

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**PROPRIEDADES ESTÁTICAS E DINÂMICAS DE
PORTADORES EM HETEROESTRUTURAS
SEMICONDUCTORAS**

Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt

*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. Gilmar Eugenio Marques

**São Carlos – SP
2002**

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

B624pe

Bittencourt, Antonio Carlos Rodrigues.

Propriedades estáticas e dinâmicas de portadores em heteroestruturas semicondutoras / Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt . -- São Carlos : UFSCar, 2004.

152 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2003.

1. Física da matéria condensada. 2. Heteroestruturas semicondutoras. 3. Cálculos de estruturas eletrônicas. 4. Sólidos – propriedades óticas. 5. Tunelamento (física). 6. Dinâmica transiente. I. Título.

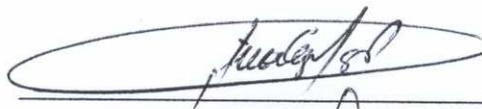
CDD: 530.41 (20^a)

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

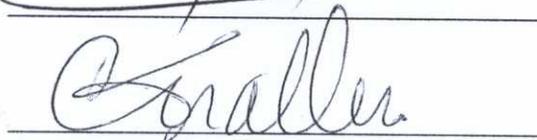
De acordo com o parágrafo 1º do artigo 26 do Regimento Interno do PPG-FIS, o candidato foi considerado aprovado, com o conceito: _____.

Encerrada a sessão secreta, o presidente informou o resultado. Nada mais havendo a tratar, foi encerrada a sessão, e para constar, eu, Benedito Wilson de Oliveira, lavrei a presente ata, que assino com os membros da Banca Examinadora.

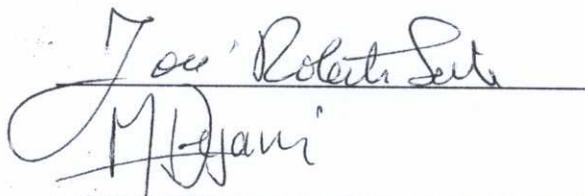
Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques
Presidente



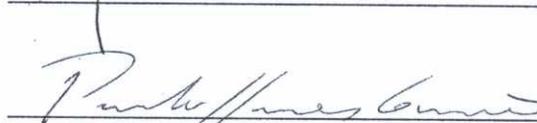
Prof. Dr. Carlos Trallero Giner
Membro



Prof. Dr. José Roberto Leite
Membro



Prof. Dr. Marcos Henrique Degani
Membro



Prof. Dr. Paulo Sérgio Soares Guimarães
Membro



Sr. Benedito Wilson de Oliveira
Secretário do PPG-FIS

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Gilmar E. Marques, pela orientação, discussões, apoio e amizade no decorrer deste trabalho;
- Ao Prof. Trallero Giner pelas discussões e sugestões na reta final do trabalho;
- Ao Prof. Abraham M. Cohen, pela orientação inicial, apoio e amizade;
- Ao grupo experimental da Ufscar Coordenado pela Prof^ª Yara Gobato;
- Aos colegas do curso de Doutorado em Física da Federal de São Carlos, em especial, ao Antonio Carlos, Denilson, Rita, Eduardo, Sílvio, Destefani, Marcão, pela amizade e agradável convivência;
- Ao Felix pelas proveitosas discussões e ajuda na fase final desse trabalho;
- Aos Professores da Pós-graduação, em especial ao Pedro Rino, Nelson Studart e Salomon pelos cursos ministrados que me ajudaram na complementação da minha formação;
- Aos colegas do DF da Universidade do Amazonas, em especial o Gil, Marta, Fernando, Ricardo, Pedro, Haroldo, José Maria, Raffa, Walter e Marcílio pelo apoio e amizade;
- Aos amigos Jose Wilson, Sanderson, Mica, Ijanílio, Gil , dona Cidinha e seu Mauro pelo apoio e amizade e momentos de lazer e descontração;
- À todos os meus familiares, em especial, à minha mãe Sebastiana e meu pai Raimundo Pereira que mesmos distantes ou perto estão sempre preocupados comigo e por quais tenho profunda gratidão e carinho;
- À minha esposa Valdete, que sempre esteve ao meu lado com muito amor e carinho;
- Por fim, a Deus que me deu saúde para suportar essa longa caminhada.

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da CAPES e da UFAM.

.....

**Àos meus pais, Sebatiana e Raimundo
e a minha esposa Valdete**

Conteúdo

Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	vii
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
1.1 Tunelamento Ressonante em Campos <i>DC</i>	1
1.2 Dinâmica <i>AC</i> em Heteroestruturas	5
1.3 Organização da Tese	10
2 Formalismo para o Cálculo da Estrutura Eletrônica	14
2.1 Aproximação de Massa Efetiva	15
2.1.1 Modelo de uma Banda	15
2.1.2 Modelo para Multibandas	21
2.1.3 Aproximação de Massa Efetiva em Heteroestruturas	22
2.2 O Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	26
2.2.1 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	26
2.3 Estrutura de Bandas de Semicondutores	
<i>Zincblende</i>	30
2.4 Aproximação de <i>Kane</i>	33

2.4.1	Constantes e Parâmetros do Hamiltoniano de <i>Kane</i>	36
3	Aplicações do Método Numérico: Estruturas Eletrônicas e Propriedades Ópticas em Delta-Doping	41
3.1	Método da Potência Inversa	42
3.2	Modelo Delta-Doping <i>Nipi</i>	47
3.2.1	O Modelo Teórico	49
3.3	Resultados e Discussão	53
3.3.1	<i>Nipi</i> -Delta Doped em Múltiplos Poços Quânticos	58
4	Métodos Analíticos e Numéricos para Propriedades de Transporte: Aplicações em Sistemas de Barreiras Duplas	64
4.1	Formalismo da Matriz de Espalhamento	66
4.2	Diferenças Finitas	71
4.3	Aplicações I - Transmissividade	76
4.4	Aplicações II - Corrente de Tunelamento	82
4.5	Aplicações III - Estrutura Eletrônica	86
4.5.1	Hamiltoniano Básico, Níveis de <i>Landau</i> e Dispersão	88
5	Formalismo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para Potenciais AC	99
5.1	O Método Numérico	100
5.2	Modelo do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Dependente do Tempo	104
6	Dinâmicas <i>Transientes e Coerentes</i> de Portadores	112
6.1	Propriedades das <i>Quase-energias</i> dos Portadores	115
6.2	Deslocamento Médio e <i>Localização Dinâmica</i>	126
6.3	Tunelamento de Portadores <i>Foto-Assistidos</i>	131
6.4	Dinâmica para $k \neq 0$	139
7	Conclusões	142

Apêndices	148
A Parâmetros do $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	148
B O Método das Diferenças Finitas	150

Lista de Figuras

1-1	Tunelamento ressonante de elétrons em dupla barreira ressonante.	3
1-2	Modelo de <i>Tien e Gordon</i>	7
1-3	Poço quântico submetido ao potencial externo $eFz\cos(\omega t)$ gerado por um laser.	9
2-1	Representação esquemática da estruturas de bandas dos compostos III-V.	31
3-1	Perfil de potencial em uma estrutura <i>nipi</i>	54
3-2	Energia de dispersão dos portadores em uma estrutura <i>nipi</i> para $T = 170K$	57
3-3	Relação de dispersão dos elétrons e buracos em uma estrutura <i>nipi</i> para $T = 40 K$ e com assimetria de 1 \AA	59
3-4	Energias de recombinação elétron-buraco para espectros de PL em estruturas <i>nipi</i>	61
4-1	Heteroestrutura com N camadas.	67
4-2	Região de dupla barreira especificada por N pontos da rede com espaçamento a	72
4-3	Transmissividade dos buracos leves e pesados para $k_\rho = 0$ usando a técnica da matriz de espalhamento.	77
4-4	Transmissividade dos buracos leves (<i>LH out</i>) e pesados (<i>HH out</i>) para $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$	79
4-5	Comparação entre os formalismos da matriz de espalhamento e o de diferenças finitas.	80

4-6	Comparação entre os formalismos da matriz de espalhamento e matriz de transferência.	81
4-7	Densidade de corrente de buracos leves e pesados para $E_F = 55$ meV e buracos leves incidentes (LH in).	84
4-8	Corrente de elétrons para dupla barreira de GaAs/Al _{0,35} Ga _{0,65} As.	85
4-9	Corrente de buracos para barreiras duplas de GaAs/Al _{0,35} Ga _{0,65} As com campo magnético $B = 14$ T.	87
4-10	Dispersão magnética em função do campo magnético para um campo elétrico $F_0 = 10$ kV/cm.	94
4-11	Dispersão magnética em função do campo magnético para um campo elétrico $F_0 = 100$ kV/cm.	95
6-1	Comparação entre as estruturas eletrônicas dos portadores calculadas com o modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e com o modelo parabólico para um poço quântico, GaAs-Ga _{0,7} Al _{0,3} As, com largura $L_z = 100$ Å.	114
6-2	Poço quântico submetido a um potencial $AC - eF_0z \cos(\omega t - \pi/2)$	116
6-3	<i>Quase-Energias</i> dos portadores em função do tempo no poço quântico de GaAs-Ga _{0,7} Al _{0,3} As para $k = 0$ e $\omega_1 = 0,0125$ meV/ \hbar	118
6-4	Densidade de probabilidade do elétron E_1 para duas configurações do campo elétrico, $\pm eF_0z$ ($eF_0 = 67$ kV/cm).	120
6-5	<i>Quase-energias</i> do elétron e dos buracos em $k = 0$ para a frequência $\omega_2 = 0,0055$ meV/ \hbar	122
6-6	Funções de ondas dos buracos leves e pesados, mostrando as oscilações associadas ao tipo de função de <i>Airy</i>	124
6-7	<i>Quase-energias</i> dos estados fundamentais do elétron e do buraco pesado, num potencial $AC, -eF_0L_z \cos(\omega t - \frac{\pi}{2})$ para $k = 0$	125
6-8	<i>Efeito Stark AC</i> para o elétron e buracos para $k = 0$ e $\omega = 0,0055$ meV/ \hbar	127
6-9	Posição média dos buracos leve (LH_1) e pesado (HH_1) e do elétron (E_1) em função do tempo para $k = 0$	129

6-10	Comparação do deslocamento médio para duas condições iniciais do campo AC	130
6-11	Comparação da posição média dos portadores HH_1 , LH_1 e E_1 em função do tempo em $k = 0$ e para duas frequências associadas a raiz da função <i>Bessel</i>	132
6-12	Probabilidades de tunelamento dos buracos HH_1 , LH_1 e do elétron E_1 para dois valores de frequências: $\omega_1 = 0,02 \text{ meV}/\hbar$, $\omega_2 = 0,0125 \text{ meV}/\hbar$	133
6-13	Probabilidades de transmissões para os portadores E_1 , HH_1 , LH_1 para a frequência $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$, $\beta_2 = 5,52$ (o segundo zero da função de <i>Bessel</i>) e $k = 0$	135
6-14	Probabilidades de transmissões de buracos e de elétron para as frequências: $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ e $\omega_3 = 0,0009 \text{ meV}/\hbar$	136
6-15	Probabilidades e taxas de tunelamento de elétrons e de buracos para a frequência $\omega = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ e $k = 0$	138
6-16	Probabilidades de transmissão dos buracos para $k = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e frequência $\omega = 0,0009 \text{ meV}/\hbar$	140

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros da região do poço (n) e barreira (p) para amostras nipi. . . .	58
3.2	Comparação entre os valores teóricos e experimentais de T_c quando a potência de excitação é $4,4 \text{ W/cm}^2$	62
6.1	Tempo médio de tunelamento.	137
A.1	Parâmetros para o $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	148

Resumo

Estudamos as propriedades dinâmicas e estacionárias de portadores em heteroestruturas semicondutoras submetidas a campos elétricos AC e DC e a campos magnéticos DC na aproximação de massa efetiva e dentro do modelo multibandas $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. O método usado para calcular a estrutura eletrônica é baseado na técnica de diferenças finitas e no método da potência inversa. Como exemplo para testar a eficiência do método, estudamos propriedades ópticas em múltiplos poços quânticos (MQW) de GaAs/AlGaAs contendo uma estrutura *delta-doping nipi*. Calculamos as energias de recombinação de um par elétron-buraco, como função da temperatura, e estimamos as temperaturas críticas onde as transições ópticas mudam de indireta para direta. Também calculamos a estrutura eletrônica de buracos em poços quânticos de GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As na presença de campos elétricos e magnéticos longitudinais, como parte inicial do estudo do magneto-tunelamento em duplas barreiras. O tunelamento ressonante dos portadores em duplas barreiras foi investigado usando os formalismos da matriz de espalhamento e diferenças finitas. O método implícito para simular as propriedades de transporte dependentes do tempo foi implementado baseado na expansão de *Magnus* para o operador evolução e sua fatorização baseada na aproximação diagonal de *Padé* (M/M). Este método tem se mostrado bastante estável, além de permitir altas ordens de precisão (O^{2M+1}). Calculamos as *quase-energias*, deslocamentos médios, probabilidades de transmissão, *efeito Stark AC* e tempos de tunelamento dos vários portadores em um poço quântico GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As submetido a um potencial AC , com $k = 0$. Nossos resultados nos revelou uma dinâmica completamente distinta para cada tipo de portador que depende fortemente das frequências ω e de localização $\omega_l = \frac{E}{\hbar}$. O *efeito Stark AC* é do tipo adiabático com as *quase-energias* apresentando uma dependência quase-parabólica com a intensidade do campo $\beta = \frac{eF_0Lz}{\hbar\omega}$. O grau de localização dos portadores é investigado através do cálculo dos tempos de tunelamento. Para $k \neq 0$ a inerente mistura entre os estados da banda de valência produz um aumento da probabilidade de transmissão dos buracos, uma vez que suas *quase-energias* são muito maiores e seus movimentos ao longo de z e planar estão acoplados. Isso favorece o escape dos buracos da região do poço.

Abstract

We have studied the dynamic and the stationary properties of carriers in semiconductor heterostructures submitted to electric fields AC and DC and to magnetic fields within the effective-mass approximation based on model multiband $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. The method used to calculate the electronic structure uses the combination of techniques of finite differences and the inverse power method. As example to test the efficiency of the method, we have studied optical properties in multiple quantum wells of GaAs/AlGaAs containing a *delta-doping nipi* structure. We have calculated the single pair electron-hole energy recombination and we estimated critical temperatures where the interband optical transitions changes its character from indirect to direct. We have also calculated the electronic structure of holes in quantum wells of GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs in the presence of longitudinal magnetic and electric parallel fields as initial part of the study of the magnetotunneling in double barrier. The resonant tunneling of the carriers in double barrier is investigated using the formalisms based on the scattering-matrix and on the finite difference technique. The implicit method to simulate the time dependent transport properties is obtained in terms of *Magnus* expansion for the evolution operator by using a factorization based on the approach of *Padé* (M/M). This method has shown quite stable, besides allowing high order of precision. We have calculate the quasi-energy, medium displacement, transmission probability, *AC Stark effect* and tunneling time of the carriers in a quantum well GaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As submitted to an AC potential, both with $k = 0$ and $k \neq 0$. Our results have revealed that carriers present dynamics completely different from each other depending strongly on the ratio between applied AC frequency ω and the carrier localization frequency $\omega_l = (\frac{E}{\hbar})$. The *AC Stark effect* has adiabatic type that is inserted into the initial conditions. The quasi-energy of all carriers, except the lighth-hole LH_1 at $k = 0$, present a similar quasi-parabolic dependence with the intensity of the field $\beta = (\frac{eF_0L_z}{\hbar\omega})$, as is observed in static cases. The degree of localization of the carriers is investigated through the calculation of tunneling times. In general, states show time localization induced by laser frequencies larger that ω_l for many states with $k = 0$. For $k > 0$ the inherent mixture among the states of the valence band produces an increase in the transmission probability. The field tilted barrier of potential leads to quasi-energies near to the border of the QW, favoring the escape of carriers from quantum well region if compared to their time localization regimes. ix

Capítulo 1

Introdução

Neste projeto de Tese de Doutorado investigamos as propriedades estacionárias e dinâmicas de portadores em heteroestruturas semicondutoras submetidas a campos dependentes do tempo (AC) ou constantes (DC). Para o caso DC , estudamos o transporte através de sistemas de duplas barreiras assim como os estados eletrônicos em estruturas com perfis arbitrários de potenciais estáticos. Nesse capítulo estaremos apresentando um resumo dos tipos de problemas investigados assim como dos formalismos analíticos e numéricos utilizados neste trabalho.

1.1 Tunelamento Ressonante em Campos DC

O Tunelamento de partículas através de barreiras de potencial representa um dos problemas mais fundamentais de Mecânica Quântica, onde se tornou conhecido o *efeito túnel*, cuja ocorrência é uma das manifestações mais interessantes do comportamento ondulatório da matéria não tendo, por isso, análogos clássicos. O conceito quântico de tunelamento foi primeiro aplicado por *Gamov* (1928) para explicar o decaimento- α em núcleos pesados, e em seguida por *Oppenheimer*, para a ionização dos átomos de hidrogênio. Na Física do Estado Sólido este efeito foi introduzido inicialmente por *Fowler e Nordheim* [1] para se estudar a emissão eletrônica em metais e por *Zener* [2],

em 1934, para estudar o movimento de elétrons através de bandas de energia proibidas. Em 1958, este efeito foi incorporado por *Leo Esaki* na descrição do funcionamento de um diodo túnel, um marco importante que deu início a era dos dispositivos semicondutores quânticos com grandes modificações na eletrônica da época.

A perspectiva de fabricação de dispositivos semicondutores operando em regime quântico surgiu, realmente, a partir dos anos 70 do século XX com a proposta pioneira de *Esaki* e *Tsu* [3] das heteroestruturas semicondutoras.

Graças aos grandes progressos alcançados nas últimas duas décadas, no desenvolvimento das técnicas de crescimento epitaxial, notadamente o MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) e o MOCVD (*Metal Metalorganic Chemical Vapour Deposition*), foi possível a preparação de filmes finos com um controle quase perfeito de suas espessuras. Tornou-se possível a fabricação de heterojunções com interface semicondutoras abruptas, comparáveis à escala atômica. Isto possibilitou a construção de uma grande variedade de estruturas artificiais com dimensionalidades reduzidas, um resultado do empilhamento de camadas muito finas de diferentes materiais semicondutores. Com esta técnica epitaxial de materiais semicondutores com diferentes *gaps* foi possível se construir sequências de barreiras e de poços com interfaces abruptas da ordem de monocamadas ($\sim 3 \text{ \AA}$). Dependendo da configuração particular dessas estruturas, foram construídas *heterojunções*, *poços quânticos simples*, *múltiplos poços quânticos*, *super-redes*, etc. Hoje temos também outras simetrias em formas de *fios* e de *pontos quânticos*.

A partir de então, essas heteroestruturas têm despertado grande interesse, tanto na ciência quanto na tecnologia, devido às inúmeras propriedades assim como os fenômenos novos observados em baixas e altas temperaturas além de seus enormes potenciais para aplicações tecnológicas. Um desses fenômenos é o tunelamento ressonante em dispositivos de *duplas barreiras*, que apresenta picos de valores unitários nas curvas de transmissividades quando as energias, E , das partículas incidentes se igualam àquelas dos estados *quase-ligados*, E_n , na região de confinamento. O tunelamento ressonante de elétrons em *duplas barreiras*, foi teoricamente idealizado e investigado por *Esaki* e *Tsu* [4], e observa-

do experimentalmente, nos laboratórios da IBM, por *Esaki, Tsu e Chang* [5], utilizando um dispositivo de *duplas barreiras* com GaAs/GaAlAs, como o ilustrado na parte (a) da Fig. (1-1). A corrente flui através da heteroestrutura entre os dois eletrodos e a ressonância ocorre quando a energia de Fermi (E_F) na região do emissor se alinha com um nível ressonante dentro do poço quântico.

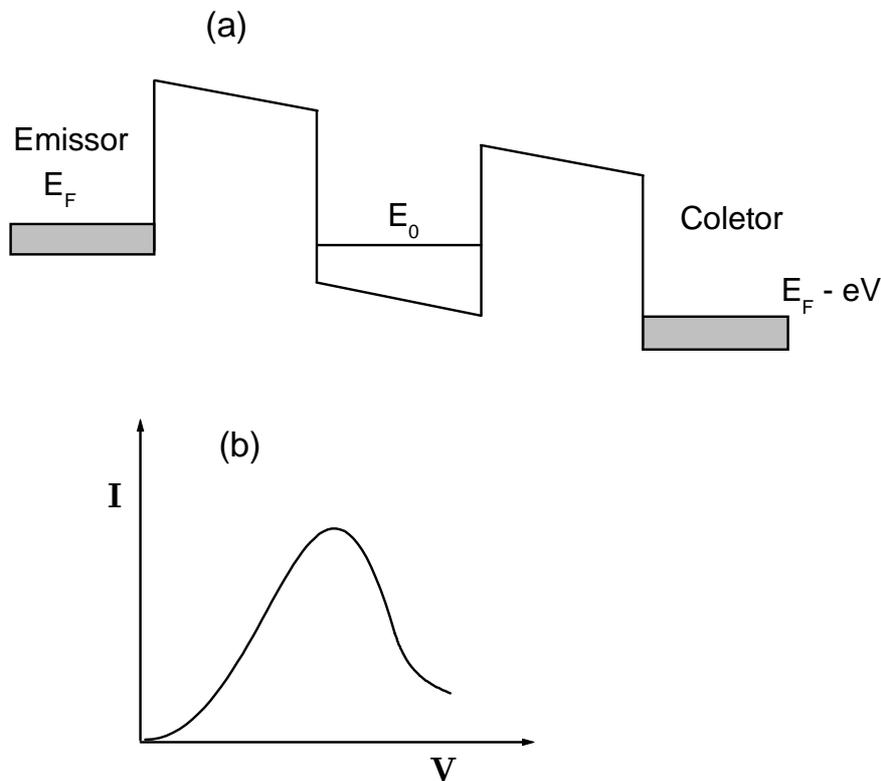


Figura 1-1: Tunelamento ressonante de elétrons em um sistema de duplas barreiras. A parte (a) mostra um desenho esquemático de um sistema submetido a uma diferença de potencial V entre o emissor e o coletor. A parte (b) mostra uma forma qualitativa da corrente de tunelamento em dispositivos de duplas barreiras.

A condutância diferencial negativa presente na curva de saída ($I \times V$) [veja a parte (b) da Fig. (1-1)] pode ser explicada, através da conservação do momento do elétron

no plano das camadas. A conservação de energia implica também na conservação de momento paralelo às camadas para que seja possível o alinhamento do nível do poço com o nível de Fermi E_F no emissor. Assim, quando o nível ressonante desalinha-se do nível de Fermi, a conservação do momento deixa de existir, produzindo uma queda brusca da corrente, que é refletida na curva $(\mathbf{I} \times \mathbf{V})$ como uma condutância diferencial negativa.

A investigação experimental do tunelamento ressonante de buracos em heteroestruturas semicondutoras foi feita, pela primeira vez, por *Mendez et al.* [6], cujos resultados experimentais revelaram o forte acoplamento entre as bandas de buracos leves e pesados. Ainda menos investigado do que o tunelamento de elétrons, o tunelamento de buracos é também um mecanismo de transporte muito importante. Devido à forte mistura dos estados de valência (buracos leves e pesados) teremos que tratar o sistema com dois canais acoplados de tunelamento, LH out (buraco leve) e HH out (buraco pesado) o que, devido a complexidade e a riqueza das relações de dispersões destes portadores, o torna um mecanismo de transporte de bastante interesse tanto teórico como experimental. Hoje, com a fabricação de dispositivos onde existem manipulação dos spins dos portadores, criou-se um novo campo denominado *spintronics*, onde temos injeção de correntes spin-polarizadas nos sistemas.

Um dos objetivos desta tese será calcular as propriedades de transporte em heteroestruturas semicondutoras. Em geral a técnica mais utilizada para o cálculo das propriedades de transporte em semicondutores é a matriz de transferência. Entretanto esta técnica apresenta instabilidades numéricas quando as dimensões das barreiras são grandes (em geral para $L_b > 50 \text{ \AA}$). A origem dessa instabilidade é bem conhecida [7, 8], sendo devida ao crescimento exponencial dos estados na região das barreiras, cujas amplitudes podem variar muito rapidamente num processo de transmissão ressonante. A técnica da matriz de transferência trata, tanto o crescimento quanto o decaimento dos estados, identicamente. Com resultado, temos uma perda da componente com decaimento exponencial na função de onda durante a computação, em presença da função de onda exponencialmente crescente. Vários esquemas alternativos vem sendo propostos [7, 8] para a solução

deste problema. Entretanto, eles são simplesmente truncamento do mesmo esquema com diferentes graus de complexidades.

Em vista dessas dificuldades que o método da matriz de transferência apresenta, decidimos implementar nessa tese dois formalismos na aproximação de massa efetiva multibandas associada ao método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, para o cálculo das propriedades de transporte dos buracos em duplas barreiras. Um deles, analítico, é o formalismo da matriz de espalhamento e o outro, numérico, é um método que explora as técnicas baseadas em diferenças finitas.

A base do método da matriz espalhamento (semelhante a matriz transferência) está em resolver a equação de massa efetiva em cada camada da heteroestrutura, e então formar um completo autoestado em todo o sistema usando as condições de contorno nas interfaces. Na prática isto é feito usando matrizes de propagação descrevendo a mudança de fase através das camadas e matrizes de espalhamento nas interfaces.

No método de diferenças finitas a equação de massa efetiva é discretizada em cada camada da heteroestrutura, e a conservação da densidade de corrente e das funções envelopes em cada interface nos permite obter um sistema matricial algébrico através do qual podemos calcular os coeficientes de transmissão através do sistema.

Ambos os formalismos utilizados são superiores em estabilidade e precisão numérica ao método da matriz de transferência, além de serem facilmente adaptados dentro do esquema de massa efetiva para a inclusão de campos elétricos, magnéticos e efeitos de *strain* nas interfaces.

1.2 Dinâmica AC em Heteroestruturas

Nos últimos anos, o estudo da dinâmica de elétrons e/ou de buracos em heteroestruturas semicondutoras submetidos a potenciais dependentes do tempo, com altas ou baixas intensidades, vem recebendo considerável interesse tanto do ponto de vista teórico como experimental, devido às inúmeras aplicações tecnológicas na forma de moduladores,

detectores ou dispositivos de alta velocidade. Inúmeras são as propriedades físicas que esses sistemas apresentam quando submetidos a esses potenciais como: *tunelamento foto-assistido*, *destruição do tunelamento coerente* (DTC), *localização dinâmica* (LD), *efeito Stark AC*, etc.

Na Física do Estado Sólido, a primeira investigação experimental do tunelamento foto-assistido foi feita por *Dayem e Martin* em 1962 [9], através de medidas de corrente em um diodo supercondutor do tipo Al-Al₂O₃-In (supercondutor-isolante-supercondutor) irradiado com radiação de 1,5 THz. Um ano depois (1963), motivados por esse experimento, *Tien e Gordon* [10] construíram um modelo simples que explicou, de forma qualitativa, as estruturas presentes nas curvas experimentais ($\mathbf{I} \times \mathbf{V}$). Esse modelo é esquematizado na parte (a) Fig. (1-2). Na região do isolante se despreza a interação entre o campo eletromagnético e os elétrons. Dessa forma, o potencial do filme **A** é tomado como referência e o principal efeito do campo eletromagnético é levado em conta adicionando-se um potencial de modulação constante $V_0 \cos(\omega t)$ no filme **B**. O processo permite a obtenção de bandas de energias virtuais $E_n = E + n\hbar\omega$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), equivalentes ao número de quanta de radiação absorvidos ou emitidos. Na parte (b) da Fig. (1-2) ilustramos o modelo de *Tien e Gordon* para um poço quântico. O potencial $V_0 \cos(\omega t)$ apenas modula adiabaticamente os estados eletrônicos não permitindo nenhum tipo de transição óptica.

Em 1982 *Landauer e Büttiker* [11] investigaram o tunelamento de elétrons através de uma barreira oscilante e analisaram os mecanismos envolvidos no processo de tunelamento através do cálculo do tempo gasto para atravessar o dispositivo. Desde então, um número de outros efeitos relacionados ao potencial oscilante vem sendo investigados tanto teoricamente como experimentalmente. Por exemplo, *Cai et al.* [12] usaram as funções de *Green* para estudar o *tunelamento foto-assistido* através de dispositivos de duplas barreiras submetidos a radiação infravermelho. Já *Iñarrea e Platero* [13], usando o formalismo de Hamiltoniano de transferência, investigaram a probabilidade de transmissão e a densidade de corrente eletrônica para dois diferentes modelos na presença de campos externos dependentes do tempo. *Holthaus e Hone* [14, 15], usando o formalismo

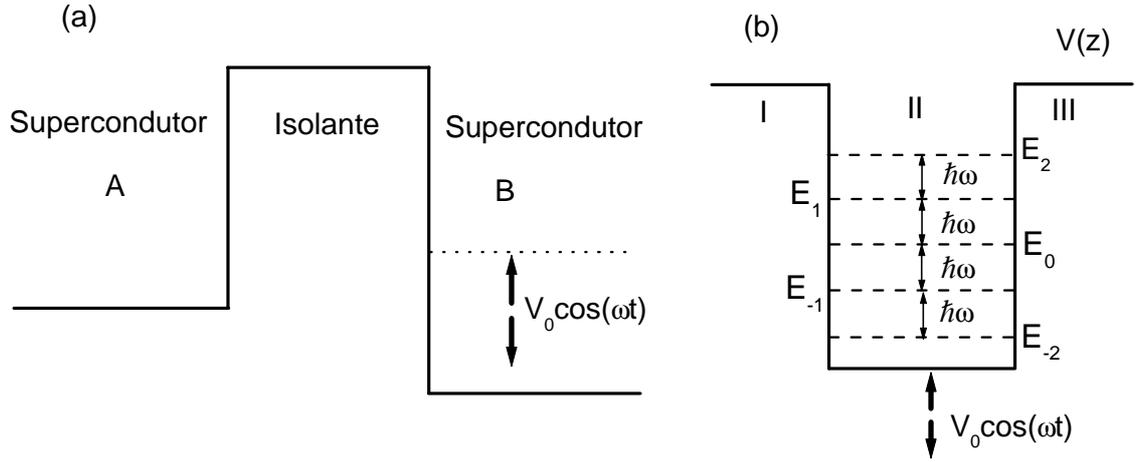


Figura 1-2: Modelo de *Tien e Gordon*. A parte (a) para um diodo supercondutor e a (b) para um poço quântico. Em ambos os casos o potencial oscilante, $V_0 \cos(\omega t)$, modula adiabaticamente os níveis de energia dando origem às chamadas bandas virtuais de energia $E_n = E + n\hbar\omega$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$).

de *Floquet*, investigaram o *efeito Stark AC* e a *localização dinâmica* em super-redes. Mais recentemente, *Matias Wagner* [16], usando o formalismo da matriz de transferência, investigou o fenômeno da destruição coerente do tunelamento em duplas barreiras para diferentes formas de modulação do potencial *AC*. Finalmente, o grupo de *S. J. Allen* de Santa Barbara [17], tem desenvolvido uma intensa investigação tanto teórica como experimental do *tunelamento foto-assistido* e da *localização dinâmica* em múltiplos poços quânticos e super-redes.

Previsto teoricamente por *Grossman et al.* em 1991 [18] a *localização dinâmica* só foi observada experimentalmente em 1995 por *B. J. Keay* [19] *et al.* [19]. Desta forma um elétron, inicialmente espacialmente localizado no poço, tenderia a continuar localizado para um certo valor do parâmetro $\Theta = \omega^{ac}/\omega$ (relação entre a frequência de *Bloch* ω^{ac} e a frequência do campo *AC*). Em particular quando esse parâmetro Θ é um zero da função de *Bessel* temos a *localização dinâmica*.

Para estudar a dinâmica de portadores em poços quânticos submetidos a campos AC , muitas teorias têm sido discutidas e muitos modelos têm sido propostos. Um dos primeiros modelos utilizados foi o de *Tien e Gordon*, descrito anteriormente, desenvolvido para o tunelamento através uma simples barreira, onde no lado do coletor é adicionado um potencial AC espacialmente uniforme $V_0 \cos(\omega t)$. Esse modelo simples tem sido usado para explicar o tunelamento assistido por fótons e a transmissividade em potenciais oscilantes [20]. Um outro formalismo teórico muito utilizado é o de *Floquet* [21] para sistemas submetidos a campos AC intensos, o que dá origem às chamadas *quase-energias*. Esse formalismo vem sendo intensamente aplicado a super-redes e múltiplos poços quânticos por vários grupos teóricos [22, 23, 24, 25] para estudo da *localização dinâmica e tunelamento foto-assistido*.

Para uma modulação do tipo $V(z, t) = eF_0z \cos(\omega t)$ [parte (a) da Fig. (1-3)] não existe nenhuma solução analítica fechada, mas apenas soluções perturbativas. Uma solução exata para *quase-energias* em campos AC num poço quântico de barreira infinita [parte (b) da Fig. (1-3)] foi desenvolvida por *M. Wagner* [26], dentro do modelo parabólico que não leva em conta, na estrutura de bandas do material, as fortes misturas dos estados eletrônicos. Um problema bem mais complexo para esse potencial requer um tratamento detalhado da estrutura de bandas ou estrutura eletrônica do material, pois o acoplamento entre os portadores afetará sensivelmente as suas dinâmicas.

Um dos objetivos dessa tese é investigar a dinâmica *transiente e coerente* de portadores em poços quânticos de $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ submetidos ao potencial oscilante $V(z, t) = -eF_0z \cos(\omega t - \pi/2)$, usando o modelo multibandas na representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para a descrição dos elétrons na banda de condução e dos buracos na banda de valência. Muitos formalismos teóricos e numéricos são utilizados na investigação da dinâmica desses portadores, como o da *Matriz Densidade* [27], *Funções de Green*, *Método de Monte Carlo* [28], cujas aplicações dependem da natureza do problema, como o estudo de efeitos de muitos corpos e interação elétron-elétron, elétron-buraco, elétron-fônon, etc. Como estamos interessados principalmente na *dinâmica transiente e coerente* de portadores, de-

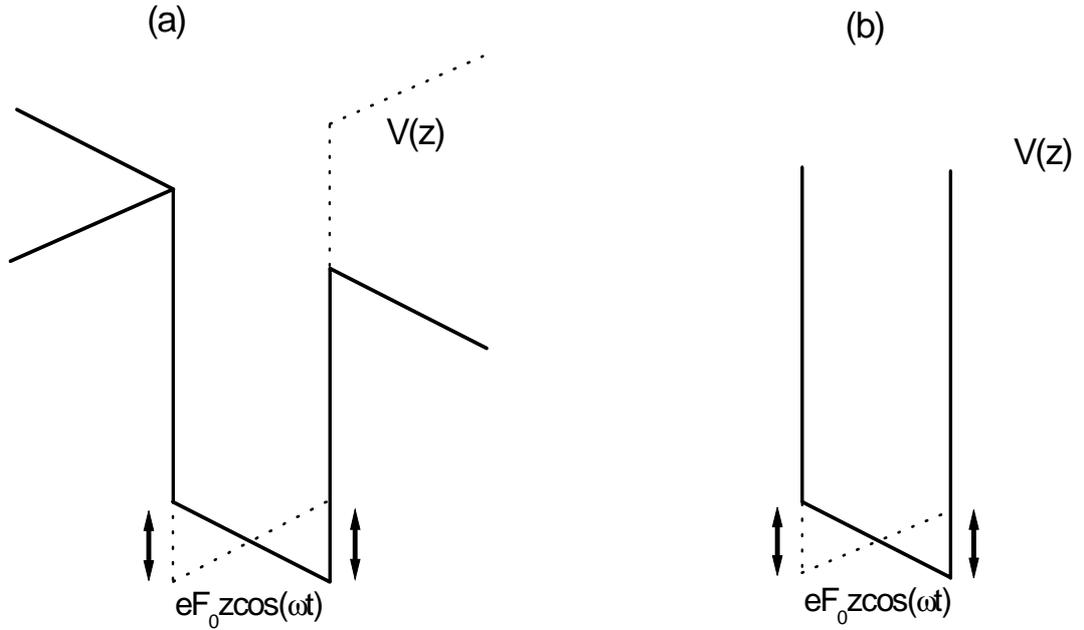


Figura 1-3: Poço quântico submetido ao potencial externo $eFz\cos(\omega t)$, gerado por um laser. Na parte (a) o potencial varia linearmente com $eFz\cos(\omega t)$ em toda a heteroestrutura e na parte (b) o potencial varia linearmente $eFz\cos(\omega t)$ apenas dentro da região do poço.

envolvemos um formalismo numérico multibandas para estudarmos a evolução no tempo de um par elétron-buraco utilizando o operador evolução temporal dentro do esquema de *Puzynin* [29] e o método das diferenças finitas. Esse formalismo tem se mostrado bastante estável, além de permitir altas ordens de precisão e tendo, ainda, o esquema de *Crank-Nicholson* como um caso particular. O método implícito é obtido em termos da expansão de *Magnus* para o operador evolução, além da fatorização baseada na aproximação diagonal de *Padé* (M/M).

Uma vez que na representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ pode existir o acoplamento entre os portadores, nossos resultados preliminares tem nos revelado uma dinâmica completamente diferente para cada portador que depende fortemente da frequência de excitação do laser e da frequência de localização do portador definida como $\omega_l = E/\hbar$.

1.3 Organização da Tese

Neste trabalho simulamos as propriedades estacionárias e dinâmicas de elétrons e buracos em heteroestruturas semicondutoras submetidas a campos elétricos AC e DC e também a campos magnéticos. Para a descrição dessas propriedades é essencial escolher um Hamiltoniano que descreva adequadamente as propriedades do cristal perfeito. Optamos então pelo modelo de *Kane* (6×6) para estudarmos as dinâmicas transientes de portadores e o de *Luttinger* (4×4) para investigarmos as propriedades de transporte, uma vez que os mesmos são de fácil adaptação ao esquema de massa efetiva e incorporam de forma natural a mistura de bandas e os efeitos de campos externos AC (dependente do tempo) e DC (independente do tempo). Dessa forma reservamos o Capítulo 2 para uma breve revisão dos aspectos principais do formalismo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e da aproximação de massa efetiva.

No cálculo das propriedades dinâmicas é essencial conhecermos a função de onda inicial a ser evoluída no tempo dessa forma, no Capítulo 3, apresentaremos o formalismo da *Potência Inversa* para o cálculo da estrutura eletrônica e das autofunções dos portadores em potenciais de perfil arbitrário. Ainda no Capítulo 3, aplicaremos este formalismo para estudar propriedades ópticas em estruturas “*delta-doping*” usando uma aproximação não autoconsistente.

No capítulo 4, apresentaremos os formalismos da matriz de espalhamento e diferenças finitas para o cálculo das propriedades de transporte em sistemas de duplas barreiras. Algumas aplicações desses formalismos são apresentadas, como a transmissividade e a corrente de tunelamento em dispositivos de duplas barreiras de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Ainda nesse capítulo apresentaremos as dispersões magnéticas dos buracos em um poço quântico de GaAs/ $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ como parte inicial do estudo do tunelamento em duplas barreiras na presença de campos elétricos e magnéticos paralelos à direção da corrente. No Capítulo 5, descreveremos o formalismo numérico dependente do tempo para o cálculo das propriedades dinâmicas.

No Capítulo 6, apresentamos os resultados numéricos das propriedades dinâmicas

de portadores em um poço simples de GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As submetidos a um campo AC, $V(z, t) = -eF_0z \cos(\omega t - \pi/2)$. As *quase-energias*, posição média, probabilidade de transmissão são calculadas como função do tempo no regime de baixa e alta frequência. As *quase-energias* como função da intensidade do campo $\beta = eF_0L_z/\hbar\omega$ são investigadas no limite de baixa frequência. O grau de *localização dinâmica* dos portadores é investigado através do cálculo da probabilidade de transmissão e dos tempos típicos de tunelamento. Para finalizar apresentamos o efeito da mistura de bandas na *dinâmica transiente* dos portadores.

No Capítulo 7, apresentamos nossas conclusões e possíveis aplicações futuras.

Bibliografia

- [1] R. H. Fowler, L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. London **A119**, 173–181 (1928).
- [2] C. Zener, Proc. Roy. Soc. London **A145**, 523 (1934).
- [3] L. Esaki, R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61–65 (1970).
- [4] R. Tsu, Leo Esaki, App. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [5] L. L. Chang, Leo Esaki, R. Tsu, App. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [6] E. E. Mendez, W. I. Wang, B. Ricco, L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **47**, 415 (1985).
- [7] S. Brand, D. T. Hughes, Semicond. Sci. Technol. **2**, 607 (1987).
- [8] C. Mailhoit, D. L. Smith, Phys. Rev. B **33**, 8360 (1986).
- [9] A. H. Dayen, R. J. Martin, Phys. Rev. Lett. **8**, 246–248 (1962).
- [10] P.K. Tien, J.P. Gordon, Phys. Rev. B **129**, 647 (1963) 519.
- [11] M. Büttiker, R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739–1742 (1982).
- [12] W. Cai, T. F. Sheng, P. Hu, M. Lax, K. Shum, R. R. Alfano, Phys. Rev. Lett. **65**, 104 (1990).
- [13] Ramon Aguado, Jesus Iñarrea, Gloria Platero, Phys. Rev. B **15**, 10030 (1996).
- [14] Martin Holthaus, Daniel W. Hone, Phys. Rev. B **47**, 6605 (1993).

- [15] Martin Holthaus, Daniel W. Hone, Phys. Rev. B **49**, 16605 (1994).
- [16] Matias Wagner, W. Zwerger, Phys. Rev. B **55**, R10207 (1997).
- [17] G. S. Vieira, S. J. Allen, P. S. S. Guimarães, K. L. Campman, A. C. Gossard, Phys. Rev. B **58**, 7136 (1998).
- [18] F. Grossman, T. Dittrich, P. Jung, P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **67**, 516–519 (1991).
- [19] B.J.Keay, C. Aversa, S Zeuner, S. J. Allen. Jr, K. L. Campman, K.D Maranowki, A. C. Gossard, Semicond. Sci. Technol. **11**, 1596–1600 (1996).
- [20] Wenjun Li and L. E. Reichl, Phys. Rev. B **60**, 15732 (1999).
- [21] G. Floquet, Ann. de l'Ecole Norm Sup. 12 (1883) **47**; Ince, Ordinary Differential Equations, Dover, New York,1956; W. Magnus, S. Winkler, Hill's Equation, Dover, New York, 1979.
- [22] J. H. Shiley Phys. Rev. **138**, B979–B987 (1965).
- [23] M. Grifoni, P. Hänggi, Phys. Rep. **304**, 229–354 (1998).
- [24] K. F. Milfed, R. E. Wyatt, Phys. Rev. A **27**, 72–94, (1983).
- [25] J. M. Villas-Bôas, W. Zhang, S. E. Ulloa, P. H. Rivera, Nelson Studart, Phys. Rev. B **66**, 085325 (2002).
- [26] M. Wagner, Phys. Rev. Lett. **76**, 4010 (1996).
- [27] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, P. A Fischer, A. Garg, W. Zwerger: Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).
- [28] D. K. Ferry: Semiconductors (Macmillan, New York 1991).
- [29] I.V. Puzynin, A.V. Selin, S.I. Vintsky, Computer Physics Communications **123** (1999) 1–6.

Capítulo 2

Formalismo para o Cálculo da Estrutura Eletrônica

Desde a pioneira proposta de *Esaki e Tsu* das heteroestruturas semicondutoras [1], tornou-se crescente o estudo tanto teórico como experimental das propriedades ópticas e de transporte dos compostos semicondutores do grupo III-V e, mais recentemente, dos compostos do grupo II-VI. Para compreendermos as propriedades ópticas e de transporte em heteroestruturas submetidas a campos elétricos *DC* e *AC* e também a campos magnéticos, torna-se essencial um bom modelo para calcularmos sua estrutura eletrônica. Vários formalismos têm sido utilizados no cálculo de sua estrutura eletrônica, como a aproximação *Tight-binding* [2], *Pseudopotenciais* [3], *Densidade funcional* etc. Além da complexidade inerente de cada um destes modelos, os altos custos computacionais podem limitar a utilização prática a um grupo reduzido de locais que possuam infraestrutura computacional assim como pessoal com formação e domínio dos mesmos.

Em vista dessas dificuldades, nessa tese optamos pelo uso do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ baseado na teoria de massa efetiva multibandas, tanto com o modelo de *Luttinger-Kohn* como o de *Kane* [4], para descrever as propriedades estáticas e dinâmicas de portadores em heteroestruturas semicondutoras submetidas a campos externos. Esta técnica é de fácil adaptação ao esquema de massa efetiva e incorpora facilmente perturbações externas

como campo elétrico, magnético, “*strain*” etc. Dessa forma, reservamos este capítulo para discutirmos alguns detalhes do formalismo baseado na aproximação de massa efetiva tanto para um cristal infinito como para uma heteroestrutura, e o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de *Kane* para o cálculo da estrutura de bandas, cujos resultados serão adaptados nos capítulos posteriores para o cálculo das propriedades de transporte nos regimes estacionário e não estacionário ou dinâmico.

