz p^\pm , $-s$ e r para cada tensor t .

	p^\pm	$-s$	r
t_s	$\pm \frac{1}{2} (k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$\sqrt{3}k_-k_z$	$-\frac{1}{2}\sqrt{3}k_-^2$
t_0	$\mp 3 (k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$4\sqrt{3}k_-k_z$	$\frac{1}{2}\sqrt{3}k_-^2$
t_1	$\mp \frac{6}{\sqrt{14}}k_xk_z$	$-\sqrt{\frac{3}{14}} \left[(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2) + \frac{k_-^2}{2} \right]$	$\sqrt{\frac{3}{14}}k_-k_z$
t_2	$\pm \frac{3}{2\sqrt{7}} (k_x^2 - k_y^2)$	$-2\sqrt{\frac{3}{7}}k_+k_z$	$-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{7}} (k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$
t_3	0	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}k_+^2$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}k_+k_z$
t_4	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}k_+^2$

onde os elementos p^\pm , $-s$ e r para cada tensor t são mostrados na Tabela (C.2). Com isso, pode-se reescrever (C.4) na forma matricial expandida:

$$\mathcal{H}_L[hhk] = \frac{1}{2}\gamma_1 k^2 \mathbf{i} + \gamma_s t_s + \gamma_\delta (c_0 t_0 + c_1 t_1 + c_2 t_2 + c_3 t_3 + c_4 t_4) \quad (\text{C.9})$$

onde \mathbf{i} é a matriz identidade. Dessa forma fica definido o Hamiltoniano de Luttinger para uma direção arbitrária $[hhk]$.

Seguindo o mesmo procedimento utilizado para obter o Hamiltoniano de Luttinger na direção arbitrária $[hhk]$, será obtido o Hamiltoniano Bir-Pikus para uma direção arbitrária $[hhk]$.

É conveniente, de antemão, fazer as seguintes definições:

$$\beta_\delta = \frac{\beta_3 - \beta_2}{2}, \quad \bar{\beta} = \frac{\beta_3 + \beta_2}{2}, \quad \beta_{n;p} = \frac{n\beta_3 + p\beta_2}{n+p}, \quad (\text{C.10})$$

$$\beta_1 = 2a_v, \quad \beta_2 = b, \quad \beta_3 = \frac{d}{\sqrt{3}}, \quad (\text{C.11})$$

onde a_v , b e d são os potenciais de deformação para a banda de valência.

O Hamiltoniano de Bir-Pikus usual é escrito como [4]:

$$\mathcal{H}_{BP}[001] = -a \sum_i \varepsilon_{ii} - b \sum_i \varepsilon_{ii} \left[\frac{2}{i} - \frac{1}{3} J^2 \right] - \frac{2d}{\sqrt{3}} \left[\varepsilon_{xy} \frac{J_x J_y + J_y J_x}{2} + c \cdot p \right] \quad (\text{C.12})$$

$$\mathcal{H}_{BP}[001] = \frac{1}{2} (\beta_1 + \frac{5}{2}\beta_2) \sum_i \varepsilon_{ii} - \beta_2 \sum_i \varepsilon_{ii} J_i^2 - \beta_3 [\varepsilon_{xy} (J_x J_y + J_y J_x) + c \cdot p],$$

onde ε_{ij} ($i, j = x, y, z = 1, 2, 3$) são os elementos do tensor de *strain*. Assim como o Hamiltoniano de Luttinger, o Hamiltoniano de Bir-Pikus apresenta uma parte invariante sob rotação, parte “esférica”, e uma parte que depende da rotação dos eixos, parte “não esférica”.

