

Este exemplar corresponde a redação final desta
defendida pelo aluno Evaldo Ribeiro e aprovada
pela comissão julgadora
Campinas, B de Maio de 1993

**Absorção e Refletividade Moduladas em
Superredes e Poços Quânticos de
 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$**

Evaldo Ribeiro

orientador

Prof. Dr. Fernando Cerdeira

Tese apresentada no Instituto de Física
"Gleb Wataghin", Universidade Estadual de
Campinas, para a obtenção do Título de
Mestre em Física.

Campinas - São Paulo

1993



TM/909/IFGW

UNEP/WHO	IF
R. 355a	
19088	M
261/93	
x	
C\$ 100.000.00	
23/04/93	
CM00045205-8	

08

Agradecimentos

Quero expressar minha sincera gratidão

ao Prof. Fernando Cerdeira, pela prontidão em discutir problemas, pelo ritmo contagiante e entusiasmado com que acompanhou a todas as fases deste projeto, pela orientação e estímulo neste trabalho e em minha formação profissional e, sobretudo, pela amizade;

à Profa. Vólia Lemos Crivelenti, pela amizade e pelo incentivo desde meu ingresso no grupo;

ao Prof. Carlos Vázquez-López, pela iniciação nos mistérios da espectroscopia de modulação (e nas gambiarras...);

ao amigo Pedro, pelo valioso auxílio dispensado durante todo este tempo;

aos colegas do Grupo de Propriedades Ópticas, pela amizade, companheirismo e pela conversa fiada;

ao pessoal do desenho, Vasco, Charles e Valter, pela paciência e capricho nas figuras;

aos meus pais, José e Neuza, por todo o carinho e apoio;

à FAPESP pelo suporte financeiro.

Abstract

We performed a detailed study of the electronic states of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells and superlattices using optical techniques. First we measured quantitatively the biaxial strain in each type of layer by means of Raman scattering. Next we obtained electro and photomodulated reflectivity and transmission spectra. We interpreted these spectra within the framework of a scalar envelope function model. Comparison between our spectra and the predictions of the model led to the determination of the band offset parameter for the $\text{In-GaAs}/\text{GaAs}$ heterojunction as well as providing unambiguous evidence about miniband dispersion. We also studied the effects of an externally-applied dc electric-field on the electronic states of one of our superlattice samples. These studies illustrated, for the first time, the step-by-step evolution of the states from Franz-Keldysh extended states to confined Stark-Wannier states. We suggested the existence of boundaries between these regions that can be expressed in terms of a material-independent effective electric-field.

Resumo

Realizamos um estudo detalhado dos estados eletrônicos de poços quânticos e superredes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ empregando técnicas ópticas. Primeiramente, medimos quantitativamente a tensão biaxial presente nas camadas dos materiais componentes por meio de espalhamento Raman. Em seguida, obtivemos espectros de refletividade e transmissão eletro e fotomodulados. Interpretamos estes espectros em termos de um modelo escalar de função envelope. A comparação entre nossos dados e as previsões do modelo levou à determinação do parâmetro de descasamento de bandas para a heterojunção $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$, assim como mostrou evidências claras de dispersão de minibandas. Estudamos também os efeitos de um campo elétrico dc (aplicado externamente) sobre os estados eletrônicos de uma das superredes de nosso conjunto de amostras. Os resultados desse estudo ilustraram, pela primeira vez, a evolução passo a passo desde estados Franz-Keldysh estendidos até estados Stark-Wannier confinados. Sugerimos a existência de fronteiras entre estas regiões, podendo ser expressadas em termos de um campo elétrico efetivo, independente dos parâmetros da amostra.

Lista de Convenções

Convenções editoriais:

Bibliografia: Identificação por sobrenome do primeiro autor e ano de publicação, citados entre colchetes:

[Ribeiro 1992]

Footnotes: Comentários de rodapé são identificados por símbolos especiais superscritos, que “zeram” ao começo de cada capítulo:

comentário*...

Convenções matemáticas:

Caracteres em negrito (**L**, **S**): grandezas vetoriais;

Caracteres “seta dupla” ($\overset{\leftrightarrow}{X}$): grandezas tensoriais;

Índices i, j, k, l, m, n, x, y, z: componentes da grandeza associada, salvo especificação em contrário.

Convenções de notação:

a: parâmetro de rede;

α : potencial de deformação hidrostático.

*Os símbolos são, na seqüência: *, †, ‡, §, ¶, ||, **, ††, ‡‡, §§, ¶¶, |||.

Conteúdo

I	Espectroscopia de Modulação	6
I.1	Introdução	5
I.2	Técnicas Experimentais	7
I.3	Algumas Considerações sobre Formas de Linha	12
I.3.1	Considerações Gerais (Semicondutores “Bulk”)	12
I.3.2	Interação Elétron-Buraco (Semicondutores “Bulk”)	16
I.3.3	Aplicações a Microestruturas Semicondutoras	20
I.4	Aplicação das Técnicas Experimentais: Gap das Ligas	22
I.5	Conclusões	26
II	Heteroestruturas de InGaAs/GaAs: “Band-offset” e Dispersão de Minibandas	27
II.1	Introdução	27
II.2	Determinação Experimental de Q	30
II.3	Confinamento dos Buracos Leves	37
II.4	Conclusões	40
III	Semicondutores em Presença de um Campo Elétrico Externo	42
III.1	Introdução	42
III.2	Considerações Gerais	43
III.3	Aproximação de Massa Efetiva	44
III.4	Funções de Houston	51
III.5	Conclusões	57
IV	Efeitos de Campo Elétrico em Superredes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$	60

IV.1	Introdução	60
IV.2	Primeira Observação de Oscilações Franz-Keldysh em Superredes	61
IV.3	Evolução dos Estados Eletrônicos de uma Superrede em Função do Campo Elétrico: de FKO's até SWL's	63
IV.4	Conclusões	73
A	Efeitos de Tensão em Semicondutores	75
B	O Modelo de Bastard para Heteroestruturas	88
	Referências	93

Introdução

No presente trabalho realizamos um estudo dos estados eletrônicos de superredes e poços quânticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ utilizando diversas técnicas ópticas.