2.1 Aproximação de Massa Efetiva

A equação de massa efetiva, ou também conhecida como aproximação das funções envelopes, tem se constituído num dos métodos mais utilizados para se descrever o movimento de elétrons e de buracos num sólido sujeito a campos externos, impurezas, etc., onde ocorre a destruição parcial da simetria de translação do cristal. Essa aproximação, na sua forma geral, consiste em transformar o problema inicialmente complicado do movimento de um portador num cristal, sujeito a um potencial externo adicional, num problema mais simples, correspondente ao movimento do portador no espaço livre com o mesmo potencial externo, onde todos os efeitos da estrutura cristalina (potencial interno) estão embutidos em um tensor denominado de massa efetiva, cujos elementos são determinados pelos parâmetros que descrevem essa aproximação para cada tipo de material escolhido. Discutiremos, inicialmente, os conceitos básicos dessa aproximação para um modelo de cristal infinito com uma banda e, em seguida, a sua generalização para o modelo multibandas.

2.1.1 Modelo de uma Banda

Considere um cristal infinito com uma banda isolada, com um extremo num ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. A equação de *Schrödinger* independente do tempo que descreve o movimento

dos elétrons (por exemplo) nessa banda é dada por:

$$H_0\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde H_0 é o Hamiltoniano do sistema não perturbado e $\varepsilon(\mathbf{k})$ é a energia do elétron em cada estado rotulado pelo índice \mathbf{k} .

As soluções da Eq. (2.1) são as funções de *Bloch*:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

onde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a parte periódica da função de *Bloch*.

A função de *Bloch*, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, pode ainda ser escrita como combinação linear das funções de *Wannier*, $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$, associadas a cada um dos N sítios $\{\mathbf{R}_j\}$ da rede de *Bravais* e que satisfazem a relação de ortonormalidade [5]:

$$\int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (2.3)$$

Desta forma obtém-se

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.4)$$

Da Eq. (2.4), observa-se que a função de *Wannier* é a transformada de *Fourier* inversa da função de *Bloch* e, portanto, invertendo a Eq. (2.4) obtém-se

$$a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Vamos agora adicionar, ao potencial cristalino, uma perturbação descrita por um potencial adicional $V(\mathbf{r})$, variando lentamente com a posição dentro de uma célula unitária do cristal, de modo que os seus elementos de matriz na base de *Wannier* são dados por:

$$V_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)V(\mathbf{r})a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)d\mathbf{r} \cong V(\mathbf{R}_i)\delta_{ij}. \quad (2.6)$$

O Hamiltoniano do sistema perturbado, $H = H_0 + V(\mathbf{r})$, satisfaz a equação de *Schrödinger*

$$[H_0 + V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.7)$$

Como o potencial $V(\mathbf{r})$ varia fracamente com a posição, podemos expandir a função de onda do cristal perturbado, $\Psi(\mathbf{r})$, na base de *Wannier* que contém as características do sistema não perturbado. Sendo assim obtém-se

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N F(\mathbf{R}_j)a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.8)$$

onde as funções $F(\mathbf{R}_j)$ são as chamadas funções envelopes, que dependem fracamente da posição e que modulam as funções de *Wannier* em cada sítio \mathbf{R}_j .

Substituindo a Eq. (2.8) na Eq. (2.7) e projetando o resultado em um elemento da base de *Wannier* obtemos

$$\sum_j [(H_0)_{ij} + V_{ij}] F(\mathbf{R}_j) = EF(\mathbf{R}_i), \quad (2.9)$$

onde usamos as condições (2.3) e (2.6), sendo:

$$(H_0)_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)H_0 a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)d\mathbf{r}, \quad (2.10)$$

os elementos de matriz do Hamiltoniano do cristal perfeito, H_0 , na base de *Wannier*. Podemos ainda escrever

$$(H_0)_{ij} \equiv H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.11)$$

uma forma que fica mais evidente a invariância translacional de H_0 .

Desta maneira, a Eq. (2.9) torna-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = E F(\mathbf{R}_i), \quad (2.12)$$

que é exata, exceto pela aproximação indicada na Eq. (2.6).

Como temos N sítios, a Eq. (2.12) é equivalente a um sistema de N equações relacionando as N incógnitas $F(\mathbf{R}_j)$. Considerando o fato de que as funções envelope variam fracamente com a posição e admitindo que as mesmas sejam obtidas dos valores de uma função contínua $F(\mathbf{r})$ para cada sítio, $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$, podemos expandir as quantidades $F(\mathbf{R}_j)$ em série de *Taylor* em torno do sítio \mathbf{R}_i . Assim sendo obtém-se

$$F(\mathbf{R}_j) = \left[1 + (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \cdot \nabla + \frac{(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)^2}{2!} \nabla^2 + \dots \right] F(\mathbf{R}_i), \quad (2.13)$$

ou seja,

$$F(\mathbf{R}_j) = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} F(\mathbf{R}_i), \quad (2.14)$$

onde usamos a substituição formal $\nabla \leftrightarrow i\mathbf{k}$.

Substituindo a Eq. (2.14) na Eq. (2.12) obtém-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F(\mathbf{R}_i) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = E F(\mathbf{R}_i). \quad (2.15)$$

Por outro lado, substituindo a Eq. (2.4) na Eq. (2.1), projetando o resultado em um elemento $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ da base de *Wannier* e utilizando a Eq. (2.11), encontraremos

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (2.16)$$

Usando agora este último resultado na Eq. (2.15), obtém-se a forma final:

$$\varepsilon(-i\nabla)F(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) F(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

A solução $F(\mathbf{r})$ desta equação nos fornece os coeficientes $F(\mathbf{R}_j)$, para cada sítio $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$.

Como acontece na maioria dos problemas tratados dentro desta aproximação, expandindo $\varepsilon(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla)$ até termos da ordem de k^2 , a equação de massa efetiva (2.17) assemelha-se à equação de *Schrödinger* para uma partícula no espaço livre sujeita a um potencial externo $V(\mathbf{r})$. Na ausência de potencial, o operador energia cinética, $\hat{T}(\hat{\mathbf{p}}^2 \rightarrow -\hbar^2\nabla^2)$, tem autovalor ($\hat{T}F(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} F(k)$) na forma

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.18)$$

onde $F(k)$ é autofunção do operador momento linear, $\hat{\mathbf{p}}$ (invariância translacional) e m^* ficou conhecida como massa efetiva da partícula devido ao potencial periódico da rede de *Bravais* e, daí, derivando o nome de aproximação de massa efetiva.

Vamos agora mostrar a relação entre a função de onda do sistema, $\Psi(\mathbf{r})$, e a parte periódica da função de *Bloch* $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ no extremo da banda de energia, em $\mathbf{k}_0 = 0$. Para isto, expandimos a função de onda $\Psi(\mathbf{r})$, da Eq. (2.8), em termos das funções de *Bloch*, usando a Eq. (2.5), isto é,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{j, \mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} F(\mathbf{R}_j) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Definindo

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} F(\mathbf{R}_j), \quad (2.20)$$

vemos que a Eq. (2.19) pode ser reescrita como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

Utilizando-se então a função de *Bloch* $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dada na Eq. (2.2), podemos reescrever a equação acima como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.22)$$

Como as funções envelope $F(\mathbf{R}_j)$ variam fraca e suavemente dentro de uma célula unitária podemos escrever, com uma boa aproximação, a Eq. (2.20) na forma

$$G(\mathbf{k}) \cong \frac{1}{\sqrt{N}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.23)$$

Desta equação, podemos verificar que $G(\mathbf{k})$ é a transformada de *Fourier* de $F(\mathbf{r})$; e como $F(\mathbf{r})$ tem uma fraca dependência com a posição no espaço real, $G(\mathbf{k})$ é bem localizada no espaço recíproco \mathbf{k} , ou seja $G(\mathbf{k})$ tem valores apreciáveis somente para $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0 = 0$. Desta forma, podemos substituir $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow u_0(\mathbf{r})$ na Eq. (2.22), para obtermos

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}) \right] u_0(\mathbf{r}). \quad (2.24)$$

Como $F(\mathbf{r})$ é a transformada de *Fourier* de $G(\mathbf{k})$, isto é:

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}) \quad (2.25)$$

podemos reescrever a Eq. (2.24) na forma

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong F(\mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}) \quad (2.26)$$

obtendo assim a relação desejada e justificando o nome desta aproximação como “função envelope”.

2.1.2 Modelo para Multibandas

Vamos agora generalizar os resultados da subseção anterior para um cristal semicondutor infinito com várias bandas acopladas, cujas extremidades ocorrem no ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. Suponha também que exista um potencial externo, $V(\mathbf{r})$, que varie fracamente com a posição dentro de uma célula unitária centrada em um sítio, \mathbf{R}_j , e satisfazendo a uma condição análoga à da Eq. (2.6):

$$V_{\mu\nu}^{ij} = \int a_{\mu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \cong V(\mathbf{R}_i) \delta_{\mu\nu} \delta_{ij}, \quad (2.27)$$

onde $a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ é a função de *Wannier*, para cada banda ν , centrada no sítio $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$.

Expandindo a função de onda do sistema perturbado, $\Psi(\mathbf{r})$, na base de *Wannier*

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,\nu} F_{\nu}(\mathbf{R}_j) a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.28)$$

Procedendo então da mesma maneira como na subseção anterior, obtemos a equação de *Schrödinger*, análoga a Eq. (2.12):

$$\sum_{j\nu} H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F_{\nu}(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F_{\mu}(\mathbf{R}_i) = E F_{\mu}(\mathbf{R}_i). \quad (2.29)$$

onde, devido a simetria de translação do cristal perfeito, podemos escrever

$$H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = (H_0)_{\mu\nu}^{ij} \equiv \int a_{\mu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H_0 a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}. \quad (2.30)$$

Como as funções envelope dependem fracamente da posição, podemos expandir as componentes $F_{\nu}(\mathbf{R}_j)$ em série de *Taylor* em torno do sítio \mathbf{R}_i , isto é:

$$F_{\nu}(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F_{\nu}(\mathbf{R}_i), \quad (2.31)$$

onde $\mathbf{k} \Leftrightarrow -i\nabla$.

Substituindo esse resultado na Eq. (2.29) e usando-se o análogo da Eq. (2.16) para multibandas:

$$H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k}) = \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j), \quad (2.32)$$

obtemos

$$\sum_{\nu} [H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{R}_i)\delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(\mathbf{R}_i) = EF_{\mu}(\mathbf{R}_i), \quad (2.33)$$

que é a generalização da equação de massa efetiva para o modelo de multibandas.

Admitindo-se, como na subseção anterior, que as funções envelope $F_{\nu}(\mathbf{R}_j)$ podem ser obtidas a partir de uma função contínua $F_{\nu}(\mathbf{r})$, a equação de massa efetiva pode ainda ser escrita como:

$$\sum_{\nu} [H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{r})\delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(\mathbf{r}) = EF_{\mu}(\mathbf{r}), \quad (2.34)$$

Utilizando procedimento idêntico ao da subseção anterior podemos mostrar que a função de onda, $\Psi(\mathbf{r})$, do sistema perturbado e a função de *Bloch* no extremo, pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} F_{\nu}(\mathbf{r})u_{\nu 0}(\mathbf{r}). \quad (2.35)$$

Nestas subseções, descrevemos o formalismo que leva à aproximação de massa efetiva para um cristal infinito perturbado. Na próxima subseção estaremos discutindo algumas aproximações, visando a utilização deste método para o cálculo dos níveis eletrônicos em heteroestruturas semicondutoras.

2.1.3 Aproximação de Massa Efetiva em Heteroestruturas

Vamos considerar uma heteroestrutura composta por dois semicondutores A e B , com simetria *zincblende*, crescida na direção z . As técnicas mais utilizadas no crescimento desses sistemas são a epitaxial por feixe molecular (*MBE - Molecular Beam Epitaxy*) e

“metal-organic chemical vapour deposition” (MOCVD), que permitem obter interfaces de alta qualidade entre cada material na escala de uma camada atômica ($\sim 2,8 \text{ \AA}$) para o GaAs [6]. Com uma boa aproximação, consideramos que as interfaces entre os semicondutores diferentes sejam bidimensionais, o que implica que os vetores de onda $\mathbf{k}_\rho = (k_x, k_y)$ são bons números quânticos (são conservados através da interface) para o sistema.

Nas próximas considerações estaremos desprezando a formação de dipolos devido a acumulação de cargas nas interfaces e consideramos o movimento dos elétrons em camadas isoladas como aproximadamente igual ao do cristal perfeito formado por aquele material, independentemente das condições de contorno que as funções envelopes devam satisfazer. Esta aproximação é conhecida como aproximação de banda plana ou *flat band approximation*.

Seguindo estas aproximações, devido à diferença dos *gaps* dos materiais ($E_g^{(B)} \neq E_g^{(A)}$) considerados numa interface, a energia na direção z apresentará uma descontinuidade,

$$\delta E_c + \delta E_v = \delta E_g, \quad (2.36)$$

onde δE_c (δE_v) medem respectivamente a descontinuidade das bandas de condução e de valência no ponto Γ . Dessa forma, crescendo uma heteroestrutura com uma sequência de camadas alternadas *ABAB..*, os portadores, nesses materiais (elétrons e buracos), estarão sujeitos a um perfil de potencial consistindo de poços e barreiras, semelhante ao problema de uma partícula em um potencial unidimensional. Entretanto, outras formas de interfaces são possíveis variando de forma controlada a composição dos materiais e que permitiria obter estruturas diversas como: poços quânticos com potenciais triangulares e parabólicos, estrutura “*delta-doping*” etc... (*Band-gap engineering*).

Como no esquema da aproximação de massa efetiva o potencial externo $V(\mathbf{r})$ não produz acoplamento (isto é na ausência de campos magnéticos ou de *strains*) entre as bandas, podemos considerar $\delta E_v = V(\mathbf{r}) = \text{constante}$. Desta forma, para encontrarmos os autoestados na heteroestrutura temos que resolver a equação de massa efetiva dentro

de cada camada j isto é:

$$\sum_{\nu} [H_{\mu\nu}^{(j)}(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{r})\delta_{\mu\nu}] F_{\nu}^{(j)}(\mathbf{r}) = E F_{\mu}^{(j)}(\mathbf{r}), \quad (2.37)$$

com $j = A$ ou B e então estabelecer condições de contorno (continuidade) que as funções envelopes devam satisfazer nas interfaces. A função de *Bloch*, em cada camada, toma a forma (2.35)

$$\Psi^{(j)}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} F_{\nu}^{(j)}(\mathbf{r}) u_{\nu 0}^{(j)}(\mathbf{r}). \quad (2.38)$$

Para determinarmos os autovalores e autofunções devemos agora especificar as condições de contorno (continuidade) para as funções envelopes. Para isto, usamos o fato de que $\Psi^{(j)}(\mathbf{r})$ deve ser contínua em todo o sistema. Entretanto, essa condição não é suficiente para relacionar as funções envelope diretamente, como pode ser visto claramente da Eq. (2.38), sendo necessário o conhecimento das funções de *Bloch* $u_{\nu 0}^{(j)}(\mathbf{r})$ em cada material, o que extrapola o domínio da aproximação de massa efetiva.

Neste trabalho, estamos interessados no estudo das propriedades ópticas e de transporte em heteroestruturas do tipo *I*, onde as regiões de confinamento dos portadores (elétrons e buracos) ocorrem no mesmo material. Como ambos os materiais, que formam a heteroestrutura, apresentam o *gap* exatamente no ponto Γ ($\mathbf{k}_0 = 0$), admitiremos que as componentes da função de *Bloch* \mathbf{u}_0 sejam iguais em todas as regiões, isto é:

$$u_{\nu 0}^{(A)} = u_{\nu 0}^{(B)} \quad (2.39)$$

o que restringe a aplicação do método a heteroestruturas formadas com materiais com mesma estrutura cristalina [7].

Desta forma, usando a ortonormalidade das funções de *Bloch* e a continuidade de $\Psi^{(j)}(\mathbf{r})$ na interface $z = z_i$ obtemos a relação:

$$F_{\nu}^{(A)}(\boldsymbol{\rho}, z_i) = F_{\nu}^{(B)}(\boldsymbol{\rho}, z_i) \quad (2.40)$$

que representa a continuidade das funções envelopes nas interfaces, sendo $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ a componente bidimensional do vetor \mathbf{r} no plano xy das camadas.

Admitindo a invariância translacional do sistema no plano xy (ou seja, conservação do momento linear \mathbf{k}_ρ), as funções envelopes em cada camada podem ser reescritas como:

$$F_\nu^{(j)}(\boldsymbol{\rho}, z) = \exp(i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}) F_\nu^{(j)}(z) \quad (2.41)$$

o que resulta em uma equação de massa efetiva multibandas cuja forma matricial é dada por:

$$[\mathbf{H}^{(j)}(k_z \rightarrow -i\partial/\partial z) + \mathbf{IV}(\mathbf{r})] \mathbf{F}^{(j)}(z) = E\mathbf{F}^{(j)}(z). \quad (2.42)$$

Uma segunda condição de contorno é continuidade da corrente de probabilidade, que pode ser obtida integrando-se a equação de massa efetiva através de uma pequena região, δ , em torno da interface que, no limite $\delta \rightarrow 0$, toma a forma

$$\mathbf{J}_z \mathbf{F}_\nu^{(A)}(z_i) = \mathbf{J}_z \mathbf{F}_\nu^{(B)}(z_i), \quad (2.43)$$

onde \mathbf{J}_z é o operador densidade de corrente que será definido no Capítulo 4.

Uma vez obtida a equação de massa efetiva multibandas que descreve o movimento dos portadores (elétrons e buracos) em heteroestruturas semicondutoras o passo seguinte é escolher o melhor Hamiltoniano para descrever adequadamente as propriedades do cristal perfeito visando a obtenção de bons resultados. Para isto, optamos pelos modelos de *Kane* $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (6×6), para estudarmos as propriedades opto-eletrônicas, e o de *Luttinger-Kohn* (4×4) para investigarmos o tunelamento dos buracos. Maiores detalhes do formalismo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ serão apresentados na próxima seção.

2.2 O Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Inicialmente utilizado para determinar massas efetivas e funções de onda próximo a pontos de alta simetria no espaço- k , o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ introduzido por *Bardeen* [8] e *Seitz* [9], tornou-se uma técnica atraente para o cálculo da estrutura de bandas em semicondutores. Isso se deve ao fato de que as propriedades eletrônicas usuais, tais como, tunelamento, absorção ótica, etc.. dependem fortemente dos detalhes da estrutura de bandas na vizinhança dos seus extremos, permitindo aproximações específicas e com simplificações nos cálculos que não comprometem os detalhes dos estados numa dada vizinhança.

Em linhas gerais, o procedimento básico para o cálculo de bandas através do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [10] envolve três etapas: (i) transformação do Hamiltoniano do cristal para uma representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que incorpora detalhes da estrutura de bandas na vizinhança do ponto $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$; (ii) redução ao problema matricial de autovalores, usando como base as funções de onda no ponto \mathbf{k}_0 para se obter formalmente a matriz do passo anterior; (iii) introduzir aproximações, visando a utilização prática desses resultados.

Dessa forma, nesta seção discutiremos as etapas (i) e (ii) que caracteriza o que chamamos de método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, com vistas para as aproximações no modelo de *Kane* que serão discutidas na seção (2.4).

2.2.1 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Na aproximação de partículas independentes, a função de onda de um portador no cristal semiconductor é obtida resolvendo a equação de *Schrödinger*

$$H_0\psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.44)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ o operador momento e $U(\mathbf{r})$ é o potencial cristalino (periódico) que descreve a interação entre os íons do cristal, incluindo até alguma média da interação elétron-elétron. O terceiro termo no Hamiltoniano é devido

ao acoplamento spin-órbita, onde $\boldsymbol{\sigma}$ é a matriz de spin de *Pauli*. Devido a periodicidade do potencial cristalino podemos fazer uso do teorema de *Bloch* e as soluções da equação acima devem ser da forma:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.45)$$

onde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a parte periódica da função de *Bloch*, com o mesmo período de $U(\mathbf{r})$ e \mathbf{k} é vetor de onda que descreve o movimento do portador no cristal. Como \mathbf{k} deve ser real (estados estendidos), as energias com vetor de onda \mathbf{k} dentro da primeira zona de *Brillouin* são quantizadas, na forma $E_n(\mathbf{k})$, onde n é o índice que classifica esta função em várias bandas de energia.

Substituindo a função de *Bloch* [Eq. (2.45)] na equação de *Schrödinger* [Eq. (2.44)] obtemos

$$H(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.46)$$

onde definimos, por razões óbvias, a Hamiltoniana transformada:

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.47)$$

Com a devida expansão das exponenciais, em série de *Taylor*, e agrupando os termos de mesma ordem em \mathbf{k} , encontramos

$$H(\mathbf{k}) = H_0 - i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}, H_0] - \frac{1}{2} \sum_{ij} k_i k_j [r_i, [r_j, H_0]] + \dots \quad (2.48)$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}]$, é o comutador dos operadores \hat{A} , \hat{B} . Uma vez que o Hamiltoniano H_0 é dado pela Eq. (2.44), os comutadores da equação anterior podem ser encontrados facilmente, como:

$$i\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p} = [\mathbf{r}, H_0], \quad [r_i, [r_j, H_0]] = -i\frac{\hbar^2}{m_0} \delta_{ij}, \quad (2.49)$$

sendo todos os outros os operadores de ordem superior nulos. Assim, substituindo a equação anterior na Eq. (2.48), chegamos uma forma exata do Hamiltoniano

$$H(\mathbf{k}) \equiv H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \mathbf{k}^2 \right], \quad (2.50)$$

que chamaremos de representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de H_0 . Com a inclusão da interação spin-órbita, este Hamiltoniano toma a forma:

$$H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + H_{ps0} + H_{kso}, \quad (2.51)$$

onde aparecem dois novos termos,

$$H_{ps0} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} [\nabla U(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.52)$$

$$H_{kso} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{k}. \quad (2.53)$$

O termo H_{ps0} representa a interação do spin com um campo magnético interno, devido ao movimento orbital dos elétrons com momento \mathbf{p} , em torno do núcleo e, o termo H_{kso} , representa a interação do spin com um campo magnético efetivo, produzido pelo movimento do elétron, com momento $\hbar \mathbf{k}$, no cristal. Dessa forma, como a velocidade do elétron em órbita atômica é muito maior que a velocidade do elétron no cristal, com momento \mathbf{k} próximo do extremo (ponto Γ), o termo H_{kso} é, certamente, muito menor que H_{ps0} e, portanto, podendo ser desprezado na maioria dos cristais com simetria *zinblende*.

Por simplicidade de exposição, seguiremos o procedimento indicado na Ref. [10] desprezando inicialmente a interação spin-órbita. A Eq. (2.46) representa uma equação de autovalores para $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ no pequeno volume de uma célula unitária do cristal, onde essas funções são normalizadas e, como $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$ é um operador Hermitiano, as funções $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, para um dado \mathbf{k} , formam um conjunto completo de funções. Escolhendo um ponto de referência (extremo) $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, para o qual $E_n(\mathbf{k})$ e $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são conhecidos, obtemos a equação de autovalores

$$H(\mathbf{k}_0)u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}_0)u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.54)$$

onde, vide Eq. (2.50), $H(\mathbf{k}_0)$ é da forma:

$$H(\mathbf{k}_0) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m}\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}_0^2. \quad (2.55)$$

Isolando o valor de H_0 e substituindo na Eq. (2.46) encontramos

$$\left(H(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.56)$$

A solução da Eq. (2.56) pode ser obtida aproximando as desconhecidas funções *Bloch* por uma expansão naqueles estados de *Bloch* de alta simetria localizada no ponto \mathbf{k}_0 ,

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{nn'} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.57)$$

Substituindo esta expressão na Eq. (2.56) e projetando o resultado em um estado particular, $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$, obtém-se facilmente uma equação para os coeficientes, $c_{nn'}$

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0) \right\} c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn} \quad (2.58)$$

onde

$$\mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0) = \int u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.59)$$

são os elementos de matriz do operador momento, entre os estados de *Bloch* no ponto \mathbf{k}_0 , calculados no volume da célula unitária.

Vemos portanto, que a Eq. (2.58) relaciona a energia de uma certa banda $E_n(\mathbf{k})$, num ponto \mathbf{k} da primeira zona de *Brillouin*, à uma matriz infinita do Hamiltoniano,

cujos elementos são dados por:

$$H_{jj'} = \left[E_j(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar}{m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{jj'}(\mathbf{k}_0). \quad (2.60)$$

Uma vez que a matriz do Hamiltoniano efetivo é de dimensão infinita, não é possível a sua diagonalização exata. Entretanto, para os materiais que estamos interessados e seus tipos de propriedades eletrônicas de maior interesse, podemos tratar os elementos fora da diagonal da matriz (2.60) como uma perturbação. Usando uma teoria de perturbação desenvolvida por *Löwdin* [12], *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. Antes de abordarmos essa aproximação, vamos descrever na próxima seção alguns aspectos qualitativos da estrutura de bandas dos semicondutores *zincblende* que são úteis para uma melhor descrição do modelo de *Kane*.

2.3 Estrutura de Bandas de Semicondutores

Zincblende

Os compostos semicondutores do grupo III-V e alguns II-VI cristalizam-se principalmente na estrutura *zincblende*. Essa estrutura, que possui propriedades de simetria do grupo tetraédrico T_d^2 , pode ser visualizada como duas subredes *fcc* separadas, uma da outra, por uma distância de um quarto da diagonal da célula unitária. Cada uma dessas subredes é formada por um tipo de átomo, introduzindo uma quebra de simetria de inversão espacial, que está presente na estrutura cristalina do diamante (grupo IV), em cujas duas subredes *fcc* aparecem com o mesmo tipo de átomo.

A rede recíproca dos semicondutores *zincblende* tem simetria corpo centrado (*bcc*). A primeira zona de *Brillouin* da rede recíproca é um octaedro truncado com seus principais pontos de simetria convencionalmente especificados como Γ , X e L mostrados na parte (a) da Fig. (2-1).

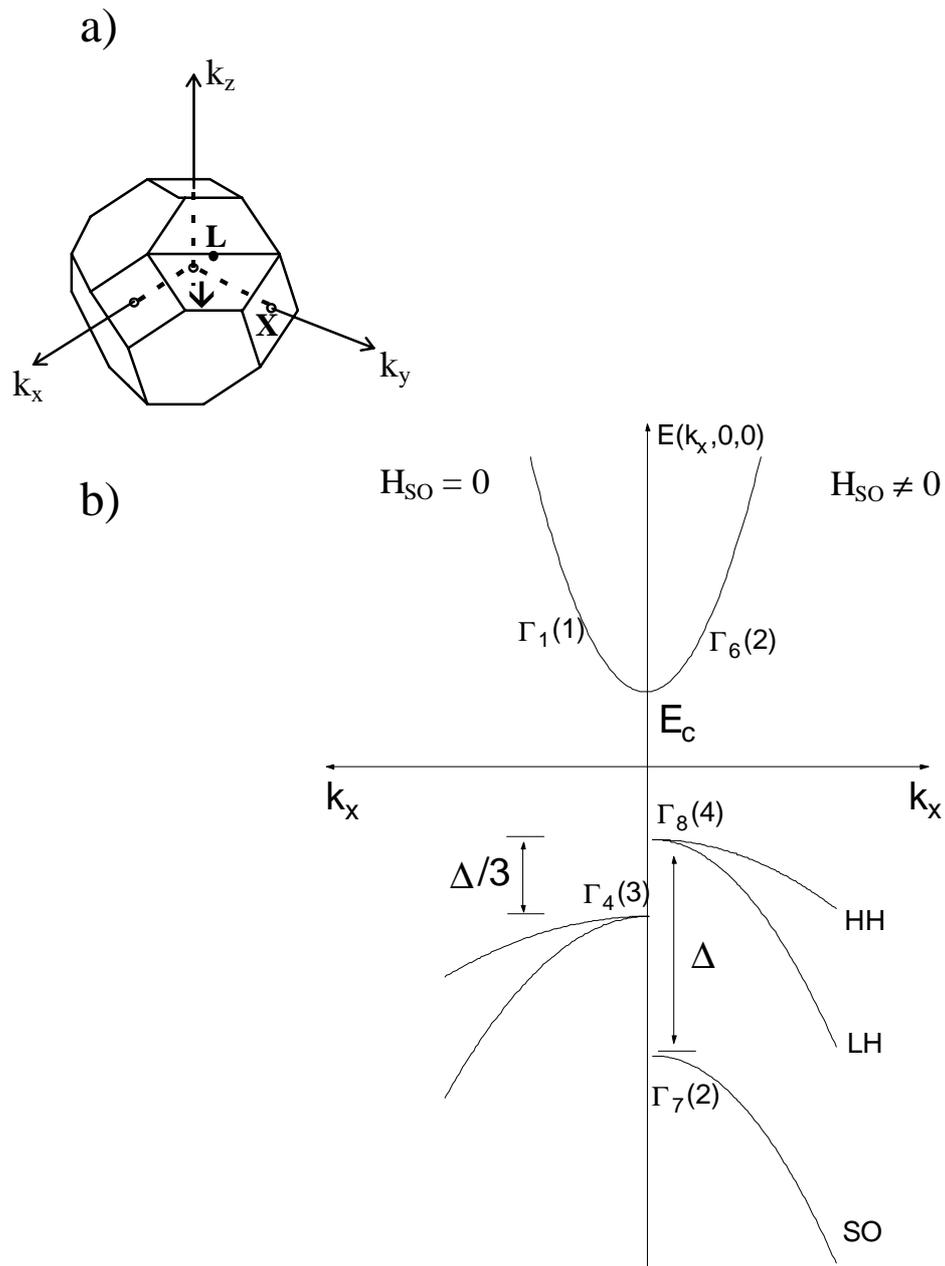


Figura 2-1: Representação esquemática das estruturas de bandas dos compostos III-V. A parte (a) mostra a primeira zona de *Brillouin* de um cristal com simetria *zincblende* e a parte (b) mostra um modelo esquemático das estruturas de bandas dos compostos III-V na vizinhança do ponto Γ .

Na parte (b) da Fig. (2-1), ilustramos a estrutura de bandas desses semicondutores, onde observamos que os extremos das bandas de condução e de valência ocorrem no ponto Γ ($\mathbf{k} = 0$), onde se define o *gap* fundamental do semicondutor, E_g . Neste ponto, na ausência de spin, o ramo mais baixo da banda de condução é não-degenerada e a banda de valência possui tripla degenerescência. A interação spin-órbita quebra parcialmente a degenerescência na banda de valência, separando um dos ramos, conhecido como a banda de buraco separado ou *split-off* (SO), dos outros dois que permanecem degenerados no ponto Γ , denominados como as bandas de buraco pesado ou *heavy-hole* (HH) e de buraco leve ou *light-hole* (LH).

Um estudo mais detalhado da simetria das estruturas *zincblende* revela que, na ausência de spin, a parte periódica da função de *Bloch* para a banda de condução mais baixa possui simetria do orbital $|s\rangle$ não ligantes e, portanto, transforma-se como um orbital de momento angular $\mathbf{L} = 0$ sob operações de simetria que pertencem à representação Γ_1 do grupo tetraédrico T_d^2 . O topo da banda de valência é formada por orbitais ligantes tipo p , indicando que as funções de *Bloch* no topo da banda de valência transformam-se da mesma forma que as funções atômicas $|x\rangle$, $|y\rangle$ e $|z\rangle$, de momento angular $\mathbf{L} = 1$, sob as operações de simetria que pertencem à representação Γ_4 .

Na presença de spin, as funções de onda de *Bloch* no ponto Γ podem ser escritas na base $|J, m_J\rangle$ obtida como combinação linear dos orbitais s - p ($\mathbf{L} = 0$ e $\mathbf{L} = 1$), com as funções do spin $\mathbf{S} = 1/2$, para a qual o momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ e sua componente J_z são diagonais. J, m_J são os autovalores, nesta base, dos operadores \mathbf{J}^2 e J_z , respectivamente. Assim, para a banda de condução $\mathbf{L} = 0$ e $\mathbf{S} = 1/2$, temos $J = 1/2$ e $m_J = \pm 1/2$, pertencendo à representação de simetria Γ_6 . Para a banda de valência $\mathbf{L} = 1$ e $\mathbf{S} = 1/2$, temos o quadrupletto $J = 3/2$ e $m_J = \pm 3/2, \pm 1/2$ (*heavy-hole* e *light-hole*) que pertencem a representação Γ_8 e o dupletto $J = 1/2$ e $m_J = \pm 1/2$, que corresponde à simetria Γ_7 (*split-off*).

Na ausência de campos externos, os materiais que possuem simetria de inversão espacial e temporal, como o diamante, têm seus níveis de energia *Zeeman*, por exemplo,

$m_J = \pm 1/2$ para elétrons, duplamente degenerados (conhecida como degenerescência de *Kramer*), o que não é verdade para uma estrutura *zincblende*, que não possui centro de simetria espacial, uma vez que como vimos anteriormente, possui dois tipos de átomos diferentes nas duas subredes *fcc*. Entretanto essa simetria pode ainda ser considerada nesses casos, uma vez que a contribuição dos termos responsáveis pela quebra dessas degenerescência é da ordem de k^3 [10], sendo portanto muito pequeno para valores de k próximo ao ponto Γ , que são de interesse neste trabalho.

2.4 Aproximação de *Kane*

Nesta seção, vamos introduzir a aproximação de *Kane* [4] baseada no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com o objetivo de construir um modelo simplificado para estudar as propriedades ópticas e de transporte em heteroestruturas semicondutoras. Os resultados desta seção serão utilizados mais tarde para implementar a aproximação de massa efetiva, ao cálculo dos níveis eletrônicos usando o método da *Potência Inversa*, assim como a obtenção de Hamiltonianos mais simples como o modelo de *Luttinger* [11] utilizado para o cálculo das propriedades de transporte.

Nos materiais semicondutores do grupo III-V os portadores (elétrons e buracos), localizam-se nas extremidades das bandas Γ ($\mathbf{k} = 0$), o que torna os estados próximos a essa região muito importantes para a investigação das propriedades eletrônicas, além de permitir simplificações na escolha dos estados de *Bloch* $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$. Desta forma, considerando o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ sem a interação spin-órbita [Eq. (2.60)] e tomando-se como ponto de referência $\mathbf{k}_0 = 0$, obtém-se

$$\mathcal{H}_{jj'} = \left[E_j^0 + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{jj'} \quad (2.61)$$

onde $E_j^0 \equiv E_j(\mathbf{k} = 0)$ e $\mathbf{p}_{jj'} \equiv \mathbf{p}_{jj'}(\mathbf{k} = 0)$, sendo j e j' os índices das bandas no ponto Γ .

A equação acima é correta para todos os valores de \mathbf{k} . Entretanto, para \mathbf{k} na vizinhança de \mathbf{k}_0 , ela permite aproximações. Isto é, os termos fora da diagonal do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$,

$$\frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{jj'}$$

podem ser tratados como uma perturbação.

Na aproximação adotada por *Kane* o Hamiltoniano na Eq. (2.61) é tratado perturbativamente, através da teoria de perturbação de *Löwdin* que considera todos os estados quânticos do sistema divididos em duas categorias, \mathcal{A} e \mathcal{B} . Neste esquema de cálculo os estados pertencentes à categoria \mathcal{A} , por hipótese os mais importantes, interagem fortemente entre si, porém fracamente com os da categoria \mathcal{B} . As interações entre \mathcal{A} e \mathcal{B} são removidas por um processo iterativo e obtém-se, então, as interações entre os estados da categoria \mathcal{A} renormalizados até a segunda ordem, isto é [12]:

$$H'_{jj'} = H_{jj'} + \sum_n^{\mathcal{B}} \frac{H_{jn}H_{nj'}}{H_{jj} - H_{nn}} \quad (2.62)$$

onde os estados rotulados por j e j' pertencem à categoria \mathcal{A} e os estados n pertencem à categoria \mathcal{B} . Selecionando então os estados de condução e valência pertencentes a categoria \mathcal{A} , referido com subespaço *hibridizado s-p* e aplicando este procedimento ao Hamiltoniano da Eq. (2.62) obtém-se a matriz das interações renormalizadas H' incluindo o spin do elétron [13] escrito na base *s-p* octodimensional : $|S \uparrow\rangle$, $|X \uparrow\rangle$, $|Y \uparrow\rangle$, $|Z \uparrow\rangle$, $|S \downarrow\rangle$, $|X \downarrow\rangle$, $|Y \downarrow\rangle$ e $|Z \downarrow\rangle$ descritos na seção anterior.

Para completar a descrição do modelo de *Kane*, é necessário incluir a interação spin-órbita. Dessa forma com objetivo de simplificar o modelo, transformamos o Hamiltoniano total para a base $|J, m_J\rangle$ dos autoestados de momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, onde a interação spin-órbita é diagonal entrando como uma parte não renormalizada na teoria de *Löwdin*. Essa base $|J, m_J\rangle$ foi escolhida numa sequência (ordenamento) especial e tem a forma:

$$\begin{aligned}
u_{1/2,1/2} &\rightarrow |e \uparrow\rangle = |S \uparrow\rangle \\
u_{3/2,3/2} &\rightarrow |h \uparrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\
u_{3/2,-1/2} &\rightarrow |l \downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow\rangle + 2|Z \downarrow\rangle] \\
u_{1/2,-1/2} &\rightarrow |so \downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} [(X - iY) \uparrow\rangle - 2|Z \downarrow\rangle] \\
u_{1/2,-1/2} &\rightarrow |e \downarrow\rangle = -|S \downarrow\rangle \\
u_{3/2,-3/2} &\rightarrow |h \downarrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\
u_{3/2,1/2} &\rightarrow |l \uparrow\rangle = \frac{-i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow\rangle - 2|Z \uparrow\rangle] \\
u_{1/2,-1/2} &\rightarrow |so \uparrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} [(X + iY) \downarrow\rangle + 2|Z \uparrow\rangle]
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Procedendo dessa forma *Kane* em 1956 obteve a matriz Hamiltoniana (8×8) que envolve parâmetros ajustáveis que podem ser reduzidos por considerações de simetria. Um método alternativo para se obter esse Hamiltoniano é baseado na teoria de grupo. Usando essa variante, *Luttinger* e *Weiler* [14] descreveram a representação Γ_8 , Γ_6 , e Γ_7 encontrando três novos parâmetros além daqueles obtidos por *Kane*, representando acoplamento adicional entre as bandas de condução (Γ_6) e de valência (Γ_8), que surgem quando incluímos acoplamento spin-órbita nas bandas da categoria \mathcal{B} . Desprezando a quebra da simetria de inversão da estrutura *zincblende*, o Hamiltoniano (6×6), no limite $\Delta \rightarrow \infty$, é escrito na forma [13]:

$$H = \begin{bmatrix} H_u & H_{ud} \\ H_{ud}^\dagger & H_d \end{bmatrix}, \tag{2.64}$$

onde cada submatriz tem a forma 3×3 :

$$H_u = \begin{bmatrix} D_c^+ & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk^+ & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk^- \\ \frac{1}{\sqrt{2}}Pk^- & D_{hh}^+ & \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_2 F_3^2 - i\sqrt{3}\gamma_3 F_4^z) \\ -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk^+ & \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_2 F_3^2 + i\sqrt{3}\gamma_3 F_4^z) & D_{lh}^+ \end{bmatrix}, \tag{2.65a}$$

$$H_{ud} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{m_0}(N_1 + \frac{1}{2})H^- & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z \\ 0 & -\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m_0}qH^+ & \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0}[(\gamma_3 F_4^- - (\kappa + \frac{7}{4}q)H^-)] \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{-\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0}[(\gamma_3 F_4^- + (\kappa + \frac{7}{4}q)H^-)] & -\frac{\hbar^2}{m_0}(\kappa + \frac{5}{2}q)H^+ \end{bmatrix}, \quad (2.65b)$$

$$H_d = \begin{bmatrix} D_c^- & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk^- & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk^+ \\ \frac{1}{\sqrt{2}}Pk^+ & D_{hh}^- & \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_2 F_3^2 + i\sqrt{3}\gamma_3 F_4^z) \\ -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk^- & \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_2 F_3^2 - i\sqrt{3}\gamma_3 F_4^z) & D_{lh}^- \end{bmatrix}. \quad (2.65c)$$

Em cada uma delas, os elementos são definidos pelas relações:

$$\left\{ \begin{array}{l} k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad k^\pm = k_x \pm ik_y, \\ F_3^1 = 2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2, \quad F_3^2 = \sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2), \\ F_4^\pm = \{k_z, k^\pm\}, \quad F_4^z = \{k_x, k_y\}, \\ H_z = i[k_x, k_y], \quad H^\pm = \pm[k^\pm, k_z], \\ D_c^\pm = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_0}(2F + 1)k^2 \pm \frac{\hbar^2}{m_0}(N_1 + \frac{1}{2})H_z, \\ D_{hh}^\pm = -\frac{\hbar^2}{2m_0}[(\gamma_1 k^2 - \gamma_2 F_3^1) \pm 3(\kappa + \frac{9}{4}q)H_z], \\ D_{lh}^\pm = -\frac{\hbar^2}{2m_0}[(\gamma_1 k^2 + \gamma_2 F_3^1) \mp (\kappa + \frac{1}{4}q)H_z]. \end{array} \right. \quad (2.66)$$

Onde tomamos, como nível de referência para as energias (zero de energia), o topo da banda de valência e $E_g = E_c(0) - E_v(0)$ é o *gap* de energia do semicondutor, na ausência de *strain* e para temperatura $T = 0$. Esta formulação se aplica para o caso sem e com campos magnéticos, onde os operadores F_4^\pm, F_z, H_z, H^\pm terão formas definidas diferentes.

2.4.1 Constantes e Parâmetros do Hamiltoniano de *Kane*

O estudo de bandas através da técnica semi-empírica $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ complementa-se com a determinação de um conjunto de parâmetros reais ($F, P, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa, q, N_1$) envolvidos na

descrição do modelo e que devem ser obtidos a partir das propriedades de cada material semiconductor tais como, massas efetivas, *gaps* de energia (E_g), energia spin-órbita (Δ) e fatores giromagnéticos (g_c, κ, q, N_1). As relações entre esses parâmetros com as propriedades dos materiais são obtidas a partir de soluções particulares do Hamiltoniano, [15, 16]. Essas relações são como segue:

- O *gap* $E_g = E_c(0) - E_v(0)$ é um parâmetro livre (sua medida é independente das demais).
- P é uma medida do acoplamento entre as bandas de condução e valência, sendo definido como [4]:

$$P = \frac{-i\hbar}{m_0} \langle S | p_v | V \rangle \quad , \quad V = X, Y, Z \quad (2.67)$$

sendo mais comum encontrarmos na literatura o parâmetro $E_P = 2m_0P^2/\hbar^2$.

- O parâmetro de segunda ordem, F , é obtido a partir da massa efetiva eletrônica m_{el}^* e dos parâmetros E_g, E_P . Para $\Delta \rightarrow \infty$ (modelo 6×6) temos:

$$F = \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_{el}^*} - 1 - \frac{2E_P}{3E_g} \right). \quad (2.68)$$

- Os parâmetros γ_i são obtidos a partir dos parâmetros E_g, E_P e das massas efetivas dos buracos m_{lh}^* e m_{hh}^* ao longo da direção [100] e dos buracos pesados na direção [111]:

$$\begin{cases} \gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_P}{3E_g}, & \gamma_1^L = \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_{lh}^*} + \frac{m_0}{m_{hh}^*} \right), \\ \gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{E_P}{6E_g}, & \gamma_2^L = \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_{lh}^*} - \frac{m_0}{m_{hh}^*} \right), \\ \gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{E_P}{6E_g}, & \gamma_3^L = \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_{lh}^*} + \frac{m_0}{m_{hh}^*} - \frac{m_0}{m_{hh}^*[111]} \right). \end{cases} \quad (2.69)$$

A nova contribuição devida a *Weiler*, poder ser obtida através do fator giromagnético da banda de condução g_c :

$$N_1 = \frac{1}{4}(g_c - 2 + 2E_P/3E_g). \quad (2.70)$$

- O parâmetro $\kappa^L = \kappa + \frac{E_P}{E_g}$, introduzido inicialmente por *Luttinger* [17] corresponde ao fator giromagnético para buracos (Γ_8).
- O parâmetro q correspondendo ao acoplamento spin-órbita das bandas de mais altas energias e pode ser determinado usando-se a equação [13]

$$\gamma_1 - 2\gamma_2 - 3\gamma_3 + 3\kappa + \frac{27}{4}q + 2 \simeq 0 \quad (2.71)$$

que pode ser usada tanto para os parâmetros de *Kane* quanto para os de *Luttinger*, feitas as correções correspondentes necessárias.

No próximo capítulo discutiremos o formalismo da *Potência Inversa*, muito útil para o cálculo da estrutura eletrônica.