Utilizando o mesmo método de rotação de eixos, que foi utilizado na construção de (C.4), é possível escrever (C.12) orientado ao longo da direção de quantização $[hkk]$ como:

$$\mathcal{H}_{BP}[001] = \frac{1}{2}\beta_1 \sum_i \varepsilon_{ii} + \beta_s \tau_s + \beta_s \left[\sum_{M=0}^4 c_M \tau_M \right], \quad (\text{C.13})$$

onde c_M é definido pela Eq.(C.5) e τ_s e τ_M são tensores que possuem a mesma forma matricial definida por (C.8), porém com elementos dados matriciais apresentados pela Tabela(C.3). Com

Tab. C.3: Elementos de matriz para cada tensor τ .

	p^\pm	s	r
τ_s	$\pm(\varepsilon_{ } - \varepsilon_{\perp})$	$\sqrt{3}\varepsilon_{13}$	0
τ_0	$\mp 6(\varepsilon_{ } - \varepsilon_{\perp})$	$4\sqrt{3}\varepsilon_{13}$	0
τ_1	$\mp 3\sqrt{\frac{2}{7}}\varepsilon_{13}$	$-\sqrt{\frac{6}{7}}(\varepsilon_{ } - \varepsilon_{\perp})$	$\sqrt{\frac{3}{14}}\varepsilon_{13}$
τ_2	0	$-2\sqrt{\frac{3}{7}}\varepsilon_{13}$	$-\sqrt{\frac{3}{7}}(\varepsilon_{ } - \varepsilon_{\perp})$
τ_3	0	0	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\varepsilon_{13}$
τ_4	0	0	0

isso, a Eq.(C.13) pode ser escrita na forma matricial expandida:

$$\mathcal{H}_{BP}[hkk] = \frac{1}{2}\beta_1(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33})\mathbb{i} + \beta_s \tau_s + \beta_s (\alpha_0 \tau_0 + \alpha_1 \tau_1 + \alpha_2 \tau_2 + \alpha_3 \tau_3 + \alpha_4 \tau_4) \quad (\text{C.14})$$

onde \mathbb{i} é a matriz identidade. Dessa forma fica definido o Hamiltonianos de Bir-Pikus para uma direção arbitrária $[hkk]$.

D. CAMPO MAGNÉTICO ORIENTADO PERPENDICULARMENTE À DIREÇÃO DE CRESCIMENTO

O Hamiltoniano de uma partícula, sujeita a um potencial $V(z)$ e em um campo magnético com intensidade B atuando no plano- xz [Fig.(5.14)], pode ser dado por:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + V(z) \quad (\text{D.1})$$

onde m é a massa do portador, e a carga do elétron e c a velocidade da luz, e o potencial $V(z)$ é da forma:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } -\frac{L_w}{2} \leq z \leq \frac{L_b}{2} \\ V_0 & \text{se } -\frac{L_b}{2} \leq z \leq \frac{L_b}{2} \\ 0 & \text{se } \frac{L_b}{2} \leq z \leq \frac{L_w}{2} \\ \infty & \text{se } |z| \geq \frac{L_w}{2} \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

O potencial vetor $\hat{\mathbf{A}}$, definido pelo *gauge* $\hat{\mathbf{A}} = (Bz, 0, 0)$, relaciona-se com o campo magnético \mathbf{B} por meio da expressão: $\nabla \times \hat{\mathbf{A}} = Bz\hat{\mathbf{j}}$.

A partir da definição do potencial vetor $\hat{\mathbf{A}}$, é possível escrever (D.1) como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{2e}{c} Bz\hat{p}_x + \frac{e^2}{c^2} B^2 z^2 \right) + V(z) \quad (\text{D.3})$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 + \frac{2e}{c} Bz\hat{p}_x + \frac{e^2}{c^2} B^2 z^2 \right) + V(z)$$

Definindo a frequência ciclotrônica ω_0 , o comprimento magnético ℓ_b e o centro da órbita ciclotrônica z_0 , respectivamente, como:

$$\omega_0 = \frac{eB}{mc}; \quad \ell_b = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}; \quad z_0 = \frac{\hbar c}{eB} k_x = \ell_b^2 k_x, \quad (\text{D.4})$$

com $p_i = \hbar k_i$, a Eq.(D.3) assume a forma:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{1}{2m} \left(\hbar^2 k_x^2 + \frac{2\hbar e}{c} B z k_x + \frac{e^2}{c^2} B^2 z^2 \right) + V(z) \\ \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{1}{2m} \left(\hbar k_x + \frac{e}{c} B z \right)^2 + V(z) \\ \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{eB}{2mc} \left(\frac{\hbar c}{eB} k_x + z \right)^2 + V(z) \\ \hat{\mathcal{H}} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} (z_0 + z)^2 + V(z)\end{aligned}\tag{D.5}$$

onde na última equação foi utilizada a relação: $\hat{p}_z = -i\hbar(d/dz)$.