A espectroscopia Raman foi utilizada para determinar a tensão biaxial nas camadas, decorrente do descasamento entre os parâmetros de rede do GaAs e da liga de InGaAs. A aplicação desta técnica para estes fins, assim como o efeito exercido pela tensão biaxial sobre os estados eletrônicos dos materiais constituintes em “bulk” são discutidos no Apêndice A.

Os estados eletrônicos das superredes são calculados (levando em conta a tensão biaxial) mediante um modelo escalar de função envelope. Os rudimentos deste modelo estão descritos no Apêndice B.

As técnicas de refletividade e absorção moduladas foram utilizadas no estudo dos estados eletrônicos destas microestruturas. Uma descrição das técnicas, a interpretação das formas de linha resultantes e suas aplicações podem ser encontradas no Capítulo I.

O primeiro problema a ser abordado foi a determinação do descasamento entre as bandas na heterojunção InGaAs/GaAs mediante o estudo do seu espectro de eletro e fotorefletividade e/ou transmissão. Este trabalho é descrito no capítulo II, onde também discutimos nossos resultados que demonstraram experimentalmente a dispersão nas minibandas em superredes de período $D \leq 200 \text{ \AA}$.

Durante estes estudos, efeitos curiosos foram observados no espectro de uma das amostras. Uma análise detalhada destes efeitos nos levou a concluir que eles eram produzidos pela existência de um campo elétrico dc $F \simeq 7 \text{ kV/cm}$ (não-intencionalmente presente) na amostra. Isto nos levou a solicitar do crescedor uma amostra especialmente crescida para estudar sistematicamente estes efeitos de campo elétrico. Os resultados destes estudos são descritos no Capítulo IV. No Capítulo III fornecemos um breve resumo das teorias existentes sobre efeitos de campos elétricos na estrutura eletrônica de semicondutores.

O trabalho descrito nesta tese deu origem a três artigos publicados em revistas internacionais e outros três publicações em anais de conferências internacionais, que listamos a seguir.

A - Em Revistas Internacionais com Árbitro:

1. “Franz-Keldysh Oscillations in the Photomodulated Spectra of an $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ Strained-Layer Superlattice”

F. Cerdeira, C. Vázquez-López, E. Ribeiro, P. A. M. Rodrigues, V. Lemos, M. A. Sacilotti

and

A. P. Roth

Physical Review B 42, 9480 (1990).

2. “A Photomodulated Spectroscopy Study of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Superlattices and Quantum Wells”

C. Vázquez-López, E. Ribeiro, F. Cerdeira, P. Motisuke, M. A. Sacilotti and A. P. Roth

Journal of Applied Physics 69, 7836 (1991).

3. “Step by Step Evolution from Franz-Keldysh Oscillations to Stark-Wannier Confinement in an $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ Superlattice”

E. Ribeiro, F. Cerdeira and A. P. Roth

Physical Review B 46, 12542 (1992).

B - Em Anais de Conferências Internacionais com Árbitro:

1. “Miniband Dispersion and Franz-Keldysh Oscillations in the Photomodulated Spectra of $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ Superlattices”

F. Cerdeira, C. Vázquez-López, E. Ribeiro, P. A. M. Rodrigues, V. Lemos, M. A. Sacilotti

and

A. P. Roth

Proceedings of the 19th International Conference on the Physics of Semiconductors, editors E. Anastassakis and J. D. Joannopoulos (World Scientific, Singapore 1990), p.1077.

2. “Evidence of Miniband Dispersion in the Photomodulated Spectra of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Superlattices”

E. Ribeiro, C. Vázquez-López, F. Cerdeira, P. Motisuke, M. A. Sacilotti and A. P. Roth
Proceedings of the *Fifth Brazilian School on Semiconductor Physics*, Editor J.R.Leite
(World Scientific, Singapore, in print).

3. “Application of Electromodulated Transmission to the Study of the Electric-Field Dependence of Electronic States in an $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Superlattice”

F. Cerdeira, E. Ribeiro and A. P. Roth

Journal of Physics C, in print.

Capítulo I

Espectroscopia de Modulação

I.1 Introdução

A espectroscopia de modulação mede a variação na refletividade ou transmissão quando uma perturbação periódica é introduzida no sistema em estudo. Esta perturbação deve ser aplicada ao feixe incidente (modulação de comprimento de onda) ou diretamente à amostra (pressão, variações na temperatura ou campo elétrico externo), de forma a modular suas propriedades ópticas. Em todos os casos, as mudanças induzidas são pequenas, de modo que o espectro resultante é relacionado a alguma derivada do espectro não-modulado. Tal natureza “derivativa” suprime “backgrounds” sem interesse e produz estruturas pronunciadas em energias nas quais ocorrem singularidades na densidade conjunta de estados. Estas são conhecidas como singularidades de van Hove[Hove 1953, Phillips 1956] e são ilustradas na Fig. I.1 para as dimensionalidades 1, 2 e 3. A vantagem disso é que esses pontos singulares, que são bem localizados em energia, podem ser analisados em termos de modelos de banda parabólica localmente válidos. Na Fig. I.2(a) temos uma boa ilustração destas características. Nela podemos comparar espectros de GaAs “bulk” de (i) refletividade, (ii) modulação de comprimento de onda (primeira derivada) e (iii) eletrorefletância (terceira derivada), nos quais o progressivo aumento de resolução das estruturas é claro. As estruturas identificadas na Fig. I.2(a) são devidas às transições na zona de Brillouin do material [Fig. I.2(b)] que estão assinaladas na Fig. I.2(c). Pode-se afirmar que o mesmo resultado poderia ser obtido se registrássemos a refletividade simples e em seguida tomássemos sucessivas derivadas numéricas da mesma. Este procedimento não é normalmente empregado,