Bibliografia

- [1] R. Tsu , Leo Esaki, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [2] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston, 1976) p.176; F. Bassani. Methods of Band Calculations Applicable to III-V Compounds. R. K. Williardson e A. C Beer, editores, Physics of III-V Compounds, vol. **1** de *Semiconductors and Semimetals*. páginas 21–24, New York, (1966). Academic Press.
- [3] B. K. Ridley. Quantum Processes in Semiconductors. Clarendon Press, Oxford, (1982).
- [4] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids, **1**, 249, (1957).
- [5] J. M. Ziman, *Principles of Theory of Solids* (Cambrige University Press, London, 1972) p.173.
- [6] J. F. Walker, “Semiconductor Growth Techniques”, J. R. Leite, A. Fazzio, A. S. Chaves, editores, Proceedings of the **5th** Brazilian School on Semiconductor Physics, página 22, Singapore, (1992). World Scientific.
- [7] S. R. White, L. J. Sham, Phys. Rev. Lett, **47**, 879–882, (1981).
- [8] J. Bardeen, J. Phys. Chem. Solids, **6**, 367–371, (1938).
- [9] F. Seitz. The Modern Theory Solids, capítulo **10**, página 352. McGraw Hill, New York, (1940).

- [10] E. O. Kane, *Semiconductors and Semimetals*, R. K. Williarddson and A. C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1966) vol. **1** p.75.
- [11] J. M. Luttinger , W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [12] P. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [13] M. H. Weiler, “*Semiconductors and Semimetals*”, R. K. Williarddson and A. C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1981) vol. **16**, p.119.
- [14] M. H. Weiler, R. L. Aggarwal, B. Lax, Phys. Rev. **B**, **17**, 3269–3283, (1978).
- [15] A. M. Cohen, G. E. Marques, Phys. Rev. B, **41**, 10608–10621, (1990).
- [16] R. Eppenga, M. F. H. Schuurmans, S. Colak, Phys. Rev. B, **36**, 1554–1564, (1987).
- [17] J. M. Luttiger, Phys. Rev. **102**, 1030–1041, 1956.

Capítulo 3

Aplicações do Método Numérico: Estruturas Eletrônicas e Propriedades Ópticas em Delta-Doping

Neste capítulo discutiremos o formalismo numérico que será utilizado nessa tese para se calcular os níveis eletrônicos em heteroestruturas semicondutoras, dentro da aproximação de massa efetiva multibanda, como apresentada no capítulo anterior. Esse estudo tem o objetivo principal de se estabelecer que tipos de precisão podemos obter nos estados eletrônicos, que será muito importante para se estabelecer as condições iniciais (estados iniciais) para descrição das propriedades dinâmicas nas presença de campos elétricos AC , que serão investigadas nos capítulos seguintes. Desta forma na seção (3.1) descreveremos os detalhes do método da *Potência Inversa* para o cálculo da estrutura eletrônica em um perfil de potencial arbitrário. Como exemplo aplicaremos na seções (3.2) e (3.3) este método para estudar propriedades ópticas em estruturas “*delta-doping*” do tipo *nipi* com camadas acopladas. Nesta aplicação usaremos uma aproximação não autoconsistente, porém com um perfil de potencial bastante geral.

3.1 Método da Potência Inversa

Para perfis de potenciais dependendo só da coordenada z , que escolhemos como a direção de quantização, a equação de massa efetiva multibandas determina um conjunto de equações diferenciais acopladas para as funções envelope de cada uma das componentes de um estado (spinor),

$$\sum_{j=1}^M \left[H_{ij} \left(k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + V(z) \mathbf{I} \right] F_j = E F_i \quad (3.1)$$

onde M é o número de bandas (ou número de tipo de portadores) usadas nas diferentes possíveis modelagens (4×4 ou *Luttinger*, 6×6 , 8×8 , etc) aplicáveis aos diferentes tipos de semicondutores (dependendo dos valores do *gap*, spin-órbita, etc), F_j são as componentes das funções envelopes e \mathbf{I} a matriz identidade. Na forma matricial, um estado típico pode ser escrito como

$$\mathbf{F}(z, \rho, k) = e^{i\mathbf{k} \cdot \rho} \begin{bmatrix} F_1(\mathbf{k}, z) \\ F_2(\mathbf{k}, z) \\ F_3(\mathbf{k}, z) \\ F_4(\mathbf{k}, z) \\ \dots \\ F_M(\mathbf{k}, z) \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

onde a numeração destas componentes está diretamente associada à sequência e ao ordenamento escolhido para os estados de *Bloch* na vizinhança do ponto de simetria. Cada um dos elementos do Hamiltoniano sendo proporcionais a derivadas segundas ou primeira em z ou ainda constantes, permite a seguinte separação

$$H_{ij} = H_{ij}^{(2)}(k_\rho) k_z^2 + H_{ij}^{(1)}(k_\rho) k_z + H_{ij}^{(0)}. \quad (3.3)$$

Mais especificamente, podemos separar o Hamiltoniano acima em uma soma de grupos de matrizes $M \times M$ e escrito na forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(2)}k_z^2 + \mathbf{H}^{(1)}k_z + \mathbf{H}^{(0)}, \quad (3.4)$$

onde $\mathbf{H}^{(i)}$ é uma matriz dos coeficientes das derivadas $(\partial/\partial z)^i$ no modelo escolhido para \mathbf{H} .

Para implementarmos o método, devemos ainda usar uma forma Hermitiana simetrizada para o Hamiltoniano \mathbf{H} , uma vez que os parâmetros dos semicondutores variam com a posição. Substituindo $k_z \Rightarrow -i\frac{\partial}{\partial z}$ encontramos uma equação de massa efetiva equivalente onde as matrizes $\mathbf{H}^{(i)}(z)$ dependem da posição, através dos parâmetros dos materiais (valores distintos em cada camada),

$$\mathbf{H}(k_z)\mathbf{F} = \left[-\frac{\partial}{\partial z}\mathbf{H}^{(2)}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{i}{2}\left\{ \mathbf{H}^{(1)}, \frac{\partial}{\partial z} \right\} + \mathbf{H}^{(0)} + V(z)\mathbf{I} \right] \mathbf{F} = E\mathbf{F}. \quad (3.5)$$

Nesta última equação, $\{\hat{a}, \hat{b}\} = \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$ é o anticomutador.

Usando o método das diferenças finitas (Apêndice B) podemos transformar o conjunto de equações diferenciais acopladas em um sistema de equações algébricas sobre uma rede discreta com N pontos, igualmente espaçados e sendo a o intervalo de discretização do eixo z . Para cada ponto, σ , da rede temos um sistema de equações

$$\mathbf{H}_{\sigma,\sigma-1}\mathbf{F}_{\sigma-1} + \mathbf{H}_{\sigma,\sigma}\mathbf{F}_{\sigma} + \mathbf{H}_{\sigma,\sigma+1}\mathbf{F}_{\sigma+1} = E\mathbf{F}_{\sigma} \quad (3.6)$$

e as M equações diferenciais acopladas são transformadas em $M \times N$ equações diferenciais lineares, onde

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\sigma,\sigma} &= \mathbf{H}^{(0)} + V_{\sigma} + \frac{\mathbf{H}_{\sigma-1/2}^{(2)} + \mathbf{H}_{\sigma+1/2}^{(2)}}{a^2}, \\ \mathbf{H}_{\sigma,\sigma\pm 1} &= -\frac{\mathbf{H}_{\sigma\pm 1/2}^{(2)}}{a^2} + i\frac{\mathbf{H}_{\sigma}^{(1)} + \mathbf{H}_{\sigma\pm 1}^{(1)}}{4a}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

As Eqs. (3.6) podem ser escritas na forma matricial compacta

$$\overline{\mathbf{H}} \overline{\mathbf{F}} = E \overline{\mathbf{F}}, \quad (3.8)$$

que resulta num sistema de equações de autovalores algébricos. Considerando que a matriz $\overline{\mathbf{H}}$ possui n autovetores $\{\overline{\mathbf{F}}_1, \overline{\mathbf{F}}_2, \overline{\mathbf{F}}_3, \dots, \overline{\mathbf{F}}_n\}$ com seus correspondentes autovalores $\{E_1, E_1, E_3, \dots, E_n\}$ então, uma solução inicial $\overline{\mathbf{F}}^{(0)}$ pode ser escrita como combinação linear deste conjunto de autovetores, na forma:

$$\overline{\mathbf{F}}^{(0)} = a_1 \overline{\mathbf{F}}_1 + a_2 \overline{\mathbf{F}}_2 + a_3 \overline{\mathbf{F}}_3 + \dots + a_n \overline{\mathbf{F}}_n \quad (3.9)$$

com todos os $a_i \neq 0$. Aplicando o operador $(\overline{\mathbf{H}} - \mu \mathbf{I})^{-m}$ em $\overline{\mathbf{F}}^{(0)}$ obtemos a expressão da *Potência Inversa* [1]

$$(\overline{\mathbf{H}} - \mu \mathbf{I})^{-m} \overline{\mathbf{F}}^{(0)} = \frac{a_1}{(E_1 - \mu)^m} \overline{\mathbf{F}}_1 + \frac{a_2}{(E_2 - \mu)^m} \overline{\mathbf{F}}_2 + \dots + \frac{a_n}{(E_n - \mu)^m} \overline{\mathbf{F}}_n, \quad (3.10)$$

onde μ é um parâmetro ajustável e m é um número inteiro.

Se o valor de μ é muito mais próximo de um dos autovalores, por exemplo E_l , do que de qualquer um dos outros, então $(\overline{\mathbf{H}} - \mu \mathbf{I})^{-m} \overline{\mathbf{F}}^{(0)}$ tem sua componente dominante ($a_l \gg a_i, i = 1, \dots, n; i \neq l$) na direção do autovetor $\overline{\mathbf{F}}_l$. Desta forma a solução aproximada da equação da *Potência Inversa* tem a forma

$$(\overline{\mathbf{H}} - \mu \mathbf{I})^{-m} \overline{\mathbf{F}}^{(0)} \simeq \frac{a_l}{(E_l - \mu)^m} \overline{\mathbf{F}}_l \quad (3.11)$$

onde o autovetor $\overline{\mathbf{F}}_l$ e o autovalor E_l são obtidos, para ajustes refinados dos parâmetros μ e da potência m . Desta mesma forma, variando-se μ desde o mínimo (fundo) até o máximo (topo) do perfil genérico de um potencial, encontraremos todos os outros $(n-1)$ autovalores e seus respectivos autovetores (estados ligados) neste perfil de potencial.

Para obtermos os autovetores correspondentes a dois ou mais estados degenerados, de um dado perfil de potencial, usamos a técnica de ortogonalização *Gram-Schmidt* para

um multiplete degenerado. Este método numérico iterativo ficou conhecido na literatura como *Método da Potência Inversa*.

Os principais passos deste procedimento iterativo podem ser sumarizados como abaixo:

- (i) Escolher : $\mu = E_i^{(0)}$;
- (ii) Aplicar: $\bar{\mathbf{f}}^{(m)} = \left(\bar{\mathbf{H}} - E_i^{(m-1)} \mathbf{I} \right)^{-1} \bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$;
- (iii) Normalizar: $\bar{\mathbf{F}}^{(m)} = \bar{\mathbf{f}}^{(m)} / \langle \bar{\mathbf{f}}^{(m)} | \bar{\mathbf{f}}^{(m)} \rangle$;
- (iv) Calcular autovalor: $E_i^m = \langle \bar{\mathbf{F}}^{(m)} | \bar{\mathbf{H}} | \bar{\mathbf{F}}^{(m)} \rangle$;
- (v) Precisão do autovalor: se $| E_i^m - E_i^{m-1} | > \varepsilon$ volta-se ao passo (ii) com $m = m + 1$;
- (vi) Voltar ao passo (i): Calcular o próximo autovalor e autovetor.

O método pode ser facilmente implementado computacionalmente para o cálculo dos autovalores e autovetores, com m sendo o número de interações. O grau de precisão exigido com a escolha de ε determinará um tempo máximo necessário para se completar o processo iterativo. O valor de ε , adotado em grande parte deste trabalho, foi de $\varepsilon = 10^{-12}$ meV. Sendo assim, com cerca de duas a quatro interações consecutivas a convergência é atingida quando $| E_i^m - E_i^{m-1} | < 10^{-12}$. Além disso, para aumentarmos a velocidade de convergência, cada nova interação é sempre iniciada com um novo valor do parâmetro $\mu = E_i^{(m-1)}$, igual ao valor determinado no passo anterior.

Como, em geral, cada portador (elétron ou buracos) tem vários estados ligados num dado perfil de potencial, para aumentarmos a velocidade de convergência escolhemos não apenas uma única função de onda inicial $\bar{\mathbf{F}}^{(0)}$ e um valor de μ , mas sim uma função e um valor de μ distintos para uma tentativa inicial cada vez que iniciamos o cálculo de um novo estado dos portadores. Claro que os valores de μ escolhidos para os estados de

buracos ou de elétrons estarão nos intervalos de energia determinados pelos respectivos *band ffsets*, ΔE_v e ΔE_c .

A escolha de $\bar{\mathbf{F}}^{(0)}$ pode ser sempre feita de tal forma que essas funções possuam características, como as necessárias simetria e/ou paridades das autofunções de cada estado, além do número de componentes que são identicamente zero. As funções de ondas escolhidas como tentativa inicial foram as de um oscilador harmônico simples, por serem de fácil implementação numérica na distribuição dos valores em cada sítio da rede, além de possuírem as desejadas características (paridades e simetrias) para cada um dos autoestados, como foi exposto acima.

As funções $\bar{\mathbf{f}}^{(m)}$, na equação do passo (ii), podem ser obtidas reescrevendo-as num esquema implícito $(\bar{\mathbf{H}} - \mu\mathbf{I}) \bar{\mathbf{f}}^{(m)} = \bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$ o que resulta num sistema de equações lineares algébricas de dimensão $M \times N$. Uma vez que o operador matricial é tridiagonal de dimensão $(M \times M)$, possuindo um grande número de zeros, a solução deste sistema de equações pode ser resolvido, com maior precisão, usando-se algoritmos para uma matriz banda. Essa equação implícita pode ser escrita na forma:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_{1,1} - \mu\mathbf{I} & \mathbf{H}_{1,2} & 0 & 0 \\ \mathbf{H}_{2,1} & \mathbf{H}_{2,2} - \mu\mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_{3,2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \mathbf{H}_{N-1,N-2} & \mathbf{H}_{N-1,N} \\ 0 & \dots & 0 & \mathbf{H}_{N,N} - \mu\mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1^{(m)} \\ \mathbf{f}_2^{(m)} \\ \mathbf{f}_3^{(m)} \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{N-1}^{(m)} \\ \mathbf{f}_N^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1^{(m-1)} \\ \mathbf{F}_2^{(m-1)} \\ \mathbf{F}_3^{(m-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{F}_{N-1}^{(m-1)} \\ \mathbf{F}_N^{(m-1)} \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

A descrição deste método numérico pode ser finalizada, admitindo-se que as funções de onda decaiam a valores desprezíveis para distâncias suficientemente longe da região de maior importância (próximo da região do poço) do sistema. Assim, os autoestados devem satisfazer a condição de contorno:

$$\mathbf{F}_0(\pm L) = \mathbf{F}_1(\pm L) = \dots = \mathbf{F}_N(\pm L) = 0,$$

onde $\pm L$ definirão as fronteiras (infinitos) da região de simulação. Esta condição torna-se equivalente a se trazer o infinito para uma proximidade numérica, controlável ou administrável. A escolha destes extremos é feita de forma que uma variação em L não influencie apreciavelmente os resultados obtidos para os autovalores quando calculamos uma estrutura eletrônica para dado potencial. Na maioria das situações o espaçamento da grade de discretização utilizado foi $a = 1 \text{ \AA}$ e o tamanho da rede adotado para as simulações foi $2L = 1000 \text{ \AA}$.

Esse método, além de fácil implementação, tem se mostrado bastante estável e de rápida convergência permitindo-nos calcular a estrutura eletrônica de poços quânticos com perfis de potenciais arbitrários tais como triangular, parabólico, autoconsistente, além de ser imediato a inclusão de outros tipos de potenciais, como nos casos de campo elétrico, campo magnético e de “*strain*” nas interfaces. Nas próximas seções, apresentaremos algumas aplicações desse método numérico para o estudo das energias de ressonâncias em espectros de luminescência de uma estrutura “*delta-doping*” do tipo *nipi*.

3.2 Modelo Delta-Doping *Nipi*

Estudos das estruturas *nipi* receberam considerável interesse após os trabalhos pioneiros de *Dohler* e colaboradores [3], onde se encontram as primeiras análises detalhadas de dopagens de camadas periódicas *n* e *p*, separadas por uma zona intrínseca de alguns poucos ângstrons de largura. Nessas homoestruturas *nipi*, as impurezas produzem um potencial oscilante que confina elétrons e buracos em diferentes regiões espaciais. Para estes sistemas semicondutores, onde os elétrons e buracos estão espacialmente separados, são observados longos tempos de recombinação radioativa dos portadores. A possibilidade de ajuste (*tunning*) da energia do *gap* com a variação da densidade dos portadores livres permite um certo controle das propriedades eletrônicas tais como condutividade,

luminescência, absorção óptica e tempos de recombinação. Em tais estruturas *nipi* pode ser observado um *blue shift* do *gap* de energia efetivo com o aumento da potência de excitação do laser. *Döhler et al.* [3] demonstraram que este comportamento ocorre desde que a amplitude da carga espacial decresce com o aumento da concentração de portadores devido a separação espacial entre os portadores elétrons e buracos.

Com a otimização das técnicas de crescimento e de controle de dopagem, nos anos recentes, tornou-se possível crescer finas camadas dopadas e, atualmente, podem ser sistematicamente construídas estruturas “*delta-doping*” com dopantes confinados em poucas camadas atômicas. *Johnston et al.* [4] apresentaram um estudo sistemático da fotoluminescência (PL) de uma estrutura “*delta-doping*” consistindo de camadas dopadas com Si e C em GaAs. Tais estruturas ficaram conhecidas por super-redes dente-de-serra (*sawtooth*) por causa da combinação do potencial tipo V, criado por dopagem tipo *n*, e do potencial V-invertido criado pela dopagem tipo *p*. Esses autores encontraram efeitos de relaxação para os extremos das bandas nos experimentos de PL, por eles denominados de: *blue shift* do *gap* de energia efetivo com o aumento da potência de excitação e evolução temporal dos extremos da banda.

Bastola et al. [5] determinaram uma dependência quantitativa para o *gap* efetivo com a intensidade da excitação da luz em uma estrutura *nipi* e encontraram uma dependência logarítmica entre o *blue shift* e a intensidade de excitação da luz. Eles confirmaram experimentalmente tal comportamento em amostras *nipi* de AlGaAs.

Heteroestruturas *nipi*, as quais envolveriam uma heteroestrutura e camadas dopadas *n* e *p*, já estão sendo largamente usadas na fabricação de moduladores de fase [6] e *optically addressed spatial light modulator* (O-SLMs). O uso da dopagem tipo delta para se produzir finas camadas *n* e *p* foi implementado por *Larsson e Maserjian* [7]. Para aplicação em dispositivos onde curtos períodos são requeridos, o tamanho de cada camada dopada aproxima-se da distância média entre os dopantes, levando a fortes flutuações no potencial de confinamento. O uso de “*delta-doping*” dentro de poços quânticos pode melhorar esses dispositivos reduzindo essas flutuações nos potenciais ou como moduladores

de amplitude baseado no *efeito Stark* quântico confinado. *Batty e Allsopp* [8] propuseram uma estrutura alternativa formada por camadas *nipi* em uma super-rede ou em múltiplos poços quânticos (MQW), com o intuito de se aumentar o deslocamento *Stark*. A seguir, estaremos estudando as transições ópticas em sistemas *nipi* em MQW de GaAs-AlGaAs, uma colaboração com o grupo do Laboratório de Semicondutores, CETUC, Pontifícia Universidade Católica, RJ.

3.2.1 O Modelo Teórico

Os espectros de luminescência para estruturas isoladas δ -doping, tipo *n* ou *p*, foram estudadas por *Sipahi et al.* [9] usando o modelo de *Luttinger* (valência) mais o modelo parabólico (condução) ou o modelo de *Kane* 8×8 para calcular a estrutura eletrônica autoconsistente. Eles incluíram os efeitos de correlação e troca em seus estudos e analisaram os efeitos da temperatura nos espectros de luminescência (transição direta). Para uma comparação com experimentos foi necessário uma estimativa para a renormalização do *band-gap* e a introdução de um excesso (em torno de 25%) de carga espacial para se diminuir a energia ressonante em suas simulações dos efeitos fóton-induzidos na excitação óptica.

Aqui nós queremos analisar um sistema bastante mais complexo que é composto de multicamadas acopladas onde as dopagens estão localizadas no centro do poço (tipo *n*) ou da barreira (tipo *p*) em um poço quântico. Essas fortes restrições espaciais para os estados eletrônicos torna bastante difícil a determinação exata do número de estados de impurezas ionizados em cada uma das camadas. Portanto, no cálculo de transições ópticas faz-se necessário usar o modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para se levar em conta os importantes acoplamentos e misturas entre as camadas *n* e *p* através da inerente mistura entre os estados das bandas de valência como também o acoplamento entre as bandas de valência e de condução naturalmente presentes neste modelo de Hamiltoniano. Quanto menor a separação entre as camadas *n* e *p* mais forte será a interação entre elas. Assim, muitos dos resultados obtidos em um cálculo autoconsistente para camadas isoladas, não poderiam

ser aplicados diretamente neste sistema que estamos interessados.

Para se estudar o espectro de luminescência numa estrutura *nipi* em um poço quântico escolhemos usar um potencial linear, com forma de um V, para simular a localização dos portadores majoritários em cada camada dopada. Eles estarão localizados nos centros dos poços (camadas *n*) e das barreiras (camadas *p*) respectivamente.

Uma assimetria espacial, como a induzida por um campo elétrico uniforme ou um potencial sem centro de inversão, quebrará a degenerescência de *Kramer* dos estados eletrônicos para todos os valores de $\mathbf{k} \neq 0$. Um campo magnético axial também levanta esta degenerescência. Deste modo, para uma perfeita camada *nipi* onde as duas camadas *p* e *n* tem uma simetria de inversão com respeito ao centro do poço, os *doublets de Kramer* podem permanecer degenerados para todos os valores de \mathbf{k} . Qualquer assimetria espacial faria com que os estados percam essa invariância sob a operação de inversão temporal (“*time-reversal*”), definida, para semicondutores com estrutura *zinblende*, como $\hat{\mathbf{T}} = -i \hat{\sigma}_y \hat{\mathbf{C}} \hat{\mathbf{I}}$, onde $\hat{\sigma}_y$ é a matriz de spin de *Pauli*, com $-i\hat{\sigma}_y$ causando “*spin-flipping*” dos portadores, $\hat{\mathbf{C}}$ e $\hat{\mathbf{I}}$ são os operadores de conjugação complexa e inversão espacial, respectivamente. O Hamiltoniano de *Kane* (energia cinética) mais algum potencial simétrico $V(z)$ (i.e., com centro de inversão) pode comutar com $\hat{\mathbf{T}}$. Além disso, se existirem *s*-regiões de confinamento espacial existirão *s*-níveis de energia, soluções da equação de *Schrödinger*, devido aos acoplamentos (tunelamento) de estados entre estas regiões. A separação de energia entre eles mudará de acordo com a probabilidade de tunelamento de portadores entre as regiões e este fato deve ser incluído em qualquer cálculo para amostras *nipi*. Essas várias dificuldades teóricas que acabam de serem descritas nos fizeram evitar o cálculo autoconsistente e adotar o modelo de confinamento tipo V, para os portadores nas camadas deltas. Contudo, escolhemos este simples modelo de perfil de potencial porque pôde nos dar uma desejável descrição das principais características observadas nos experimentos, onde conseguimos formular uma explicação plausível para várias características envolvidas neste complexo sistema. Em nossa aproximação *não-autoconsistente* os campos elétricos internos foram ajustados pela

dopagem efetiva de cada tipo de portador majoritário na amostra, para produzir cada perfil de confinamento (campo elétrico local), na forma

$$V(z) = \left(\frac{e^2}{\kappa\epsilon_0} n_{eff} \right) z, \quad (3.13)$$

onde κ é a constante dielétrica de cada camada não dopada. Para cada tipo de dopante em uma dada amostra, a concentração efetiva de portadores, n_{eff} , foi escolhida para reproduzir valores calculados para energias de transição entre as bandas de valência e de condução, que estejam de acordo com os valores obtidos para os picos de energia dos espectros PL, para o mais baixo valor de temperatura ($T \simeq 0$). Por outro lado, as posições das *quase-energias* de Fermi, E_F^n e E_F^p , foram incluídas com uma estimativa do conhecimento destes valores para uma “*delta-doping*” isolada, contudo levando-se em conta que os autoestados em nosso sistema podem ter diferentes degenerescências espaciais e múltiplos ramos de energias (dispersão em k -paralelo), além da usual degenerescência de spin. Finalmente, este modelo de ajuste de potencial foi usado para todas as temperaturas, sendo que todos os efeitos devido ao aumento da temperatura, estão embutidos na mudança do *gap* de energia dos materiais do poço e da barreira, que produzirão novos parâmetros de *Kane-Luttinger* em cada valor de T , onde os autovalores são recalculados.

Esta aproximação de potencial linear pode dar resultados satisfatórios somente para o estado fundamental e claramente vai superestimar as energias de todos os estados excitados quando comparado aos valores equivalentes para um potencial autoconsistente em uma camada δ -doping, onde os campos locais decrescem suavemente a zero, quando nos afastamos do centro das camadas dopadas. De qualquer maneira, as mais importantes transições nos experimentos de luminescência ocorrem entre o estados fundamentais dos três tipos de portadores (elétron, buraco pesado e buraco leve). Além disso, a determinação das reais posições das *quase-energias* de Fermi do sistema pode requerer um estudo experimental combinado da absorção óptica e da luminescência em uma amostra, sob iguais condições.

Finalmente, a aproximação descrita acima inclui, de certa forma, os valores não conhe-

cidos da renormalização do *band-gap* na estrutura *nipi* e, possivelmente, um deslocamento excitônico, contribuições estas que estarão sempre presentes nos valores experimentais. Deve-se ressaltar ainda que, para transições ópticas indiretas, os efeitos excitônicos são sempre menores que para as transições diretas.

Os estados eletrônicos para algum perfil de potencial são calculados usando o Hamiltoniano *Weiler-Kane* na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, método que já provou ser uma excelente aproximação para o problema de autovalores, já que o cálculo baseado em primeiros princípios estaria muito aquém de nosso interesse direto neste trabalho. Estes potenciais V para as camadas acopladas são adicionados ao potencial *flat-band* do poço quântico e, então, as soluções

$$[H_{\mathbf{k},\mathbf{p}} + V(z) \mathbf{I}] \Psi_i(\mathbf{k}, x, y, z) = E_i(\mathbf{k}) \Psi_i(\mathbf{k}, x, y, z),$$

para o i^{th} tipo de portador, com uma dada componente de spin, são obtidas com o método descrito anteriormente. O Hamiltoniano utilizado para o ordenamento dos estados de *Bloch* no ponto Γ ($|e+\rangle$, $|hh+\rangle$, $|lh-\rangle$, $|e-\rangle$, $|hh-\rangle$, $|lh+\rangle$), é dado pela Eq. (2.64). Todos os parâmetros do GaAs e AlAs são mostrados no Apêndice A, contudo, a dependência do *gap* de energia (meV) com a temperatura, para GaAs e AlAs é dado por [2]

$$E_g^0(T) = 1519,2 - 0,58 \left[\frac{T^2}{T + 300} \right], \quad (\text{GaAs}) \text{ (meV)}$$

$$E_g^0(T) = 2239,0 - 0,60 \left[\frac{T^2}{T + 408} \right], \quad (\text{AlAs}) \text{ (meV)}$$

respectivamente, com T sendo medido em grau *Kelvin*. Usaremos uma extrapolação linear com a concentração, x , para determinar todos os parâmetros de uma camada $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, ainda que outros tipos de ajustes possam ser usados. Certamente, todos parâmetros e massas efetivas para um dado material vão depender da temperatura através dos respectivos $E_g^0(T)$.

Como último comentário, cada um dos estados de *Bloch* no ponto Γ com “*spin-up*”, $\{|e+\rangle, |hh+\rangle, |lh-\rangle\}$, são estados “*time-reversal*” do conjunto de estados “*spin-down*”, $\{|e-\rangle, |hh-\rangle, |lh+\rangle\}$, por exemplo $|e+\rangle = \hat{\mathbf{T}} |e-\rangle$ assim, uma solução do Hamiltoniano de $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, em um potencial com um centro de simetria, será duplamente degenerada (*doublets de Kramer*).

O i -ésimo estado da banda de condução, para um dado valor de $\mathbf{k}_\rho = (k_x, k_y)$, e para o ordenamento acima dos estados de *Bloch* no ponto Γ , tem uma função com seis componentes, que pode ser escrita na forma:

$$\Psi_i^c(\mathbf{k}, \boldsymbol{\rho}, z) = e^{i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}} \begin{bmatrix} F_1^i(\mathbf{k}, z) |e+\rangle \\ F_2^i(\mathbf{k}, z) |hh+\rangle \\ F_3^i(\mathbf{k}, z) |lh-\rangle \\ F_4^i(\mathbf{k}, z) |e-\rangle \\ F_5^i(\mathbf{k}, z) |hh-\rangle \\ F_6^i(\mathbf{k}, z) |lh+\rangle \end{bmatrix}, \quad (3.14)$$

onde $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ é a posição do portador livre no plano - xy e $F_1^i(\mathbf{k}, z)$ são as componentes ou funções envelope na direção z . Uma notação semelhante é usada para os estados de valência.

O conjunto de autovetores $\{\Psi_i(\mathbf{k}, \boldsymbol{\rho}, z)\}$ e seus respectivos autovalores $\{E_i(\mathbf{k})\}$, para todos os portadores e para cada vetor de onda \mathbf{k}_ρ , são calculados usando o esquema combinado de diferenças finitas e do método da *Potência Inversa* discutidos na seção (3.1).

3.3 Resultados e Discussão

Os perfis dos potenciais em uma estrutura *nipi*, dentro do modelo descrito acima, e as densidades de probabilidades para os primeiros dois autoestados de elétrons e para alguns de buracos, com $\mathbf{k}_\rho = 0$, são mostrados na Fig. (3-1).

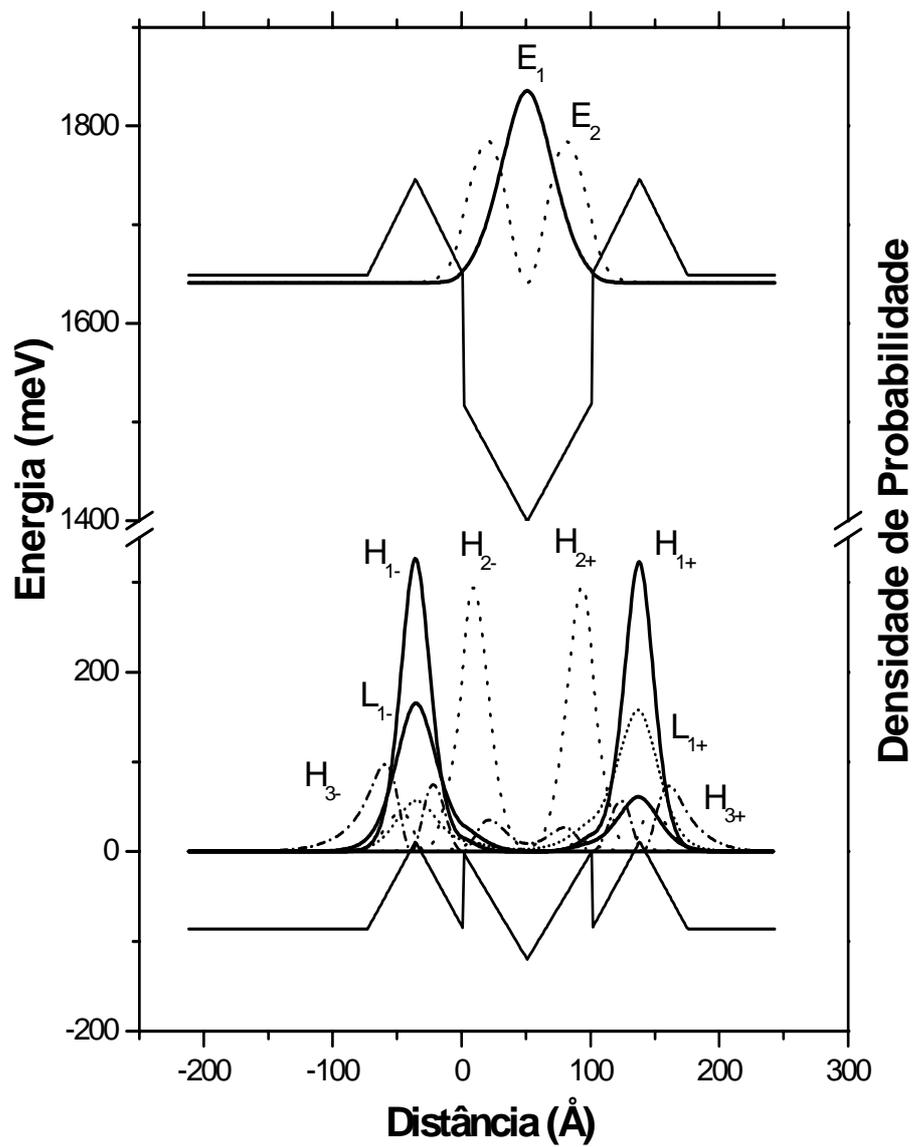


Figura 3-1: Perfil de potencial em uma estrutura *nipi*. Nesta figura mostramos a densidade de probabilidade para os dois autoestados de elétrons e para alguns estados de buracos.

O estado fundamental para elétrons tem seu autovalor, E_1^c , dentro da camada com dopagem n , isto é, $E_1 < E_g(T)$ para GaAs, enquanto o segundo estado tem energia, $E_2^c > E_g(T)$. Note também a duplicidade (degenerescência espacial) dos estados de buracos, H_{1+} e H_{1-} , localizados nas camadas p das barreiras do lado direito e esquerdo, respectivamente. Note que os estados H_{2+} e H_{2-} são “puxados” para o lado direito e esquerdo (em direção das interfaces) do poço, devido a presença da camada com dopagem n , dentro do poço de GaAs. Observe também, para alguns estados de buracos, a ocorrência de picos menores nas diferentes regiões do potencial da heteroestrutura. Isto é uma indicação do grau de acoplamento entre as camadas dopadas, determinado tanto pela separação como pela altura das barreiras que governarão as probabilidades de tunelamento em cada nível para cada uma das regiões. Este fato é de grande importância para se explicar uma propriedade observada no espectro de luminescência onde, para uma dada temperatura crítica, o espectro que é determinado por transições interbandas que dependem das regras de seleção (paridade), passa a depender da integral de “*overlap*” entre os estados iniciais e finais envolvidos numa mesma banda. Desta forma, podemos estimar as temperaturas críticas onde as transições intrabanda (excitações térmicas), para uma dada amostra $nipi$, mudam de caráter. Mais especificamente, as transições ópticas na luminescência mudam de indireta (recombinação entre estados localizados nos dois materiais diferentes) para direta (recombinação entre estados localizados na camada GaAs).

Os cálculos das dispersões de energias dos portadores, para $T = 170 K$, para cada camada da amostra $nipi$, com dopagens nominais, $n = 1,8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (poço), $p = 2,3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (barreira), e larguras $L_p = 100 \text{ \AA}$, $L_b = 70 \text{ \AA}$, é apresentado na Fig. (3-2). Para auxiliar o entendimento dos processos de luminescência e de excitação térmica no sistema, estamos também mostrando as posições corretas onde se localizam as relações de dispersão [parte (d)] dos portadores livres ao longo das camadas. Para simplificar a figura, omitimos a camada p do lado esquerdo, assim como, por falta de espaço, só foi mostrada uma dispersão dos estados de valência no lado esquerdo da camada

GaAs.

Na parte (a) da Fig. (3-2) mostramos as dispersões calculadas para os dois primeiros estados de elétrons na camada n -dopada localizada dentro do poço quântico, com o quase-nível de Fermi na primeira banda. O vetor de onda \mathbf{k} é apontado ao longo da direção mostrado na parte (d). Na parte (b) mostramos as energias de dispersão para os primeiros dois estados de buracos, denominados HH_{2-} e LH_{2-} , no lado esquerdo da camada de GaAs, também vistos em (d). Note que cada um tem uma multiplicidade 4 devido ao acoplamento entre as quatro regiões de confinamento, isto é, autovalores ocorrendo entre as posições 2 e 3 mostrados na parte (d). Suas autofunções devem ter picos em cada região do potencial e, a altura dos picos estarão associados com as probabilidades de tunelamento entre elas. A separação entre as energias de cada multiplete não pode ser vista na escala da figura, devido a grande separação entre as camadas simétricas p e o centro do poço quântico. Associados com estas multiplicidades espaciais, existem também as degenerescência do *dublete de Kramer* dos portadores. Na parte (c) são mostradas as dispersões para os dois primeiros estados de buracos localizados na camada p do lado direito, denominadas HH_{1+} e LH_{1+} . O estado fundamental HH_{1+} (HH_{1-}) no lado direito (esquerdo mas não mostrado) da camada p tem multiplicidade 2, desde que eles aparecem com energias localizadas entre as posições 3 e 4, indicadas na parte (d). O nível LH_{1+} tem multiplicidade espacial 4. As dispersões para estes estados mostram claramente a influência da presença do potencial V dentro do poço quântico, produzido pela camada- n , induzindo não-parabolicidades adicionais às já bem conhecidas e originadas pelas misturas e acoplamentos de estados dentro do modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. O mesmo efeito ocorre, de forma mais forte, para os estados LH_{2-} e LH_{2+} por estarem mais próximos do topo do *offset* (próximo do contínuo) da banda de valência e, assim, os tunelamentos entre as regiões vizinhas ficam mais acentuados (fáceis). Para mostrar essa multiplicidade nas dispersões, nós recalculamos as energias desta mesma amostra, para $T = 40 \text{ K}$. Contudo, foi introduzido uma pequena assimetria espacial ($\simeq 1 \text{ \AA}$) na posição das duas camadas tipo p . Os resultados são mostrados na Fig. (3-3). As partes (a), (b) e (c) são

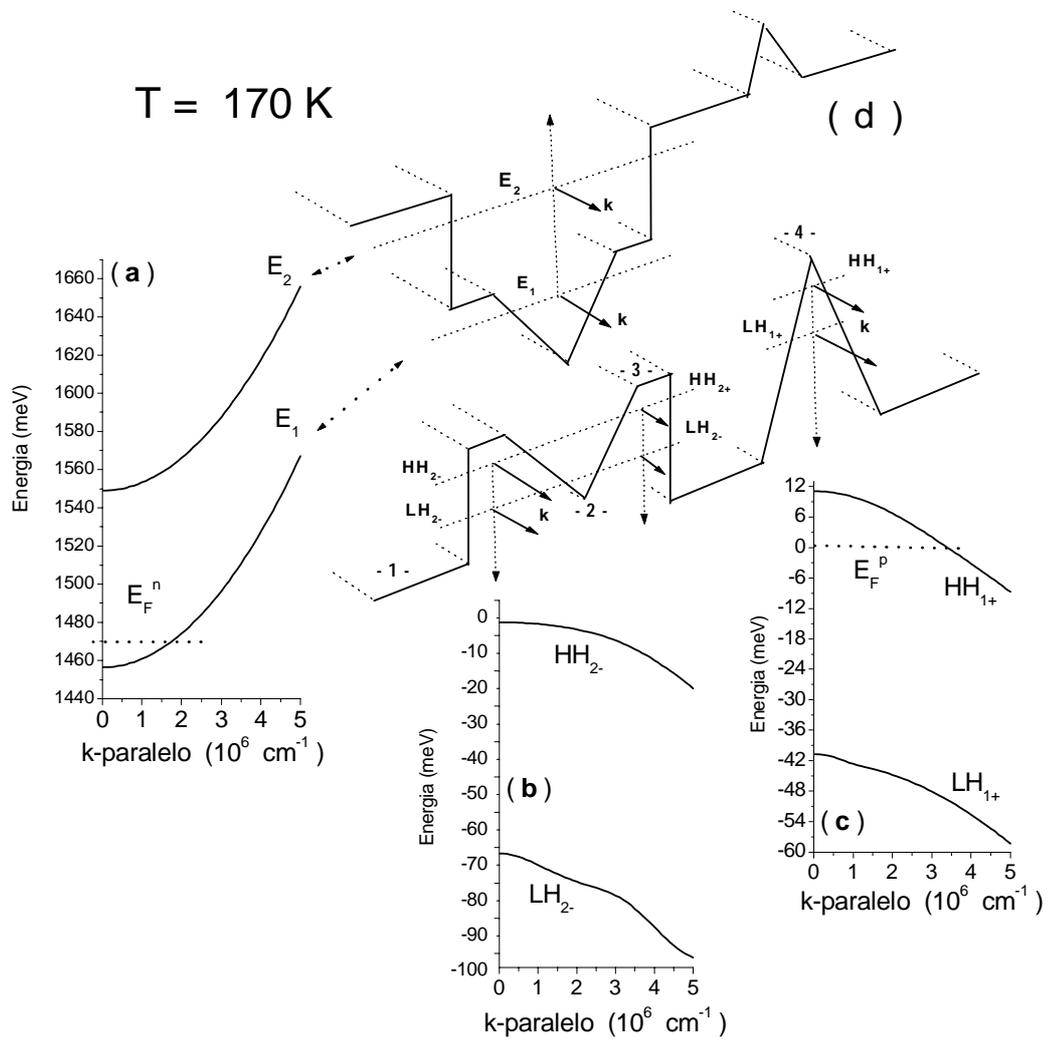


Figura 3-2: Energia de dispersão dos portadores em uma estrutura *nipi* para $T = 170\text{ K}$. Na parte (a) mostramos as dispersões para os primeiros estados de elétrons e na parte (b) e (c) para alguns estados de buracos. O perfil de potencial é mostrado na parte (d).

Amostra	n (10^{12}cm^{-2})	p (10^{12}cm^{-2})	L_p (Å)	L_b (Å)
498	0,42	0,5	100	78
502	0,5	0,5	100	70
482	1,8	2,3	100	70
referência	não dopada	não dopada	100	-

Tabela 3.1: Parâmetros da região do poço (n) e barreira (p) para amostras *nipi*.

as dispersões para os mesmos estados descritos na Fig. (3-2), mas com $T = 40$ K. A parte (d) mostra uma ampliação nas dispersões espaciais com duplicidade 2 dos estados de buracos HH_{1+} e HH_{1-} localizados nas camadas p como também para os estados HH_{2+} e HH_{2-} localizados na camada GaAs. Isso torna bem claro que quando o autovalor está próximo do contínuo da banda de valência (entre as posições 1 e 2) esta separação de energia será maior uma vez que eles podem tunelar mais facilmente entre as regiões de confinamentos vizinhas. Claro que as camadas com largas separações espaciais tornar-se-ão degeneradas. Nos cálculos apresentados neste exemplo usamos um período isolado com duas camadas p para simular uma estrutura *nipi*. Em múltiplos poços quânticos a multiplicidade dos estados certamente crescerá, o que tornaria ainda mais difícil um cálculo autoconsistente.

3.3.1 *Nipi*-Delta Doped em Múltiplos Poços Quânticos

As energias de recombinação elétron-buraco para espectros de PL em estruturas *nipi* foram calculadas e comparadas com os resultados experimentais do grupo do CETUC-PUC-RJ. As posições dos picos de PL como função da temperatura são mostrados na Fig. (3-4), para três amostras diferentes: (a) 498, (b) 502, e (c) 482. As concentrações nominais dessas amostras e a espessura das regiões do poço e barreira estão sumarizados na tabela 3.1.