Fazendo a mudança de variável: $z = \ell_b t$, com $t_0 = \ell_b k_x$, em (D.5) tem-se que:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell_b^2} \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} (\ell_b t_0 + \ell_b t)^2 + V(t)\tag{D.6}$$

Invocando a equação de autovalores: $\hat{\mathcal{H}} \mathcal{F}_1(t) = \mathcal{E} \mathcal{F}_1(t)$ tem-se:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell_b^2} \frac{\partial}{\partial t^2} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} (\ell_b t_0 + \ell_b t)^2 + V(t) \right] \mathcal{F}_1(t) = \mathcal{E} \mathcal{F}_1(t)\tag{D.7}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell_b^2} \frac{\partial}{\partial t^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} (\ell_b t_0 + \ell_b t)^2 + V(t) - \mathcal{E} \right] \mathcal{F}_1(t) = 0$$

onde defini-se: $\mathcal{E} = \mathcal{E} - \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2$. Rearranjando (D.7):

$$\left[\frac{1}{\ell_b^2} \frac{d^2}{dt^2} - \frac{m^2 \omega_0^2 \ell_b^2}{\hbar^2} (t_0 + t)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V(t)) \right] \mathcal{F}_1(t) = 0$$

$$\left[\frac{1}{\ell_b^2} \frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{\ell_b^2} (t_0 + t)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V(t)) \right] \mathcal{F}_1(t) = 0\tag{D.8}$$

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} - (t_0 + t)^2 + \frac{2}{\hbar\omega_0} (\mathcal{E} - V(t)) \right] \mathcal{F}_1(t) = 0$$

Fazendo uma segunda mudança de variável: $\alpha = t + t_0$ e $\lambda_0 = (2/\hbar\omega_0)(\mathcal{E} - V(\alpha))$ em (D.8)

tem-se que:

$$\left(\frac{d^2}{d\alpha^2} - \alpha^2 + \lambda_0 \right) \mathcal{F}_2(\alpha) = 0\tag{D.9}$$

Fazendo nova mudança de variável: $\alpha = w/\sqrt{2}$ e $a_0 = -\lambda_0/2$ em (D.9) tem-se:

$$\frac{d^2 \mathcal{F}_3(w)}{dw^2} - \left(\frac{w^2}{4} + a_0 \right) \mathcal{F}_3(w) = 0\tag{D.10}$$

A Eq.(D.10), da forma como foi escrita, apresenta soluções pares e ímpares bem conhecida, as quais recebem o nome de *Funções Cilíndricas Parabólicas* [5]:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_3(w) &= e^{-\frac{w^2}{4}} \mathcal{M}\left(\frac{a_0}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) && \text{solução par} \\ \mathcal{F}_3(w) &= e^{-\frac{w^2}{4}} w \mathcal{M}\left(\frac{a_0}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) && \text{solução ímpar}\end{aligned}\quad (\text{D.11})$$

$$\mathcal{F}_3(w) = \mathcal{A}e^{-\frac{w^2}{4}} \mathcal{M}\left(\frac{a_0}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}e^{-\frac{w^2}{4}} w \mathcal{M}\left(\frac{a_0}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \quad \text{solução geral}$$

em que \mathcal{A} e \mathcal{B} são coeficientes e \mathcal{M} é a *Função Hipergeométrica Confluente* [5].