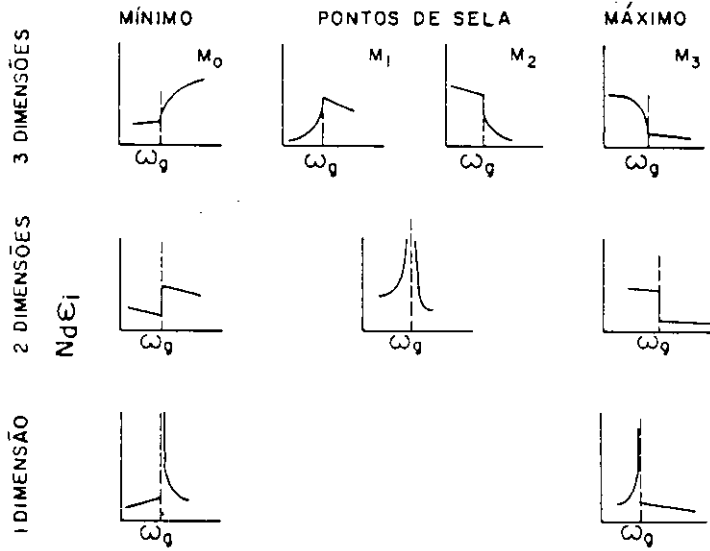
pois repetidas diferenciações aumentam muito o ruído presente no espectro original. Além disso, ao medir-se o espectro de derivada evitam-se uma variedade de erros sistemáticos (flutuações das fontes luminosas, variações na eletrônica, etc.).

Devido às vantagens enumeradas acima, a espectroscopia de modulação teve influência decisiva no entendimento da estrutura de bandas dos semicondutores “bulk”. A maioria dos trabalhos nesta área foi realizada nos anos sessenta e no começo dos anos setenta e tem sido amplamente revisado por inúmeros autores [Cardona 1969, Williardson 1972, Seraphin 1972, Aspnes 1973a, Aspnes 1980]. Com o advento das microestruturas semicondutoras, crescidas por técnicas tais como MBE (Molecular Beam Epitaxy), MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) e CBE (Chemical Beam Epitaxy), surgiu toda uma nova gama de materiais artificiais cuja estrutura eletrônica precisa ser estudada. Como conseqüência, houve um reavivamento do interesse em espectroscopia tradicional e de modulação. O último tipo de medida tem sido muito útil no estudo dessas microestruturas, como mostram recentes revisões de F. H. Pollak [Pollak 1989, Pollak 1991]. De particular importância têm sido as técnicas de transmissão e refletividade foto e eletromoduladas, as quais produzem formas de linha de terceira derivada sob condições bem determinadas [Aspnes 1973a, Aspnes 1980]. A seguir discutiremos sobre técnicas e formas de linha experimentais, mostrando exemplos de aplicação das mesmas na caracterização de materiais semicondutores.

I.2 Técnicas Experimentais

O arranjo experimental usado em espectroscopia foto ou eletromodulada é mostrado esquematicamente na fig. I.3. A modulação dos campos internos na microestrutura semicondutora é feita incidindo-se um feixe de luz secundário na amostra, com energia acima do gap fundamental e pulsado a uma frequência fixa (tipicamente dentro do intervalo $10 \text{ Hz} \leq \Omega_m \leq 10^3 \text{ Hz}$). O mecanismo exato pelo qual os pares elétron-buraco injetados modulam os campos internos ainda está em discussão e depende de cada amostra. Na maioria dos casos, entretanto, ele está relacionado com o efeito foto-voltaico, que consiste numa redução do campo elétrico em alguma interface (substrato – “buffer layer”, “capping layer” – ar, etc.), da mesma maneira que em semicondutores “bulk” [Cerdeira 1969, Aspnes 1970a]. Esses campos também podem ser modulados depositando um filme metálico semitransparente, o qual cria uma barreira Schottky na superfície

PARTE IMAGINARIA



PARTE REAL

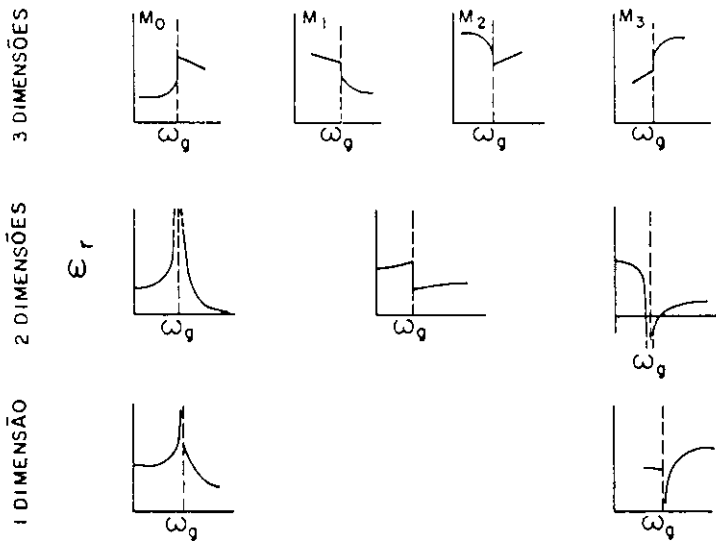


Figura I.1: Partes imaginária e real da função dielétrica na vizinhança de pontos singulares na densidade de estados conjunta, para dimensões 1, 2 e 3.