As linhas contínuas são os resultados teóricos enquanto os dados experimentais para as energias de transições, E_p , são representados pelos diferentes símbolos. Os círculos abertos correspondem às transições para as amostras de referência ou seja uma não-

$T = 40 \text{ K}$

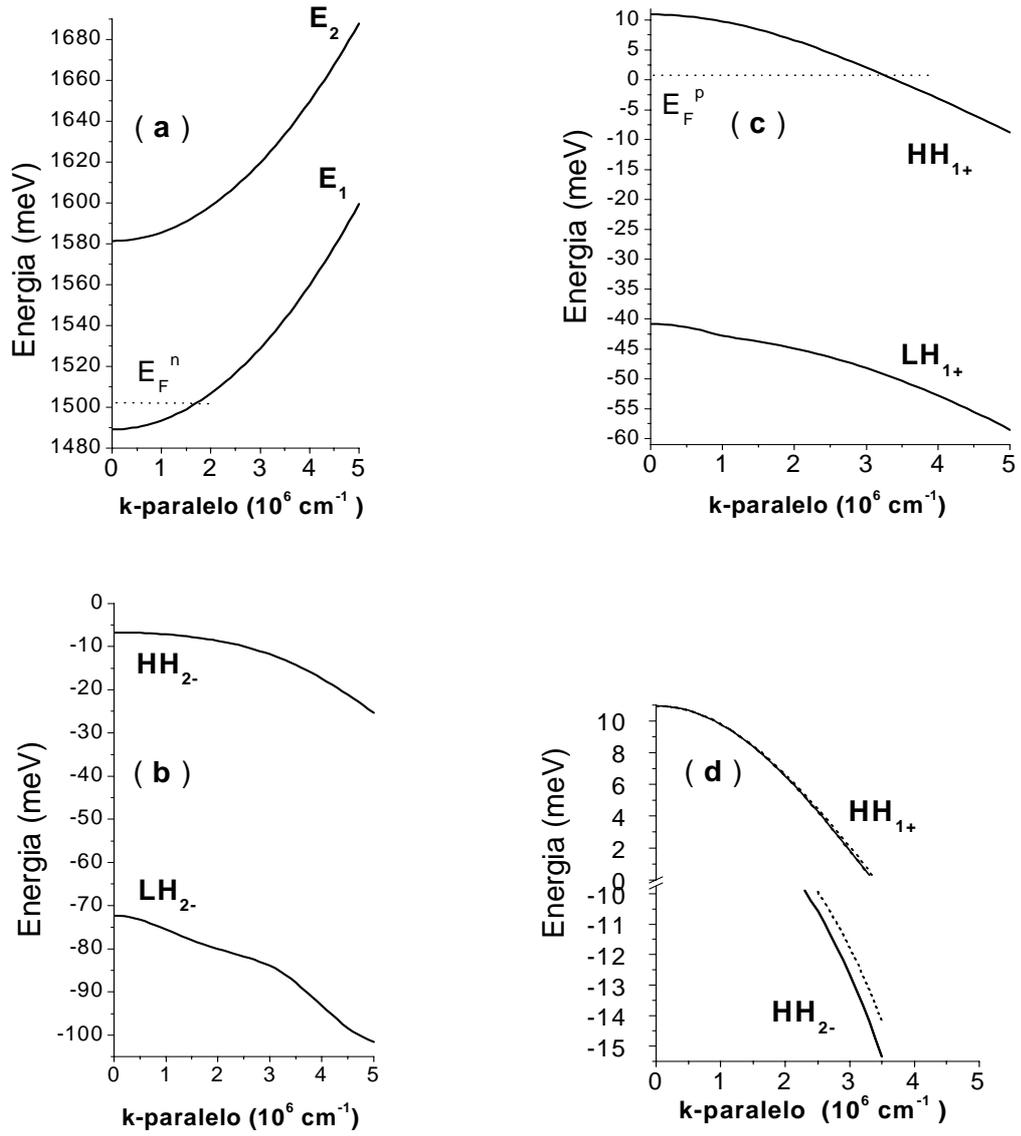


Figura 3-3: Relação de dispersão dos elétrons e buracos. A figura mostra os mesmos estados descritos na Fig. (3-2), mas com $T = 40 \text{ K}$ e introduzido uma pequena assimetria espacial ($\simeq 1 \text{ \AA}$) na posição das duas camadas tipo p .

dopada enquanto os triângulos cheios correspondem as transições para as amostras *nipi*, medidas com uma intensidade de excitação de $4,4 \text{ W/cm}^2$. Em primeiro lugar podemos observar que para altas temperaturas as energias de transições, E_P , da amostra dopada e da não-dopada, são essencialmente as mesmas. Contudo para baixas temperaturas, E_P da amostra dopada difere bastante da referência, sugerindo que a introdução das camadas “*delta-doping*” modificaram fortemente as propriedades ópticas das estruturas MQW. De fato dois comportamentos bem distintos com o aumento da temperatura são observadas nas amostras *nipi*. Abaixo de um certo valor, que definimos como temperatura crítica (T_c), a emissão observada ocorre para energias menores do que o *gap* fundamental, o que pode ser identificado pelo valor E_P da amostra de referência. Por outro lado, acima de T_c , a variação da energia do pico dominante do espectro de PL com a temperatura segue o mesmo comportamento que o da amostra de referência. O valor desta temperatura crítica, diferente para cada amostra, tem valor menor para amostras com menores concentrações nas camadas dopadas. Através desta figura podemos estimar os valores de T_c como aproximadamente 60 K , 100 K e 180 K para as amostras 498, 502 e 482, respectivamente.

As energias de emissão, como função da temperatura, foram calculadas usando o Hamiltoniano de *Weiler-Kane* na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ descrito previamente. Com esses resultados teóricos podemos identificar as transições envolvidas. Os valores experimentais de E_P para a amostra de referência segue a primeira transição elétron-buraco pesado no poço quântico ($e1_{QW} - hh1_{QW}$), representados pelas linhas tracejadas. Nas amostras *nipi*, as energias dos picos de PL, medidos acima de T_c , são também melhores descritos pela transição que envolve os níveis de elétron e de buracos dentro do poço quântico de GaAs QW. Contudo, abaixo de T_c os pontos experimentais seguem o comportamento com a temperatura da transição ($e1_{QW} - hh1_b$), isto é, do primeiro nível do elétron no poço de GaAs para o primeiro nível de buraco pesado no potencial invertido V na barreira AlGaAs (camada *p*), uma transição espacialmente indireta. Nesses espectros, T_c foi por nós interpretado como aquela temperatura na qual a natureza da transição muda de

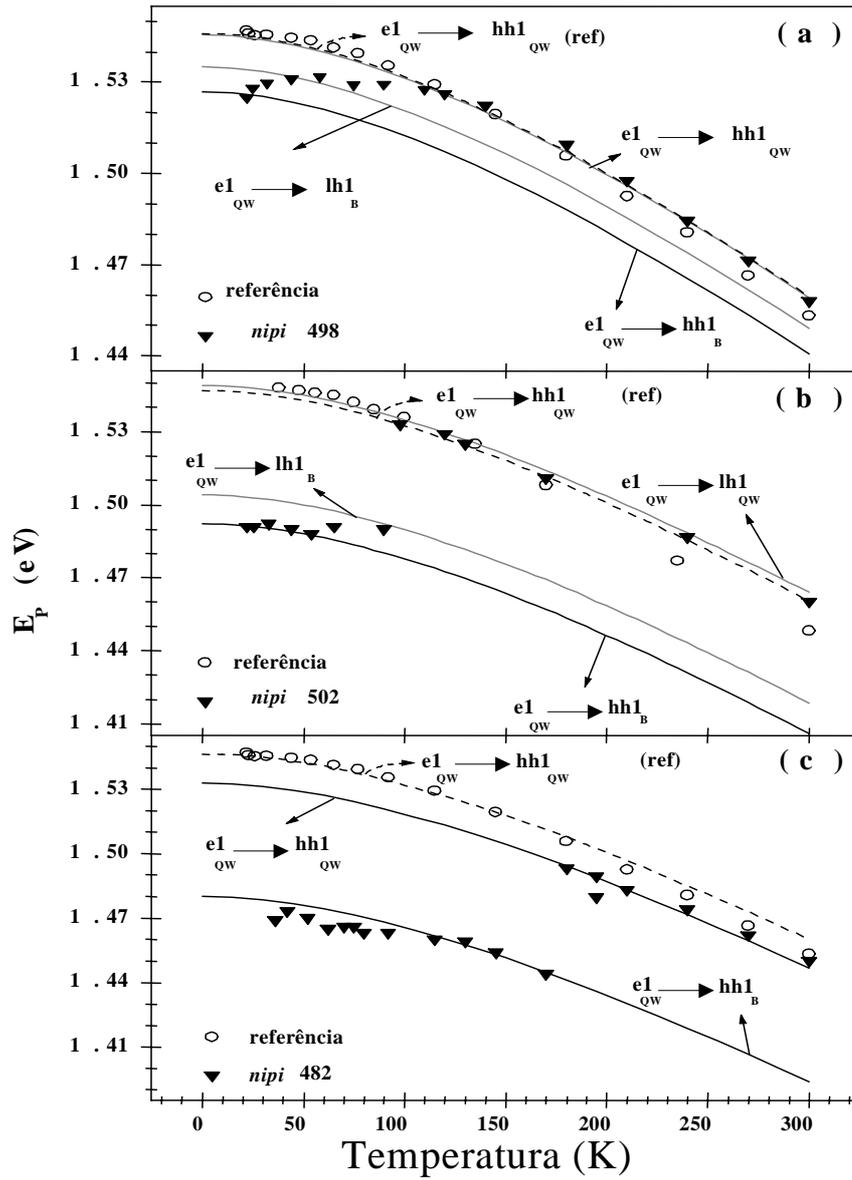


Figura 3-4: Energias de recombinação elétron-buraco para espectros de PL em estruturas *nipi* para as amostras: 498 (a), 502 (b), 482 (c) e não-dopada (referência). As linhas contínuas correspondem aos resultados teóricos. Os pontos correspondem aos resultados experimentais.

Amostra	V_P (meV)	T_c^{exp} (K)	T_c^{calc} (K)
498	44	< 60	100
502	52	100 ± 10	89
482	98	180 ± 10	169

Tabela 3.2: Comparação entre os valores teóricos e experimentais de T_c quando a potência de excitação é $4,4 \text{ W/cm}^2$.

“indireta” para “direta”. Este valor dependerá da estrutura da amostra e da potência de excitação do laser. Na tabela 3.2 os valores experimentais de T_c estão sumarizados, sendo V_P a altura invertida do potencial - V nas barreiras [Fig. (3-1) ou parte (d) da Fig. (3-2)]. Os valores de V_P foram calculados usando Eq. (3.13). Podemos observar que T_c cresce com o aumento de V_P . Os valores de T_c^{calc} incluídos na tabela 3.2 são valores estimados tomando a diferença de energia entre o quase-nível de Fermi no potencial - V invertido das barreiras e um nível de buraco ressonante na camada GaAs. Esta concordância entre valores teóricos e experimentais significa que a mudança de transição indireta para direta ocorre em virtude da excitação térmica que transfere buracos abaixo de E_F^p (ou, se preferir, elétrons) da região da barreira de AlGaAs (do poço de GaAs) para a região do poço de GaAs QW (para a barreira AlGaAs). Esta excitação térmica abrirá o canal para a transição direta ao mesmo tempo que diminuirá a recombinação no canal de transição indireta. Mais especificamente, quando as energias do buraco na barreira e do buraco no poço quântico tornam-se ressonantes, existirá uma probabilidade mais efetiva de transferência de portadores entres as regiões, favorecendo a transição óptica espacial direta para os estados dentro do poço quântico. Desde que a energia dos buracos no poço quântico depende do nível de dopagem, T_c também dependerá, através de E_F^p . Finalmente, podemos também entender a dependência de T_c com a potência da excitação óptica, pois a diferença de energia entre os estados do poço e da barreira diminuirá quando a potência da excitação for aumentada, levando a uma consequente redução esperada, e realmente observada, para T_c .

No próximo capítulo vamos discutir os formalismos analítico e numérico para o cálculo das propriedades de transporte em dupla barreira ressonante.

Bibliografia

- [1] C. Juang, K. J. Kuhn, R. B. Darling, Phys. Rev. B, **41** 12047–12053, (1990).
- [2] Y. P . Varshni. Physica, **34**, 149 (1967).
- [3] Döhler, H. Kunzel, D. Olego, K. Ploog, P. Ruden, H. J. Stolz, G. Abstreiter, Phys. Rev. Letter. **47**, 864 (1981).
- [4] M. B. Johnston, M. Gal, Li, and G. Li, C. Jagadish, J. Appl. Phys. **82**, 5748 (1997).
- [5] S. Bastola, S. J. Chua, S. J. Xu, J. Appl. Phys. **83**, 1476 (1998).
- [6] W. Batty and D. W. E Allsop, IEEE Photon. Technol. Lett **7**, 635 (1995).
- [7] A. G. Larsson, J. Marsejian, Optical Engineering **31**, 1576 (1992).
- [8] W. Batty, D. W. E. W. Allsopp, Electron Lett. **29**, 2066 (1993).
- [9] G.M Sipahi, R. Enderlein, L, M Scolfaro, J. R. Leite, Phys. Rev. B **53**, 9930 (1996).

Capítulo 4

Métodos Analíticos e Numéricos para Propriedades de Transporte: Aplicações em Sistemas de Barreiras Duplas

Desde a pioneira proposta de *Esaki* e *Tsu* sobre as heteroestruturas semicondutoras, o tunelamento de elétrons [1] e buracos [2] tem sido objeto de considerável interesse tanto teórico como experimental.

Enquanto o transporte de elétrons é bem entendido, a complexidade das estruturas das bandas de valência, com uma forte influência nas propriedades ópticas e de transporte em sistemas de duas dimensões (2D), dá origem a uma variedade de fenômenos que continuam a merecer o interesse dos pesquisadores. Os efeitos de um campo magnético sobre o transporte tem sido bastante estudado e onde o magneto-tunelamento tornou-se extremamente útil como técnica de caracterização espectroscópica [3]. Quando um campo magnético é aplicado paralelo à corrente, o momento transversal dos elétrons num poço quântico, torna-se quantizado. Numa primeira aproximação, onde se despreza a pequena *separação Zeeman* e os acoplamentos com a banda de valência, este sistema na banda de

condução pode ser descrito através de um modelo de bandas parabólicas onde as energias adquirem valores discretos devido a quantização espacial. As energias destes níveis de *Landau*, $E_n = \hbar\omega_c (n + \frac{1}{2})$, associadas com as funções de onda do oscilador harmônico no plano $x - y$, mostram uma dependência linear com o campo através da frequência ciclotrônica, $\omega_c = (\frac{eB_0}{cm})$. Para valores fixos de B_0 , o tunelamento magnético, na banda de condução, ocorre quando a energia do elétron incidente torna-se ressonante com algum desses níveis de *Landau* [4].

Os efeitos de campo magnético sobre o buraco pesado (HH) e o buraco leve (LH), com dispersões de energia altamente não-parabólicas, são bem mais complexos que no caso do Hamiltoniano parabólico. A estrutura eletrônica para os buracos dentro de um poço quântico é fornecida, por exemplo, pela espectroscopia de tunelamento magnético ressonante [5]. A formação dos níveis da banda de valência também tem sido experimentalmente estudada através de técnicas ópticas em diferentes heteroestruturas [6].

Uma importante diferença entre o tunelamento magnético de elétrons e de buracos é que a corrente I-V dos buracos mostra forte não-linearidade devido as regiões de cruzamento e anti-cruzamento em suas dispersões de energia. No caso de elétrons, a não conservação do índice de *Landau* durante o tunelamento é somente possível via processos de espalhamento assistido, devida a impurezas ou fônons LO, por exemplo. Para banda de valência, a não-conservação do índice de tunelamento pode ocorrer sem a assistência de qualquer processo de espalhamento, visto que os estados de buraco, no espaço de *Hilbert*, exibem uma forte mistura entre diferentes tipos de portadores.

Um grande número de trabalhos teóricos tem sido desenvolvidos para simular e estudar o tunelamento ressonante em sistemas de baixa dimensionalidade. A técnica da matriz de transferência, desenvolvida por *Wessel* e *Altarelli* [7] na aproximação de massa efetiva, é certamente uma das mais usadas. Entretanto, é bem conhecido que essa técnica é numericamente instável [8] quando aplicada a sistemas cuja largura das barreiras excede alguns poucos ângstroms ($\simeq 50 \text{ \AA}$ para a direção de crescimento (100)).

Iniciamos este capítulo apresentando dois formalismos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, na aproximação de mas-

sa efetiva multibandas, para o cálculo das propriedades de transporte dos buracos em sistemas com duplas barreiras e que são bastante superiores em estabilidade numérica se comparados com a técnica da matriz de transferência. Na seção (4.1) apresentamos o formalismo da matriz de espalhamento (analítico) que incorpora, de forma muito simples, os efeitos de “*strain*” nas interfaces e que estamos inicialmente explorando para o cálculo do transporte em múltiplas direções. Na seção (4.2) apresentamos o formalismo baseado nas técnicas de diferenças finitas (numérico) que está sendo adaptado ao cálculo da corrente de tunelamento na presença de campos magnéticos longitudinais ($\mathbf{B} // \hat{\mathbf{z}}$). Nas seções (4.3) e (4.4), faremos algumas aplicações simples desses formalismos. Na seção (4.5) apresentaremos uma parte inicial dos estudos do tunelamento de duplas barreiras submetidas a campos magnéticos na direção da corrente. Em especial, o cálculo dos estados estacionários como função dos campos elétricos e magnéticos.

4.1 Formalismo da Matriz de Espalhamento

A técnica da matriz de espalhamento [9], por definição, consiste em relacionar os coeficientes, $(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_n)$, das ondas que incidem nas interfaces de uma heteroestrutura [veja a Fig. (4-1)] com os coeficientes das ondas que são espalhadas (refletidas), $(\mathbf{a}_n, \mathbf{b}_0)$, mais precisamente

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

O procedimento básico para a obtenção da matriz de espalhamento, na aproximação de massa efetiva, envolve as seguintes etapas:

- Inicialmente, resolve-se a equação de massa efetiva no cristal perfeito (*bulk*) para um determinado valor de energia E e, então, determinam-se as funções envelopes $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, para cada tipo de partícula (buracos):

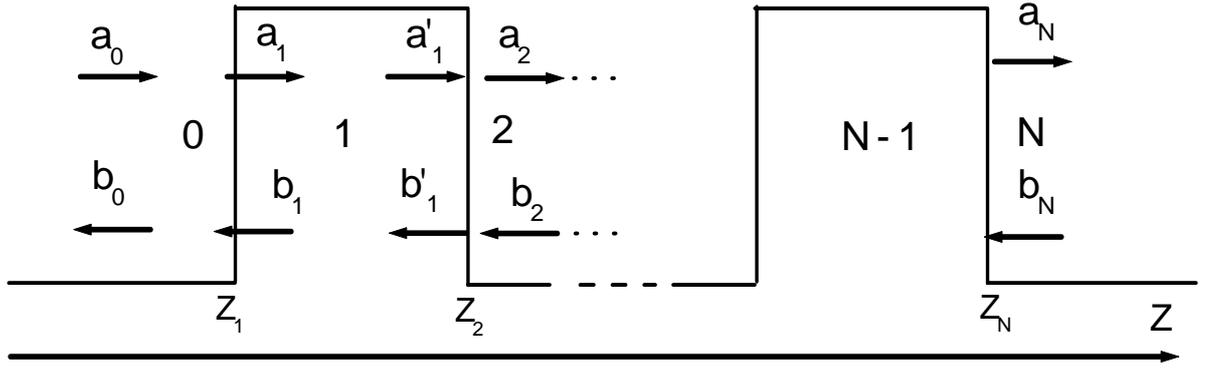


Figura 4-1: Heteroestrutura com N camadas. A figura mostra os coeficientes das ondas incidentes e das ondas refletidas ou espalhadas em cada região.

$$H \mathbf{F}(\mathbf{r}) = E \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (4.2)$$

onde H é o Hamiltoniano de *Luttinger* e $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = (F_1(\mathbf{r}), F_2(\mathbf{r}), F_3(\mathbf{r}), F_4(\mathbf{r}))$ são as funções envelopes com quatro componentes onde $F_1(\mathbf{r})$ e $F_4(\mathbf{r})$ são as componentes “*spin-up*” e “*spin-down*” nos estados de base de buracos pesados (*heavy-hole*) e $F_2(\mathbf{r})$ e $F_3(\mathbf{r})$, são as componentes “*spin-up*” e “*spin-down*” para buracos leves (*light-hole*). Devido à simetria de translação do cristal, podemos escrever $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ da seguinte forma:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.3)$$

na qual $\mathbf{F}(\mathbf{k}) = (F_{h1}(\mathbf{k}), F_{\ell1}(\mathbf{k}), F_{\ell2}(\mathbf{k}), F_{h2}(\mathbf{k}))$.

- A função de onda total em cada região n da heteroestrutura pode ser escrita como uma combinação linear das funções envelopes do cristal perfeito para aquela energia, fixando-se o momento paralelo às camadas, $\mathbf{k}_\rho = (k_x, k_y)$:

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{\nu=h,l} \sum_{j=1,2} a_{\nu,j} \mathbf{F}_{\nu,j}(k_{z\nu}) e^{ik_{z\nu}(z-z_n)} + b_{\nu,j} \mathbf{F}_{\nu,j}(-k_{z\nu}) e^{-ik_{z\nu}(z-z_n)}. \quad (4.4)$$

- Aplicamos as condições de contorno na interface $n + 1$, ou seja, a conservação da densidade de probabilidade e da densidade de corrente

$$\begin{cases} \mathbf{F}(z_j) |_{z_j} = \text{contínuo} \\ \mathbf{J}_z \mathbf{F}(z_j) |_{z_j} = \text{contínuo}, \end{cases} \quad (4.5)$$

onde \mathbf{J}_z é o operador densidade de corrente para o Hamiltoniano de *Luttinger*, que tem a seguinte forma

$$\mathbf{J}_z = \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z & -\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z & \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Assim procedendo, podemos encontrar a seguinte equação matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n11} & \mathbf{M}_{n12} \\ \mathbf{M}_{n21} & \mathbf{M}_{n22} \end{pmatrix}_{8 \times 8} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n+111} & \mathbf{M}_{n+112} \\ \mathbf{M}_{n+121} & \mathbf{M}_{n+122} \end{pmatrix}_{8 \times 8} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

onde as submatrizes de dimensão (4×4) , \mathbf{M}_{n11} , \mathbf{M}_{n12} , \mathbf{M}_{n21} , \mathbf{M}_{n22} são os elementos que formam a matriz de transferência usual \mathbf{M} [10]

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{h1}^+ & \mathbf{F}_{h2}^+ & \mathbf{F}_{\ell1}^+ & \mathbf{F}_{\ell2}^+ & \mathbf{F}_{h1}^- & \mathbf{F}_{h2}^- & \mathbf{F}_{\ell1}^- & \mathbf{F}_{\ell2}^- \\ \mathbf{J}_{zh}^+ \mathbf{F}_{h1}^+ & \mathbf{J}_{zh}^+ \mathbf{F}_{h2}^+ & \mathbf{J}_{z\ell}^+ \mathbf{F}_{\ell1}^+ & \mathbf{J}_{z\ell}^+ \mathbf{F}_{\ell2}^+ & \mathbf{J}_{zh}^- \mathbf{F}_{h1}^- & \mathbf{J}_{zh}^- \mathbf{F}_{h2}^- & \mathbf{J}_{z\ell}^- \mathbf{F}_{\ell1}^- & \mathbf{J}_{z\ell}^- \mathbf{F}_{\ell2}^- \end{bmatrix}, \quad (4.8)$$

onde usamos uma notação comprimida para os elementos na forma $\mathbf{F}_{h1}^\pm \equiv \mathbf{F}_{h1}(\pm k_{zh})$ para

as funções envelope e $\mathbf{J}_{zh}^{\pm} \equiv \mathbf{J}_{zh}(\pm k_{zh})$ para o vetor densidade de corrente. Também, \mathbf{a}_n é o vetor que representa a amplitude da onda incidente para os buracos leves e pesados e \mathbf{b}_n a amplitude da onda refletida. A partir da Eq. (4.7), e com alguma longa manipulação algébrica, podemos relacionar os coeficientes das ondas espalhadas numa interface (\mathbf{a}_{n+1} e \mathbf{b}_n) com os das ondas incidentes (\mathbf{a}_n e \mathbf{b}_{n+1}), na forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{n+1} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

sendo

$$\mathbf{S}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n+111} & -\mathbf{M}_{n12} \\ \mathbf{M}_{n+121} & -\mathbf{M}_{n22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n11} & -\mathbf{M}_{n+112} \\ \mathbf{M}_{n21} & -\mathbf{M}_{n+122} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

a matriz de espalhamento para a interface $n + 1$.

Aplicando as condições de contorno nas interfaces localizadas nas posições $z = z_1$ e $z = z_2$, obtemos:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Na região 1 [Fig. (4-1)], os coeficientes ($\mathbf{a}'_1, \mathbf{b}_1$) das ondas que saem e os coeficientes das ondas que entram nesta região ($\mathbf{a}_1, \mathbf{b}'_1$) estão relacionados da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

sendo

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_4 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_4 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

onde

$$\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4 \quad (4.18)$$

é matriz de espalhamento total. Aplicações deste formalismo serão mostrados depois.

4.2 Diferenças Finitas

O procedimento básico para o cálculo da transmissividade no esquema de diferenças finitas [12] usando o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é composto das seguintes etapas:

- Para um valor fixo da energia, E , discretizamos uniformemente a equação de massa efetiva multibandas em cada região da heteroestrutura, conforme já discutido em outros pontos:

$$\left[-\mathbf{H}^{(2)} \frac{\partial}{\partial z^2} - i\mathbf{H}^{(1)} \frac{\partial}{\partial z} + \mathbf{H}^{(0)} + V(z) \right] \mathbf{F} = E\mathbf{F} \quad (4.19)$$

$$\mathbf{H}_{\sigma,\sigma+1} \mathbf{F}_{\sigma+1} + \mathbf{H}_{\sigma,\sigma} \mathbf{F}_{\sigma} + \mathbf{H}_{\sigma,\sigma-1} \mathbf{F}_{\sigma-1} = 0, \quad \sigma = 2, N-1, \quad (4.20)$$

$$\mathbf{H}_{\sigma,\sigma} = \frac{2\mathbf{H}^{(2)}}{a^2} + \mathbf{H}^{(0)} + V_{\sigma} - E, \quad (4.21a)$$

$$\mathbf{H}_{\sigma,\sigma+1} = \frac{-\mathbf{H}^{(2)}}{a^2} - \frac{i\mathbf{H}^{(1)}}{2a}, \quad (4.21b)$$

$$\mathbf{H}_{\sigma,\sigma-1} = \frac{-\mathbf{H}^{(2)}}{a^2} + \frac{i\mathbf{H}^{(1)}}{2a}, \quad (4.21c)$$

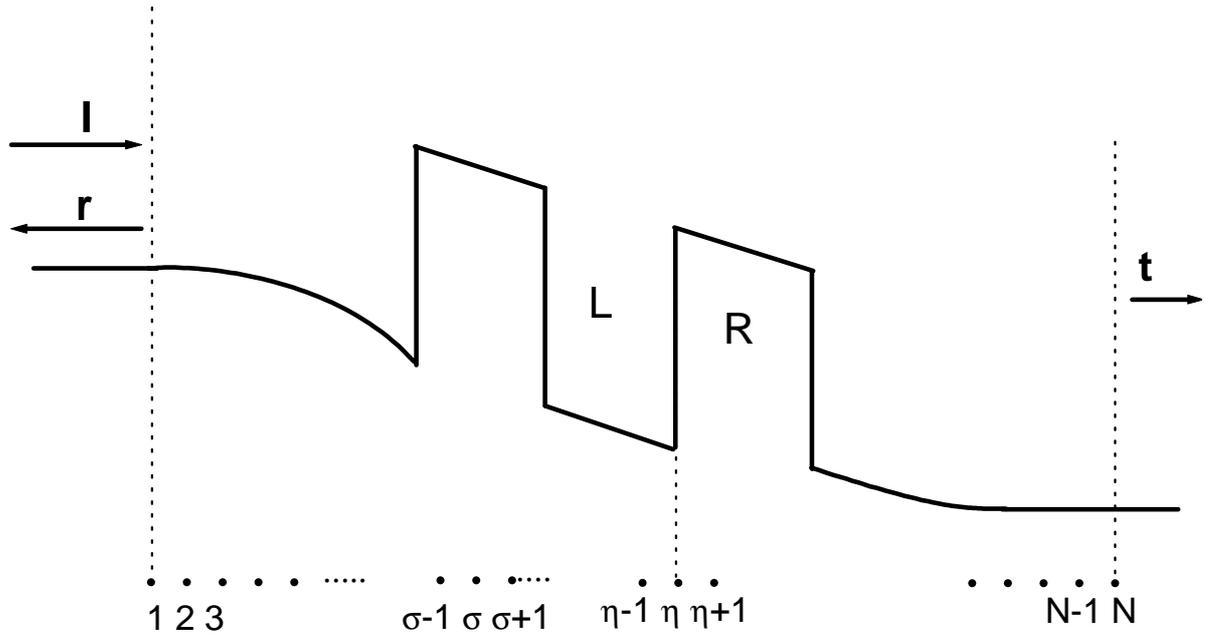


Figura 4-2: Região de dupla barreira especificada por N pontos da rede com espaçamento a . Nas fronteiras da heteroestrutura o potencial é *flat band* e as soluções da equação de *Schrödinger* são ondas planas.

onde $\mathbf{H}_{\sigma,\sigma}$ são matrizes de dimensões $(M \times M)$. Como esquematicamente mostrado na Fig. (4-2), a região inteira da heteroestrutura de duplas barreiras é discretizada e transformada em uma rede uniforme de N pontos, $\{z_\sigma\}$, $\sigma = 1, 2, \dots, N$, com espaçamento a . Trabalhando com o Hamiltoniano de *Luttinger* para o cálculo das propriedades de transporte teremos $M = 4$. Nesse caso, a matriz $\mathbf{H}^{(i)}$ dos coeficientes das derivadas de ordem i , $(\partial/\partial z)^i$, são escritas como:

$$H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} (\gamma_1 + \gamma_2)k_\rho^2 & 0 & \frac{-\sqrt{3}}{2}\bar{\gamma}k_\rho^2 e^{-i2\theta} & 0 \\ 0 & (\gamma_1 - \gamma_2)k_\rho^2 & 0 & \frac{-\sqrt{3}}{2}\bar{\gamma}k_\rho^2 e^{-i2\theta} \\ \frac{-\sqrt{3}}{2}\bar{\gamma}k_\rho^2 e^{i2\theta} & 0 & (\gamma_1 - \gamma_2)k_\rho^2 & 0 \\ 0 & \frac{-\sqrt{3}}{2}\bar{\gamma}k_\rho^2 e^{i2\theta} & 0 & (\gamma_1 + \gamma_2)k_\rho^2 \end{pmatrix} \quad (4.22a)$$

$$H^{(1)} = -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{m} \begin{pmatrix} 0 & -\gamma_3 k_\rho e^{i\theta} & 0 & 0 \\ -\gamma_3 k_\rho e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_3 k_\rho e^{i\theta} & 0 \\ 0 & \gamma_3 k_\rho e^{-i\theta} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.22b)$$

$$H^{(2)} = - \begin{pmatrix} \gamma_1 - 2\gamma_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_1 + 2\gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1 + 2\gamma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_1 - 2\gamma_2 \end{pmatrix} \quad (4.22c)$$

onde $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ são os parâmetros de *Luttinger*, $\bar{\gamma} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$ (aproximação axial), $k_\rho = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ e $\theta = \arctan(k_y/k_x)$.

- Definindo densidade de corrente ao longo da direção de propagação, na forma:

$$\mathbf{J}_z = \frac{1}{\hbar} (-2i\mathbf{H}^{(2)} \frac{\partial}{\partial z} + \mathbf{H}^{(1)}), \quad (4.23)$$

e aplicando as condições de contorno (4.5), obteremos em cada uma das interfaces as seguintes formas matriciais

$$\mathbf{H}_{\eta,\eta} = \frac{2(\mathbf{H}_R^{(2)} + \mathbf{H}_L^{(2)})}{a^2} - i \frac{(\mathbf{H}_R^{(1)} - \mathbf{H}_L^{(1)})}{2a}, \quad (4.24a)$$

$$\mathbf{H}_{\eta,\eta+1} = \frac{-2\mathbf{H}_R^{(2)}}{a^2} - i \frac{\mathbf{H}_R^{(1)}}{2a}, \quad (4.24b)$$

$$\mathbf{H}_{\eta,\eta-1} = \frac{-2\mathbf{H}_L^{(2)}}{a^2} + i\frac{\mathbf{H}_L^{(1)}}{2a}. \quad (4.24c)$$

A função de onda pode ser escrita como uma combinação linear de ondas incidentes e espalhadas (refletidas), na forma:

$$\mathbf{F}_L = \exp(i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}) \sum_{j=1}^M (\mathbf{I}_j e^{ik_{z,j}^L z} \mathbf{F}_{k,j}^L + \mathbf{r}_j e^{ik_{z,j+M} z} \mathbf{F}_{k,j+M}^L) \quad (4.25)$$

$$\mathbf{F}_R = \exp(i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}) \sum_{j=1}^M \mathbf{t}_j e^{ik_{z,j} z} \mathbf{F}_{k,j}^R \quad (4.26)$$

onde cada valor $j = 1, 2, \dots, M$ corresponderá a um estado “propagante” ou “antipropagante” no sentido positivo do eixo, isto é: $+z$. Por outro lado, cada um dos valores $j = M+1, \dots, 2M$ corresponderá a um estado “propagante” ou “antipropagante” no sentido oposto, ou seja, $-z$. Finalmente, \mathbf{F}_k são as funções envelopes do “*bulk*” [Eq. (4.3)]. Por outro lado, \mathbf{I} , \mathbf{r} , e \mathbf{t} são vetores coluna de dimensão M representando, respectivamente, as amplitudes dos estados incidentes, refletidos e transmitidos. Após longa manipulação algébrica, podemos obter as relações entre essas amplitudes e as funções envelopes, na forma da transformação

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{11}^L & \mathbf{D}_{12}^L \\ \mathbf{D}_{21}^L & \mathbf{D}_{22}^L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} \\ \mathbf{r} \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_{N-1} \\ \mathbf{F}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{11}^R & \mathbf{D}_{12}^R \\ \mathbf{D}_{21}^R & \mathbf{D}_{22}^R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{t} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

onde \mathbf{D}_{11}^L , \mathbf{D}_{12}^L , \mathbf{D}_{11}^R , \mathbf{D}_{12}^R são matrizes ($M \times M$) cujos vetores colunas são as funções envelopes do *bulk*, \mathbf{F}_k^L e \mathbf{F}_k^R , obtidas resolvendo a Eq. (4.2) para os lados esquerdo e direito da heteroestrutura. Essas matrizes são arranjadas na mesma ordem de ocorrência que os correspondentes autovalores:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{D}_{11}^\lambda = \left[\mathbf{F}_{k,1}^\lambda \quad \dots \quad \mathbf{F}_{k,M}^\lambda \right], \\ \mathbf{D}_{12}^\lambda = \left[\mathbf{F}_{k,M+1}^\lambda \quad \dots \quad \mathbf{F}_{k,2M}^\lambda \right], \\ \mathbf{D}_{21}^\lambda = \left[e^{ik_z,1^a} \mathbf{F}_{k,1}^\lambda \quad \dots \quad e^{ik_z,M^a} \mathbf{F}_{k,M}^\lambda \right], \\ \mathbf{D}_{22}^\lambda = \left[e^{ik_z,M+1^a} \mathbf{F}_{k,M+1}^\lambda \quad \dots \quad e^{ik_z,2M^a} \mathbf{F}_{k,2M}^\lambda \right]. \end{array} \right. \quad (4.29)$$

Eliminando \mathbf{r} e \mathbf{t} das Eqs. (4.27) e (4.28) obtemos

$$\mathbf{F}_1 - \mathbf{D}_{12}^L (\mathbf{D}_{22}^L)^{-1} \mathbf{F}_2 = \mathbf{D}_{11}^L \mathbf{I} - \mathbf{D}_{12}^L (\mathbf{D}_{22}^L)^{-1} \mathbf{D}_{21}^L \mathbf{I} \quad (4.30)$$

$$\mathbf{D}_{21}^R (\mathbf{D}_{11}^R)^{-1} \mathbf{F}_{N-1} + \mathbf{F}_N = 0. \quad (4.31)$$

Essas duas últimas equações juntamente com a Eq. (4.20) resultará num sistema matricial de dimensão $M \times N$ para as soluções:

$$\left[\begin{array}{ccccccc} 1 & -\mathbf{D}_{12}^L \mathbf{D}_{22}^{L-1} & \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{H}_{2,1} & \mathbf{H}_{2,2} & \mathbf{H}_{2,3} & \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_{3,2} & \mathbf{H}_{3,3} & \mathbf{H}_{3,4} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ \mathbf{0} & & & \mathbf{0} & \mathbf{H}_{N-1,N-2} & \mathbf{H}_{N-1,N-1} & \mathbf{H}_{N-1,N} \\ \mathbf{0} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{0} & -\mathbf{D}_{21}^R \mathbf{D}_{11}^{R-1} & \mathbf{1} \end{array} \right] \times \quad (4.32)$$

$$\left[\begin{array}{c} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \mathbf{F}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_{N-1} \\ \mathbf{F}_N \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \mathbf{D}_{11}^L \mathbf{I} - \mathbf{D}_{12}^L \mathbf{D}_{22}^{L-1} \mathbf{D}_{21}^L \mathbf{I} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{array} \right].$$

Esse sistema de equações diferenciais acopladas deve ser resolvido, para determinarmos as amplitudes de tunelamento. Uma vez obtidas as funções envelopes, \mathbf{F}_σ , em todos os pontos de discretização da heteroestrutura, os coeficientes ou amplitudes das ondas transmitidas são obtidos da Eq. (4.28),

$$\mathbf{t} = (\mathbf{D}_{21}^R)^{-1} \mathbf{F}_N \quad (4.33)$$

onde $\mathbf{t} = (t_{h1}, t_{l1}, t_{l2}, t_{h2})$ determina as amplitudes de probabilidade de tunelamentos de cada tipo de portador com as correspondentes componentes de spin.

- Seguindo o mesmo procedimento da Ref. [13], os coeficientes de transmissão de cada portador, T_v , $v = h1, h2, l1, l2$, são calculados na forma:

$$T_v = \frac{\mathbf{Re} \left[(t_{\nu 1} \mathbf{F}_{\nu 1}^+ + t_{\nu 2} \mathbf{F}_{\nu 2}^+)^\dagger \mathbf{J}_z^+ (t_{\nu 1} \mathbf{F}_{\nu 1}^+ + t_{\nu 2} \mathbf{F}_{\nu 2}^+) \right]}{\mathbf{Re} \left[(\mathbf{F}_\nu^+)^\dagger \mathbf{J}_z^+ (\mathbf{F}_\nu^+) \right]} \quad (4.34)$$

onde os índices representam as componentes, $1 \Leftrightarrow \textit{spin-up}$ e $2 \Leftrightarrow \textit{spin-down}$, dos respectivos portadores envolvidos.

4.3 Aplicações I - Transmissividade

Nesta seção, vamos aplicar os formalismos acima descritos para calcular as transmissividades de buracos leves e pesados na aproximação de massa efetiva e descritos dentro do modelo de *Luttinger* (4×4) [14]. O sistema escolhido para estudo nessa seção foi o de duplas barreiras GaAs/AlAs.

Na Fig. (4-3) mostramos a transmissividade de buracos, para $k_\rho = 0$, usando a técnica da matriz de espalhamento. Nestas condições, não existindo nenhuma mistura de bandas entre os estados de buracos, estamos diante de um processo com os dois canais de saída independentes (*HH* e *LH*). A parte (a) da figura mostra a transmissividade calculada para barreiras laterais com largura $L_b = 100 \text{ \AA}$ e a parte (b) para barreiras

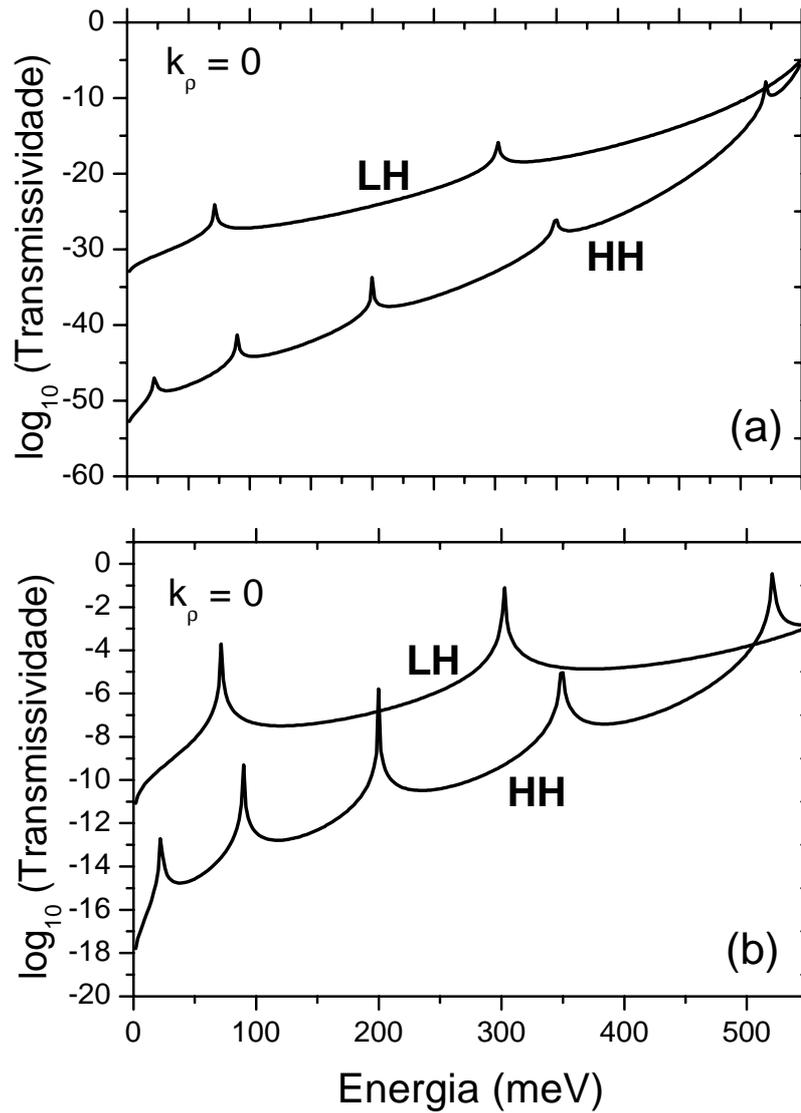


Figura 4-3: Transmissividade dos buracos leves e pesados para $k_p = 0$ usando a técnica da matriz de espalhamento. A parte (a) corresponde a barreiras de 100 Å e a parte (b) de 50 Å. Em ambos os casos, o poço tem largura de 50 Å. Note que o aumento da barreira diminui a transmissividade, mais picos dos estados ressonantes continuam na mesma posição em energia.

com largura $L_b = 30 \text{ \AA}$. Em ambos os casos a largura do poço vale $L_w = 50 \text{ \AA}$ e altura do potencial da barreira $V_b = 550 \text{ meV}$. Note a existência de cinco estados de buracos pesados e dois de buracos leves, dentro do poço escolhido. Além disso, pode-se notar que a maior largura das barreiras influenciará apenas as intensidades das transmissividades, com as ressonâncias sendo observadas nos mesmos valores de energia. Nestes casos, não existindo acoplamentos entre os estados (ou canais), os tipos dos portadores transmitidos são idênticos aos dos incidentes.

Na Fig. (4-4) mostramos a transmissividade dos buracos leves e pesados, para incidência de buracos pesados (a) e leves (b), com momento linear $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Nesta situação estamos diante de um processo de tunelamento multicanais acoplados, pois todos os portadores apresentam as conhecidas misturas dos estados. Um dos efeitos dessa mistura de bandas se apresenta com um aumento (em média quatro ordens de grandeza) das intensidades de transmissividade dos buracos pesados quando comparadas com as do modelo parabólico (ou desacoplado) da Fig. (4-3). Os picos nas curvas nos fornecem detalhes sobre os valores das energias ressonantes do sistema.

A comparação entre os formalismos da matriz de espalhamento e o de diferenças finitas é mostrada respectivamente nas partes (b) e (a) da Fig. (4-5) para o buraco incidente (HH in) com momento paralelo $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Os dois modelos concordam muito bem próximos a ressonância e mostram uma pequena diferença em regiões fora da ressonância. Acreditamos que isso ocorra porque dentro do método de diferenças finitas determinamos, em cada ponto da grade da heteroestrutura, todas as funções de onda, de forma numericamente “exata” com um grau de precisão desejado, além de tratarmos a continuidade das funções de onda e das correntes nas interfaces dos materiais, de uma forma muito mais precisa que no método analítico para o espalhamento. Mais ainda, o método numérico permite a introdução de um defeito “local” numa posição da heteroestrutura, por exemplo, enquanto que no método analítico este tratamento ficaria bastante mais complicado e menos preciso (perturbativo).