Assim, de acordo com a Fig(5.15) o sistema apresenta-se com três regiões distintas, de forma que a_0 assume os seguintes valores para as regiões *I*, *II* e *III*, respectivamente:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 = a_1 = -\frac{\lambda_1}{2} = \frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_0} \quad \text{se} \quad \sqrt{2} \left(-\frac{L_w}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \leq w \leq \sqrt{2} \left(-\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \\ a_0 = a_2 = -\frac{\lambda_2}{2} = \frac{\mathcal{E} - V_0}{\hbar\omega_0} \quad \text{se} \quad \sqrt{2} \left(-\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \leq w \leq \sqrt{2} \left(\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \\ a_0 = a_1 = -\frac{\lambda_1}{2} = \frac{\mathcal{E}}{\hbar\omega_0} \quad \text{se} \quad \sqrt{2} \left(\frac{L_b}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right) \leq w \leq \sqrt{2} \left(\frac{L_w}{2\ell_b} + \ell_b k_x \right). \end{array} \right. \quad (\text{D.12})$$

Portanto, a solução geral do problema, para cada região, pode ser dada por:

$$\mathcal{F}_3(w) = \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{F}_{3(I)}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \\ \mathcal{F}_{3(II)}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_2 \mathcal{M}\left(\frac{a_2+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_2 w \mathcal{M}\left(\frac{a_2+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \\ \mathcal{F}_{3(III)}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_3 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_3 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right]. \end{array} \right. \quad (\text{D.13})$$

É importante notar que para as regiões (I) e (II), assim como para as regiões (II) e (III) as massas são diferentes, o que implica dizer que a frequência ciclotrônica apresenta a dependência: $\omega_0 = \omega_0(m^*)$. A partir das funções que descrevem o problema, pode-se aplicar as condições de contorno:

(i) continuidade das funções nas interfaces:

$$\mathcal{F}_{3I}(-w_L) = 0, \quad \mathcal{F}_{3I}(-w_b) = \mathcal{F}_{3II}(-w_b), \quad \mathcal{F}_{3II}(w_b) = \mathcal{F}_{3III}(w_b), \quad \mathcal{F}_{3III}(w_L) = 0 \quad (\text{D.14})$$

(ii) continuidade do fluxo de partículas nas interfaces:

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d\mathcal{F}_{3I}(w)}{dw} \Big|_{-w_b} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d\mathcal{F}_{3II}(w)}{dw} \Big|_{-w_b}, \quad \frac{1}{m_2^*} \frac{d\mathcal{F}_{3II}(w)}{dw} \Big|_{w_b} = \frac{1}{m_1^*} \frac{d\mathcal{F}_{3III}(w)}{dw} \Big|_{w_b} \quad (\text{D.15})$$

De imediato tem-se que:

$$\mathcal{F}_{3I}(-w_L) = 0 \rightarrow \mathcal{B}_1 = \frac{\mathcal{A}_1}{w_L} \frac{\mathcal{M}\left(\frac{a_1}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_L^2}{2}\right)}{\mathcal{M}\left(\frac{a_1}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_L^2}{2}\right)} = \frac{\mathcal{A}_1}{w_L} \beta \quad (\text{D.16})$$

$$\mathcal{F}_{3III}(w_L) = 0 \rightarrow \mathcal{B}_3 = -\frac{\mathcal{A}_3}{w_L} \frac{\mathcal{M}\left(\frac{a_1}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_L^2}{2}\right)}{\mathcal{M}\left(\frac{a_1}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_L^2}{2}\right)} = -\frac{\mathcal{A}_3}{w_L} \beta$$

onde $w_L = \sqrt{2}L_w/(2\ell_B)$.

Restringindo o problema ao caso em que $k_x = 0$, este terá o potencial simétrico com relação à origem do sistema, de forma que a condição: $\mathcal{F}_3(w) = \pm \mathcal{F}_3(-w)$ deverá ser satisfeita. Assim:

(i) $w \in [-w_b, w_b]$ com a condição $\mathcal{F}_{3II}(w) = \pm \mathcal{F}_{3II}(-w)$

$$\mathcal{F}_{3II}(-w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_2 \mathcal{M}\left(\frac{a_2+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) - \mathcal{B}_2 w \mathcal{M}\left(\frac{a_2+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \quad (\text{D.17})$$

$$\mathcal{F}_{3II}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_2 \mathcal{M}\left(\frac{a_2+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_2 w \mathcal{M}\left(\frac{a_2+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right]$$