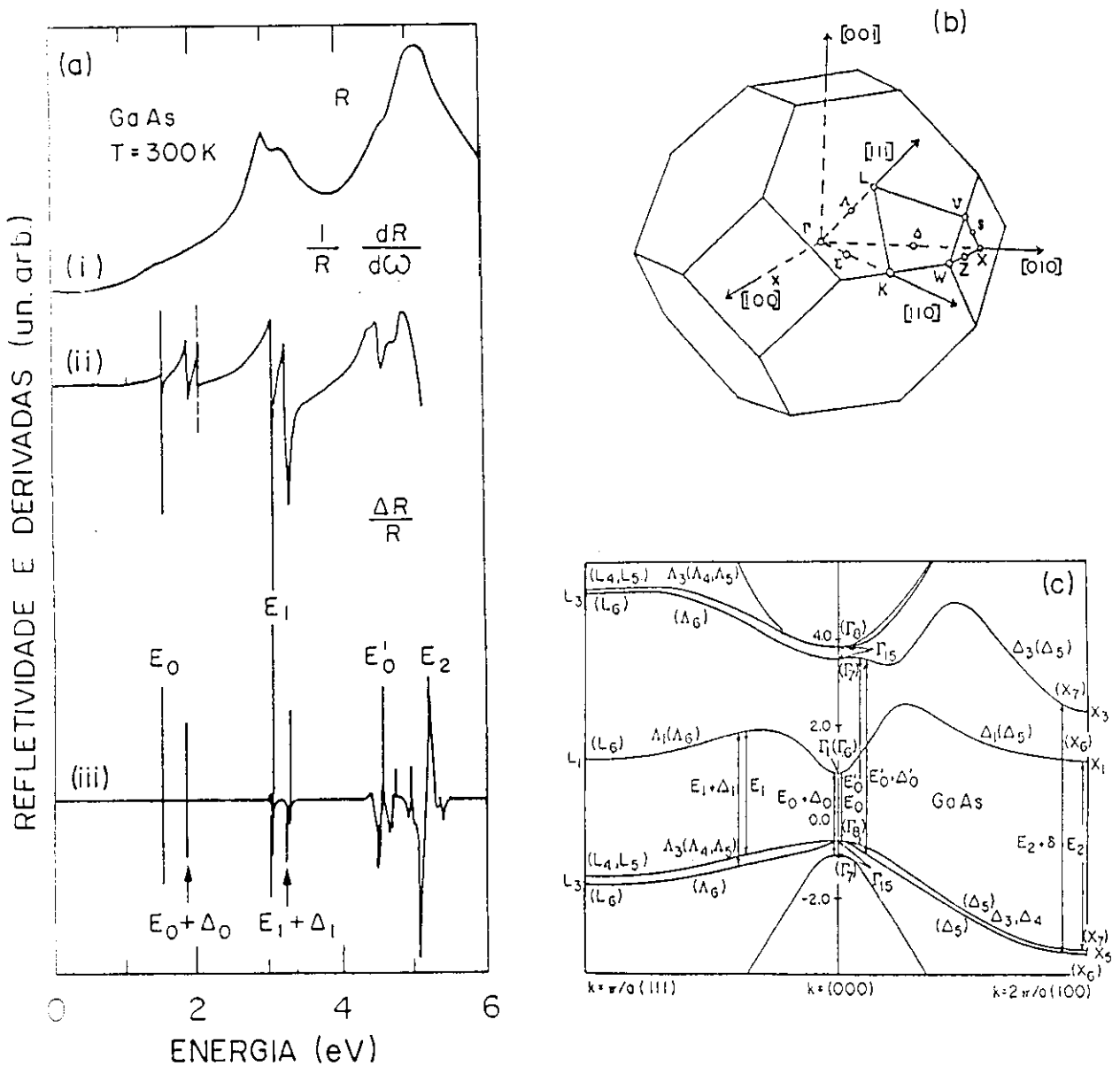


Figura I.2: (a) Comparação entre três tipos de espectros ópticos do GaAs "bulk": (i) refletividade, (ii) refletividade modulada (derivada primeira) e (iii) eletrorefletância de baixo campo. Após Aspnes[Aspnes 1980]. (b) Zona de Brillouin do GaAs. (c) Estrutura de bandas do GaAs indicando algumas das transições interbanda observáveis.

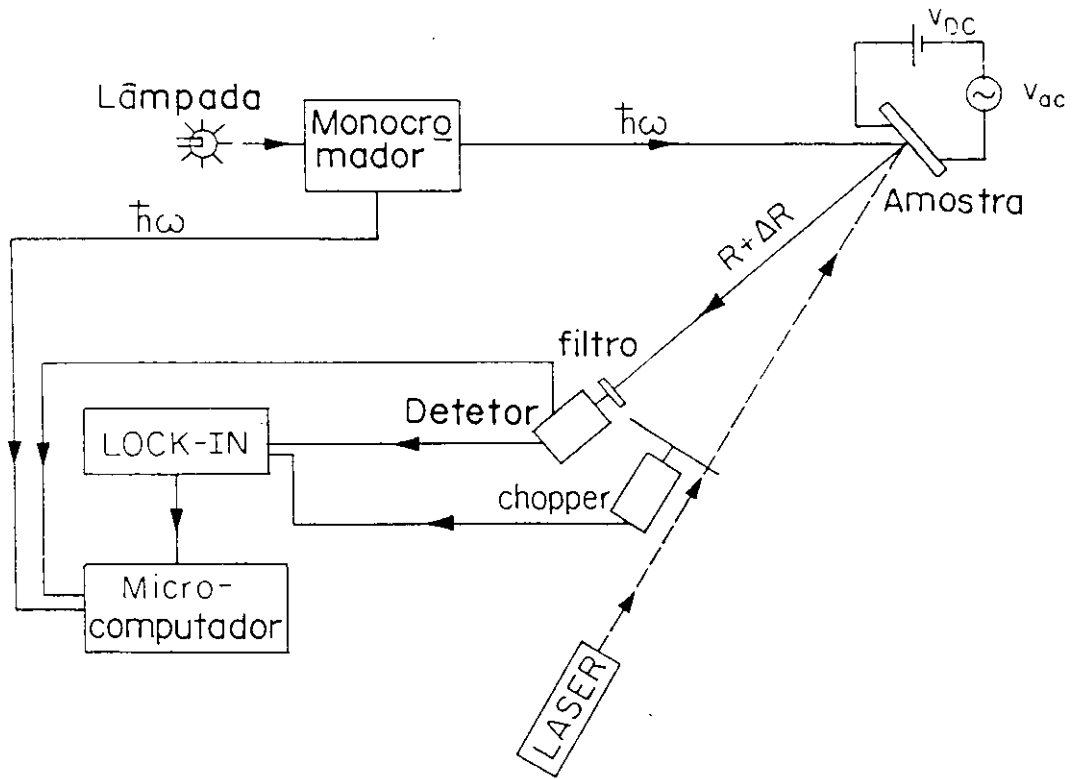


Figura I.3: Montagem experimental típica da técnica de foto ou eletrorefletância.