Na Fig. (4-6) mostramos as diferenças entre os formalismos analíticos da matriz de

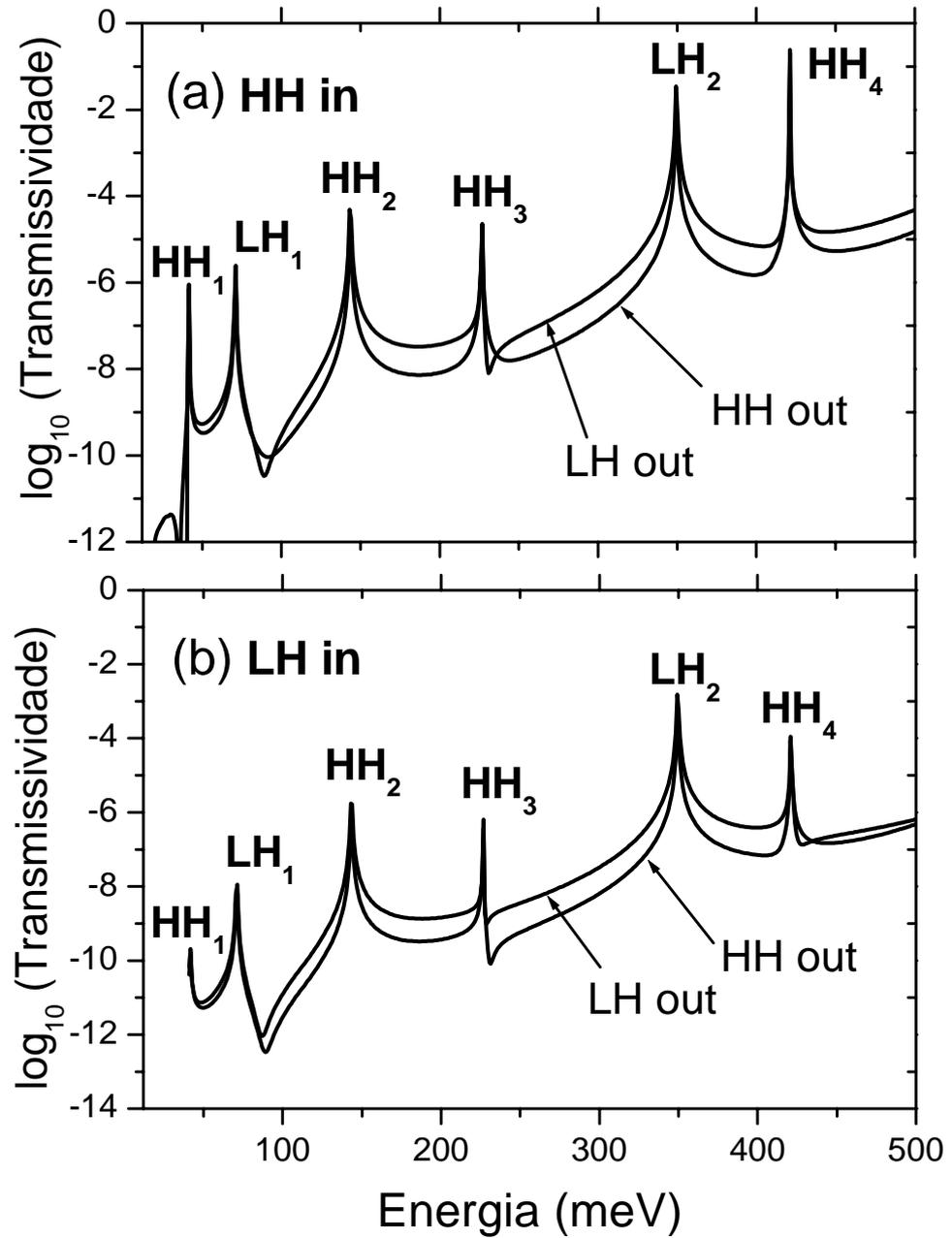


Figura 4-4: Transmissividade dos buracos leves (LH out) e pesados (HH out) através da heteroestrutura de barreiras duplas (30 Å, 50 Å, 30 Å) de GaAs/AlAs para um valor do momento $k_p = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. A parte (a) é para uma partícula incidente no estado HH (HH in) e a parte (b) para uma partícula incidente no estado LH (LH in).

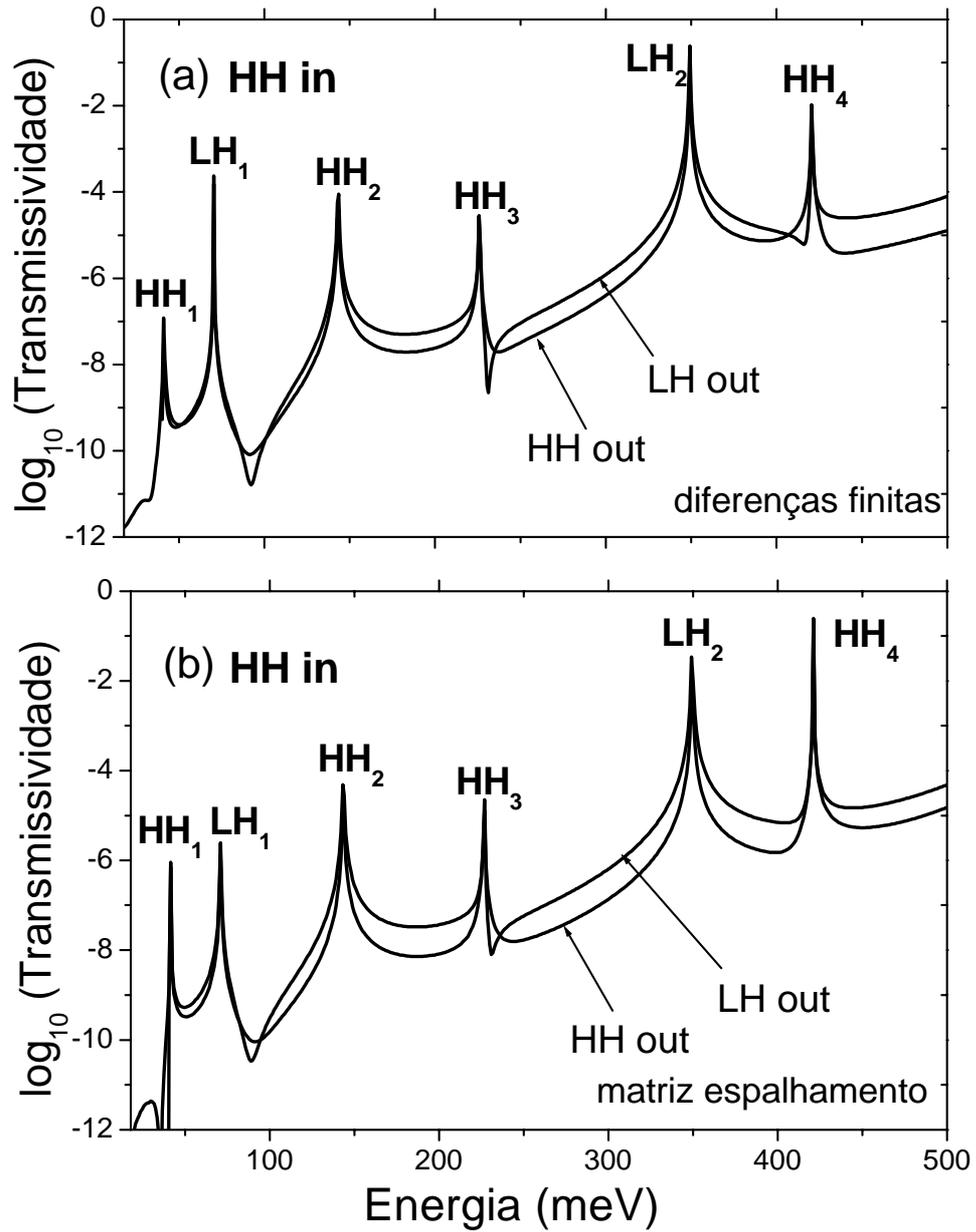


Figura 4-5: Comparação entre os formalismos da matriz de espalhamento e diferenças finitas. A parte (a) corresponde as transmissividades dos buracos leves (LH out) e pesados (HH out) obtidas pelo método das diferenças finitas, e a parte (b) pelo método da matriz de espalhamento em uma heteroestrutura de dupla barreira (30 Å, 50 Å, 30 Å) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Os dois modelos apresentam boa concordância, existindo uma pequena diferença nas regiões fora da ressonância.

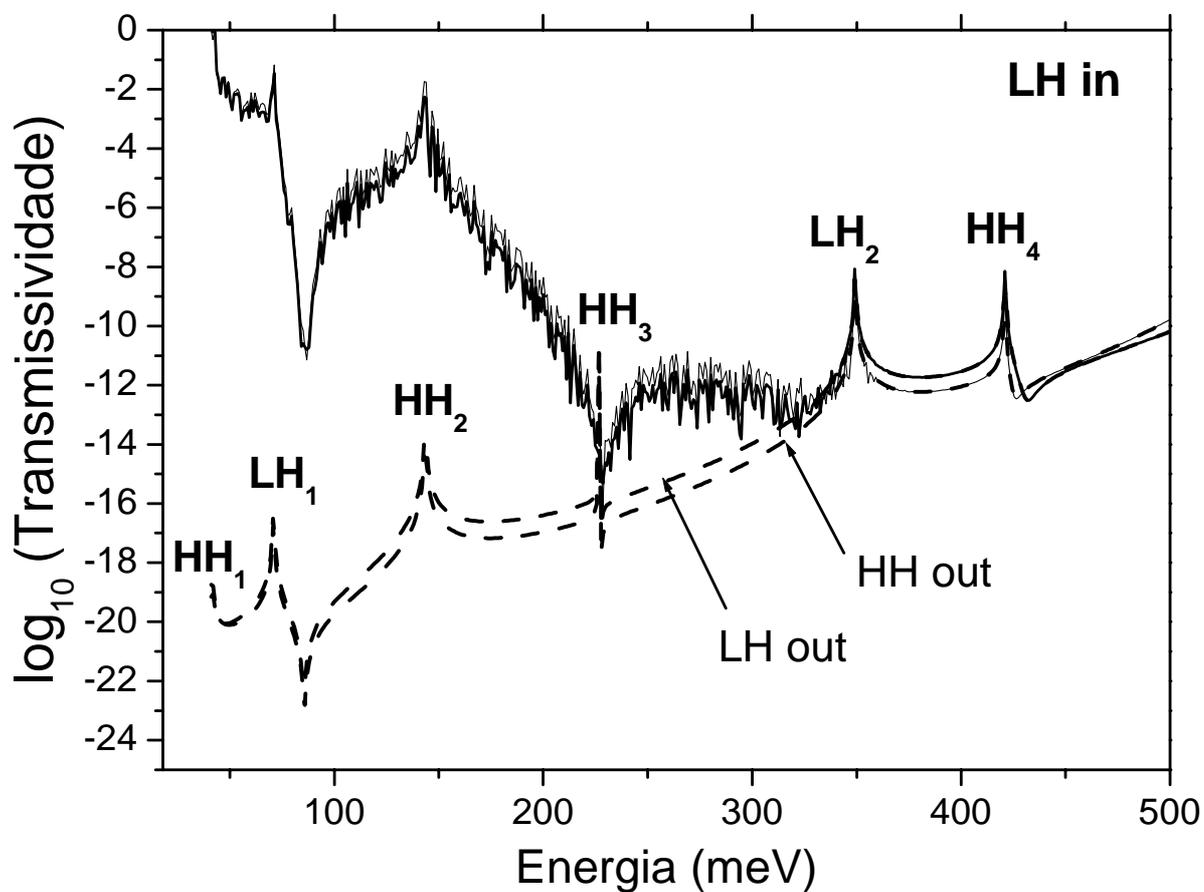


Figura 4-6: Comparação entre os formalismos da matriz de espalhamento e matriz de transferência para barreiras duplas (60 Å, 50 Å, 60 Å) de GaAs/AlAs com o momento paralelo $k_p = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. As linhas tracejadas correspondem as transmissividades dos buracos leves (*LH out*) e pesados (*HH out*) calculadas pelo formalismo da matriz de espalhamento, e as linhas contínuas as transmissividades calculadas pelo formalismo da matriz de transferência. A instabilidade numérica do método da matriz de transferência é clara.

espalhamento e da matriz de transferência. Para isso, calculamos as respectivas transmissividades do sistema de duplas barreiras de GaAs/AlAs, com a largura das barreiras $L_b = 60 \text{ \AA}$ e a largura do poço $L_w = 50 \text{ \AA}$. As linhas tracejadas correspondem as transmissividades dos buracos leves (LH out) e pesados (HH out) calculada via matriz de espalhamento enquanto as linhas contínuas mostram as transmissividades calculadas via matriz de transferência. Nessa figura é possível se observar a bastante propalada instabilidade numérica deste formalismo analítico baseado na matriz de transferência (linhas contínuas) se comparada com os resultados obtidos via matriz espalhamento (linhas tracejadas). Note que só existirá uma pequena estabilidade no método da matriz de transferência quando estamos tratando de transmissividades para energias dos portadores acima de um valor específico, que dependerá do *offset* (altura da barreira e tipo de material) e da largura das barreiras para um dado dispositivo.

Uma vez construídos os métodos mais precisos para o cálculo das propriedades de transporte, um próximo passo seria aplicar essas técnicas a sistemas mais complexos, como por exemplo a sistemas de barreiras duplas submetidos a “*strain*” e campos magnéticos. O cálculo da corrente de tunelamento em duplas barreiras submetido a esforços de tração e compressão para a direção (100) já foi por nós investigado usando o formalismo da matriz de transferência [10]. Na próxima seção aplicaremos o formalismo da matriz de espalhamento para para o cálculo da corrente de buracos leves e de elétrons em sistemas de duplas barreiras sem *strain*, crescidos na direção (100).

4.4 Aplicações II - Corrente de Tunelamento

Nesta seção vamos aplicar o formalismo da matriz de espalhamento para calcular a corrente de tunelamento de buracos em sistemas de duplas barreiras de GaAs/AlAs e a de elétrons em GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As. Para o tunelamento de buracos vamos considerar o caso simples, onde existe incidência de buracos leves (LH in) no sistema de barreiras duplas. A densidade de corrente para os buracos leves pode se calculada como:

$$J_{lh} = \frac{e}{4\pi} \int_{\Omega_l} d^3\mathbf{k} [T_{lh \rightarrow hh} + T_{lh \rightarrow lh}] [f(E) - f(E - eV)] v_{zl}(k_\rho, k_{zl}) \quad (4.35)$$

onde V é uma voltagem externa aplicada. Nessa expressão Ω_l é a região no espaço k do material da camada do poço, tendo soluções reais para k_{zl} para um dado valor de energia (somente ondas propagantes são relevantes para o transporte), onde a integração pode ser realizada, $v_{zl}(k_\rho, k_{zl})$ é a velocidade de grupo dos buracos leves obtida através da relação de dispersão e $f(E)$ é a função distribuição de Fermi.

Na Fig. (4-7) mostramos a densidade de corrente de buracos leves (linha tracejada) e pesados (linha pontilhada) em função do potencial $U = eV$ aplicado entre as regiões do emissor e coletor da heteroestrutura de barreiras duplas, para uma dopagem onde $E_F = 55$ meV. Note que os níveis ressonantes do poço tornam-se alinhados com E_F , na mesma sequência em que aparecem nas curvas de transmissividade. O nível HH_1 não entra em ressonância porque já está abaixo do nível de Fermi E_F , para $U = 0$. Note a quebra de degenerescência de spin produzida pelo campo elétrico, mais visível no estado HH_2 , um efeito que será discutido em detalhes na próxima seção.

Para finalizar, mostramos, na Fig. (4-8), a densidade de corrente de elétrons para um sistema de barreiras duplas de GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As com dimensões $L_b = 100$ Å, $L_w = 50$ Å, altura do potencial $V_b = 130$ meV e energia de Fermi $E_F = 10$ meV. Essa densidade de corrente simulada (pontos) foi comparada com dados experimentais (triângulos), obtidos pelo grupo da Prof^a Yara Gobato, numa amostra idêntica com dopagem tipo- n assimétrica (em um dos lados) e tendo um perfil de potencial semelhante ao mostrado na Fig. (4-2). A histerese observada no resultado experimental, logo acima do pico, é devido a um acúmulo de cargas no poço e este um efeito não foi considerado no presente cálculo. Para ser incluído requer um cálculo auto-consistente para o perfil de potencial eletrostático.

Estudos da transmissividade em múltiplas direções (111) e (110) foi iniciado usando o formalismo da matriz de espalhamento. Nesse sistemas a aproximação axial, geral-

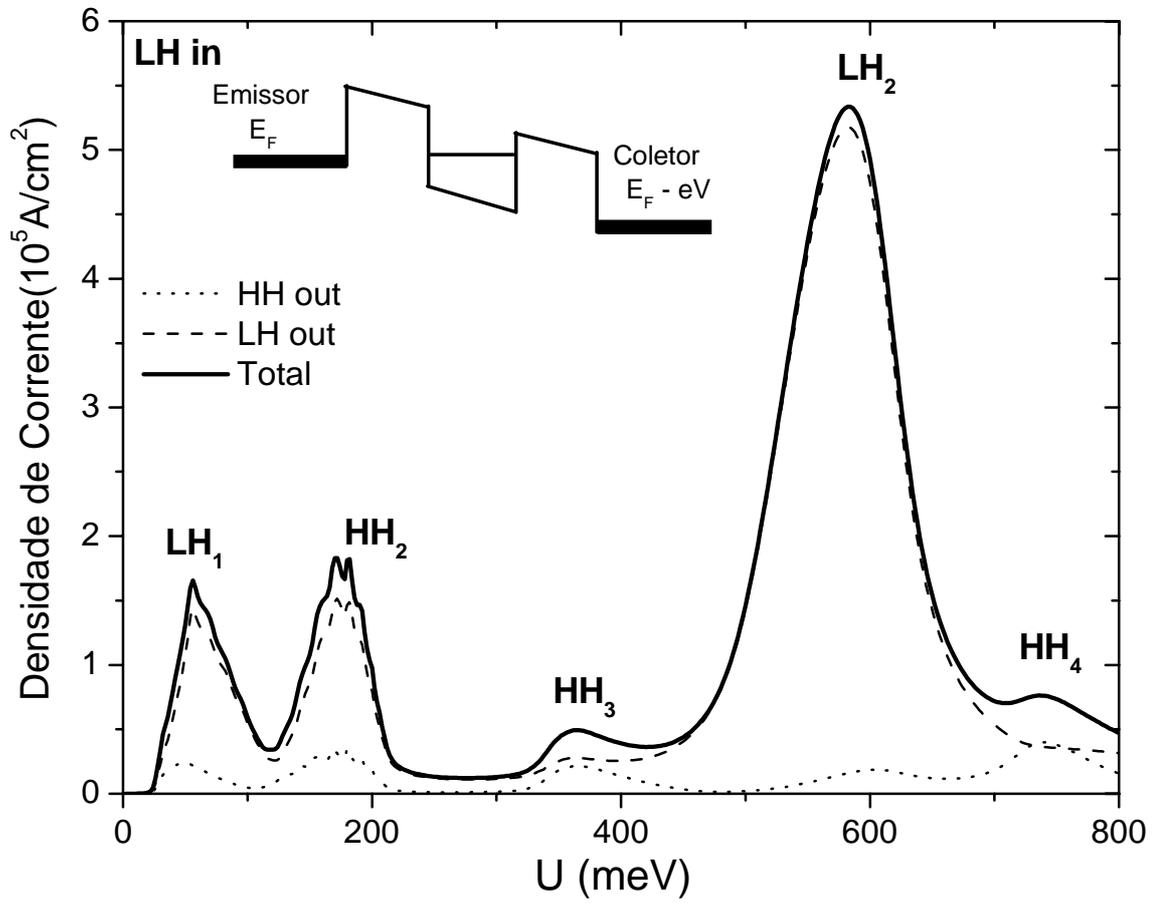


Figura 4-7: Densidades de corrente de buracos leves e pesados para $E_F = 55 \text{ meV}$, considerando buracos leves incidentes (LH in). A linha tracejada corresponde a densidade de corrente dos buracos leves (*light hole*) e a pontilhada corresponde a densidade de corrente de buracos pesados (*heavy hole*). A linha cheia é a densidade de corrente total.

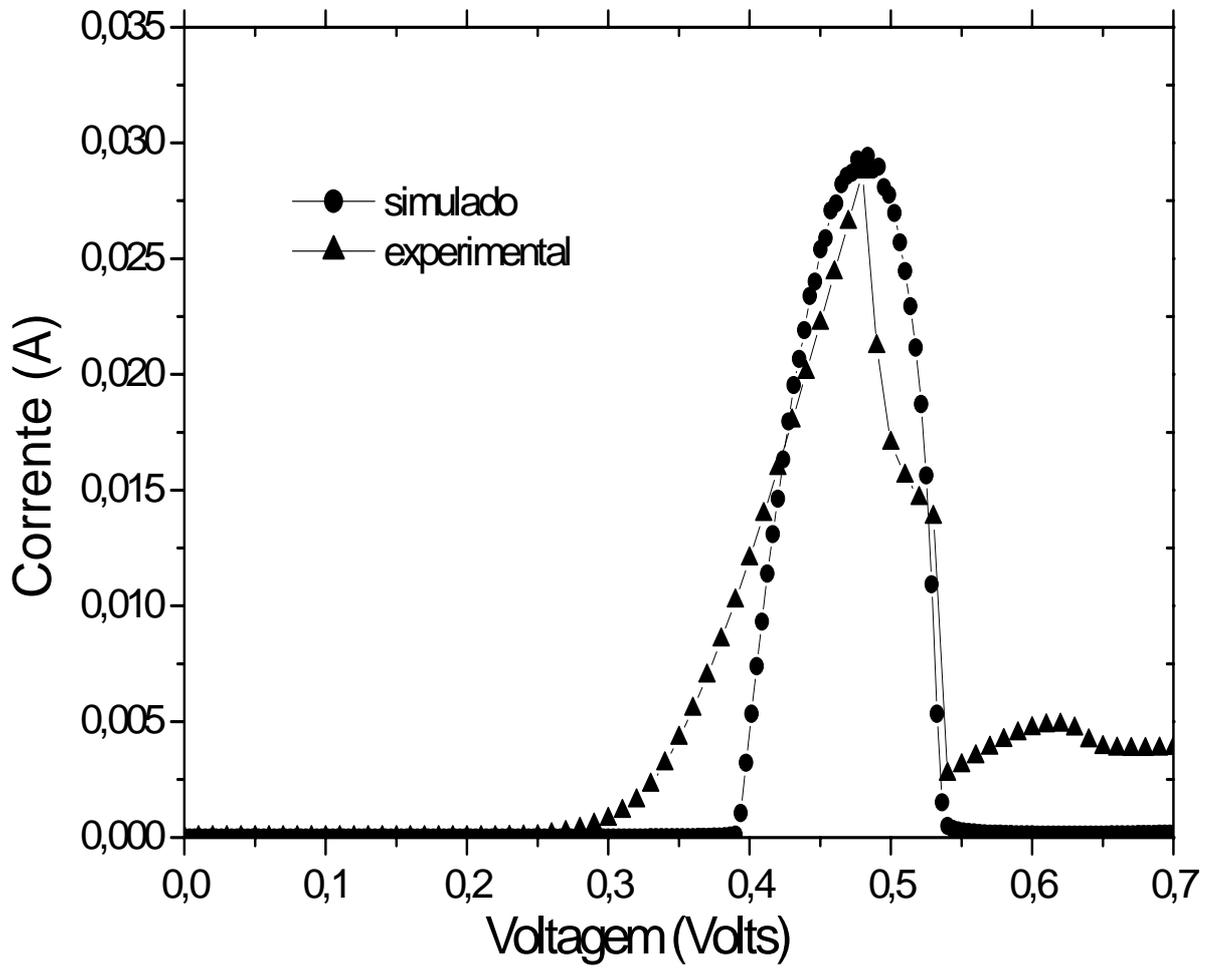


Figura 4-8: A figura mostra a corrente de elétrons (—▲—) medida em GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As com barreiras de 100 Å de espessura e poço de 50 Å de largura. Comparamos com o valor teórico (—●—) que foi simulado para uma dopagem $E_F = 10$ meV.

mente utilizada para o cálculo da corrente, não é uma aproximação ideal e os custos computacionais envolvidos no cálculo da corrente aumentam consideravelmente. Importante frisar que todos métodos foram estendidos para estudar estas direções cristalinas exóticas, porém a falta de resultados experimentais e o surgimento de áreas mais interessantes, como o estudo de magneto-tunelamento nestas estruturas, nos atraiu mais e vamos, assim, mudar o enfoque e mostrar algumas aplicações em magneto-tunelamento de buracos.

4.5 Aplicações III - Estrutura Eletrônica

Na presença de um campo magnético paralelo à direção de crescimento do cristal, os portadores do emissor de uma amostra tunelam para o coletor através do leque de níveis de *Landau* formado dentro do poço de uma estrutura do tipo barreiras duplas (DBRTS). Aqui, a complexidade da banda de valência e a forte *separação Zeeman* não linear das magneto-dispersões determinam as posições dos picos bem como a forma geral da magneto-corrente em uma dada amostra.

As estruturas usadas nesta seção são constituídas por barreiras duplas simétricas de GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As com espessuras $L_b = 100 \text{ \AA}$ (barreiras) e $L_w = 50 \text{ \AA}$ (poço). A Fig. (4-9) mostra a corrente de buracos (linha cheia) medida neste dispositivo para um campo magnético fixo indicado.

Nosso interesse principal é entender a origem dos vários picos sob campo magnético paralelo à corrente e determinar suas relações com os níveis de *Landau* dentro do poço quântico. A curva tracejada foi usada para identificá-los através da segunda derivada (maior sensibilidade) exibida na mesma figura. Os experimentos foram realizados pelo grupo da Prof^{ta} Yara Gobato, no Departamento de Física da UFSCar.

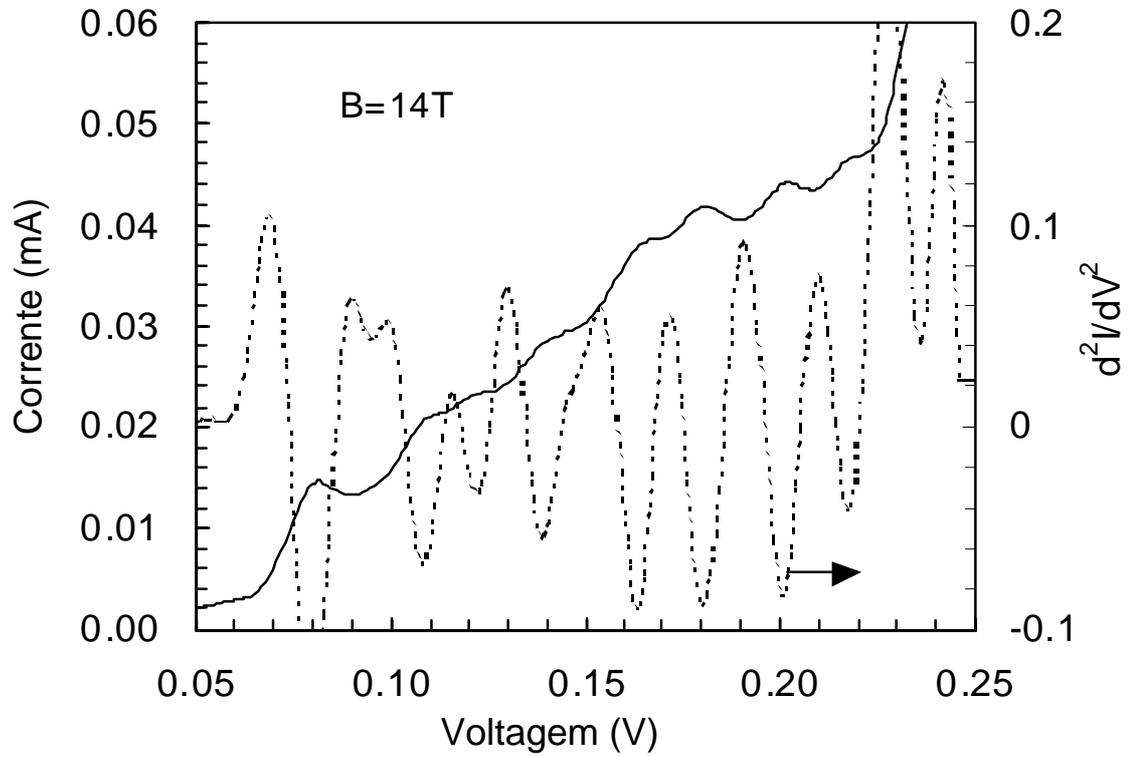


Figura 4-9: Corrente de buracos (linha cheia) medida numa heteroestrutura de barreiras duplas ($\text{GaAs}/\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$) com 100 \AA de espessura nas barreiras e 50 \AA de largura no poço. Para acentuar as posições dos picos de fracas intensidades, a parte tracejada mostra a taxa de variação da condutância (derivada segunda da corrente) com a voltagem.

4.5.1 Hamiltoniano Básico, Níveis de *Landau* e Dispersão

Vamos considerar campos elétrico e magnético, $\vec{B} = (0, 0, B_0)$, $\vec{F} = (0, 0, F_0)$, paralelos ao eixo z de um poço quântico. Em semicondutores com simetria *zinblende*, os estados de buracos localizados, na ausência de campo elétrico, são compostos de estados de *Bloch* no ponto Γ_8^v vezes a função envelope formada como produto de funções do poço quântico, $A_i^m(z)$, [$i = hh^\sigma$ (lh^σ) com componentes de spin, $\sigma = \pm\frac{3}{2}(\pm\frac{1}{2})$] e funções de onda do oscilador harmônico, $\langle \rho | N_L \rangle = H_{N_L}(\rho)$, de coordenadas no plano, $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$.

Um modelo realista para tratar estrutura eletrônica dos estados de buracos pesados (*heavy-hole*) e buracos leves (*light-hole*) é o bem conhecido modelo de Hamiltoniano de *Luttinger-Kohn* [14], que contém um grau considerável da mistura deles e fornece uma excelente descrição para os estados da banda de valência nesses semicondutores onde a energia *spin-órbita* (Δ_0), e o *gap* (E_g) de energia são grandes ($E_g, \Delta_0 \geq 300$ meV).

A energia e os autoestados de um *light-hole* ($lh_{N_L}^\sigma$) ou *heavy-hole* ($hh_{N_L}^\sigma$) para dado número de *Landau*, N_L , e polarização de spin, σ , em um poço quântico podem ser calculados como soluções de

$$\begin{bmatrix} P_{hh}^+ & L_1 & 0 & \mathcal{M} \\ L_1^* & P_{lh}^+ & \mathcal{M} & 0 \\ 0 & \mathcal{M}^* & P_{hh}^- & L_1^* \\ \mathcal{M}^* & 0 & L_1 & P_{lh}^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{hh^+}^m(z) |N_L - 2\rangle \\ A_{lh^+}^m(z) |N_L - 1\rangle \\ A_{hh^-}^m(z) |N_L + 1\rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |N_L\rangle \end{bmatrix} = E_i^m(B_0, F_0) \begin{bmatrix} A_{hh^+}^m(z) |N_L - 2\rangle \\ A_{lh^+}^m(z) |N_L - 1\rangle \\ A_{hh^-}^m(z) |N_L + 1\rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |N_L\rangle \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

onde $i = hh_{N_L}^\sigma, lh_{N_L}^\sigma$ e os elementos do Hamiltoniano são:

$$P_{hh}^\pm = V_0(z) + \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - S(B_0) \left[\left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right) (2\hat{n} + 1) \mp \frac{3}{2} \left(\kappa + \frac{9}{4}q\right) \right] \quad (4.37)$$

$$P^{\pm}_{lh} = V_0(z) + \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - S(B_0) \left[\left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2}\right) (2\hat{n} + 1) \mp \frac{1}{2} \left(\kappa + \frac{1}{4}q\right) \right] \quad (4.38)$$

$$L_1 = -i\sqrt{6} \frac{1}{R_c} \gamma_3 \frac{\partial}{\partial z} \hat{a} \quad (4.39)$$

$$\mathcal{M} = \sqrt{3} S(B_0) \left[\left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}\right) (\hat{a})^2 + \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2}\right) (\hat{a}^+)^2 \right]. \quad (4.40)$$

Nestas expressões, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa$ e q são os parâmetros de *Luttinger* de segunda ordem (em unidades de $\frac{\hbar^2}{m_0} = U_0 = 0,76201 \text{ meV} \times \bar{\text{Å}}^2$), $S(B_0) = \hbar\omega_c = 0,115764 B_0$ é a energia ciclotrônica (em meV) para B_0 dado em Tesla e $R_c = \sqrt{\frac{U_0}{S(B_0)}}$ é o raio ($\bar{\text{Å}} = 100 \text{ \AA}$) de uma órbita ciclotrônica. Também, $V_0(z)$ (meV) é o perfil de potencial (*band-offsets*) dos materiais dentro de um poço quântico mais um campo elétrico, $(eF_0)z$, paralelo a B_0 . Ainda, $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$ é o operador número do oscilador harmônico, $\hat{n} |N_L\rangle = N_L |N_L\rangle$, para cada estado de nível de *Landau* $|N_L\rangle$. A sequência acima dos números de *Landau* foi escolhida depois de colocado $\gamma_2 = \gamma_3$ somente nos termos, proporcionais a $(\hat{a}^+)^2$ (*warping*), dos elementos \mathcal{M} do Hamiltoniano de *Luttinger-Kohn*. Em todos outros pontos retemos a forma axial do Hamiltoniano e cada estado e respectiva dispersão de energia são obtidos resolvendo cada uma das formas multibanda da equação de *Schrödinger* na Eq. (4.36) usando uma combinação da diferença finita com a aproximação da *Potência Inversa*, descrita no Capítulo 3 desta tese.

O uso inerente da simetria espacial em todo Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [15] bem como também em versão simples, exemplo: o *Luttinger-Kohn*, permite a solução de uma maneira fácil. Na ausência de ambos os campos, cada função do poço quântico é simétrica (par), $A_{hh\pm(lh\pm)}^m(z)$, $m = 1, 3, 5..$, ou anti-simétrica (ímpar), $A_{hh\pm(lh\pm)}^m(z)$, $m = 2, 4, ..$ em

$\mathbf{k} = 0$. Somente neste caso podemos chamar esses portadores de estados *heavy-hole* e *light-hole* puros com seus *dubletos de Kramer*, lh^\pm ou hh^\pm , sendo degenerados. A aplicação de um campo magnético induz mudanças na separação entre as componentes de “*spin-up*” e “*spin-down*” dos portadores de diferentes números de *Landau*. Essa forte mistura, quando induzida por B_0 , origina uma *separação Zeeman* com um grande fator *giromagnético* anômalo, bem como uma diferença nas massas ciclotrônicas, para cada polarização de *spin* dos portadores. A aplicação adicional do campo elétrico F_0 , primeiro induz uma mistura das paridades nas diferentes componentes de *spin* de cada portador dos tipos listados no *spinor* acima e então, quebra a simetria de inversão das funções espaciais, $A_i^m(z)$'s, adicionando uma nova contribuição no levantamento da degenerescência dos *dubletos de Kramer* de cada tipo de portador. Estes dois efeitos combinados, sobre a simetria espacial e sobre as dispersões de energia dos níveis de *Landau*, são fundamentalmente importantes para se compreender a natureza de qualquer propriedade óptica ou de transporte no sistema. Para cada estado, podemos observar uma *separação Zeeman* com fator- g anômalo ($g_{hh_{n_L}(lh_{n_L})}(B_0, F)$), bem como também diferentes massas efetivas ciclotrônicas ($m_{hh_{n_L}(lh_{n_L})}^\pm(B_0, F_0)$), dependendo da ação de ambos os campos.

Depois de uma análise cuidadosa das soluções determinadas pela combinação dos operadores $\frac{\partial}{\partial z}$ e \hat{a} nos elementos fora da diagonal do Hamiltoniano, cada estado completo de *Landau* deve ser construído de forma específica. A sequência dos números de *Landau* ocorrendo em cada componente de um *spinor* acima é uma consequência direta dessa forte mistura. A estrutura do espaço de *Hilbert* mostra que existe quatro grupos dos estados de buraco com diferentes combinações envolvendo os números quânticos de *Landau*. Vamos chamar cada número individual de *Landau* dos portadores, de n_L , para todos os possíveis valores do índice, N_L , em cada *spinor* indicado na forma da Eq. (4.36).

i) O menor valor possível para cada índice é $N_L = -1$. No caso, somente estados lh_0^- , as soluções *heavy-hole* de *spin-down* com número de *Landau* $n_L = 0$, podem ocorrer para todos $m = 1, 2, 3$ estados na estrutura. Eles exibirão dispersões parabólica, $E_{hh_0^-}^m(B_0, F_0)$ (linear em B_0) e adotamos a seguinte notação para a forma do *spinor* para esse estado:

$$\Psi_{hh^-}^m(z, \rho, 0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ A_{hh^-}^m(z)|0 \rangle \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.41)$$

É claro que nessa solução parabólica, os autovalores do termo diagonal do Hamiltoniano P_{hh}^- na Eq. (4.36), não se acoplam com qualquer outro grupo de estados.

ii) O próximo valor $N_L = 0$, determinará um acoplamento (Hamiltoniano matricial 2×2) somente entre os estados de *spin-down*, hh_1^- e lh_0^- . Suas dispersões de energia com os números de *Landau* que podem ocorrer na construção de seus estados têm a forma abaixo:

$$\Psi_{hh^-}^m(z, \rho, 1) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ A_{hh^-}^m(z)|1 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z)|0 \rangle \end{bmatrix}; \quad \Psi_{lh^-}^m(z, \rho, 0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ A_{hh^-}^m(z)|1 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z)|0 \rangle \end{bmatrix}. \quad (4.42)$$

Estes dois estados, para cada valor de m , interagem um com o outro e suas dispersões, $E_{hh_1^-}^m(B_0, F_0)$, $E_{lh_0^-}^m(B_0, F_0)$ podem mostrar regiões de anti-cruzamento na vizinhança de valores especiais de B_0 . A separação de energia próxima entre eles, que depende da massa efetiva e da largura do poço, é a condição crucial para se observar regiões de anti-cruzamento para esses dois estados.

iii) Para o valor seguinte, $N_L = 1$, devemos encontrar soluções descritas por um Hamiltoniano matricial 3×3 acoplando os hh_2^- , lh_1^- e lh_0^+ com os respectivos números de *Landau* indicados. Suas formas de *spinor* são escritas como:

$$\begin{aligned}
\Psi_{hh^-}^m(z, \rho, 2) &= \begin{bmatrix} 0 \\ A_{lh^+}^m(z)|0 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|2 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |1 \rangle \end{bmatrix}; \quad \Psi_{-}^m(z, \rho, 1) = \begin{bmatrix} 0 \\ A_{lh^+}^m(z)|0 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|2 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |1 \rangle \end{bmatrix} \\
\Psi_{lh^+}^m(z, \rho, 0) &= \begin{bmatrix} 0 \\ A_{lh^+}^m(z)|0 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|2 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |1 \rangle \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Observe a primeira ocorrência do estado lh_0^+ nesse multipletto e que vai interagir somente com estados lh_1^- e hh_2^- . A mesma observação sobre a separação de energia pode ser estendida aqui para os estados $lh's$ and $hh's$. Porém, os estados lh_0^+ , lh_1^- podem revelar uma forte interação.

iv) Na sequência seguinte de índice, $N_L \geq 2$, todas as quatro componentes dos portadores de “*spin-down*” e “*spin-up*” estão acopladas e os números de *Landau* particulares são:

$$\Psi_{hh^+}^m(z, \rho, N_L-2) = \begin{bmatrix} A_{hh^+}^m(z)|N_L-2 \rangle \\ A_{lh^+}^m(z)|N_L-1 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|N_L+1 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |N_L \rangle \end{bmatrix}, \quad \Psi_{lh^+}^m(z, \rho, N_L-1) = \begin{bmatrix} A_{hh^+}^m(z)|N_L-2 \rangle \\ A_{lh^+}^m(z)|N_L-1 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|N_L+1 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |N_L \rangle \end{bmatrix} \tag{4.44a}$$

$$\Psi_{hh^-}^m(z, \rho, N_L+1) = \begin{bmatrix} A_{hh^+}^m(z)|N_L - 2 \rangle \\ A_{lh^+}^m(z)|N_L - 1 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|N_L + 1 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |N_L \rangle \end{bmatrix}, \Psi_{lh^-}^m(z, \rho, N_L) = \begin{bmatrix} A_{hh^+}^m(z)|N_L - 2 \rangle \\ A_{lh^+}^m(z)|N_L - 1 \rangle \\ A_{hh^-}^m(z)|N_L + 1 \rangle \\ A_{lh^-}^m(z) |N_L \rangle \end{bmatrix}. \quad (4.44b)$$

Observe a primeira ocorrência dos estados hh_0^+ neste multipletto $N_L = 2$, tendo forte interação com seus associados lh_1^+ , lh_2^- e hh_3^- para os diferentes valores de m . As dispersões do nível de *Landau* com estes números específicos podem mostrar regiões de anti-cruzamento para valores específicos do campo magnético, um resultado diretamente conectado com a forma inerente do acoplamento induzido pelo Hamiltoniano de *Luttinger-Kohn*. Logicamente, não haverá acoplamento entre grupos de estados que pertençam aos diferentes multiplettos com índices N_L .

As curvas de dispersões magnéticas calculadas com o modelo descrito acima, são mostradas nas Figs. (4-10) e (4-11) para duas situações diferentes. Na Fig. (4-10), mostramos o caso de campo elétrico fraco ($F_0 = 10$ kV/cm) e na Fig. (4-11) o caso de campo forte ($F_0 = 100$ kV/cm). Os correspondentes números de *Landau* e suas polarizações de spin estão indicados nas figuras.

Primeiro perceba a dependência anômala de todos os fatores $g_{hh_{n_L}(lh_{n_L})}(B_0, F)$ de cada um dos portadores para os diferentes números de *Landau* [Fig. (4-10)]. Observe também uma mudança de sinal de g_{hh_0} para campos magnéticos acima de 12 T, onde a *separação Zeeman* torna-se mais transparentemente resolvida. Os mesmos efeitos ocorrem para g_{hh_1} acima de 4 T e para g_{lh_2} acima de 3 T. A origem e a natureza das regiões de cruzamentos (diferentes N_L) e anti-cruzamentos (mesmo N_L) entre alguns níveis já foi explicada anteriormente. Finalmente, observe que para um dado campo magnético, os estados de *Landau* de *light-hole* tem maior *separação Zeeman* comparada com o correspondentes multiplettos de *heavy-hole*.

Grandes campos elétricos [Fig. (4-11)] aplicados através da estrutura causam fortes

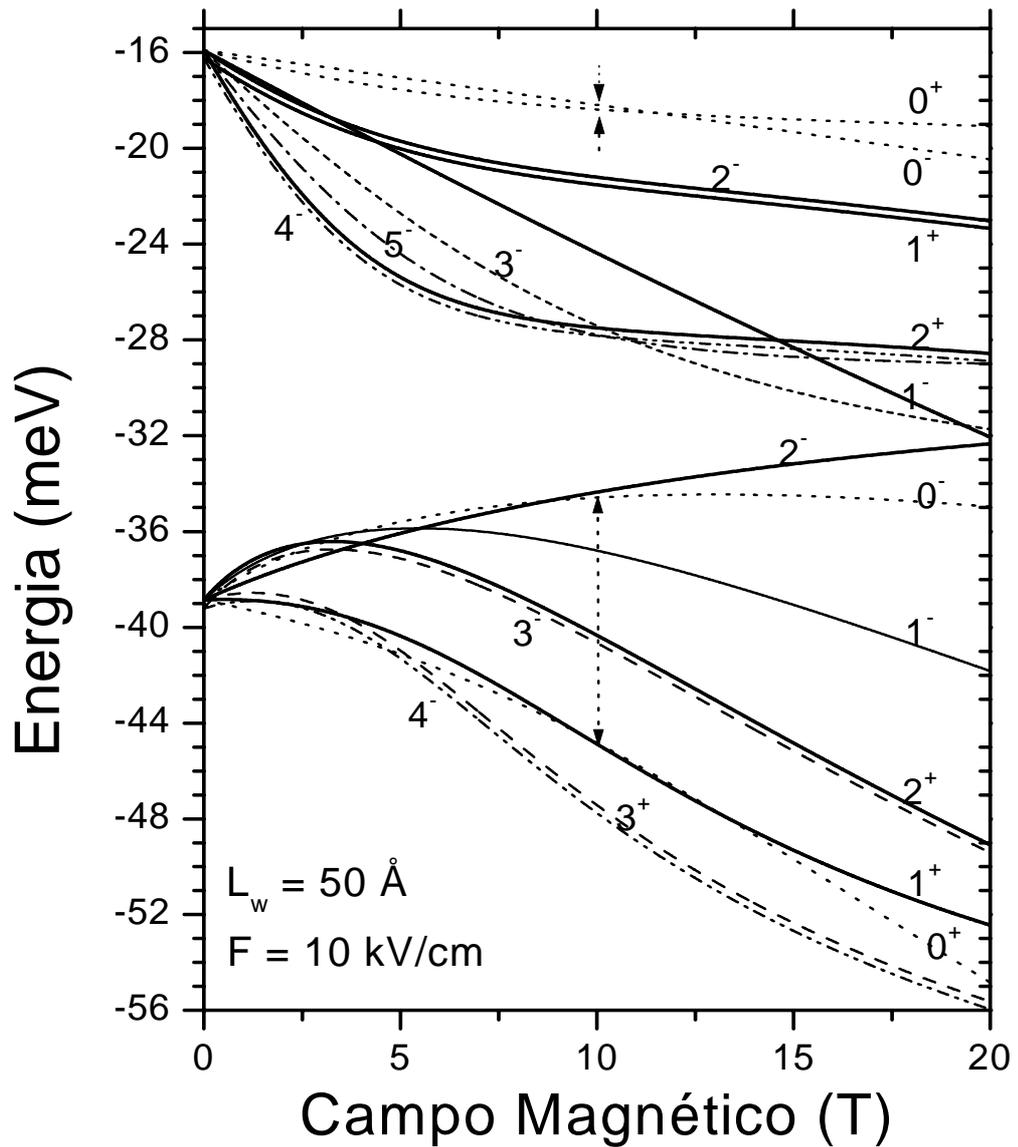


Figura 4-10: Dispersões magnéticas, em função do campo magnético, para um campo elétrico $F_0 = 10 \text{ kV/cm}$. Note a dependência anômala de todos os fatores $g_{hh_{n_L}(lh_{n_L})}(B_0, F)$ de cada um dos portadores para os diferentes números de Landau. Veja que existe uma mudança de sinal de g_{hh_0} para campos magnéticos acima de 12 T, onde a separação Zeeman dos estados hh_0^- e hh_0^+ torna-se mais transparente ou resolvida.