Para que $\mathcal{F}_3(w) = \mathcal{F}_3(-w)$, tem-se que $\mathcal{B}_2 = 0$. Em contrapartida, para que $\mathcal{F}_3(w) = -\mathcal{F}_3(-w)$, tem-se que $\mathcal{A}_2 = 0$. Portanto:

$$\mathcal{F}_{3II}(w) = \mathcal{A}_2 e^{-\frac{w^2}{4}} \mathcal{M}\left(\frac{a_2}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \quad \text{solução par} \quad (\text{D.18})$$

$$\mathcal{F}_{3II}(w) = \mathcal{B}_2 e^{-\frac{w^2}{4}} w \mathcal{M}\left(\frac{a_2}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \quad \text{solução ímpar.}$$

(ii) $w \in [-w_L, w_L]$ com a condição $\mathcal{F}_{3I}(-w) = \pm \mathcal{F}_{3III}(w)$

$$\mathcal{F}_{3I}(-w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) - \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \quad (\text{D.19})$$

$$\mathcal{F}_{3III}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_3 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_3 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right]$$

Para que $\mathcal{F}_{3I}(-w) = \mathcal{F}_{3III}(w)$, tem-se que $\mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_3$ e $\mathcal{B}_1 = -\mathcal{B}_3$. Em contrapartida, para que $\mathcal{F}_{3I}(-w) = -\mathcal{F}_{3III}(w)$, tem-se que $\mathcal{A}_1 = -\mathcal{A}_3$ e $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_3$. Logo, tem-se que:

$$\mathcal{F}_{3I}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \quad \text{solução par}$$

$$\mathcal{F}_{3III}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) - \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \quad \text{solução par} \quad (\text{D.20})$$

$$\mathcal{F}_{3I}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \quad \text{solução ímpar}$$

$$\mathcal{F}_{3III}(w) = e^{-\frac{w^2}{4}} \left[-\mathcal{A}_1 \mathcal{M}\left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) + \mathcal{B}_1 w \mathcal{M}\left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2}\right) \right] \quad \text{solução ímpar}$$

Portanto, usando as condições de contorno (i) e (ii) ¹ obtém-se o as equações transcendentais que fornecem os autovalores referentes aos estado pares (subscrito “p”) e ímpares (subscrito “i”):

$$m_1^* \mathcal{G}_{1p} \mathcal{F}_{2p} = m_2^* \mathcal{G}_{2p} \mathcal{F}_{1p}, \quad m_1^* \mathcal{G}_{1i} \mathcal{F}_{2i} = m_2^* \mathcal{G}_{2i} \mathcal{F}_{1i} \quad (\text{D.22})$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{1p}(a_{1p}) &= e^{-w_b^2/4} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) - \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{G}_{2p}(a_{2p}) &= e^{-w_b^2/4} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{2p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{F}_{1p}(a_{1p}) &= e^{-w_b^2/4} \left\{ -\frac{w_b}{2} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) - \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right. \\ &\quad + \frac{w_b}{2} (a_{1p}+1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) - \frac{\beta}{w_L} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{w_b^2}{6} (a_{1p}+3) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1p}+7}{4} \left| \frac{5}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right\} \\ \mathcal{F}_{2p}(a_{2p}) &= e^{-w_b^2/4} \left[-\frac{w_b}{2} \mathcal{M} \left(\frac{a_{2p}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \frac{w_b^2}{2} (a_{2p}+1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{2p}+5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{G}_{1i}(a_{1i}) &= e^{-w_b^2/4} \left[-\mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{G}_{2i}(a_{2i}) &= e^{-w_b^2/4} \left[w_b \mathcal{M} \left(\frac{a_{2i}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{F}_{1i}(a_{1i}) &= e^{-w_b^2/4} \left\{ -\frac{w_b}{2} \left[-\mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \beta \frac{w_b}{w_L} \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right. \\ &\quad + \frac{w_b}{2} (a_{1i}+1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{w_b^2}{6} (a_{1i}+3) \mathcal{M} \left(\frac{a_{1i}+7}{4} \left| \frac{5}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \right\} \\ \mathcal{F}_{2i}(a_{2i}) &= e^{-w_b^2/4} \left[\left(1 - \frac{w_b^2}{2} \right) \mathcal{M} \left(\frac{a_{2i}+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