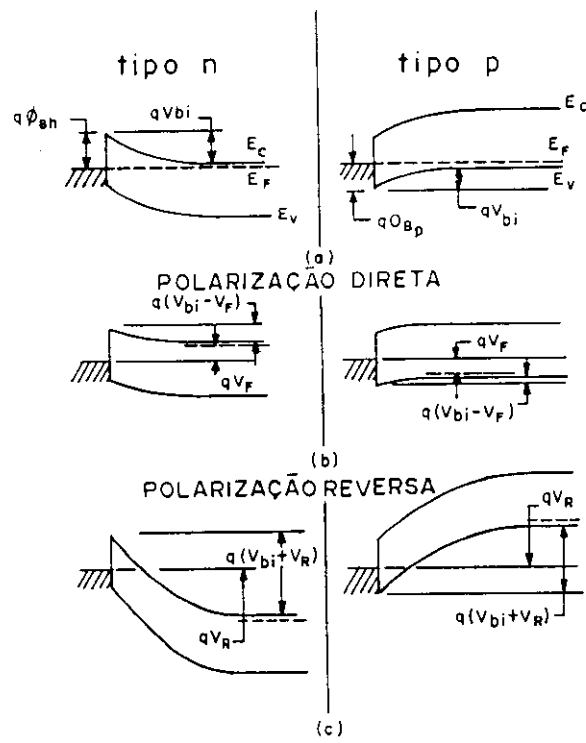
da amostra[Aspnes 1980]. Essa barreira pode ser controlada por uma voltagem dc aplicada externamente e modulada por uma outra ac. Estes dois mecanismos estão ilustrados na Fig. I.4. Detecção sensível à fase permite a medida de variações na transmissão ou refletividade da amostra da ordem de uma parte em 10^5 ou 10^6 . O arranjo experimental da Fig. I.3 é auto-explicativo e tem sido descrito em detalhes por outros autores[Cardona 1969, Aspnes 1980, Pollak 1989].

A quantidade diretamente medida é a variação fracional na refletividade (R) ou transmissividade (T) of the material, i.e., $\Delta R/R$ ou $\Delta T/T$. Cálculos teóricos normalmente fornecem a função dielétrica ($\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$). Variações nessa função resposta estão relacionadas aos espectros obtidos experimentalmente por:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R}{R} &= \alpha \Delta \varepsilon_1 + \beta \Delta \varepsilon_2 = \text{Re} [(\alpha - i\beta) \Delta \varepsilon] \\ &= \text{Re} [C e^{i\theta} \Delta \varepsilon], \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

onde α e β são os coeficientes de Seraphin[Seraphin 1972]. Expressões similares podem ser obtidas para $\Delta T/T$.

METAL-SEMICONDUCTOR



AR-SEMICONDUCTOR

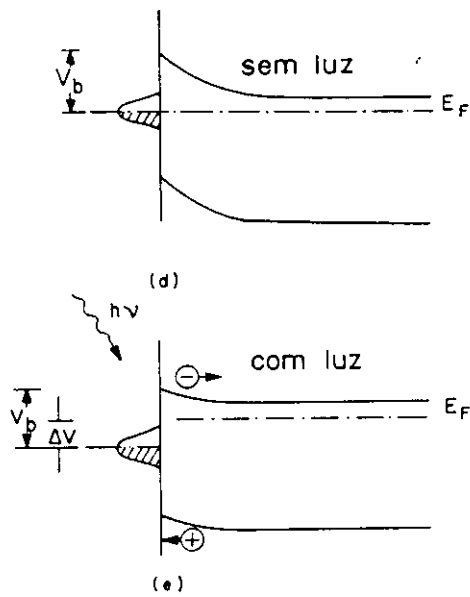


Figura I.4: Ilustração dos mecanismos de modulação do campo elétrico para: (a)-(c) eletrorefletância e (d)-(e) fotorefletância.

I.3 Algumas Considerações sobre Formas de Linha

I.3.1 Considerações Gerais (Semicondutores “Bulk”)

A simplicidade e relativa facilidade com que as experiências são realizadas às vezes contrastam com a complexidade inerente que se encontra na interpretação das formas de linha resultantes. Como em toda técnica de modulação, a perturbação introduz pequenas mudanças na função dielétrica complexa do material, ε . Quando o Hamiltoniano da perturbação conserva a periodicidade, o momento cristalino é um bom número quântico e as transições ópticas permanecem verticais. As variações dominantes introduzidas pela perturbação consistem em pequenos deslocamentos nos gaps, larguras de linha e elementos de matriz de transição. Desde que essas variações sejam pequenas, as correspondentes mudanças em ε também serão pequenas e podem ser aproximadas por derivadas primeiras da função dielétrica não-perturbada:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(\omega, \xi) - \varepsilon(\omega, 0) = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial E_0} \frac{\partial E_0}{\partial \xi} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial \Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial \xi} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial \xi} \right) \Delta\xi \quad (I.2)$$

onde ξ é a perturbação externa e E_0 , Γ e P são a energia de transição, largura de linha e elemento de matriz, num dado ponto crítico na zona de Brillouin. Estes são chamados mecanismos interbanda e descrevem os efeitos da maioria dos parâmetros moduladores (ξ). Em contraste com outras formas de modulação, o campo elétrico (F) introduz um potencial perturbativo $V = -e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$ que destrói a simetria translacional do Hamiltoniano não-perturbado, H_0 . Essa perda resulta num outro mecanismo de modulação chamado intrabanda. Aqui o campo acelera o elétron no espaço k ($\hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{F}$) dentro de uma mesma banda. Esse processo introduz mudanças em ε que não podem ser expressadas em termos de derivadas primeiras. O campo elétrico também produz um deslocamento Stark nas energias das transições, larguras de linha e elementos de matriz que levam a variações do tipo derivada primeira em ε , semelhantes às dadas pela eq. (I.2). Entretanto, para estados de Bloch não-confinados tais termos são negligíveis quando comparados à contribuição intrabanda a $\Delta\varepsilon$ [Aspnes 1973a]. Espectros de eletrorefletância (ER) a baixo campo são obtidos quando ambos mecanismos podem ser tratados em teoria de perturbação de primeira ordem, i.e., num regime de campo onde pode ser feita uma expansão até primeira ordem em termos de duas energias características, uma da perturbação e outra (muito maior) do sistema. Para mecanismos interbanda, a energia do sistema é o gap óptico (E_0), enquanto que a energia de perturbação pode ser tomada como a queda de potencial em uma cela unitária ($-eFa$). A condição para um