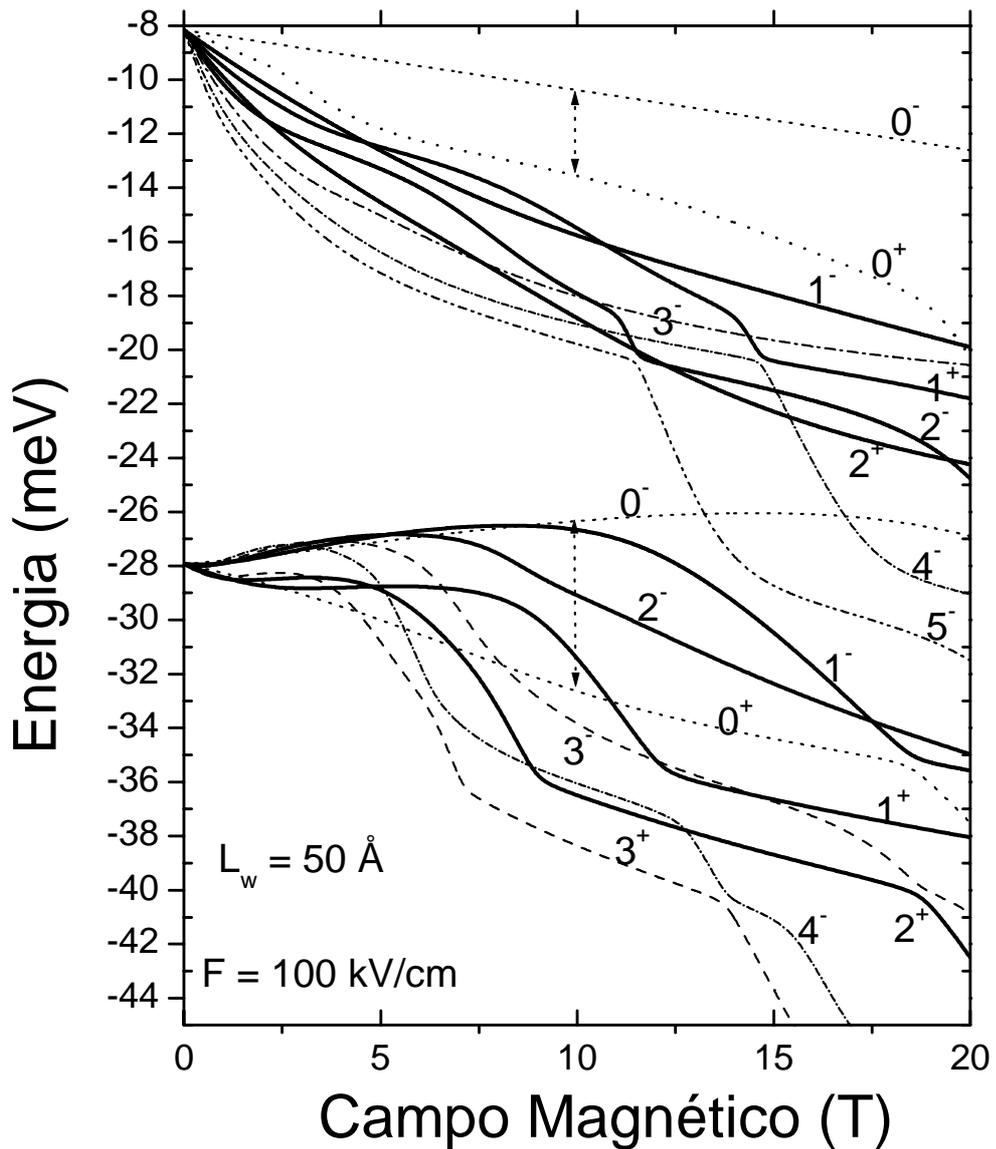


Figura 4-11: Dispersões magnéticas, em função do campo magnético, para um campo elétrico $F_0 = 100 \text{ kV/cm}$. Observe que o forte campo elétrico produz um empacotamento dos níveis e, portanto, um aumento das interações entre estados correlacionados de cada multiplete (aqueles acoplados para um dado índice N_L). Veja que a *separação Zeeman* dos estados hh_0^- e hh_0^+ foi completamente resolvida. A mudança de sinal do fator- g foi transferida para outros níveis (por exemplo hh_1^- e hh_1^+).

mudanças e introduzem distorções nas dispersões de energia de todos os estados. Em primeiro lugar, o campo “puxa” os autoestados em $B = 0$, para o topo da banda de valência (isto é, para o fundo do poço quântico). Este empacotamento de níveis produzirá um crescimento nas interações entre estados de cada multiplete correlacionado (aqueles acoplados com mesmo índice N_L). Este efeito juntamente com a quantização de *Landau* conduz à mudança nas posições relativas dos níveis de energia de *Landau* de cada portador e na energia *Zeeman*.

Para campos elétricos fortes, fica bem clara a completa resolução da *separação Zeeman* de hh_0^- e hh_0^+ , bem como também a supressão da região de mudança de sinal para esse *dubleto de Kramer*. Entretanto, o grupo hh_1^- , hh_1^+ (e hh_2^- , hh_2^+) exibe duas (três) regiões, onde é observado mudança de sinal no fator- g , um efeito causado puramente pelo forte campo elétrico. Finalmente, quando o campo magnético cresce, observamos um desdobramento nas curvas de dispersão com os ramos lh ocorrendo em um maior intervalo de energia se comparado com o dos ramos hh , visto que estes seriam comprimidos por alguns dos estados lh pertencentes ao mesmo grupo de interação ou de acoplamento. Acima de 15 T a energia dos estados lh_0^- é encontrada abaixo das energias dos estados *heavy-hole* de número de *Landau* grande, hh_4^- , hh_5^- , já que esses estão desacoplados em outros grupos, portanto podendo mostrar estas regiões de cruzamentos para valores específicos do campo magnético.

Claro que o cálculo de magneto-tunelamento através de uma heteroestrutura de barreiras duplas é um passo seguinte simples que está em fase de desenvolvimento.

Bibliografia

- [1] R. Tsu and L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [2] E. E. Mendez, W. I. Wang, B. Ricco, L. Esaki, Appl. Phys. Letter. **47**, 415 (1985).
- [3] A. Zaslavsky, D. A. Grützmacher, S. Y. Lin, T. P. Smith III, R. A. Kiehl, T. O. Sedwick, Phys. Rev. B **47**, 16036 (1993).
- [4] E. E. Mendez, L. Esaki and W. L. Wang, Phys. Rev. B **33**, 2893 (1986).
- [5] S. Wongmanerod et al., Phys. Rev. B **62**, 15952 (2000).
- [6] B. E. Cole et al., Phys. Rev. B **55**, 2503 (1997).
- [7] R. Wessel, M. Altarelli, Phys. Rev. B **39**, 12 802 (1989).
- [8] D.L. Smith, C. Mailhot, Phys. Rev. B **33**, 8345 (1986).
- [9] M. Cahay, M. McLennan, S. Datta. Phys. Rev. B **17**, 10125 (1988).
- [10] A. C. Bittencourt, A. M. Cohen, G. E. Marques, Phys. Rev. B **57**, 4525 (1998).
- [11] P. W. Anderson, Phys. Rev. B **23**, 4828 (1981).
- [12] Y. X. Liu, D. Z. Y Ting, T. C. McGill, Phys. Rev. B **54**, 5675 (1996).
- [13] C. Y. P. Chao. S. L. Chuang, Phys. Rev. B **43**, 7027 (1990).
- [14] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. B **8**, 2697 (1973).

[15] H. Y. Chu, P. W. Park, S. G. Han, E. Lee, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, 1355 (1994).

Capítulo 5

Formalismo $k \cdot p$ para Potenciais AC

O uso de métodos dependentes do tempo para se investigar o tunelamento de elétrons ou de buracos em heteroestruturas semicondutoras ganhou tremenda importância nas últimas décadas. Uma grande variedade de métodos numéricos para se resolver a equação de *Schrödinger* dependente do tempo foram desenvolvidos, entre os quais podemos destacar *Split-Operator* [1, 2, 3], *Crank-Nicholson* [4] e *Lanczos* [5]. Em alguns destes esquemas pode ser necessário um incremento de tempo τ bastante pequeno para que se obtenha uma solução com razoável precisão. Nestes casos são exigidos grandes esforços computacionais, principalmente quando os potenciais envolvidos dependem explicitamente do tempo. Dessa forma, gostaríamos de construir esquemas mais precisos que pudessem gerar boa precisão numérica usando estruturas computacionais simples.

Algumas aproximações polinomiais [6] para se propagar uma solução da equação de *Schrödinger* dependente do tempo foram testadas, utilizando a primeira e segunda ordem da expansão de *Magnus* do operador evolução para aumentar estabilidade e melhorar a precisão das soluções numéricas. Recentemente, um esquema implícito [7] de alta ordem de precisão $O(\tau^{2M})$ foi obtido, usando-se as expansões de *Magnus* para o operador evolução e a aproximação diagonal de *Padé* (M/M), e foi aplicado a um problema simples como a do oscilador harmônico unidimensional.

Neste trabalho nós estamos interessados em desenvolver este formalismo implícito

dentro da formulação multibandas da aproximação de massa efetiva onde a precisão chegue a $O(\tau^5)$ com possibilidades de aplicações nos estudos de *dinâmicas transientes e coerentes* para os diferentes tipos de portadores em uma heteroestrutura, usando um Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Neste capítulo discutiremos os principais detalhes da montagem desse esquema que será usado no Capítulo 6 no cálculo das propriedades dinâmicas de todos os tipos de portadores em uma heteroestrutura do tipo poço quântico, sob a ação de fortes campos elétricos AC .

5.1 O Método Numérico

A evolução temporal das funções de ondas em heteroestruturas semicondutoras são obtidas resolvendo a equação de *Schrödinger* dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.45)$$

onde $H(\mathbf{r}, t) = H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t)$ é operador Hamiltoniano do sistema com $V(\mathbf{r}, t)$ representando um potencial AC . Em geral, a solução da Eq. (5.45) para a função de onda, pode ser escrita na forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(\mathbf{r}, t_0) \quad (5.46)$$

onde $\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{D}\{\exp[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\mathbf{r}, t) dt]\}$ é o operador evolução temporal e \mathcal{D} o operador ordenamento cronológico de *Dyson*. Na Eq. (5.46) nós caracterizaremos o estado inicial do sistema pela função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, sem potenciais externos. Por outro lado, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ levará em conta a completa evolução do estado quando um campo externo $V(\mathbf{r}, t)$ for ligado.

Para resolvermos a Eq. (5.45) sob a condição (5.46) seguiremos o mesmo procedimento apresentado na Ref. [7], ou seja: (a) Assumindo que $T = \frac{2\pi}{\omega}$ é o período do campo AC , dividiremos o intervalo de tempo $[0, T]$ em K segmentos. Assim, definimos um deslocamento temporal, $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k = \tau$, onde τ determinará uma apropriada escala

de tempo para cada sistema em estudo; (b) A solução em $t = t_{k+1}$ é obtida através da função de onda em $t = t_k$, de acordo com a transformação

$$\Psi(\mathbf{r}, t_{k+1}) = \widehat{U}(t_{k+1}, t_k) \Psi(\mathbf{r}, t_k), \quad (5.47)$$

com

$$\widehat{U}(t_{k+1}, t_k) = \exp \{-i\tau \mathcal{H}_k\}. \quad (5.48)$$

Nesta expressão, \mathcal{H}_k é um Hamiltoniano efetivo que é obtido usando a expansão de *Magnus* [9]:

$$\mathcal{H}_k = \frac{1}{\tau \hbar} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt H(\mathbf{r}, t) + \frac{i}{2\tau \hbar^2} \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt' \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt'' [H(\mathbf{r}, t''), H(\mathbf{r}, t')] + \dots; \quad (5.49)$$

(c) Para uma desejável precisão ϵ , a série (5.49) é truncada em uma certa ordem $M = M(\epsilon, \tau)$ da expansão. Portanto, para um dado truncamento M , teremos

$$\widehat{U}(t_{k+1}, t_k) = \exp \{-i\tau \mathcal{H}_k\} + O(\tau^{2M+1}). \quad (5.50)$$

Para se visualizar a ordem de magnitude para um truncamento específico, M , podemos fazer uso da aproximação diagonal de *Padé* (M/M) [8] para a função exponencial, $\exp(z)$, que pode ser escrita na forma

$$\exp(z) = \prod_{s=1}^M \left[\left(1 + \frac{z}{z_s^*}\right)^{-1} \left(1 - \frac{z}{z_s}\right) \right] + O(z^{2M+1}), \quad (5.51)$$

onde z_s são os zeros da função hipergeométrica ${}_1F_1(-M, -2M, z)$. Com esta aproximação acima podemos generalizar a Eq. (5.51) para o operador exponencial $\exp \{-i\tau \mathcal{H}_k\}$. Logo,

de forma análoga, obtemos

$$\exp \{-i\tau \mathcal{H}_k\} = \prod_{s=1}^M \left(\mathbf{I} + \frac{\tau(\alpha_s^{(M)})^*}{2M} \mathcal{H}_k \right)^{-1} \left(\mathbf{I} + \frac{\tau\alpha_s^{(M)}}{2M} \mathcal{H}_k \right) + O(\tau^{2M+1}), \quad (5.52)$$

sendo \mathbf{I} o operador identidade e os parâmetros $\alpha_s^{(M)} = i2M/z_s$ estando relacionados com os respectivos M zeros de ${}_1F_1$. De acordo com as bem conhecidas propriedades dos M zeros, z_s , [8] temos as seguintes relações:

$$\text{Im} \{\alpha_s^{(M)}\} < 0 \text{ e } 0,6 < \text{Re}\{\alpha_s^{(M)}\} < 3,5714 \text{ para } s = 1, 2, \dots, M.$$

A representação (5.52) pode ser garantida para um dado intervalo de tempo, τ , que satisfaça a condição

$$\tau < 2M\mu \left\| \mathcal{H}_k^{(M)} \right\|^{-1}, \quad (5.53)$$

onde $\left\| \mathcal{H}_k^{(M)} \right\|$ define a norma do operador \mathcal{H}_k para um conjunto de funções $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ pertencentes ao espaço de *Hilbert* \mathbf{H} definido pelas soluções do Hamiltoniano $H(\mathbf{r}, t)$. Portanto é possível mostrar que o operador $\hat{T} = \prod_{s=1}^M \left(\mathbf{I} + \frac{\tau\alpha_s^{(M)}}{2M} \mathcal{H}_k \right) / \left(\mathbf{I} + \frac{\tau(\alpha_s^{(M)})^*}{2M} \mathcal{H}_k \right)$ é isométrico, isto é $\left\| \hat{T}\mathbf{u} \right\| = \|\mathbf{u}\|$, para qualquer estado $\mathbf{u} \in \mathbf{H}$. Então, segue-se que as funções auxiliares $\{\Psi^{k+s/M}\} \in \mathbf{H}$ com $s = 1, 2, \dots, M$ satisfazem as relações

$$\begin{aligned} \Psi^{k+s/M} &= \hat{T}\Psi^{k+(s-1)/M}, \quad s = 1, 2, 3, \dots, M \\ \|\Psi^k\| &= \|\Psi^{k+1/M}\| = \dots = \|\Psi^{k+1}\| \end{aligned} \quad (5.54)$$

ou, equivalentemente,

$$\left(\mathbf{I} + \frac{\tau(\alpha_s^{(M)})^*}{2M} \mathcal{H}_k^{(M)} \right) \Psi^{k+s/M} = \left(\mathbf{I} + \frac{\tau\alpha_s^{(M)}}{2M} \mathcal{H}_k^{(M)} \right) \Psi^{k+(s-1)/M}, \quad (5.55)$$

onde $s = 1, 2, \dots, M$ e $k = 1, 2, \dots, K - 1$.

As Eqs. (5.54) e (5.55) mostram um formalismo direto para obtermos uma solução da equação de *Schrödinger* dependente do tempo. Este é um formalismo de ordem $2M$ que

preserva a norma da função de onda em cada instante (passo) de tempo. Portanto, as funções $\Psi^{k+s/M}$ podem ser consideradas como uma solução aproximada no conjunto de instantes de tempo fracionário $t_{k+s/M} = t_k + \tau s/M$, com $s = 1, 2, \dots, M - 1$, no intervalo de tempo $[t_k, t_{k+1}]$.

Vamos primeiro considerar a aproximação de primeira ordem, que é equivalente a se considerar $M = 1$ nas relações acima. Neste caso, solução ${}_1F_1(-1, -2M, z) = 0$ tem somente uma solução, $z_1^{(1)} = -1$, ou seja, $\alpha_1^{(1)} = -i$. O Hamiltoniano efetivo, $\mathcal{H}_k^{(M)}$, pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_k^{(1)} = \frac{1}{\tau \hbar} \int_{t_k}^{t_k + \tau} H(t) dt = \frac{H(t_k + \tau/2)}{\hbar} + O(\tau^2). \quad (5.56)$$

Assim, a Eq. (5.55) tomará a forma:

$$\left(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar} H(t_k + \tau/2) \right) \Psi^{k+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{i\tau}{2\hbar} H(t_k + \tau/2) \right) \Psi^k. \quad (5.57)$$

Usando a transformação de *Cayley* [10], a expressão acima pode ser reduzida a bem conhecida relação de *Crank-Nicholson* [4]. Neste grau de precisão, reproduzimos os resultados dentro do famoso método de *Crank-Nicholson*.

Para se prosseguir adiante, podemos analisar o procedimento (5.55) que se obtém até segunda ordem, $M = 2$, na expansão de *Magnus* (5.49). De acordo com o formalismo desenvolvido, necessitamos do operador $\mathcal{H}_2^{(2)}$ que é obtido de forma exata, até ordem $O(\tau^4)$. Com $M = 2$, duas soluções emergem através dos zeros, $z_1^{(2)} = -3 + i/\sqrt{3}$, $z_2^{(2)} = -3 - i/\sqrt{3}$ e os coeficientes α tomando os seguintes valores, $\alpha_1^{(2)} = \alpha = -i + 1/\sqrt{3}$, $\alpha_2^{(2)} = -\alpha^* = -i - 1/\sqrt{3}$. Assim, a relação funcional (5.55) pode ser reduzida para um conjunto de duas equações acopladas:

$$\left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(i + 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)} \right) \Psi^{k+1/2} = \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(-i + 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)} \right) \Psi^k \quad (5.58a)$$

$$\left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(i - 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)}\right)\Psi^{k+1} = \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(-i - 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)}\right)\Psi^{k+1/2}. \quad (5.58b)$$

Desta maneira, a evolução do sistema para $t = t_{k+1}$ pode ser escrita em termos da função de onda para $t = t_k$ na forma

$$\Psi^{k+1} = \widehat{U}(t_{k+1}, t_k)\Psi^k, \quad (5.59)$$

onde o operador evolução, até ordem $O(\tau^5)$ de precisão, é dado por:

$$\begin{aligned} \widehat{U}(t_{k+1}, t_k) = & \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(i - 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)}\right)^{-1} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(-i - 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)}\right) \times \\ & \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(i + 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)}\right)^{-1} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(-i + 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)}\right). \end{aligned} \quad (5.60)$$

É possível mostrar que o operador $\widehat{U}(t_{k+1}, t_k)$ satisfaz a necessária condição de unitariedade:

$$\widehat{U}(t_{k+1}, t_k)[\widehat{U}(t_{k+1}, t_k)]^\dagger = [\widehat{U}(t_{k+1}, t_k)]^\dagger\widehat{U}(t_{k+1}, t_k) = 1 \quad (5.61)$$

isto é, preserva as normas das funções de onda dos estados até ordem $O(\tau^5)$.

5.2 Modelo do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Dependente do Tempo

A dinâmica dos estados eletrônicos em poços quânticos formados por heteroestruturas semicondutoras III-V or II-VI, com simetria *zincblende*, submetidas a um campo elétrico AC pode ser descrito pelo Hamiltoniano 6×6 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ já discutido na Capítulo 2. Aplicando-se um campo elétrico ao longo da direção de crescimento do poço quântico (direção- z), o potencial externo AC pode ser escrito como $V(z, t) = -eF_0z \cos(\omega t - \frac{\pi}{2})$, onde F_0 é a intensidade do campo. A fase determinará que, em $t = 0$, os estados são soluções do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ sem o campo AC . Dentro da aproximação de massa efetiva uma

função de onda de um dado estado no poço quântico, terá 6 componentes e toma a seguinte forma:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{S}} \sum_{v=1}^6 F_v(z, t) u_{v0}(\mathbf{r}), \quad (5.62)$$

onde $\{u_{v0}(\mathbf{r})\}$, $\nu = 1, 2, \dots, 6$ é o conjunto das funções de *Bloch* no ponto Γ da zona de *Brillouin*, F_v é a função envelope para cada portador associado com o movimento ao longo da direção- z , \mathbf{k} e $\boldsymbol{\rho}$ são, respectivamente, os vetores de onda e posição no plano xy e S é uma constante de normalização.

A dinâmica do elétron na banda de condução ou de buracos na banda de valência, de acordo com o modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ multibandas, é determinado por um conjunto de equações diferenciais acopladas para as seis funções envelopes $\{F_v\}$:

$$ih \frac{\partial}{\partial t} F_\nu(z, t) = \sum_{v'=1}^6 \left\{ H_{\nu\nu'} \left(\mathbf{k}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + (V_0(z) + V(z, t)) \delta_{\nu\nu'} \right\} F_{v'}(z, t), \quad \nu = 1, 2, \dots, 6. \quad (5.63)$$

Nesta expressão, $V_0(z)$ é o potencial estático que confina os portadores dentro do poço quântico com as interfaces colocadas em $z = \pm d/2$, isto é, $V_0(z)$ é definido pelos *band-offsets* $\Delta E^{c(v)}$ para banda de condução (valência) nas interfaces e $H_{\nu\nu'}$ são os elementos de matriz do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, e escritos na forma:

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{D}^{(2)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{D}^{(1)}, \frac{\partial}{\partial z} \right\} + \mathbf{D}^{(0)}, \quad (5.64)$$

onde $\mathbf{D}^{(j)}$ ($j = 0, 1, 2$), é a matriz dos coeficientes $(\partial/\partial z)^j$ do Hamiltoniano $\mathbf{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$.

Como foi dito, a condição inicial para o nosso sistema, $\Psi(\mathbf{r}, 0)$, será um estado localizado, solução de $\mathbf{H}_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$, representando um dado portador na banda de condução ou na banda de valência do poço quântico. Portanto o estado inicial do pacote, $\Psi(\mathbf{r}, 0)$, é formado por uma combinação linear do conjunto de funções $\{F_v(z, 0)\}$ descritas pela soluções da equação de *Schrödinger* do poço quântico,

$$\sum_{v'=1}^6 \left[H_{vv'} \left[\mathbf{k}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right] + V_0(z) \delta_{vv'} \right] F_{v'}(z, 0) = E(\mathbf{k}) F_v(z, 0), \quad \nu = 1, 2, \dots, 6. \quad (5.65)$$

As soluções deste conjunto de equações diferenciais acopladas, no potencial estático são obtidas com a combinação dos métodos de diferenças finitas e da *Potência Inversa*, já descritos em detalhes no Capítulo 3. Procedendo, então, da mesma forma que naquele capítulo obtém-se

$$\mathbf{H}_{\sigma, \sigma-1} \mathbf{F}_{\sigma-1} + \mathbf{H}_{\sigma, \sigma} \mathbf{F}_{\sigma} + \mathbf{H}_{\sigma, \sigma+1} \mathbf{F}_{\sigma+1} = E_{\sigma} \mathbf{F}_{\sigma}, \quad \sigma = 1, 2, \dots, N \quad (5.66)$$

onde \mathbf{F}_{σ} é um vetor de ordem 6 e cujos valores são dados em cada sítio da rede, $z = z_{\sigma}$, no instante $t = 0$, ($F = [F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6]$). Neste esquema,

$$\mathbf{H}_{\sigma, \sigma} = \mathbf{D}^{(0)}(z_{\sigma}) + V_0(z_{\sigma}) - \frac{\mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma-1/2}) + \mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma+1/2})}{a^2} \quad (5.67a)$$

$$\mathbf{H}_{\sigma, \sigma \pm 1} = \frac{\mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma \pm 1/2})}{a^2} - \frac{\mathbf{D}^{(1)}(z_{\sigma}) + \mathbf{D}^{(1)}(z_{\sigma \pm 1})}{4a} \quad (5.67b)$$

onde $\mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma \pm 1/2}) = \frac{\mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma}) + \mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma \pm 1})}{2}$, $z_{\sigma \pm 1} = z_{\sigma} \pm a$ e $a = d/N$ é o intervalo de discretização ao longo do eixo z . É importante salientar que o método numérico dependente do tempo, descrito na seção (5.1), pode ser aplicado imediatamente para operadores Hamiltonianos $\overline{H}(\mathbf{r}, t)$ que são “*bounded*” no espaço de *Hilbert* onde as soluções são investigadas. Neste caso podemos garantir que existe uma norma para o operador $\mathcal{H}_k^{(M)}$ ($\left\| \left\| \mathcal{H}_k^{(M)} \right\| \right\|$), que existe convergência para a expansão (5.52), para todos os intervalos de tempo τ que cumprirem com a condição dada na Eq. (5.53)]. Portanto a equação matricial para o problema estacionário dado pela Eq. (5.66) apresenta um conjunto de autovalores e autofunções.

De maneira a satisfazer a condição necessária para que exista a norma do operador $\mathcal{H}_k^{(M)}$, nós resolvemos nosso problema para um espaço de *Hilbert* restrito, onde $\overline{H} = \overline{H}(z)$ será definido na região do espaço, $[-L, L]$ ($L \gg d$), onde se imporá as condições de

contorno

$$F_v(-L, 0) = F_v(L, 0) = 0. \quad (5.68)$$

A condição $L \gg d$ torna-se necessária para que se evite indesejáveis interferências entre estados. A simulação será realizada no intervalo $[-L, L]$, ($2L \sim d$ onde d será a dimensão da ordem da secção do feixe do laser que, em geral, tem ordem de poucos μm).

Uma vez conhecidas as funções envelopes $F_v(\mathbf{r}, 0)$, $v = 1, 2, \dots, 6$, podemos construir o estado inicial $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ para estender o formalismo dependente do tempo para o Hamiltoniano multibandas. Na representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, a Eqs (5.58a) e (5.58b), para cada tempo t , podem ser escritas como:

$$\left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(i + 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)} \right) \mathbf{F}_\nu^{k+1/2}(z) = \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(-i + 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)} \right) \mathbf{F}_\nu^k(z), \quad (5.69a)$$

$$\left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(i - 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)} \right) \mathbf{F}_\nu^{k+1}(z) = \left(\mathbf{I} + \frac{1}{4}\tau(-i - 1/\sqrt{3})\mathcal{H}_k^{(2)} \right) \mathbf{F}_\nu^{k+1/2}(z). \quad (5.69b)$$

Essas duas equações diferenciais acopladas podem ser resolvidas, seguindo as prescrições do método das diferenças finitas. Isto é, o primeiro conjunto de equações (5.69a) nos fornecerá o vetor $\mathbf{F}_\nu^{k+1/2}(z_i)$ desde que os valores $\mathbf{F}_\nu^k(z_i)$ ($i = 1, 2, \dots, N$) sejam conhecidos. Assim, as funções $\mathbf{F}_\nu^{k+1/2}(z_i)$ são obtidas resolvendo-se o sistema de equações lineares

$$\begin{bmatrix}
(\mathcal{L}_k^{(2)})_{1,1} & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{1,2} & 0 & \dots & 0 \\
(\mathcal{L}_k^{(2)})_{2,1} & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{2,2} & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{2,3} & \dots & 0 \\
0 & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{3,2} & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{3,3} & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\
0 & 0 & \dots & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{N-1,N-1} & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{N-1,N} \\
0 & \dots & \dots & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{N,N-1} & (\mathcal{L}_k^{(2)})_{N,N}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\mathbf{F}_1^{k+1/2} \\
\mathbf{F}_2^{k+1/2} \\
\vdots \\
\mathbf{F}_{N-1}^{k+1/2} \\
\mathbf{F}_N^{k+1/2}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\mathbf{f}_1^k \\
\mathbf{f}_2^k \\
\vdots \\
\mathbf{f}_{N-1}^k \\
\mathbf{f}_N^k
\end{bmatrix}, \quad (5.70)$$

onde os operadores diferenciais matriciais têm a forma:

$$\begin{bmatrix}
(\mathcal{L}_k^{(2)}(\alpha))_{\sigma,\sigma\pm 1} = -\frac{\tau\alpha}{4} \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma\pm 1/2})}{a^2} - \frac{\mathbf{D}^{(1)}(z_\sigma) + \mathbf{D}^{(1)}(z_{\sigma\pm 1})}{4a} \right) \mp \frac{g_2 \mathbf{D}^{(2)}(z_\sigma)}{a} \right\}, \\
(\mathcal{L}_k^{(2)}(\alpha))_{\sigma,\sigma} = \mathbf{I} - \frac{\tau\alpha}{4} \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\mathbf{D}^{(0)}(z_\sigma) + V_0(z_\sigma) - \frac{\mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma-1/2}) + \mathbf{D}^{(2)}(z_{\sigma+1/2})}{a^2} \right) \right. \\
\left. + z_\sigma g_1 \mathbf{I} + \frac{\mathbf{D}_{\sigma+1}^{(1)}(z_{\sigma+1}) - \mathbf{D}_{\sigma-1}^{(1)}(z_{\sigma-1})}{2a} \right\}.
\end{bmatrix} \quad (5.71a)$$

Nesta última expressão, os coeficientes são dados por

$$g_1(\omega, t_k, F_0) = \left(\frac{eF_0}{\hbar\omega\tau} \right) [\text{sen}(\omega t_{k+1}) - \text{sen}(\omega t_k)], \quad (5.71b)$$

$$g_2(\omega, \tau, F_0) = \frac{ieF_0}{2(\hbar\omega)^2\tau} \{ \omega\tau [\text{sen}(\omega t_{k+1}) + \text{sen}(\omega t_k)] + 2 [\cos(\omega t_{k+1}) - \cos(\omega t_k)] \}. \quad (5.71c)$$

A evolução dos estados para cada instante, se obtém com $t_k \rightarrow t_k - \frac{\pi}{2\omega}$.

Os vetores, \mathbf{f}_σ^k , da Eq. (5.70), são obtidos de maneira similar através da expressão:

$$\mathbf{f}_\sigma^k = (\mathcal{L}_k^{(2)}(-\alpha^*))_{\sigma,\sigma-1} \mathbf{F}_{\sigma-1}^k + (\mathcal{L}_k^{(2)}(-\alpha^*))_{\sigma,\sigma} \mathbf{F}_\sigma^k + (\mathcal{L}_k^{(2)}(-\alpha^*))_{\sigma,\sigma+1} \mathbf{F}_{\sigma+1}^k. \quad (5.72)$$

De maneira completamente análoga podemos obter todos os elementos do conjunto de valores para as funções envelope $\{\mathbf{F}^{k+1}(z_\sigma)\}$, usando a Eq. (5.69b) e tomando a evolução no tempo entre t_{k+1} e $t_{k+1/2}$.

Tendo completado a descrição de montagem dos detalhes do método numérico que usaremos para encontrar as soluções da equação de massa efetiva multibandas dependente do tempo, vamos mostrar, no próximo capítulo, como podemos estudar as *dinâmicas transientes* de cada um dos vários tipos de portadores em um poço quântico e sob a ação de um potencial AC .

Bibliografia

- [1] M. D. Feit , J. A. Fleck, J . Phys. Chem, **78** (8), 301, (1983).
- [2] M. H. Degani, Appl. Phys. Lett., **59** (1), 57, (1991).
- [3] M. H. Degani, Phys. Rev. B, **44** (11), 5580, (1991).
- [4] E. A. McCullough Jr. , R. E. Wyatt, J. Chem. Phys. **51**, 1253 (1969).
- [5] Tae Jun Park, J. C. Light, J. Chem. Phys. **85** (10), 5870 (1986).
- [6] H. Tal-Ezer, R. Kosloff, C. Cerjan, J. Comput. Phys. **100** (1992) 179.
- [7] I. V. Puzynin, A.V. Selin, S. I. Vintsky, Computer Physics Communications **123**, 1–6 (1999).
- [8] G. A. Baker Jr. and P. Graves-Morris, *Padé Approximants* (Addison-Wesley, London,1981).
- [9] W. Magnus, Comm. Pure Appl. Math. **7**, 649 (1954); R. M. Wilcox. J. Math Phys **.8**, 962 (1967); G. Dattoli, J. C Gallardo, A. Torre, Rivista del Nuovo Cimento 11, **1** (1988).
- [10] Abraham Goldberg , Harry M. Schey, American Journal of Physics, 35, **3** (1967).
- [11] E. O. Kane. in: *The $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Method*, Eds. R. K. Williardson and A.C. Beer, Semiconductors and Semimetals, Vol. **1**, Academic Press, New Work 1996 (p. 75).

- [12] Veja, por exemplo, G. W. Steward, *Introduction to Matrix Computations* (Academic Press, New York, 1973).

Capítulo 6

Dinâmicas *Transientes e Coerentes* de Portadores

Neste capítulo vamos usar o formalismo numérico, descrito no capítulo anterior, para estudar, discutir e apresentar resultados para as propriedades dinâmicas transientes de elétrons e de buracos, em um poço simples de GaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As. Os portadores estarão submetidos a um campo *AC*, $V(z, t) = -eF_0z \cos(\omega t - \pi/2)\mathbf{I}$, sendo \mathbf{I} a matriz identidade.

Esses resultados serão apresentados em função de dois parâmetros básicos. O primeiro, definido pela energia, E , de um portador como $\alpha = \frac{E}{\hbar\omega}$. Isto define uma razão entre as frequências de localização espacial ($\omega_l = \frac{E}{\hbar}$) e a do campo *AC*, para cada um dos diversos portadores. Ele tem como principal característica a definição dos comportamentos dinâmicos (respostas) associados com as diferenças entre as massas efetivas dos portadores para uma mesma frequência *AC*. O segundo, definido como $\beta = eF_0L_z/\hbar\omega$, está associado com a razão entre a frequência de *Bloch*, definida como $\omega_B^{ac} = \frac{eF_0L_z}{\hbar}$, e a frequência ω do campo *AC*. É claro que β é determinado pela intensidade do campo aplicado e por uma distância característica do sistema, L_z , que é a largura do poço quântico. Do ponto de vista clássico, ω_B^{ac} mede o número de vezes, por unidade de tempo, que um portador choca com uma dada barreira, devido a ação imposta pelo campo elétrico.

Devido as diferenças entre massas efetivas dos vários tipos de portadores (elétrons ou buracos leves e pesados), os seus regimes dinâmicos serão distintos e dependem das relações entre as frequências características do campo AC , ω , com a frequência de Bloch, ω_B^{ac} , e com a frequência de localização espacial, ω_l . A energia do portador, ou a frequência de localização espacial determinará os limites, $\omega_l < \omega$ (regime de alta frequência) e $\omega_l > \omega$ (regime de baixa frequência), respectivamente. Para esses dois regimes diferentes, a intensidade do campo AC aplicado será considerada alta quando $\omega_B^{ac} > \omega$ (campo forte) e fraca quando $\omega_B^{ac} < \omega$ (campo fraco).

Para descrevermos essas dinâmicas tornar-se-á necessário usar um modelo que descreva bem não só as bandas de energia de cada portador mas, principalmente, as suas inerentes diferenças. Para isso, utilizamos o modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que apresenta uma dinâmica bem mais completa e com sérias diferenças se comparados ao modelo de Hamiltoniano parabólico para tratarmos cada um dos portadores. Essas diferenças podem ser melhor observadas, analisando-se e comparando as relações de dispersão em cada modelo, que exemplificamos na Fig. (6-1). Note que tanto a energia cinética de elétrons e buracos como o ordenamento crescente dos níveis na banda de valência, são completamente diferentes nos dois modelos. Para facilitar a comparação dentro da banda de condução, usamos um valor de massa efetiva diferente para o elétron no modelo parabólico, afim de que os resultados para o nível E_1 , nos dois modelos, coincidissem para $k = 0$. Nosso interesse então seria usar o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para estudarmos as dinâmicas destes portadores assim como os efeitos da não-parabolicidade destas dispersões de energia nos seus comportamentos dinâmicos.

Nas seções seguintes estaremos estudando e apresentando os resultados referentes às *quase-energias*, $E_n(t)$, as probabilidades de tunelamento, $\Pi(t)$, e os deslocamentos médios dos portadores, $\langle Z_m(t) \rangle$. Vamos mostrar exemplos e discussões sobre as condições necessárias para se observar o fenômeno de *Localização Dinâmica* para o modelo multibandas, no sistema físico estudado.

Inicialmente, na seção (6.1) apresentaremos os resultados para as *quase-energias*, co-

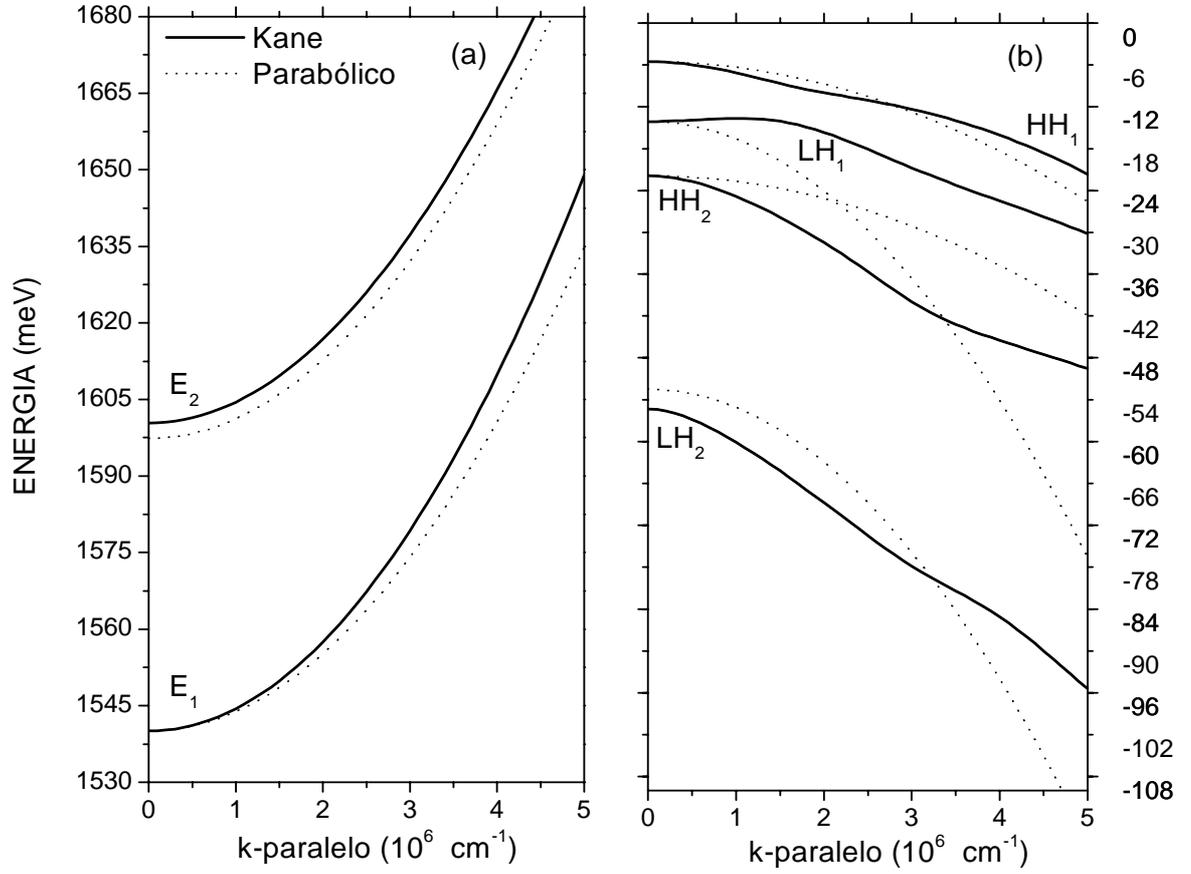


Figura 6-1: Comparação entre as estruturas eletrônicas dos portadores calculadas com o modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (linhas cheias) e com o modelo parabólico (linhas pontilhadas) para um poço quântico, GaAs-Ga_{0,7}Al_{0,3}As, com largura $L_z = 100 \text{ \AA}$. A parte (a) corresponde a estrutura eletrônica da banda de condução e a parte (b) da banda de valência. A massa efetiva do elétron ($m_e = 0,0665m_0$) em GaAs foi modificada ($m_e = 0,09155 m_0$), para que o primeiro estado, E_1 em $k = 0$, nos dois modelos tivessem o mesmo valor de energia.

mo função do tempo, para diversos portadores, e como função do parâmetro β para uma frequência fixada (α fixado). Neste caso determinaremos em que condições poderemos observar o chamado “efeito Stark AC”. Nas seções (6.2) e (6.3) apresentaremos, respectivamente, os resultados para os deslocamentos médios dos portadores e suas probabilidades de tunelamento que determinarão as condições e os detalhes para se chegar a *localização dinâmica*. Outros dados importantes que serão estimados são os tempos típicos de tunelamento para os diferentes portadores, ao calcularmos as taxas de tunelamento (fluxos de partículas) através do sistema. Finalmente na seção (6.4) apresentaremos um rápido estudo dos comportamentos dinâmicos para $k \neq 0$.

Todos os efeitos que serão apresentados e analisados são referentes a um único poço quântico de GaAs-Ga_{0,7}Al_{0,3}As com largura, $L_z = 100 \text{ \AA}$, e com barreiras laterais, $L_b = 450 \text{ \AA}$. Mostramos na Fig. (6-2) uma amostra esquemática dos efeitos do campo elétrico sobre um poço quântico quando submetido a um potencial AC assim como as distâncias usadas nesse trabalho. As longas distâncias usadas para as barreiras são importantes para evitarmos possíveis reflexões ou interferências além de não afetarem os valores das auto-energias do Hamiltoniano $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}$. É sempre importante evitar possíveis interferências entre estados uma vez que mascarariam as suas propriedades dinâmicas.

Neste trabalho, as frequências angulares, ω , serão medidas em unidades de meV/\hbar , para facilitar a comparação com os valores típicos de auto-energias no material.

6.1 Propriedades das *Quase-energias* dos Portadores

Nos sistemas submetidos a um potencial dependente do tempo, a energia de uma dada partícula não será uma quantidade conservada. As essas quantidades dependentes instantaneamente do tempo, as denominaremos de *quase-energias*. A determinação destes valores nos dará informações importantes sobre como um dado portador está recebendo ou dando energia para o campo AC aplicado. Definimos a *quase-energia* dependente do

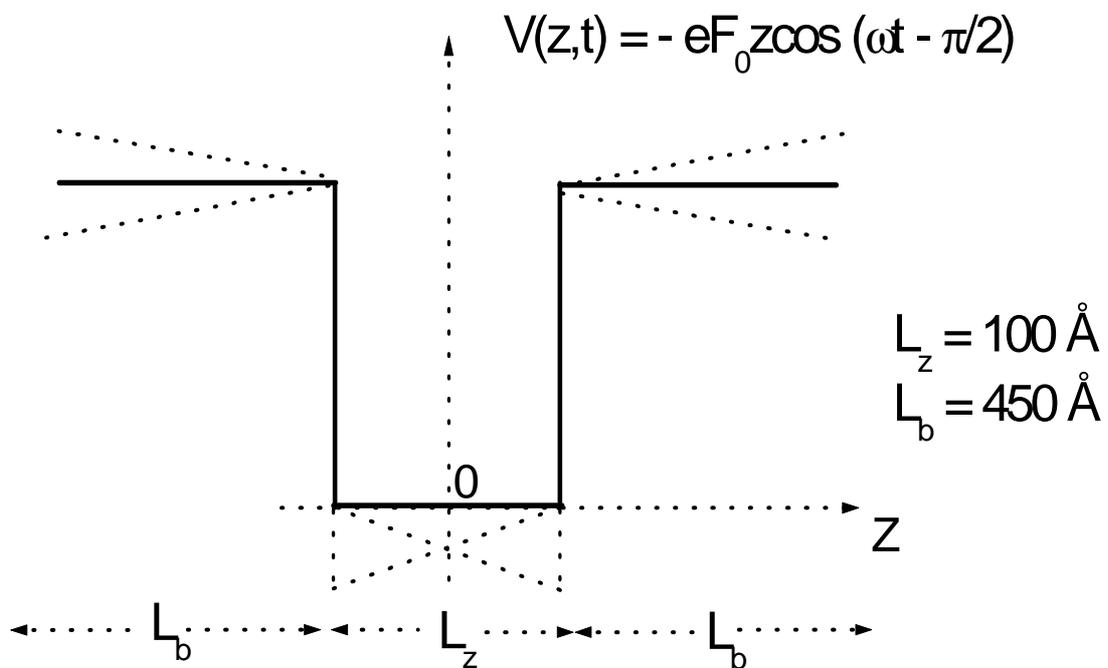


Figura 6-2: Poço quântico submetido a um campo AC , $-eF_0 z \cos(\omega t - \pi/2)$. As linhas pontilhadas mostram o efeito do potencial AC sobre o potencial estático da heteroestrutura.

tempo para um dado estado, como:

$$\mathcal{E}(t) = \langle \mathbf{F}(z, t) | H(z, t) | \mathbf{F}(z, t) \rangle \quad (6.1)$$

onde $\mathbf{F}(z, t)$ são os estados do sistema determinados pelo operador evolução e descritos anteriormente no Capítulo 5. Também, $H(z, t) = H_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} + [V(z) - eF_0 z \cos(\omega t - \frac{\pi}{2})] \mathbf{I}$ é o Hamiltoniano total que determina a dinâmica de cada portador do sistema sob a ação do campo AC e do potencial (estático) de confinamento espacial, $V(z)$, que é determinado através dos *off-sets* para cada tipo de portador. O primeiro termo independente do tempo, $H_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}$, já foi bastante discutido nas aplicações para algumas situações estáticas estudadas nos capítulos anteriores.