¹ Na obtenção dos resultados utilizou-se a seguinte relação de derivada para a função $\mathcal{M}(a|b|w)$:

$$\frac{d}{dw} \mathcal{M}(a|b|w) = \frac{a}{b} \mathcal{M}(a+1|b+1|w) \quad (\text{D.21})$$

$$+ \frac{w_b^2}{2}(a_{2i} + 1) \mathcal{M} \left(\frac{a_{2i} + 5}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w_b^2}{2} \right), \quad (\text{D.23})$$

onde a w_b e w_L são dados por: $w_b = \sqrt{2}L_b/(2\ell_B)$ e $w_L = \sqrt{2}L_w/(2\ell_B)$, e as variáveis a_1 e a_2 possuem a seguinte relação: $a_2 = a_1 - V_0$. É importante apontar também que, da forma como o parâmetro a_1 se relaciona com os autovalores \mathcal{E} , as equações construídas acima só serão válidas quando $a_1 < 0$.

Além disso, das condições de contorno é possível obter as seguintes relações entre os coeficientes:

$$\mathcal{A}_2 = \frac{\mathcal{G}_{1p}}{\mathcal{G}_{2p}} \mathcal{A}_1 \quad (\text{D.24})$$

$$\mathcal{B}_2 = \frac{\mathcal{G}_{1i}}{\mathcal{G}_{2i}} \mathcal{A}_1$$

Dessa forma, as autofunções para o problema podem ser escritas como:

$$\mathcal{F}_{3p}(w) = \begin{cases} \mathcal{F}_{3I}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{F}_{3II}(w) = \mathcal{A}_1 \frac{\mathcal{G}_{1p}}{\mathcal{G}_{2p}} e^{-\frac{w^2}{4}} \mathcal{M} \left(\frac{a_2}{2} + \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \\ \mathcal{F}_{3III}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) - \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right]. \end{cases} \quad (\text{D.25})$$

para estados pares, e:

$$\mathcal{F}_{3i}(w) = \begin{cases} \mathcal{F}_{3I}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[\mathcal{M} \left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{2}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \\ \mathcal{F}_{3II}(w) = \mathcal{A}_1 \frac{\mathcal{G}_{1i}}{\mathcal{G}_{2i}} e^{-\frac{w^2}{4}} w \mathcal{M} \left(\frac{a_2}{2} + \frac{3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \\ \mathcal{F}_{3III}(w) = \mathcal{A}_1 e^{-\frac{w^2}{4}} \left[-\mathcal{M} \left(\frac{a_1+1}{4} \left| \frac{1}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) + \frac{\beta}{w_L} w \mathcal{M} \left(\frac{a_1+3}{4} \left| \frac{3}{2} \right| \frac{w^2}{2} \right) \right] \end{cases} \quad (\text{D.26})$$

para estados ímpares. O coeficiente \mathcal{A}_1 , tanto para estados pares como para estados ímpares pode ser determinado via normalização das autofunções: $\int \mathcal{F}_{3p(i)}^* \mathcal{F}_{3p(i)} dw = 1$.

E. MATRIZ HAMILTONIANA DE LUTTINGER NA PRESENÇA DO CAMPO MAGNÉTICO

Abaixo seguem as matrizes Hamiltonianas de Luttinger na presença de campo magnético. Estes hamiltonianos possuem contribuição da segunda banda, por tal motivo se apresentam como uma matriz 8×8 .

Direção [100]:

$$\mathbb{H}_L = \left(\begin{array}{cccccccc|c} hh_1 \uparrow & lh_1 \uparrow & lh_1 \downarrow & hh_1 \downarrow & hh_2 \uparrow & lh_2 \uparrow & lh_2 \downarrow & hh_2 \downarrow & \\ \hline \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} & \mathcal{H}_{13} & \mathcal{H}_{14} & \mathcal{H}_{15} & \mathcal{H}_{16} & \mathcal{H}_{17} & \mathcal{H}_{18} & \mathcal{F}_1 | \mathcal{N}_L - 2 \rangle \\ & \mathcal{H}_{22} & \mathcal{H}_{23} & \mathcal{H}_{24} & \mathcal{H}_{25} & \mathcal{H}_{26} & \mathcal{H}_{27} & \mathcal{H}_{28} & \mathcal{F}_1 | \mathcal{N}_L - 1 \rangle \\ & & \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{34} & \mathcal{H}_{35} & \mathcal{H}_{36} & \mathcal{H}_{37} & \mathcal{H}_{38} & \mathcal{F}_1 | \mathcal{N}_L \rangle \\ & & & \mathcal{H}_{44} & \mathcal{H}_{45} & \mathcal{H}_{46} & \mathcal{H}_{47} & \mathcal{H}_{48} & \mathcal{F}_1 | \mathcal{N}_L + 1 \rangle \\ & & & & \mathcal{H}_{55} & \mathcal{H}_{56} & \mathcal{H}_{57} & \mathcal{H}_{58} & \mathcal{F}_2 | \mathcal{N}_L - 2 \rangle \\ & & & & & \mathcal{H}_{66} & \mathcal{H}_{67} & \mathcal{H}_{68} & \mathcal{F}_2 | \mathcal{N}_L - 1 \rangle \\ & & & & & & \mathcal{H}_{77} & \mathcal{H}_{78} & \mathcal{F}_2 | \mathcal{N}_L \rangle \\ & & & & & & & \mathcal{H}_{88} & \mathcal{F}_2 | \mathcal{N}_L + 1 \rangle \end{array} \right) \quad (\text{E.1})$$

onde os elementos de matriz \mathcal{H}_{ij} são dados por¹:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{11} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-2)+1] + \frac{3}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{22} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-1)+1] + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{33} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L)+1] - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{44} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L+1)+1] - \frac{3}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{55} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-2)+1] + \frac{3}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{66} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-1)+1] + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{77} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L)+1] - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{88} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_2}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L+1)+1] - \frac{3}{2} (\boldsymbol{\kappa} + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{13} &= \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2+\gamma_3}{2}\right) \mathcal{S} \sqrt{\mathcal{N}_L(\mathcal{N}_L-1)} \\
\mathcal{H}_{24} &= \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2+\gamma_3}{2}\right) \mathcal{S} \sqrt{(\mathcal{N}_L+1)\mathcal{N}_L} \\
\mathcal{H}_{16} &= -i\gamma_3 \sqrt{6\mathcal{S}} \sqrt{(\mathcal{N}_L-1)} \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{25} &= i\gamma_3 \sqrt{6\mathcal{S}} \sqrt{(\mathcal{N}_L-1)} \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{38} &= i\gamma_3 \sqrt{6\mathcal{S}} \sqrt{(\mathcal{N}_L+1)} \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{47} &= -i\gamma_3 \sqrt{6\mathcal{S}} \sqrt{(\mathcal{N}_L+1)} \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{57} &= \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2+\gamma_3}{2}\right) \mathcal{S} \sqrt{\mathcal{N}_L(\mathcal{N}_L-1)} \\
\mathcal{H}_{68} &= \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2+\gamma_3}{2}\right) \mathcal{S} \sqrt{(\mathcal{N}_L+1)\mathcal{N}_L}
\end{aligned} \tag{E.2}$$

¹ Os elementos que não aparecerem explicitamente são nulos.

onde S é definido como: $\mathcal{F}_B B / \mathcal{F}_e$, onde B é o campo magnético, $\mathcal{F}_B = (e\hbar/m_0c) = 0.115764$ meV/T e $\mathcal{F}_e = (\hbar^2/m_0) = 0.7620$ meVÅ² ($\bar{A} = 100\text{Å}$). Com essa definição, os parâmetros de Luttinger γ_1 , γ_2 e γ_3 , κ e q são dados por: $\gamma_i = \gamma_i \mathcal{F}_e$, $\kappa = \kappa \mathcal{F}_e$ e $q = q \mathcal{F}_e$.