tratamento perturbativo para este mecanismo é:

$$eFa \ll E_0. \quad (\text{I.3})$$

As energias análogas para o mecanismo intrabanda são menos óbvias, mas a condição de validade para uma expansão perturbativa pode ser expressada ao requerer que a energia média por partícula, ganha por aceleração do campo externo no intervalo entre colisões ($\tau \sim \hbar/2\Gamma$), seja muito menor que o alargamento (em energia) devido à vida média do estado de Bloch ($\sim \Gamma$, largura de linha). Isto pode ser expressado quantitativamente como[Aspnes 1973a]:

$$\hbar\Omega \ll \Gamma, \quad (\text{I.4})$$

onde:

$$\hbar\Omega = \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{8\mu_{\parallel}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.5})$$

e μ_{\parallel} é a massa efetiva reduzida na direção do campo. Desta forma, $\hbar\Omega$ e Γ são as energias (de perturbação e do sistema) a serem comparadas.

Em semicondutores bulk, onde $E_0 \sim 1$ eV e $a \sim 6$ Å, a violação da eq. (I.3) requiriria campos de tamanha magnitude ($F \geq 10^7$ V/cm) que uma expansão perturbativa em primeira ordem é sempre válida para o termo interbanda. Campos que violem a eq. (I.3) produzem mudanças na estrutura de bandas do material e transições entre estes estados alterados não podem ser tratados com a aproximação de ponto crítico. Estes estados serão discutidos posteriormente no capítulo III. É possível violar a condição da eq. (I.4) mas ao mesmo tempo manter a da eq. (I.3). Isto é particularmente verdadeiro para o limiar de absorção fundamental no caso de materiais de gap direto. Por outro lado, Γ aumenta rapidamente com o aumento da energia, de forma que a eq. (I.4) é quase sempre satisfeita para transições superiores. Este regime de campo intermediário é dominado pelo mecanismo intrabanda. Na vizinhança de pontos críticos, o problema pode ser tratado na aproximação de massa efetiva. Esse tratamento fornece uma cauda exponencial abaixo do gap e uma série de oscilações amortecidas acima dele. Quando $\hbar\Omega \geq 3\Gamma$ essas oscilações adquirem uma forma analítica e simples, dada por[Aspnes 1973b]:

$$\hbar\omega_n = \hbar\Omega X_n + E_0 \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (\text{I.6})$$

com:

$$X_n = \left[\frac{3\pi}{2} (n - \alpha) \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (\text{I.7})$$

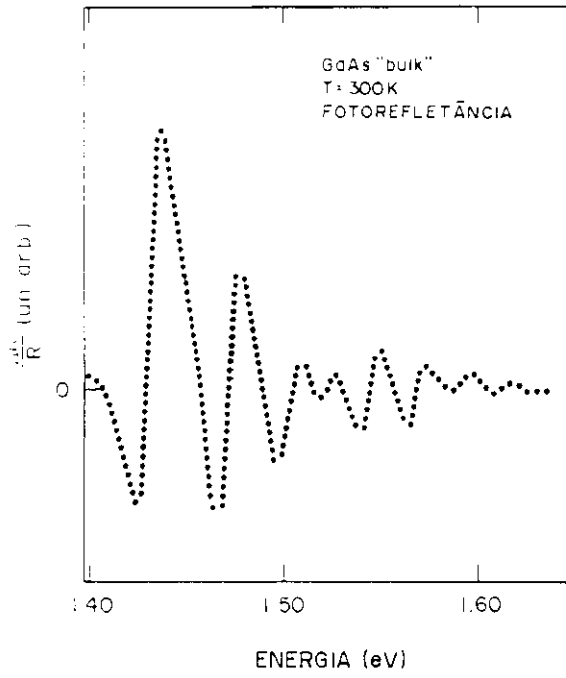


Figura I.5: Espectro de fotorefletância de GaAs “bulk” apresentando FKO’s associadas com o gap direto. Após Hoof[Hoof 1989].

onde n são inteiros que numeram os máximos e mínimos alternados a partir da cauda exponencial e os valores de α dependem da dimensionalidade do ponto crítico ($\alpha = 1/2$ para um M_0 3D). Essas oscilações Franz-Keldysh (FKO’s) são uma assinatura inconfundível do regime de campo intermediário. A Fig. I.5 mostra um espectro PR (300 K) do GaAs ao redor do limiar de absorção, um exemplo representativo deste regime. As oscilações para $\hbar\omega > E_0$ contêm batimentos devidos à interferência de dois conjuntos de oscilações com diferentes periodicidades, provenientes de transições da banda de condução para as de buraco pesado e de buraco leve.

Finalmente, quando ambas eqs. (I.3) e (I.4) são satisfeitas, estamos no regime de campo baixo, onde o mecanismo interbanda é dominante. Aqui, a perturbação fornece[Aspnes 1973a, Aspnes 1980, Aspnes 1970b, Aspnes 1972]:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(\omega, F) - \varepsilon(\omega, 0) = \frac{e^2\hbar F^2}{2A(\hbar\omega)^2\mu_{\parallel}} \frac{\partial^3}{\partial\omega^3} \left[\omega^2\varepsilon(\omega, 0) \right], \quad (I.8)$$

onde $\varepsilon(\omega, 0)$ é a função dielétrica não-perturbada e ω é a energia do fóton. A forma de linha experimental pode ser obtida substituindo essa expressão para $\Delta\varepsilon$ na eq. (I.1). Assim, ambas $\Delta\varepsilon$ e forma de linha experimental ($\Delta R/R$ ou $\Delta T/T$) são independentes do campo elétrico e suas intensidades de pico dependem quadraticamente do mesmo. Essas duas características podem ser usadas para identificar estruturas do regime de baixo campo. Quando os campos são gerados