A seguir, discutiremos as peculiaridades das *quase-energias* dos vários portadores, elétrons e buracos, ($E_1, HH_1, LH_1, HH_2, LH_2, \dots$) calculadas para dois valores especiais da frequência AC , $\omega_1 = 0,0125 \text{ meV}/\hbar$ e $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$. O primeiro (segundo) valor está associado com o primeiro (segundo) zero da função de *Bessel*, $J_0(\beta)$, que é solução analítica para o operador evolução temporal, quando a dinâmica do sistema é governada pelo modelo parabólico de Hamiltoniano. A intensidade do campo elétrico aplicado, $eF_0 = 0,2 \text{ meV}/\text{\AA}$, ou ainda o valor do campo elétrico AC , $F_0 = 20 \text{ kV/cm}$ ($1 \text{ meV}/\text{\AA} = 10 \text{ kV/cm}$), são parâmetros comuns usados na maioria dos exemplos estáticos.

A dinâmica de um elétron, com energia E_1 , para a frequência ω_1 [Fig. (6-3)] é mostrada na parte (a). Note que o portador apresenta uma periodicidade onde o seu período tem um valor exatamente igual a metade do período do campo ou do potencial AC aplicado. Esta propriedade existe uma vez que o Hamiltoniano total possui a seguinte simetria combinada,

$$H(-z, t + \frac{T}{2}) = H(z, t). \quad (6.2)$$

Isto é, uma troca de sinal tanto no termo temporal (coseno) como no termo espacial, z , deixará o Hamiltoniano invariante. Claro que o potencial do poço quântico, devido

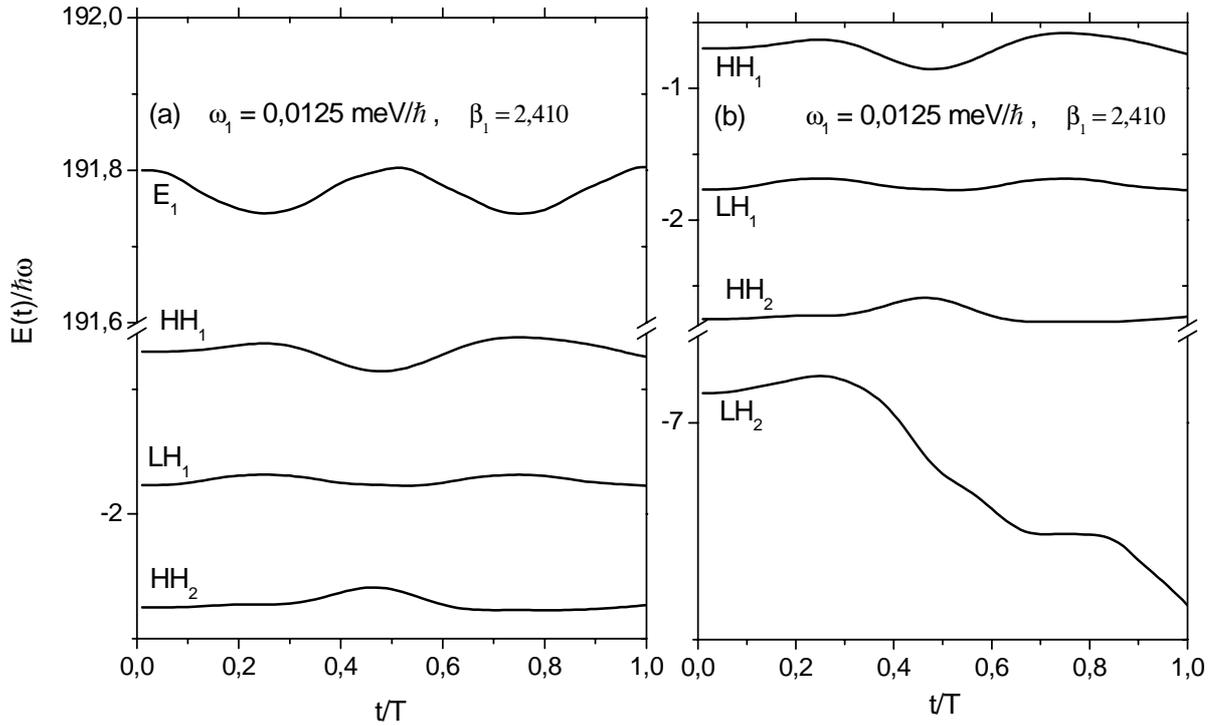


Figura 6-3: *Quase-Energias* dos portadores, em função do tempo, num poço quântico de GaAs-Ga_{0,7}Al_{0,3}As. Usamos $k = 0$ e $\omega_1 = 0,0125 \text{ meV}/\hbar$ (parte a), correspondendo ao primeiro zero da função de Bessel $J_0(\beta_1)$, ($\beta_1 = 2,410$). Na parte (a) mostramos a *quase-energia* do elétron E_1 e dos buracos (HH_1 , LH_1 , HH_2), e na parte (b) mostramos só as *quase-energias* dos estados da banda de valência.

aos *off-sets*, também possui a simetria de inversão, uma vez que a origem do sistema de coordenadas foi escolhido no centro do poço. Mais claramente, quando estamos tratando do cálculo dos valores das *quase-energias* num período, tudo o que aconteceu durante a fração de intervalo de tempo $(0, \frac{T}{2})$ para cada portador, será repetido na fração de intervalo seguinte $(\frac{T}{2}, T)$. Esta simetria é equivalente ao caso onde tivéssemos invertido o sentido (sinal) do campo elétrico. Esta troca ou inversão não poderia modificar um dado autovalor de energia de um portador submetido a este potencial estático, tanto para um campo elétrico aplicado ao longo do eixo positivo quanto ao longo do negativo.

A Fig. (6-4) abaixo, mostrando a densidade de probabilidades para os estados de elétrons,

nos instantes $\frac{T}{4}$ e $\frac{3T}{4}$, onde atingiríamos a máxima amplitude (ou inclinação) do campo (do potencial). Note que esta figura ilustra, com bastante clareza, os argumentos descritos acima e que deram origem a metade da periodicidade para as quase-energias de um dado portador, desde que estejam num regime de baixa frequência onde conseguisse acompanhar (ou responder) as variações temporais do campo elétrico. Para esta simulação usamos um campo bastante forte, para mostrar as configurações, $\pm eF_0z$ (onde o campo $eF_0 = 67$ kV/cm), das densidades de probabilidades (ou localizações espaciais) dos portadores.

Esta propriedade dinâmica, relacionada com uma simetria ou invariância do Hamiltoniano, ficará ainda mais evidente (para o elétron), quando o campo AC é aplicado com uma frequência ainda menor, como $\omega = \omega_2$, o segundo zero de $J_0(\beta)$, que veremos mais adiante.

Note mais ainda, que o portador LH_1 da Fig. (6-3) apresenta uma dinâmica quase idêntica à do elétron, porém em uma escala um pouco menor, que é devido à pequena diferença entre as respectivas massas efetivas destes portadores. Mais importante, observe que o par elétron-buraco-leve está fortemente acoplado no modelo de *Kane*, uma mistura existente mesmo para $\mathbf{k} = 0$. Isto pode ser visto na forma do elemento H_{16} do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que é proporcional ao operador $\frac{d}{dz}$. Claro que as *quase-energias* destes estados deverão oscilar de formas parecidas, porém mantendo uma diferença de fase π entre elas, um fato que pode ser observado nas duas figuras desta seção. Uma forma mais simples de ver esta fase π seria lembrarmos que um aumento do campo elétrico estático implica numa diminuição da energia do portador (delocalização ou estado ressonante), puxando-o para o fundo do poço.

Por outro lado, a *quase-energia* do estado fundamental do buraco pesado, HH_1 , mostrado nas partes (a) e (b) da Fig. (6-3), apresenta um comportamento quase-periódico uma vez que, devido ao valor muito maior de sua massa efetiva, possuirá uma energia pequena, isto é, mais próxima do fundo do poço quântico. Assim, este portador comportar-se-á como sujeito a uma dinâmica com um outro regime, $\omega_l < \omega$, de alta frequência ou

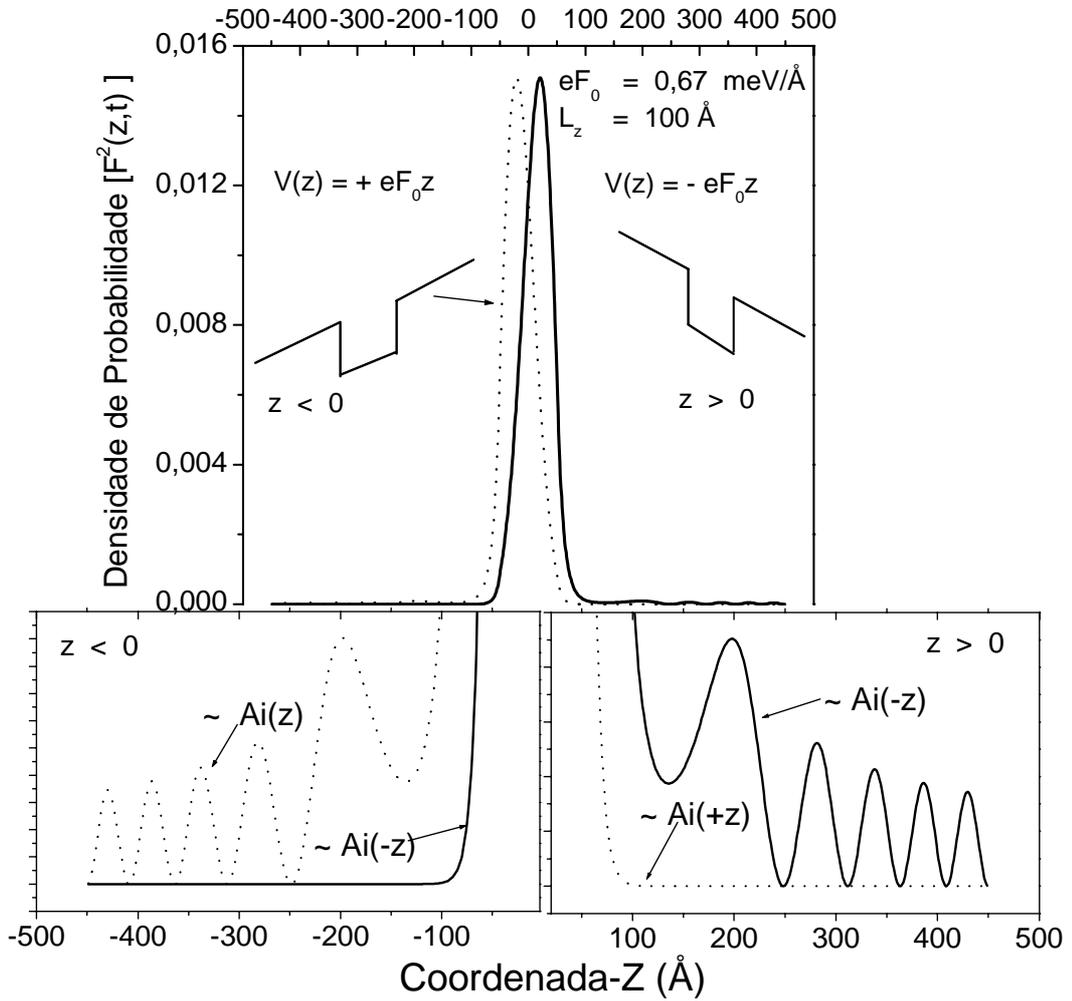


Figura 6-4: Densidade de probabilidade do elétron E_1 para duas configurações do campo elétrico, $\pm eF_0z$ ($eF_0 = 67 \text{ kV/cm}$). A linha cheia corresponde a configuração $+eF_0z$ e a linha pontilhada $-eF_0z$. Note a simetria das oscilações idênticas ao caso de uma função de *Airy* para campos elétricos estáticos.

de forte localização espacial, $\alpha \ll 1$. Logo, este portador não responderia instantaneamente a todas as excitações provenientes do campo elétrico AC , co-existindo com uma situação ligeiramente fora da ressonância entre a frequência AC e a frequência de Bloch, ω_B^{ac} .

Para uma frequência AC aplicada, $\omega_2 < \omega_1$, as *quase-energias* de todos os estados de valência (exceto LH_2), mostradas na Fig. (6-5), mudam para um regime de baixas frequências. Neste caso, exibem um acompanhamento perfeito com as variações do campo AC . O estado de elétron, como já mencionado acima, permanece no mesmo regime e conservando a periodicidade de ω_1 . Estes tipos diferentes de comportamentos são bastante claros para os portadores HH_1 , HH_2 assim como para o LH_1 que já era periódico na frequência maior, ω_1 . Contudo, o comportamento do estado excitado de buraco leve, LH_2 , apresenta uma dinâmica totalmente diferente dos outros três estados de valência, porque o seu autovalor de energia, no caso estático, ocorre muito próximo da borda do poço.

Então, a quase-energia do estado LH_2 , muito próxima do contínuo, deverá exibir uma dinâmica mista entre os regimes, $\omega_l \gg \omega$ de baixa frequência e a intensidade do campo aplicado, $\frac{eF_0L_z}{\hbar\omega} = \beta \gg 1$, determinando também a situação $\omega_B^{ac} > \omega$ de um campo forte. Desta forma, este portador estará muito mais sensível às variações do campo, exibindo fácil probabilidade de tunelamento ou mesmo estando completamente liberado do potencial estático (energia passa para o contínuo, acima do *off-set*). De uma forma mais simples, o campo levanta uma extremidade do poço e abaixa a outra, junto das interfaces. Dependendo da quantidade de energia deslocada, este estado pode passar de uma situação de quase-localizado espacialmente para outra completamente ressonante ou quase-livre. Isso pode ser observado na Fig. (6-6), para distâncias longe do centro do poço, onde o valor da densidade de probabilidade, $|\Psi_{LH_2}(z, t = \frac{T}{4})|^2$, é várias ordens de grandeza superior aos valores dos outros três estados que estão numa situação de “*dinamicamente localizados*”. Este estados localizados sofrerão menores efeitos das variações do campo AC e, assim, suas *quase-energias* ficarão bem próximas dos valores no

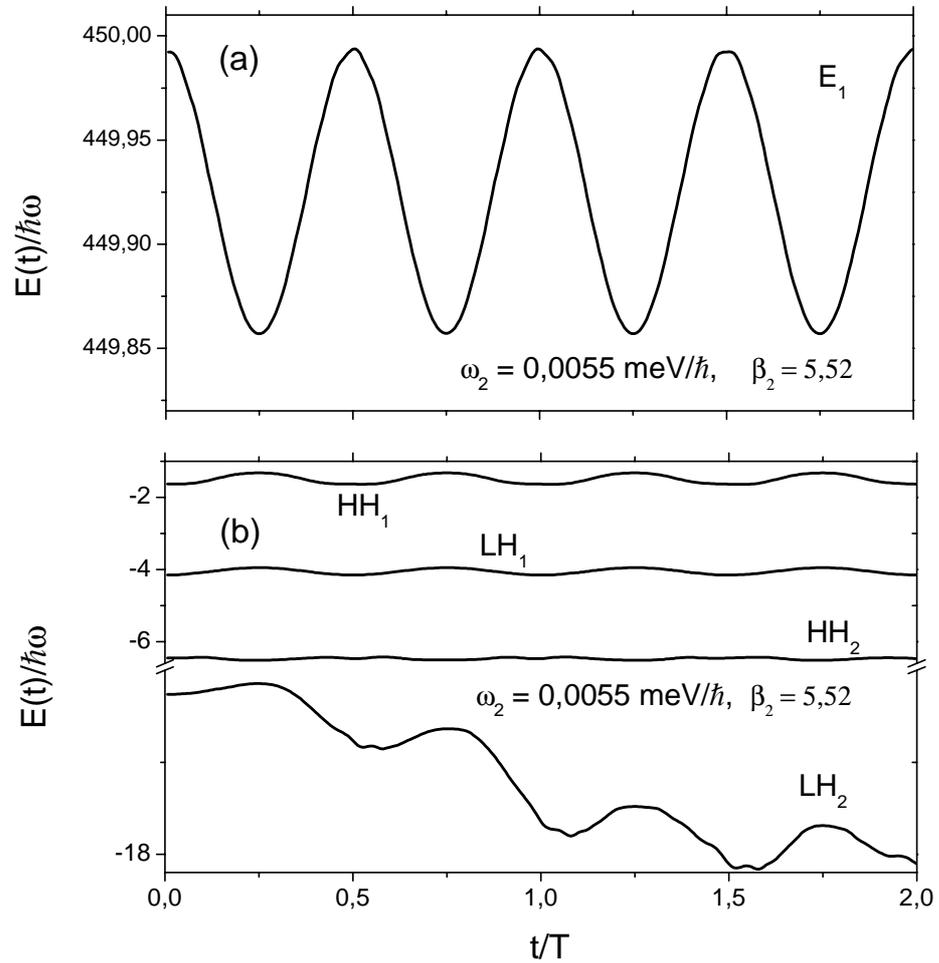


Figura 6-5: *Quase-energias* do elétron (a) e dos buracos (b) em $k = 0$ para uma frequência $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ associada com o segundo zero da função de Bessel $J_0(\beta_2)$.

potencial de confinamento estático (localização espacial). Observe que a função de onda do buraco leve, LH_2 , na região exterior ao poço, mostra oscilações bem mais pronunciadas que a dos outros estados. Isso é devido ao seu mais forte caráter de uma função de *Airy*, (solução exata para um Hamiltoniano parabólico com um potencial linear) quando o campo AC atinge a intensidade máxima em $\frac{T}{4}$ ou, ainda, em $\frac{3T}{4}$ (não mostrada).

Finalmente, quando a modulação do campo AC é tomada como espacialmente constante, isto é $V(z, t) = eF_0L_z\cos(\omega t - \frac{\pi}{2})$, a periodicidade induzida nas *quase-energias* é sempre preservada para todos os portadores, qualquer que seja a frequência AC ou a intensidade do campo aplicado, como mostrado na Fig. (6-7). É interessante observar que o período volta a ser idêntico ao do campo AC aplicado, devido ao fato de que a operação de inversão espacial, ($z \rightarrow -z$), não mais existe para modificar o Hamiltoniano total enquanto a simetria temporal, associada a mudança $t \rightarrow t + T/2$, continua sendo válida. Mas especificamente, neste caso teremos outra simetria (ou assimetria) para o Hamiltoniano:

$$H(-z, t + \frac{T}{2}) = - H(z, t), \quad (6.3)$$

isto é, passará a ter a mesma periodicidade do termo AC . Claro que agora, aquela quantidade de energia ganha do campo pelo portador, no intervalo $(0, T/2)$ será devolvida na outra metade do período.

Finalmente, vamos analisar os comportamentos dinâmicos dos diferentes portadores, através de suas *quase-energias*, como função do parâmetro $\beta = \frac{eF_0L_z}{\hbar\omega}$. Nesses cálculos usaremos um valor de frequência baixa e fixa, $\omega = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$, e variamos as intensidades do campo AC (variando os valores de β), como mostrado na Fig. (6-8). Note que existe um “efeito Stark” AC , do tipo adiabático, muito semelhante ao caso com campo elétrico estático. Aqui, as *quase-energias* também apresentam uma dependência quase-parabólica com a intensidade do campo (ou com β).

É importante observar que, para o intervalo de amplitudes dos campos considerados, a *quase-energia* de LH_1 ([parte (c)]) apresenta as seguintes diferenças: i) Primeiro, varia

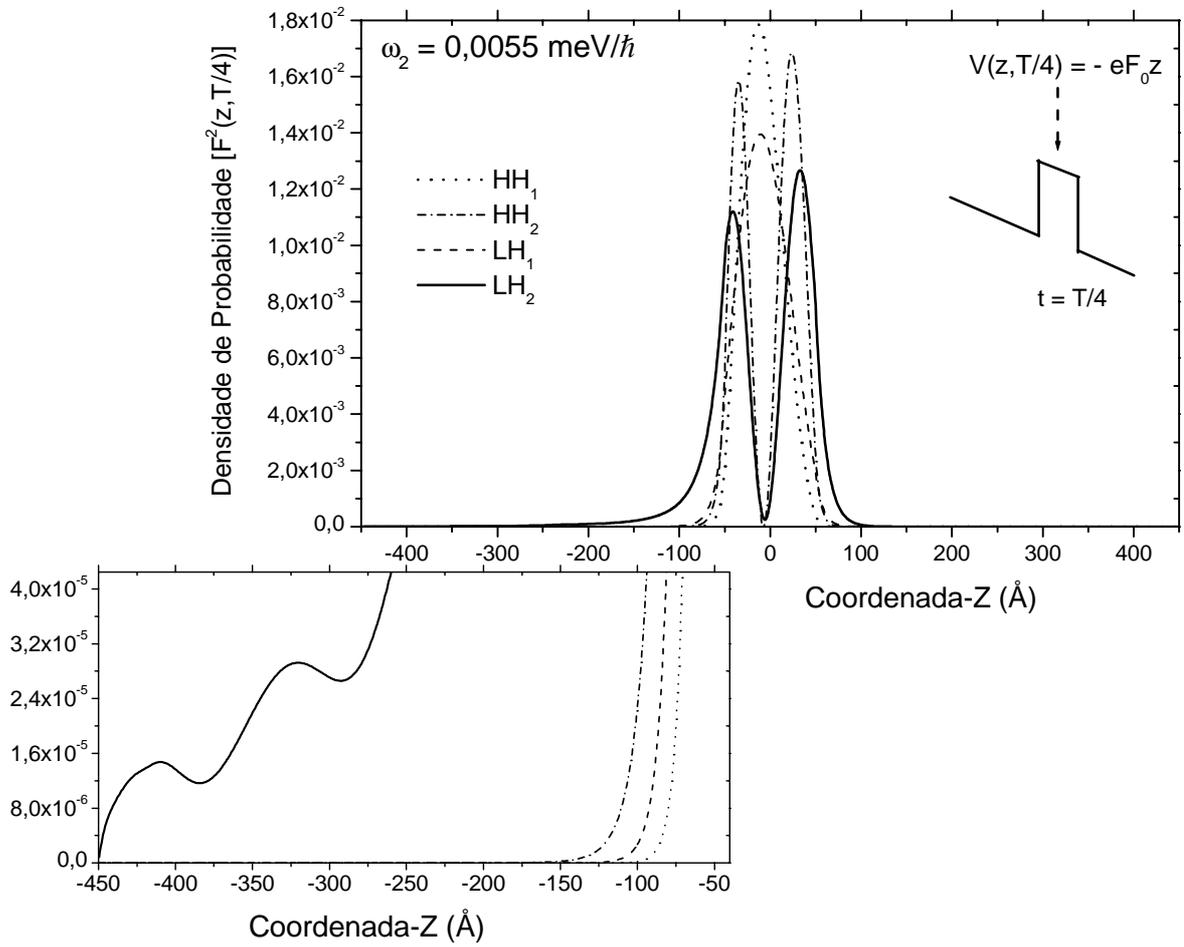


Figura 6-6: Funções de ondas dos buracos leves e pesados, mostrando as oscilações associadas ao tipo de função de *Airy*, principalmente para o estado de buraco, LH_2 , com energia próximo do contínuo.

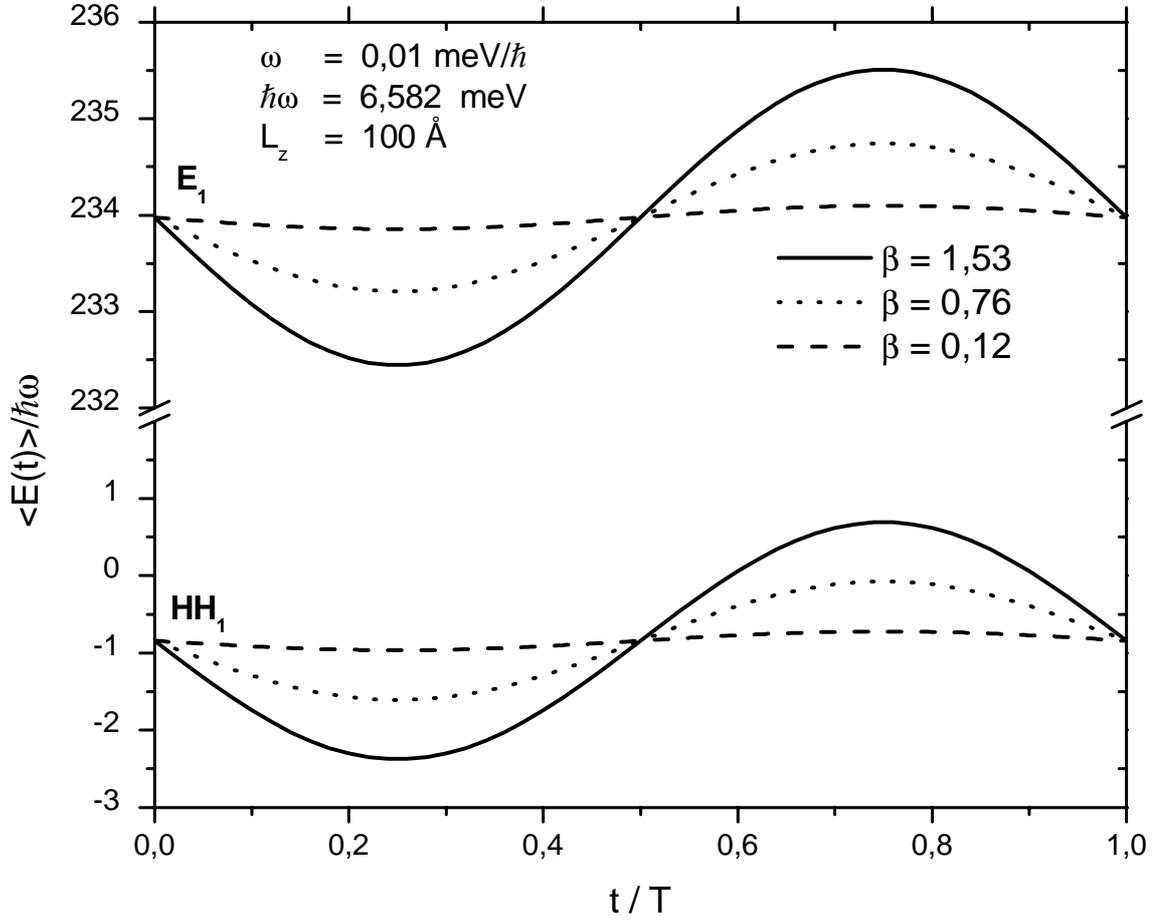


Figura 6-7: *Quase-energias* dos estados fundamentais de elétron e de buraco pesado, num potencial AC , $-eF_0L_z\cos(\omega t - \frac{\pi}{2})$ com $k = 0$. Note que a periodicidade é mantida qualquer que seja a intensidade do campo, $\beta = eF_0L_z/\hbar\omega$, aplicado.

de forma oposta aos outros portadores quando o campo aumenta; ii) Segundo, apresenta um mínimo indicando que o portador passa a devolver a energia ao campo, em torno de $\beta \sim 10$, um valor muito próximo do quarto zero da função de *Bessel*, $J_0(\beta)$.

Os comportamentos dos deslocamentos *Stark AC*, dos outros portadores são os esperados, pois um aumento de campo implica numa diminuição da energia, como discutido anteriormente. O efeito *Stark AC* apresentado pelo portador LH_1 é um fato novo e, até certo ponto, surpreendente. A explicação para este comportamento, pode ser encontrada ao analisarmos as dispersões de energia os portadores, no modelo \mathbf{k}, \mathbf{p} , mostrado na Fig. (6-1). Note, que as dispersões de todos os portadores, exceto o LH_1 , seguem uma tendência tipo a do modelo parabólico, em $\mathbf{k} \sim 0$. Porém, devido a seu forte acoplamento com os estados da banda de condução, o LH_1 mostra uma dispersão com massa “*negativa*”, devido sua curvatura para “*cima*” (direção ao fundo do poço). Assim, enquanto todos portadores estão “diminuído” suas energias, sob a ação do campo, o LH_1 está, na realidade, aumentando a sua. Esse sinal de massa efetiva diferente em $\mathbf{k} = 0$, produz o deslocamento *Stark AC* oposto ao que se deveria esperar, para este portador. A posição do mínimo onde o portador apresenta massa com o mesmo sinal dos outros, dependerá da diferença de energia entre o máximo da dispersão do LH_1 , onde $\frac{dE_{LH}}{dk} = 0$ e $E_{LH}(0)$. Quando a energia do campo igualar este valor, o portador iniciará o processo de deslocamento *Stark AC*, como os demais portadores. No presente exemplo (perfil do poço) o valor do campo onde isso ocorre é em torno de $\beta \sim 10$. Acreditamos que esta propriedade pode ser muito bem explorada em muitos dispositivos de transporte.

6.2 Deslocamento Médio e *Localização Dinâmica*

Uma outra propriedade dinâmica que pode fornecer importantes informações sobre diversos aspectos e regimes de cada portador é o valor da sua posição instantânea média. O deslocamento médio, $\langle Z_m(t) \rangle$, pode ser facilmente obtido calculando-se,

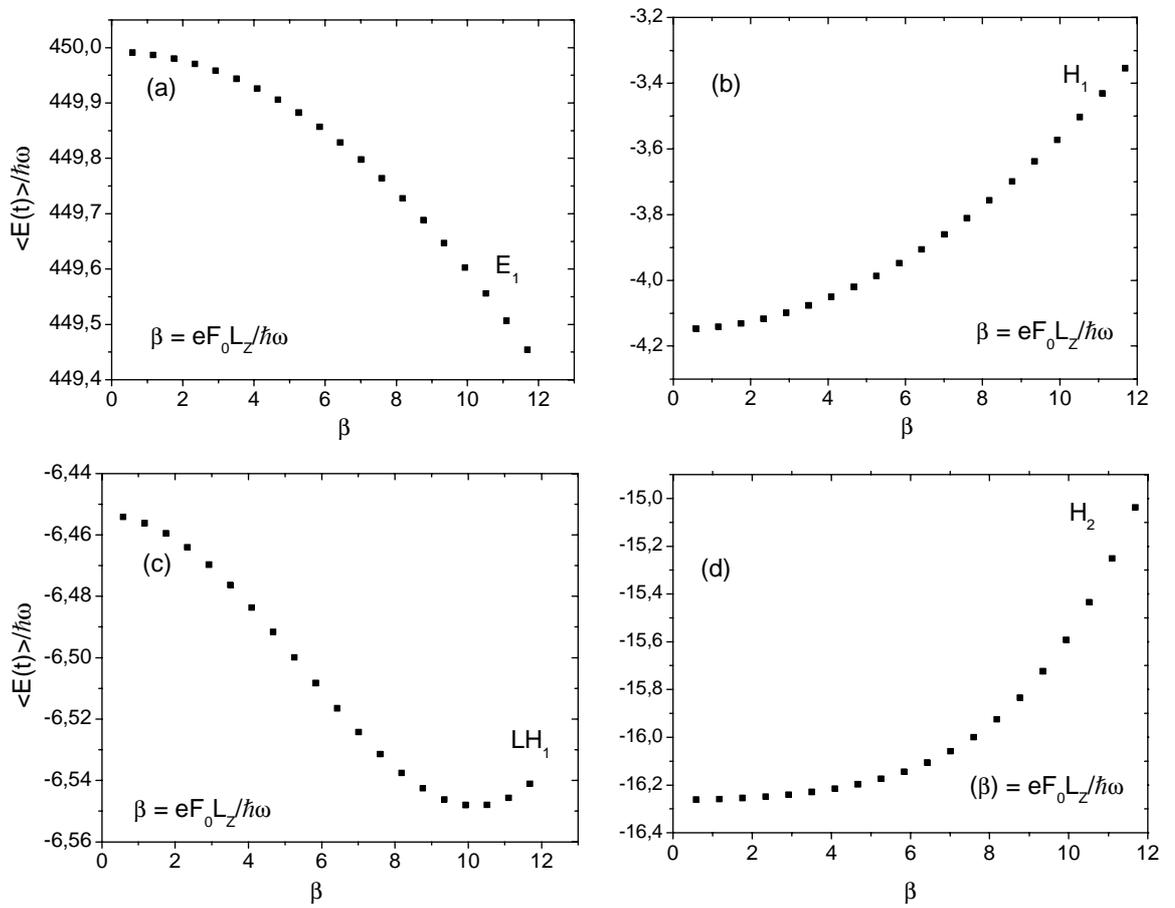


Figura 6-8: *Efeito Stark AC* para o elétron (a) e para buracos (b), (c), (d) com os valores calculados dos estados no instante $t = \frac{T}{4}$, quando o potencial *AC* atinge o seu valor máximo. As *quase-energias* variam de forma parabólica com a intensidade do campo β . Para o estado LH_1 observa-se um mínimo em $\beta \sim 10$ cuja origem é discutida no texto.

$$\langle Z_m(t) \rangle = \langle F(z, t) | z | F(z, t) \rangle. \quad (6.4)$$

Não é difícil de se reconhecer que o operador \hat{z} não comuta com o operador evolução, $\hat{U}(t)$. Vamos analisar os comportamentos dos portadores, usando diferentes frequências para um valor fixo do campo AC (20 kV/cm). Vamos calcular estes deslocamentos para dois tipos de condições iniciais, $\Psi(z, t = 0)$: i) A primeira, consideramos um autoestado do poço quântico com um campo elétrico $F = 0$; ii) A segunda, consideramos também um autoestado mas para o valor máximo do campo elétrico, $F = F_0 = 20$ kV/cm, que ocorre em $t = T/4$ (ou em $t = 3T/4$).

Ao calcularmos o deslocamento médio de cada portador estaremos estabelecendo uma medida do seu grau de *localização dinâmica*. Podemos lembrar que, quando o portador está ligado num potencial estático e simétrico (assimétrico), o valor $\langle Z_m(t) \rangle$ é identicamente zero (constante diferente de zero), condição que é uma consequência direta das paridades (mistura de simetrias) dos estados eletrônicos em potenciais com um centro de inversão (com assimetria espacial).

Na Fig. (6-9) mostramos o efeito do campo elétrico sobre a posição média dos portadores, para duas frequências AC e onde os valores de β são bem próximos da primeira raiz da função de *Bessel*, $J_0(\beta)$. Nesta figura usamos a primeira condição inicial mencionada acima, isto é, com todos os portadores tendo $\langle Z_m(t) \rangle = 0$. Podemos observar rápidas oscilações, em maior escala para o elétron E_1 e depois para o buraco LH_1 , indicando uma maior *localização dinâmica* para esses dois portadores se comparada ao buraco pesado, HH_1 . Essas diferenças mostram claramente os distintos tipos regimes dinâmicos que cada portador apresenta numa mesma frequência. Mais especificamente, nesta frequência, que é alta para o estado HH_1 , não observaremos a sua *localização dinâmica* para o valor do campo usado. Note ainda, que o número de oscilações em meio período do campo AC , é inversamente proporcional as massas efetivas.

Na Fig. (6-10), podemos comparar os deslocamentos médios descritos acima, parte (b), com aqueles deslocamentos médios partindo da condição inicial, $F = F_0$ ($t = 0$) e

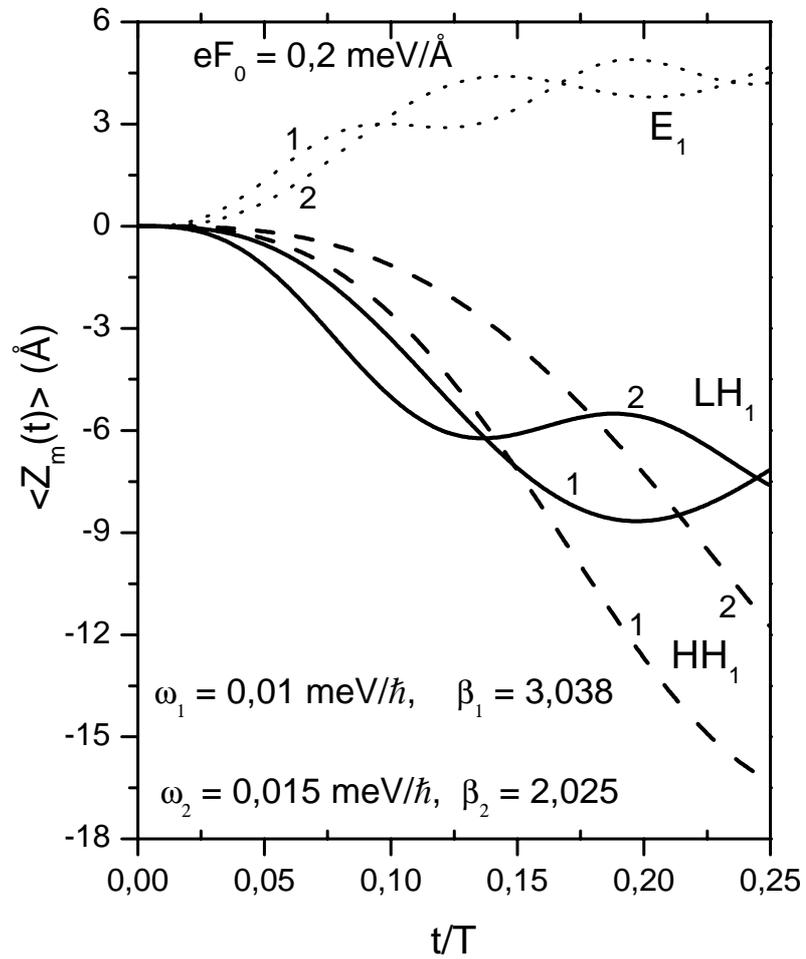


Figura 6-9: Posição média do buraco leve (LH_1), do pesado (HH_1) e do elétron (E_1) em função do tempo e para $k = 0$. A intensidade do campo AC usada é $0,20 \text{ meV/Å}$. As duas frequências ω_1 e ω_2 correspondem a dois valores de β próximos a primeira raiz da função de Bessel, $J_0(\beta)$.

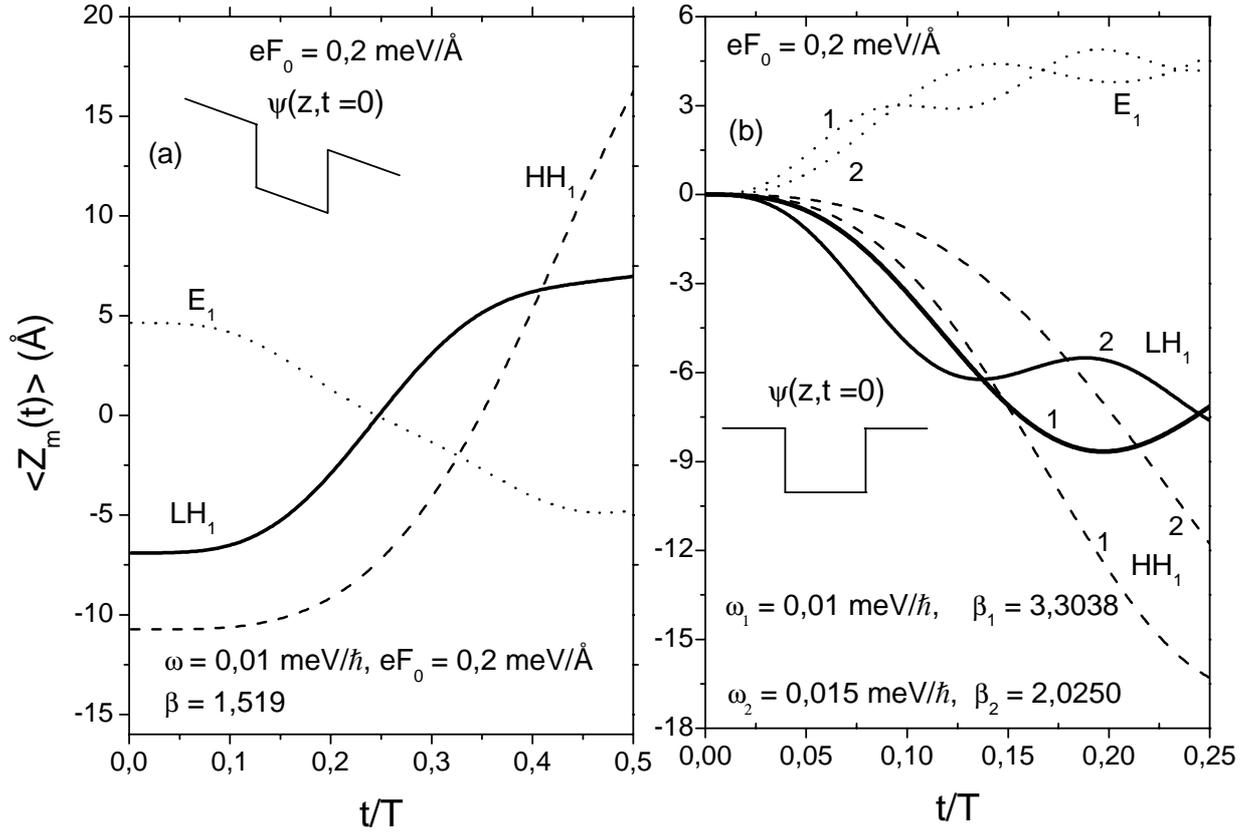


Figura 6-10: Comparação do deslocamento médio para duas condições iniciais. A parte (a) mostra a posição média para uma condição inicial de campo elétrico $F_0 = 20 \text{ kV/cm}$ e (b) para campo elétrico nulo. Em ambas as partes, as linhas pontilhadas correspondem a elétrons (E_1), a tracejada a buracos pesados (HH_1) e a cheia a buracos leves (LH_1).

$\beta = 1,519$, mostrados na parte (a). Nesta segunda condição, não existem as oscilações características associadas com os regimes de localização dinâmica das partículas. Note que os estados do buraco leve, LH_1 , e do elétron, E_1 , obedecem a simetria (invariância) associada com a dupla inversão de sinal, ($F_0 \rightarrow -F_0$) e ($z \rightarrow -z$), como pode ser visto na parte (a) da Fig. (6-10).

Na Fig. (6-11) comparamos os deslocamentos médios dos portadores HH_1 , LH_1 , E_1 para as duas raízes da função de Bessel. Os portadores E_1 e LH_1 possuem mais oscilações superpostas para uma frequência menor, isto é $\omega_2 < \omega_1$. Estes fatos eviden-

ciam uma mudança gradativa, de alta para baixa frequência, nos regimes dinâmicos dos portadores. As localizações dinâmicas aumentam com a diminuição da frequência, num dado campo fixo.

6.3 Tunelamento de Portadores *Foto-Assistidos*

Para cada portador em presença do campo AC , podemos definir a probabilidade de tunelamento, como função do tempo, em termos da integral de “*overlap*” entre a função (ou estado) no instante inicial ($t = 0$), $F(z, 0)$, e no instante t , $F(z, t)$:

$$\Pi(t) = 1 - |\langle F(z, 0) | F(z, t) \rangle|^2. \quad (6.5)$$

Note que esta quantidade mede a probabilidade de se encontrar o referido portador, num dado instante t , fora da região do poço de potencial, uma vez que usaremos como condições iniciais, os autoestados do Hamiltoniano $H_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}$ localizados inicialmente na região do poço quântico. Assim, $\Pi(t = 0) = 0$, já que todos os autoestados foram normalizados no intervalo $(-L_b - \frac{L_z}{2}, +L_b + \frac{L_z}{2})$.

Inicialmente, na Fig. (6-12), comparamos as probabilidades de tunelamento para os estados fundamentais dos portadores HH_1 (buraco pesado), LH_1 (buraco leve) e E_1 (elétron) calculados para dois valores de frequência. O primeiro é associado com o primeiro zero da função de *Bessel*, $\omega_1 = 0,0125 \text{ meV}/\hbar$ e $\beta = 2,41$. O outro valor foi escolhido próximo do dobro do primeiro, $\omega_3 = 0,020 \text{ meV}/\hbar$. Todos os resultados serão mostrados e analisados em meio período $(0, \frac{T}{2})$ do campo AC , já que podemos usar aquela propriedade de simetria já discutida anteriormente para o intervalo $(\frac{T}{2}, T)$.