Direção [110]:

$$\mathbb{H}_L = \left(\begin{array}{cccccccc|c} hh_1 \uparrow & lh_1 \uparrow & hh_1 \downarrow & lh_1 \downarrow & hh_2 \uparrow & lh_2 \uparrow & hh_2 \downarrow & lh_2 \downarrow & \\ \hline \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} & \mathcal{H}_{13} & \mathcal{H}_{14} & \mathcal{H}_{15} & \mathcal{H}_{16} & \mathcal{H}_{17} & \mathcal{H}_{18} & \mathcal{F}_1 |N_L - 2\rangle \\ & \mathcal{H}_{22} & \mathcal{H}_{23} & \mathcal{H}_{24} & \mathcal{H}_{25} & \mathcal{H}_{26} & \mathcal{H}_{27} & \mathcal{H}_{28} & \mathcal{F}_1 |N_L - 1\rangle \\ & & \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{34} & \mathcal{H}_{35} & \mathcal{H}_{36} & \mathcal{H}_{37} & \mathcal{H}_{38} & \mathcal{F}_1 |N_L + 1\rangle \\ & & & \mathcal{H}_{44} & \mathcal{H}_{45} & \mathcal{H}_{46} & \mathcal{H}_{47} & \mathcal{H}_{48} & \mathcal{F}_1 |N_L\rangle \\ & & & & \mathcal{H}_{55} & \mathcal{H}_{56} & \mathcal{H}_{57} & \mathcal{H}_{58} & \mathcal{F}_2 |N_L - 2\rangle \\ & & & & & \mathcal{H}_{66} & \mathcal{H}_{67} & \mathcal{H}_{68} & \mathcal{F}_2 |N_L - 1\rangle \\ & & & & & & \mathcal{H}_{77} & \mathcal{H}_{78} & \mathcal{F}_2 |N_L + 1\rangle \\ & & & & & & & \mathcal{H}_{88} & \mathcal{F}_2 |N_L\rangle \end{array} \right) \quad (\text{E.3})$$

onde os elementos de matriz \mathcal{H}_{ij} são dados por²:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{11} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-2)+1] + \frac{3}{2} (\kappa + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{22} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-1)+1] + \frac{1}{2} (\kappa + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{33} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L+1)+1] - \frac{3}{2} (\kappa + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{44} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L)+1] - \frac{1}{2} (\kappa + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{55} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-2)+1] + \frac{3}{2} (\kappa + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{66} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L-1)+1] + \frac{1}{2} (\kappa + \frac{1}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{77} &= -\left(\frac{\gamma_1-2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1+\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L+1)+1] - \frac{3}{2} (\kappa + \frac{9}{4}q) \right\} \\
\mathcal{H}_{88} &= -\left(\frac{\gamma_1+2\gamma_{31}}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mathcal{S} \left\{ \left(\frac{\gamma_1-\gamma_{31}}{2}\right) [2(\mathcal{N}_L)+1] - \frac{1}{2} (\kappa + \frac{1}{4}q) \right\}
\end{aligned} \tag{E.4}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{14} &= -\sqrt{6}\mathcal{S}\gamma_{53} \\
\mathcal{H}_{23} &= -\sqrt{18}\mathcal{S}\gamma_{53} \\
\mathcal{H}_{58} &= -\sqrt{6}\mathcal{S}\gamma_{53} \\
\mathcal{H}_{67} &= -\sqrt{18}\mathcal{S}\gamma_{53} \\
\mathcal{H}_{16} &= -i\sqrt{6}\mathcal{S}\gamma_k \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{25} &= i\sqrt{6}\mathcal{S}\gamma_k \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{38} &= -i\sqrt{18}\mathcal{S}\gamma_k \frac{\partial}{\partial z} \\
\mathcal{H}_{47} &= i\sqrt{18}\mathcal{S}\gamma_k \frac{\partial}{\partial z}
\end{aligned}$$

² Os elementos que não aparecerem explicitamente são nulos.

onde $\gamma_k = (\gamma_3 + \gamma_2)/2$, $\gamma_{31} = (3\gamma_2 + \gamma_3)/4$ e $\gamma_{32} = (5\gamma_2 + 3\gamma_3)/8$. Todas as outras definições permanecem idênticas ao caso [100].

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 7th) (1996).
- [2] J. M. Hinckley and J. Singh, *Phys. Rev. B* **42**, 3546 (1990).
- [3] G. Fishman, *Phys. Rev. B* **52**, 11132 (1995).
- [4] G. E. Pikus and G. L. Bir, *Sov. Phys. Solid State* **1**, 136 (1959).
- [5] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, (Dover Publications, INC., New York) (1972).