por uma barreira Schottky na superfície do semiconductor, essa dependência quadrática em F é traduzida como uma dependência linear no potencial da barreira (V_B), i.e., $\Delta R/R \propto F^2 \propto V_B$, e a forma de linha permanece invariante quando V_B varia. Esta é uma assinatura certificada do regime de baixo campo [Aspnes 1973a]. Em via de regra, este regime é obtido para $\Delta R/R \leq 10^{-4}$. Uma verificação da forma de linha de terceira derivada é mostrada na Fig. I.6, onde os valores de $\Delta\varepsilon_1$ e $\Delta\varepsilon_2$ obtidos de espectros de eletrorefletância [usando eq. (I.1) e análise de Kramers-Kronig] das transições E_1 e $E_1 + \Delta_1$ em Ge [curvas inferiores, (e)] são comparados às derivadas terceiras calculadas numericamente a partir de espectros de elipsometria de alta resolução [segunda curva mais baixa, (d)] [Aspnes 1972b]. Esta figura [comparando-se as curvas (a) e (d)] também ilustra o fato de que a natureza de derivada terceira da eletrorefletância de baixo campo aumenta a resolução em energia da singularidade e suprime “backgrounds” sem interesse, resultando em uma estrutura que é diferente de zero somente em uma estreita faixa de energia ao redor do ponto crítico.

Na vizinhança de pontos críticos, diferenças nas energias das bandas podem ser substituídas por uma expansão parabólica válida localmente. Neste caso, a função dielétrica que entra na eq. (I.8) pode ser aproximada por [Aspnes 1972, Aspnes 1973a]:

$$\varepsilon(\omega, \Gamma) = A\Gamma^{-m} e^{i\phi} (\hbar\omega - E_0 + i\Gamma)^m, \quad (I.9)$$

onde $m = -1/2, 0$ (logarítmico) e $1/2$ são os resultados válidos para pontos críticos 1D, 2D e 3D. Na eq. (I.9) A é uma constante que é proporcional ao quadrado do elemento de matriz de transição e o fator de fase ϕ depende do tipo de singularidade (M_0, M_1, M_2 ou M_3) [Aspnes 1973a, Aspnes 1972]. Formas de linha de modulação podem agora ser obtidas substituindo esta forma de ε válida localmente na eq. (I.8) (mecanismo intrabanda em ER de baixo campo) ou na eq. (I.2) (termo interbanda em ER de campo baixo ou intermediário, ou outra forma de espectroscopia de modulação). Procedendo desta maneira, e lembrando da ligação entre $\Delta R/R$ e $\Delta\varepsilon$ pela eq. (I.1), formas de linha experimentais obtidas em ER de baixo campo podem ser ajustadas por expressões do tipo:

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re} \left\{ \frac{C e^{i\theta}}{[(\hbar\omega - E_0) + i\Gamma]^n} \right\}, \quad (I.10)$$

com $n = 7/2, 3$ ou $5/2$ para pontos críticos 1D, 2D ou 3D. Valores de E_0 e Γ são facilmente obtidos destes ajustes experimentais. Eq. (I.9) é válida para portadores não-confinados numa situação na qual a interação elétron-buraco é negligenciada. Em situações físicas onde vale essa descrição,