Note que, para ambas frequências, os estados E_1 e LH_1 apresentam clara *localização dinâmica*, com probabilidades da ordem de 2% e 4% de serem encontrados fora do poço ou, equivalentemente, média de 98% e 96% de probabilidade de permanecerem na região do poço. Note também que o buraco pesado HH_1 , estando em regime diferente e quase-periódico como discutido antes, começa a apresentar *localização dinâmica*, mas tem

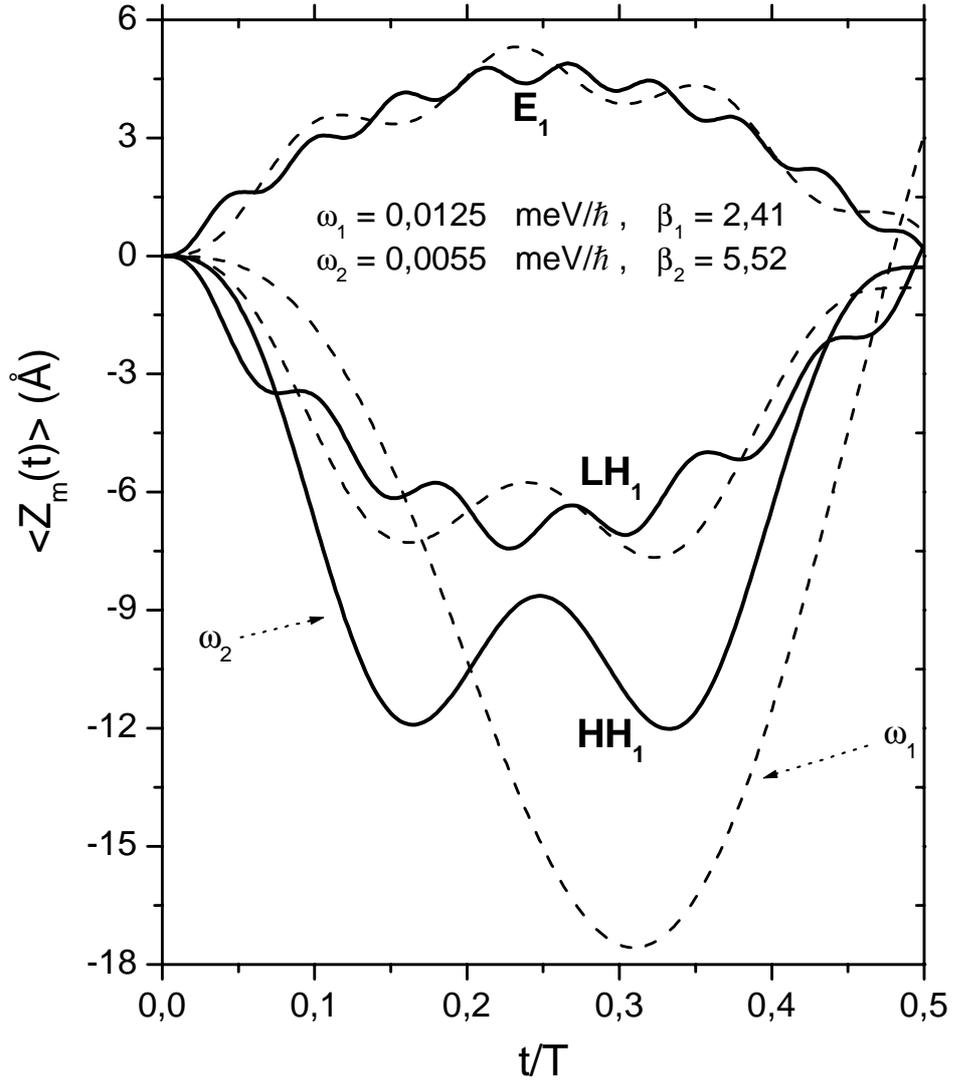


Figura 6-11: Comparação entre as posições médias dos portadores HH_1 , LH_1 e E_1 , nos estados com $\mathbf{k} = 0$ e para as frequências $\omega_1 = 0,0125 \text{ meV}/\hbar$ e $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ que correspondem a dois zeros da função de Bessel $J_0(\beta)$. As linhas tracejadas (cheias) são posições médias para a frequência ω_1 (ω_2).

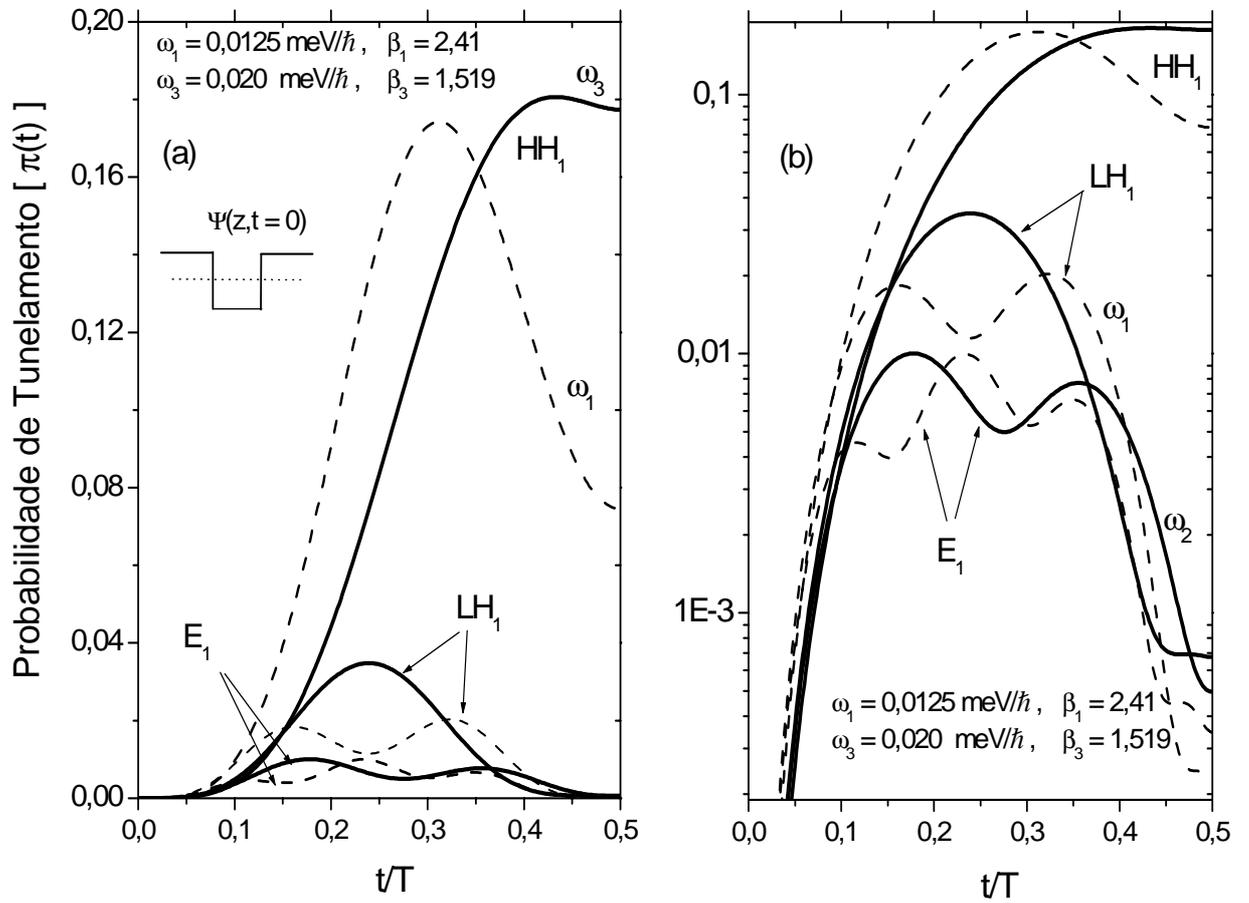


Figura 6-12: Probabilidades de tunelamento dos buracos HH_1 , LH_1 e do elétron E_1 , mostradas em escala linear [parte (a)] e logarítmica [parte (b)], para dois valores de freqüências: $\omega_1 = 0,02 \text{ meV}/\hbar$ (linhas tracejadas), $\omega_2 = 0,0125 \text{ meV}/\hbar$ (linhas cheias). Note que os estados E_1 e LH_1 apresentam uma clara localização dinâmica em comparação com o estado HH_1 . As condições iniciais são mostradas no esquema.

probabilidade um pouco maior ($\simeq 6\%$) de deixar o poço que os portadores anteriores.

Uma simetria perfeita para estas probabilidades, principalmente para o elétron E_1 , pode ser vista na Fig. (6-13), onde baixamos a frequência para $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ e $\beta_2 = 5,52$. Este valor corresponde ao segundo zero da função de *Bessel*, $J_0(\beta)$ e, mostramos os gráficos tanto em escala linear (parte (a)) como em logarítmica (parte (b)). Note que o menor grau de *localização dinâmica* do buraco HH_1 , um pouco inferior ao buraco leve LH_1 e ao do elétron E_1 , está associado aos diferentes valores de suas massas efetivas. Entretanto podemos estimar em qual frequência o buraco HH_1 apresentaria uma *localização dinâmica* quase que completa. Para isso, usamos a relação entre as massas do elétron e do buraco pesado, para mudarmos o regime do estado HH_1 . Encontramos o valor:

$$\omega_3 = \omega_2 / (m_h / m_e). \quad (6.6)$$

Para os materiais compondo o poço quântico deste trabalho, temos $\omega_3 = 0,0009 \text{ meV}/\hbar$ uma vez que a relação das massas é $m_h / m_e = 5,7$. As probabilidades de transmissão, para esta frequência, são mostradas na Fig. (6-14), juntamente com os resultados para $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$. Pode-se observar mais rápidas oscilações e mais forte *localizações dinâmicas* para todos os estados na frequência ω_3 , o que não está presente para ω_2 . O número destas oscilações no período do campo AC , inversamente proporcional às massas dos respectivos portadores, indica bem claramente o tipo de regime e o grau de localização de cada portador. Estas rápidas oscilações estão ligadas ao fato de que para uma frequência menor, isto é $\omega_B^{ac} > \omega$, os portadores respondem instantaneamente às excitações provenientes do campo elétrico AC . O número de oscilações mede o número de vezes que eles chocariam com as paredes das barreiras. Assim, o buraco pesado HH_1 , por ter uma massa efetiva bem maior que os outros portadores, possui um menor número de oscilações.

Podemos ainda ressaltar outras características interessantes que aparecem nas propriedades dinâmicas transientes dos portadores, se calcularmos as taxas de tunelamento,

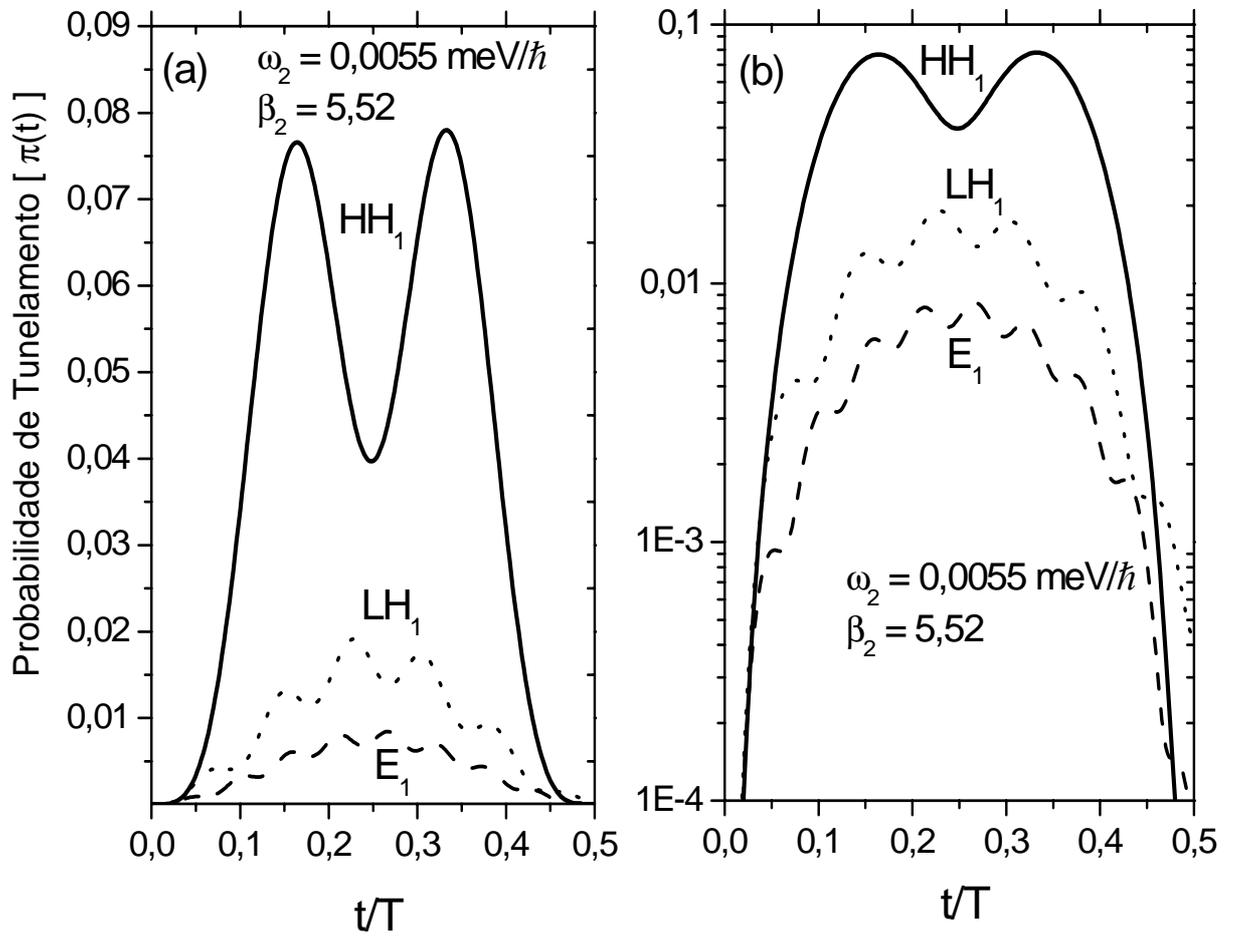


Figura 6-13: Probabilidades de transmissões para os portadores E_1 , HH_1 , LH_1 para a frequência $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$, $\beta_2 = 5,52$ (o segundo zero da função de Bessel) e $k = 0$. A parte (a) está na escala linear e a parte (b) na escala logarítmica. Note uma localiza ção dinâmica maior para o elétron E_1 .

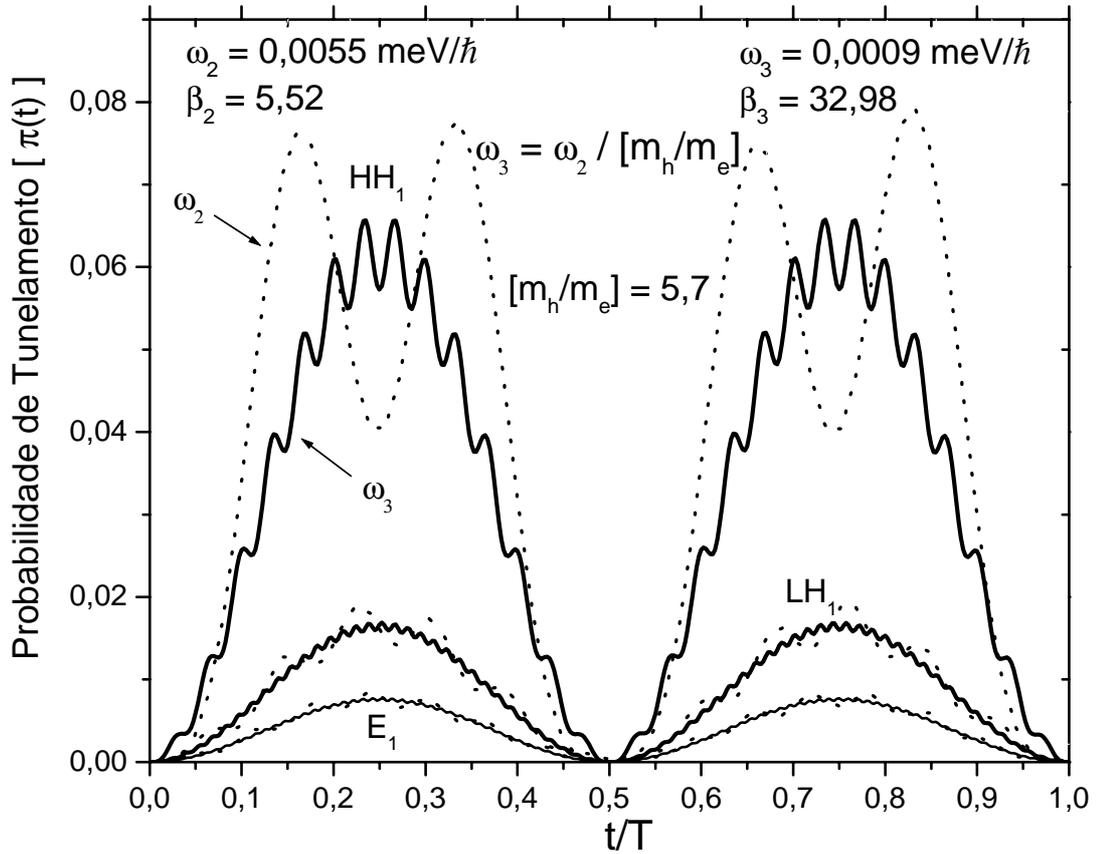


Figura 6-14: Probabilidades de transmissões de buracos e de elétron para as freqüências: $\omega_2 = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ e $\omega_3 = 0,0009 \text{ meV}/\hbar$. Observe o aumento do número de oscilações para a freqüência menor e com uma maior *localização dinâmica*.

Portador	τ_m (ps)
Buraco pesado (HH_1)	7,21
Buraco pesado (HH_2)	3,63
Buraco leve (LH_1)	17,7
Buraco leve (LH_2)	4,5
Elétron (E_1)	38,7

Tabela 6.1: Tempo médio de tunelamento.

$\frac{d\Pi(t)}{dt} = 1/\tau(t)$ ou frequência dos choques. Estas taxas determinam os tempos médios de tunelamento para cada portador, como $\tau_m = \langle \tau(t) \rangle$.

Como observado nas partes (a) e (b) da Fig. (6-15), as probabilidades de transmissão e as intensidades das taxas de tunelamento dos buracos pesados HH_1 e HH_2 são bem maiores do que os outros portadores, possuindo tempos médios de tunelamento τ_m pequenos. As mudanças de sinal nas taxas de tunelamento indicam que as partículas (elétron ou buracos) estão ou saindo ou entrando na região do poço, no intervalo de tempo $t = 1/4 T$. A frequência com que essa mudança de sinal ocorre é maior para o elétron E_1 , o que corresponde a um tempo médio de tunelamento maior ou uma maior *localização dinâmica* em relação aos outros portadores. Já buraco leve LH_1 possui uma dinâmica semelhante a do elétron E_1 , mais com um tempo médio de tunelamento menor que do elétron, e maior que dos buracos pesados HH_1 e HH_2 . Como observado na parte (b) da Fig. (6-15), a intensidade dos picos nas taxas de tunelamento do buraco leve LH_2 é sempre crescente com o tempo, uma vez que sua energia está muito próximo da borda do poço, como já discutido anteriormente. Dessa forma o buraco LH_2 est

6.4 Dinâmica para $k \neq 0$

Até agora mostramos propriedades dinâmicas sem levar em conta a forte mistura de bandas pois todos os resultados anteriores foram calculados para o momento paralelo as camadas $\mathbf{k} = 0$. Nesta situação só existe acoplamento entre elétrons e buracos leves, como discutido no início das *quase-energias*. Para valores de \mathbf{k} diferentes de zero, a mistura de

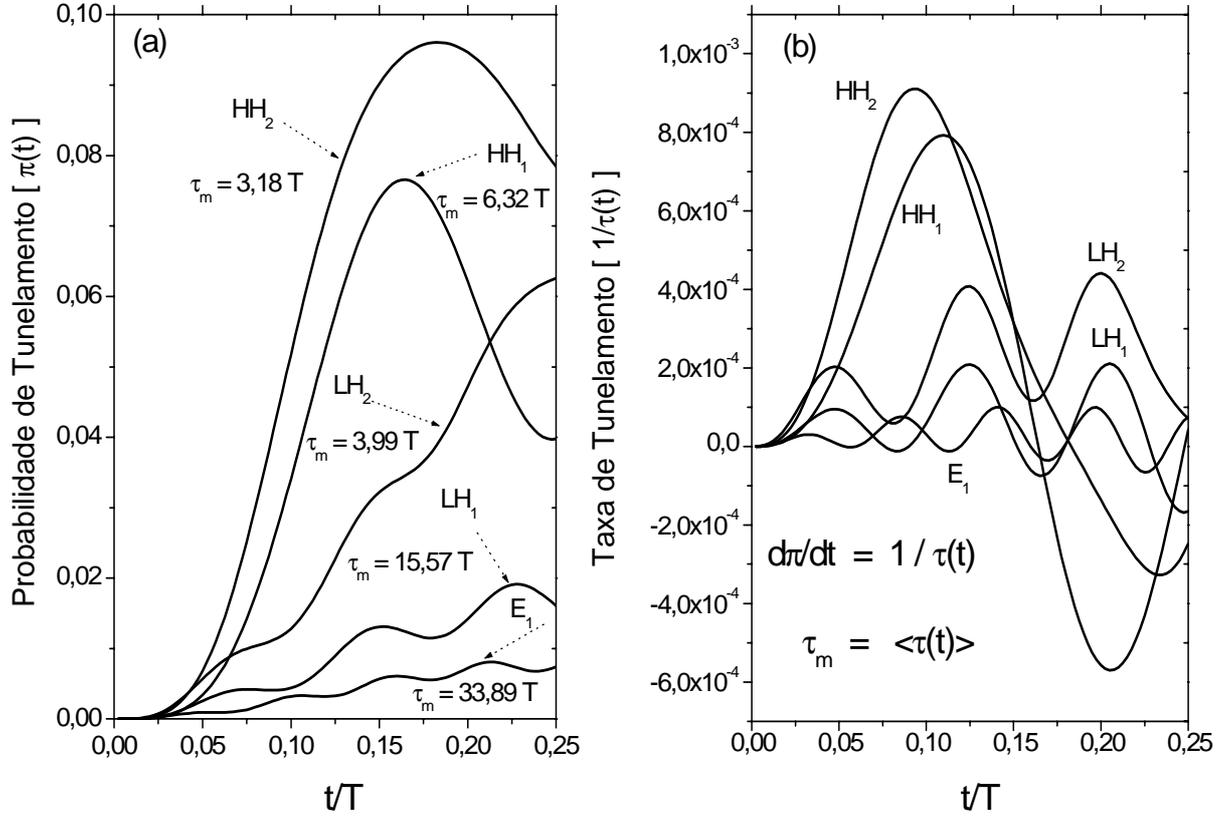


Figura 6-15: Probabilidades e taxas de tunelamento de elétrons e de buracos para a frequência $\omega = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$ e $k = 0$. Na parte (a) mostramos as probabilidades de transmissão e os tempos médios de tunelamento para cada portador. Na parte (b) mostramos as taxas de tunelamento. Observe que menor taxa de tunelamento corresponde a maior *localização dinâmica*.

componentes dos vários estados aumentará. Isso deve alterar, principalmente, a dinâmica dos buracos pesados uma vez que estarão acoplados, entre outros, com os buracos leves.

Como resultados preliminares mostramos na Fig. (6-16) as probabilidades de transmissão para os portadores E_1 , LH_1 , LH_2 , HH_1 e HH_2 , para frequência $\omega = 0,0009 \text{ meV}/\hbar$ com o vetor de onda paralelo $k = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

Em primeiro lugar, notamos um aumento muito grande das probabilidades de tunelamentos para todos os portadores. Este ponto pode ser facilmente entendido, uma vez que suas *quase-energias*, em $k \neq 0$, serão muito maiores que seus valores em $k = 0$ favorecendo, então, o escape destes portadores da região do poço. Note claramente que ocorre uma mudança muito significativa na dinâmica dos vários portadores, uma vez que seus movimentos ao longo de z (tunelamento) e ao longo do plano $x - y$ (energia cinética), ficam parcialmente acoplados, via a dependência explícita das funções envelopes com os valores do momento linear

$$\mathbf{F}(z, \rho, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\rho} \begin{bmatrix} F_1(\mathbf{k}, z) \\ F_2(\mathbf{k}, z) \\ F_3(\mathbf{k}, z) \\ F_4(\mathbf{k}, z) \\ \dots \\ F_M(\mathbf{k}, z) \end{bmatrix},$$

muito diferente do caso parabólico, onde esta dependência fica limitada na forma de onda plana. Como é bem conhecido, as densidades de probabilidades, $|\mathbf{F}(z, \rho, \mathbf{k})|^2$, para o Hamiltoniano parabólico, não dependem de \mathbf{k} .

Um fato bastante interessante e ainda bastante intrigante é que só os elétrons continuaram “*dinamicamente localizados*”. Isso é, suas probabilidades de tunelamento permanecem iguais ou menores que no caso anterior. Talvez isso possa ser entendido pois os estados da banda de condução, neste material que possui energia do *gap* bastante grande, teria um acoplamento bem fraco com os outros tipos de portadores, exceto com o ramo

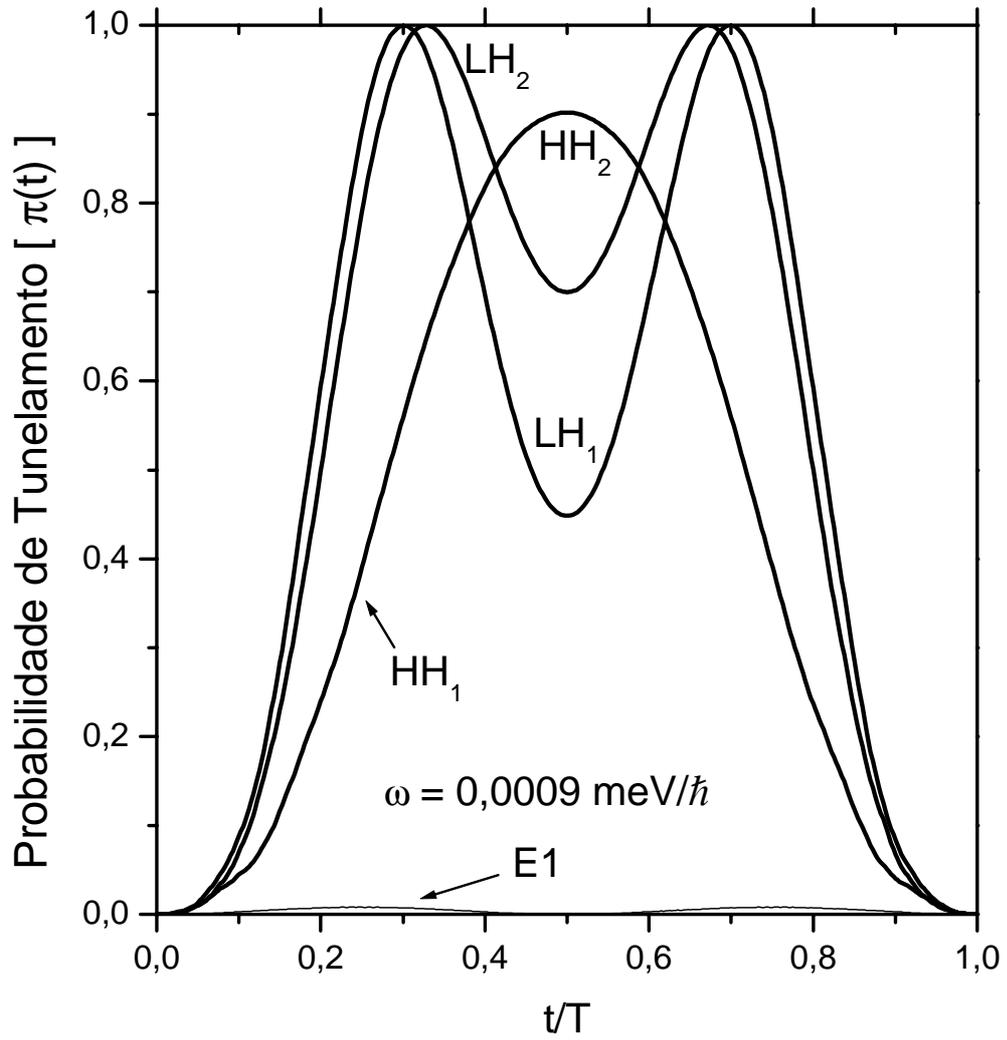


Figura 6-16: Probabilidades de transmissão dos buracos para $k = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e frequência $\omega = 0,0009 \text{ meV}/\hbar$. Note que o efeito da mistura de estados aumenta a probabilidade de transmissão em comparação com os casos anteriores, com excessão do elétron.

light-hole. Assim, a não-parabolicidade de suas dispersões são pequenas e se assemelham às obtidas com um modelo parabólico. Por outro lado, as fortes misturas existentes entre os estados da banda de valência, para $k \neq 0$ e para quase todos os semicondutores, devem estar levando ao efeito de destruição da *localização dinâmica* dos buracos. De outra forma, o aumento do acoplamento entre estados de valência, quando aumentamos o valor de k , favorece o tunelamento em vez da *localização dinâmica*.

Outros efeitos da interação entre portadores da banda de valência e de condução, como a interação Coulombiana atrativa, poderam alterar estes resultados, pois favorecerão a *localização dinâmica*.

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho apresentamos cálculos de propriedades estacionárias e dinâmicas de portadores em sistemas de baixa dimensionalidade, submetidos a campos elétricos *DC* e *AC* e a campos magnéticos *DC*. Vários formalismos, baseados na aproximação de massa efetiva, foram estudados e implementados. Aqui destacamos o método da potência inversa para o cálculo da estrutura eletrônica, os métodos da matriz de espalhamento e de diferenças finitas para o cálculo das propriedades de transporte. Além deles, implementamos o formalismo multibandas $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, dependente do tempo para investigarmos as propriedades dinâmicas de elétrons e buracos em um poço quântico submetido a um potencial *AC*, na forma $V(z, t) = -eF_0z \cos(\omega t - \pi/2)$.

Para o cálculo da estrutura eletrônica, desenvolvemos um método numérico baseado na técnica de diferenças finitas e no método da potência inversa. O método tem se mostrado bastante estável e de rápida convergência, permitindo se estudar heteroestruturas com perfis de potenciais arbitrários. Como aplicação desse método investigamos as propriedades ópticas em múltiplos poços quânticos (MQW) de GaAs/AlGaAs contendo uma estrutura *delta-doping nipi*, onde usamos um modelo não-autoconsistente para simular a localização espacial devido aos campos elétricos internos. Com esse modelo, obtivemos bons valores para as energias de transição ópticas interbandas. Foi possível estimarmos valores para temperaturas críticas onde estas transições mudam de caráter,

passando de indireta (recombinação entre estados localizados nos dois materiais diferentes) para direta (recombinação entre estados localizados na mesma camada). O nosso grande interesse aqui foi testar o modelo numérico desenvolvido e explorar as grandes possibilidades deste método num problema difícil mas ainda bastante atraente. Certamente as bases para um cálculo autoconsistente estão completamente estabelecidas, mas sua implementação não caberia aqui neste trabalho de tese.

Também investigamos a estrutura eletrônica de buracos, em um poço quântico de GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As, na presença de campos elétricos e magnéticos longitudinais (paralelos) como parte inicial do estudo do magneto-tunelamento em sistemas de duplas barreiras. Para campo elétrico fraco ocorre uma dependência anômala de todos os fatores $g_{hh_{n_L}(lh_{n_L})}(B_0, F)$ definindo a separação *Zeeman* para cada um dos portadores nos níveis com diferentes números de *Landau*. Acima de 12 T ocorre uma mudança de sinal de g_{hh_0} , onde a separação *Zeeman* torna-se mais transparentemente resolvida. Grandes valores dos campos elétricos aplicados através da estrutura causam fortes mudanças e introduzem distorções nas dispersões de energia de todos os estados de índice N_L . O maior empacotamento dos níveis, com o aumento do campo elétrico, produz um crescimento nas interações entre estados de cada multiplete, levando a mudanças nas posições relativas dos níveis de *Landau* de cada portador. Ocorre uma completa separação *Zeeman* do dubleto de *Kramer* hh_0^- e hh_0^+ , bem como também a supressão da região de mudança de sinal para esse dubleto. Entretanto, o grupo hh_1^- , hh_1^+ (e hh_2^- , hh_2^+) exibe duas (três) regiões, onde observamos a mudança de sinal no fator- g , um efeito causado puramente pelo forte campo elétrico aplicado.

Finalmente quando aumentamos o campo magnético, observamos um desdobramento nas curvas de dispersão com os ramos lh ocorrendo em um maior intervalo de energia se comparado com os dos ramos hh . Isso ocorre uma vez que estes últimos estados são bem mais comprimidos tanto pelo campo como por alguns dos estados lh pertencentes ao mesmo multiplete que define o grupo de seus acoplamentos.

Em geral, uma das técnicas mais utilizadas para o cálculo das propriedades de trans-

porte em heteroestruturas semicondutoras submetidas a campos elétricos DC é a matriz de transferência. Entretanto este método apresenta instabilidade numérica quando as dimensões da região barreira são “grandes” (em geral para $L_b > 50 \text{ \AA}$) ou quando as heteroestruturas são crescidas nas direções [111], [110], [112] onde apresentam massas efetivas muito grandes. Em vista dessas dificuldades que o método da matriz de transferência apresenta, decidimos implementar, nessa tese, dois outros formalismos multibandas $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, dentro da aproximação de massa efetiva, para o cálculo das propriedades de transporte dos buracos em dispositivos de barreiras duplas. Um deles é o formalismo da matriz de espalhamento (analítico) e o outro é o método das diferenças finitas (numérico). Esses dois formalismos mostraram boa estabilidade numérica em comparação com a técnica da matriz de transferência e foram aplicados no cálculo das propriedades de transporte em duplas barreiras de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. O nosso objetivo, aqui, foi construir modelos numéricos mais eficientes para aplicação futura em sistemas com barreiras largas e em sistemas submetidos a campos magnéticos e com fortes efeitos de *strain* em direções exóticas dos tipos [111], [110] ou [112].

Para o cálculo das propriedades de transporte dependentes do tempo, desenvolvemos um método numérico, baseado na representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e na técnica de diferenças finitas, onde usamos a expansão de *Magnus* para determinar o operador evolução em conjunto com a aproximação diagonal de *Padé* (M/M). O método mostrou-se bastante estável além de permitir altas ordens de precisão (O^{2M+1}). Nesta abordagem, o esquema de *Cranck-Nicholson* aparece como caso particular para o número $M = 1$. Esse método, com $M = 2$, foi aplicado no estudo da dinâmica transiente de portadores em poços quânticos de GaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As submetidos a um campo elétrico AC .

Devido a diferenças de massas efetivas entre os vários portadores, observamos que a dinâmica de elétrons e buracos se apresentam em regimes completamente distintos, dependendo das relações entre as frequências características do campo AC , ω , a frequência de *Bloch*, $\omega_B^{ac} = \frac{eF_0 L_z}{\hbar}$, com a frequência de localização espacial, $\omega_l = \frac{E}{\hbar}$. A frequência de localização espacial determinará os limites de alta frequência, $\omega_l < \omega$ e de baixa

frequência, $\omega_l > \omega$ para cada portador. Para esses dois regimes diferentes, a intensidade do campo AC aplicado determinará o regime de campo forte quando $\omega_B^{ac} > \omega$ e de campo fraco quando $\omega_B^{ac} < \omega$.

Inicialmente investigamos as *quase-energias* dos vários portadores para $k = 0$. Encontramos, que para altas frequências ($\omega > \omega_l$) as *quase-energias* dos portadores apresentam um comportamento periódico, com excessão da partícula mais pesada HH_1 e daqueles portadores com energia que estão próximo da borda do potencial e não são mais controlados pelo campo AC . A periodicidade, na *quase-energia* do buraco HH_1 , só é obtida para baixas frequências ($\omega < \omega_l$) ou para um potencial AC com modulação constante. As curvas das probabilidades de transmissão e dos deslocamentos médios foram analisadas para valores do parâmetro $\beta = eF_0L_z/\hbar\omega$, correspondentes ao zero da função de *Bessel*. No regime de altas e baixas frequências, encontramos uma forte *localização dinâmica* de elétrons, e em menor escala, para o buraco leve e pesado. Devido as diferenças de massas, a frequência de localização do elétron é maior que a frequência de localização dos buracos. Uma outra característica observada nas curvas de transmissão é o aparecimento de rápidas oscilações superpostas à medida que se aumenta a *localização dinâmica* do portador. O número destas oscilações é inversamente proporcional às massas efetivas. Estes fatos foram usados para estimarmos a frequência na qual o buraco HH_1 poderia ter uma *localização dinâmica* quase que completa.

Investigamos também o *efeito Stark AC* para $k = 0$, usamos uma frequência fixa, $\omega = 0,0055 \text{ meV}/\hbar$, e variamos a intensidade do campo elétrico, F_0 . Vimos que existe um *efeito Stark* do tipo adiabático, bastante semelhante ao de um campo estático, com as *quase-energias* apresentando uma dependência quase-parabólica com a intensidade do campo $\beta = eF_0/\hbar\omega$. Devido a forte mistura entre elétrons e buracos leves, o buraco LH_1 apresenta uma massa oposta à dos outros estados de valência em $k = 0$. Assim, sua dinâmica demonstra que o *efeito Stark AC* anômalo e oposto ao dos outros portadores, onde o valor absoluto das *quase-energias* aumenta com um aumento do campo. Este comportamento anômalo e oposto ao que se esperaria está associado diretamente

a não-parabolicidade de sua dispersão, induzida pelos fortes acoplamentos interbandas e intrabandas presentes no modelo de Hamiltoniano de *Kane*. O efeito *Stark AC* do LH_1 passa por um mínimo em um campo crítico, que dependerá do material e dos perfis de potenciais estáticos. A partir do mínimo, o estado volta a apresentar o efeito *Stark AC* normal.

Para investigarmos o grau de *localização dinâmica* de cada portador para $k = 0$, calculamos as taxas de tunelamento, $\frac{d\Pi(t)}{dt} = 1/\tau(t)$, e os tempos médios de tunelamento, $\tau_m = \langle \tau(t) \rangle$, calculados para o intervalo $0 - > \frac{1}{4}T$. As mudanças observadas no sinal nas taxas de tunelamento, associadas as frequências de choques com as interfaces, é uma indicação de que os portadores estão saindo ou entrando na região do poço quântico. Dessa forma, o elétron E_1 , apresenta uma maior *localização dinâmica* e, conseqüentemente, um tempo de tunelamento maior em comparação com os outros portadores ($HH_1, HH_2, LH_1..$) mais pesados. O buraco leve LH_1 possui uma dinâmica semelhante a do elétron, com um tempo médio de tunelamento menor do que E_1 porém maior que dos buracos pesados HH_1 e HH_2 . As intensidades na taxa de tunelamento do buraco leve LH_2 é sempre crescente, uma vez que ele est

Por fim investigamos as probabilidades de transmissão, para $k \neq 0$. Neste caso, encontramos apenas o elétron E_1 ainda dinamicamente localizado. Associamos isso ao caráter quase-parabólico dos estados da banda de condução por apresentarem um acoplamento muito fraco com os ramos de buracos (*gap* muito grande). Por outro lado, as fortes misturas existente entre os buracos da banda de valência produziram um aumento nas probabilidades de tunelamento. Mas especificamente, suas *quase-energias* são bem maiores com o aumento de k , o que favorece o escape da região do poço. Para estes portadores, os movimentos ao longo de z (tunelamento) permanece acoplado com o movimento ao longo do plano $x - y$. Desta forma, movimento no plano destrói a localização dinâmica.

Como trabalho futuro, vamos aplicar esse formalismo dependente do tempo para investigarmos as propriedades de transporte levando em conta a interação Coulombiana entre um par elétron-buraco, efeito que deverá favorecer a *localização dinâmica*, em

oposição ao efeito da energia cinética planar dos buracos. Além disso, poderemos também estudar as propriedades ópticas, calculando as taxas de recombinação entre um par elétron-buraco como função do tempo, os tempos médios de recombinação do par, tanto em presença como sem a interação Coulombiana (exciton). Estes trabalhos estão fase final de desenvolvimento.

Apêndice A

Parâmetros do $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$

Parâmetro	Unidade	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	Referências
E_g	eV	$1,59 + 1,040x + 0,470x^2$	[1]
E_p	eV	22,85	[2]
$\Delta E_c/\Delta E_v$	%	62/38	[3][4]
γ_1	-	$1,84 - 0,90x$	Calculado
γ_2	-	$2,00 - 1,68x$	Calculado
γ_3	-	$0,39 - 0,35x$	Calculado
F	-	$2,0 - 1,68x$	Calculado
N_1		$1,9 - 0,76x$	Calculado
κ		$-0,79 - 0,35x$	Calculado
q		$0,04 - 0,01x$	[4]
Δ	eV	$0,343 - 0,064x$	[5]
g_c^*		$-0,44 + 3,5x - 1,54x^2$	[6]
κ^L	-	$1,72 - 1,6x$	[4]
γ_1^L		$6,85 - 3,40x$	[2]
γ_2^L		$2,10 - 1,61x$	[2]
γ_3^L		$2,90 - 1,61x$	[2]
m_e^*	m_0	$0,0665 + 0,0835x$	[5]
m_{lh}^*	m_0	$0,09 + 0,12x$	Calculado
m_{hh}^*	m_0	$0,38 + 0,10x$	Calculado
$m_{hh}^{*[111]}$	m_0	$0,95 + 0,20x$	Calculado
m_{so}^*	m_0	$0,173 + 0,141x$	[5]
a_0	Å	$5,653 - 0,0078x$	[7]

Tabela A.1: Parâmetros para o $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$.

Bibliografia

- [1] A. Onton. Festkörperprobleme XIII. H. S. Queisser, editores, Advances in Solid State Physics, pag 59, Braunschweig, 1973. Vieweg.
- [2] Semiconductors. O Madelung, M Scultz, H. Weiss, editores, Numerical Data e Functional Relationships in Science and Technology: Group III, volume **17** a e **17** b de Landolf-Bornstein, Berlin, 1982, Springer.
- [3] H. Kroemer. *Band Offsets* at Heterointerfaces: Theoretical Bases and Review, of Recent Experimental Work. Surf. Sci., **174**, 299 – 306, (1986).
- [4] P. Lawaetz. Phys. Rev. B **4**, 3460–3467, (1971).
- [5] R. Eppenga, M. F. H. Schuurmans, S. Colak, Phys. Rev. B, **36**, 1554 – 1564, (1987).
- [6] C. Weisbuch, C. Hermann, Phys. Rev. B, **36**, 816 – 822, (1977).
- [7] J. Appl. Phys., **58**, R1–R29, (1984).

Apêndice B

O Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas ([1]) é utilizado na solução numérica das equações diferenciais de forma a transformá-las em um sistemas de equações lineares algébricas. Sendo assim, as funções contínuas são tratadas como um conjunto de valores discretos permitindo transformar derivadas em operações aritméticas simples.

Seja $f(z)$ uma função analítica. Expandindo $f(z)$, na vizinhança de um ponto z , em uma série de *Taylor* obtemos,

$$f(z \pm a) = f(z) \pm a \frac{df(z)}{dz} + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2 f(z)}{dz^2} \pm \frac{a^3}{3!} \frac{d^3 f(z)}{dz^3} + \dots \quad (\text{B.1})$$

Estas equações podem ser resolvidas para $\frac{df(z)}{dz}$, $\frac{d^2 f(z)}{dz^2}$, resultando em

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{f(z+a) - f(z-a)}{2a} + \mathcal{O}(a^2)$$

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = \frac{f(z+a) - 2f(z) + f(z-a)}{a^2} + \mathcal{O}(a^3).$$

Considerando que z varie de forma discreta sobre uma rede uniforme de N pontos e usando a notação com índices,

$$z \rightarrow z_i ; z_{i+1} - z_i = a; f(z) \rightarrow f_i ; f(z \pm a) \rightarrow f_{i \pm 1} ; \{i = 1, 2 \dots N\}$$

onde , z_i e f_i são variáveis discretas obtém-se

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{f_{i+1} - f_i}{2a} + \mathcal{O}(a^2)$$

$$\frac{d^2f(z)}{dz^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{a^2}.$$

Entretanto como o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é simetrizado, todos os parâmetros presentes são dependentes da posição z . Dessa forma sendo $\alpha(z)$ um parâmetro da posição, a segunda derivada $\frac{d^2f(z)}{dz^2}$ pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dz}\alpha(z)\frac{d}{dz}f(z) = \frac{\alpha_{i+1/2}f_{i+1} - (\alpha_{i+1/2} + \alpha_{i-1/2})f_i + \alpha_{i-1/2}f_{i-1}}{a^2} + \mathcal{O}(a^3)$$

onde $\alpha_{i \pm 1/2} = (\alpha_i + \alpha_{i \pm 1})/2$.

Bibliografia

- [1] R. W. Hornbeck. Numerical Methods. Quantum Publishers, New York, 1975.