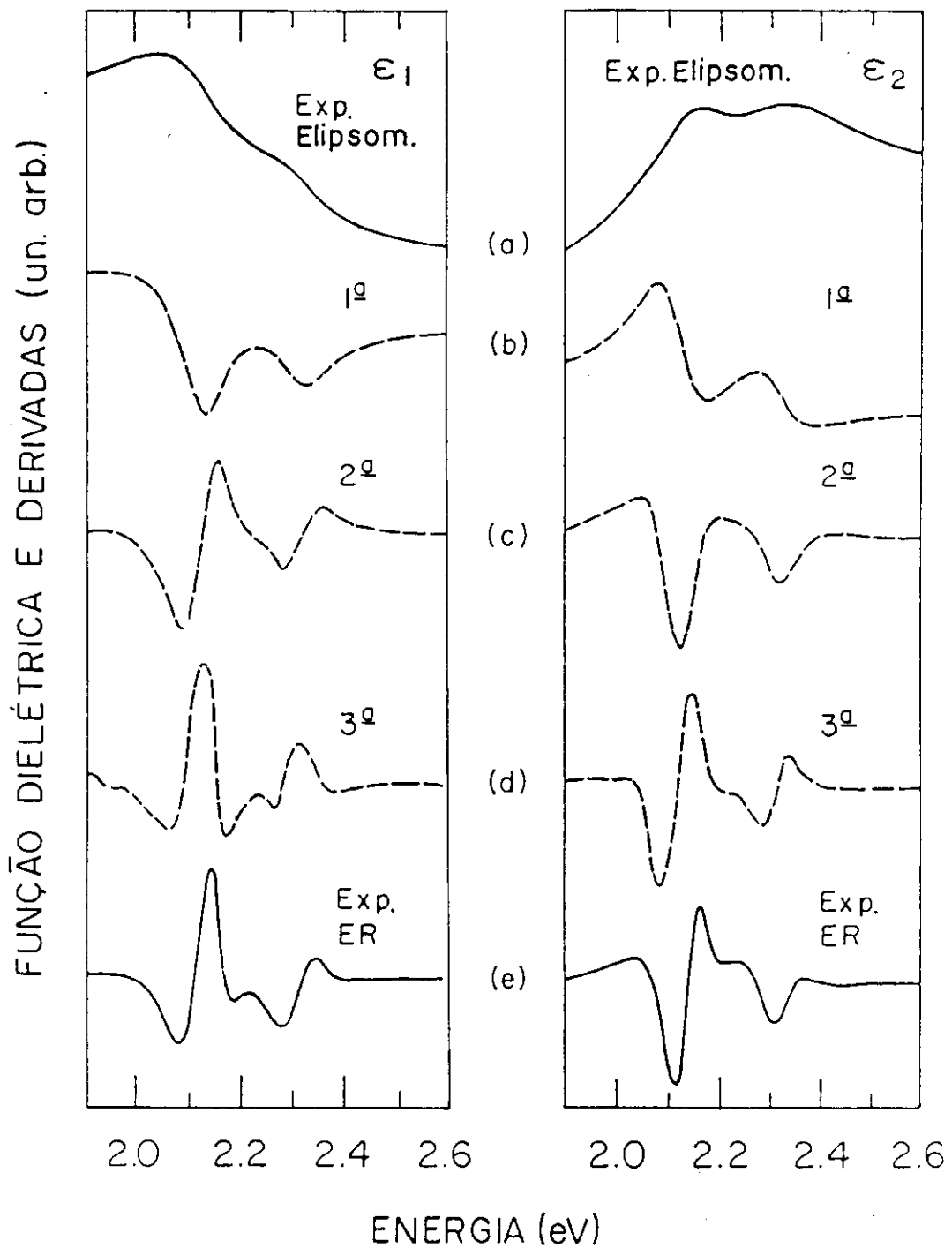


Figura I.6: Partes real e imaginária da constante dielétrica do Ge "bulk" medidas por elipsometria, (a), e suas derivadas calculadas numericamente, (b) - (d). Em (e) encontramos os valores de $\Delta\epsilon_1$ e $\Delta\epsilon_2$ obtidos por eletrorefletância de baixo campo.

pode-se obter informações adicionais sobre a dimensionalidade e o tipo de singularidade (M_0 , M_1 , M_2 ou M_3) através de ajustes do espectro experimental com a eq. (I.9). Estas informações, entretanto, são mais incertas uma vez que interação elétron-buraco e inomogeneidades produzem alterações drásticas nos valores desses parâmetros[Aspnes 1973a].

I.3.2 Interação Elétron-Buraco (Semicondutores “Bulk”)

A interação elétron-buraco (éxciton) altera o modelo de um elétron descrito acima. Uma discussão geral do assunto é dada por Dow[Dow 1976]. Expressões analíticas não podem ser obtidas mesmo para o mais simples dos casos. Cálculos numéricos para limiares de absorção M_0 diretos e indiretos descrevem bem os resultados experimentais para regimes de campos baixo e intermediário. Um bom exemplo disto são os cálculos de Weinstein, Dow e Lao[Weinstein 1970] para a eletroabsorção indireta do Ge (Fig. I.7). A curva sólida representando este cálculo descreve corretamente o limiar de absorção e as FKO's que ocorrem na seqüência, enquanto que a curva tracejada (cálculo sem éxcitons) resulta em uma descrição pobre dos dados e só reproduz as FKO's de mais altas energias. A Fig. I.7 ilustra que mesmo quando elétron e buraco estão fortemente correlacionados, campos intermediários ainda produzem oscilações Franz-Keldysh. Ainda mais surpreendente, o período dos casos correlacionado e não-correlacionado é quase o mesmo para $n \geq 3$ (as primeiras têm período mais curto no caso excitônico), quando a expansão assintótica que leva às eqs. (I.6) e (I.7) é válida[Aspnes 1973b, Dow 1976, Weinstein 1970].

No limite de campo fraco é possível, às vezes, encontrar expressões simples para éxcitons hidrogênicos relacionados com a transição direta M_0 de mais baixa energia[Aspnes 1980, Dow 1976, Aspnes 1970c]. Quando o éxciton concentra a maior parte da força de oscilador e seu alargamento devido ao tempo de vida é pequeno o suficiente, de modo que sua linha de absorção é bem separada do continuum banda-a-banda, sua contribuição à função dielétrica pode ser obtida da eq. (I.9) fazendo[Aspnes 1980, Aspnes 1970c] $m = -1$. Neste caso, o mecanismo interbanda é o correto, uma vez que o éxciton é uma entidade neutra e, portanto, não é acelerado pelo campo. Assim, formas de linha experimentais poderiam ser obtidas inserindo-se a função dielétrica da eq. (I.9) com $m = -1$ na eq. (I.2), o que leva a um $\Delta R/R$ da forma geral dada pela eq. (I.10) com $n = 2$. Neste caso, E_0 seria a energia do limiar da banda menos o Rydberg excitônico e Γ o alargamento devido à vida média do éxciton hidrogênico. Em adição aos estados ligados

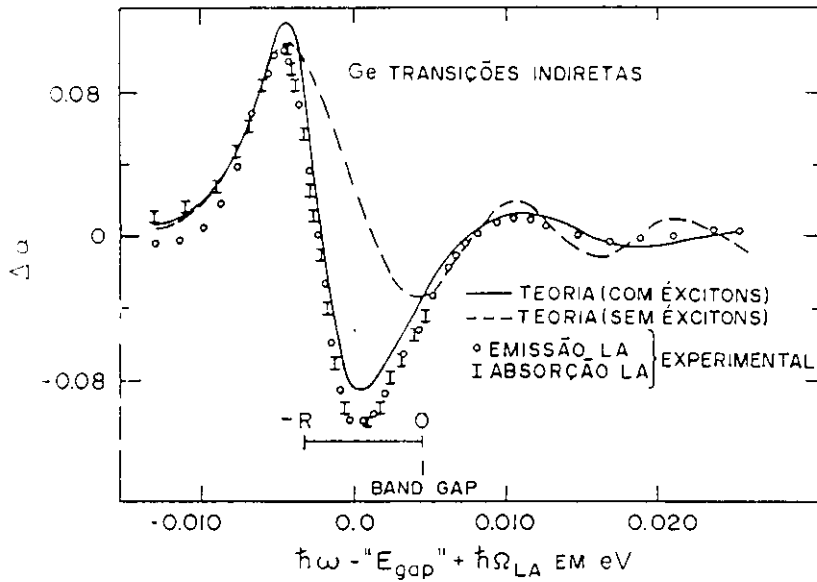


Figura I.7: Comparação entre formas de linha de eletroabsorção experimentais (símbolos) e teóricas (curvas) para o gap indireto de Ge, após Weinstein[Weinstein 1970]. A curva contínua (tracejada) é um cálculo que inclui (não inclui) interações excitônicas.

formados no gap proibido, a correlação Coulombiana elétron-buraco aumenta muito a seção de choque de absorção para energias acima do gap[Dow 1976], como mostrado esquematicamente na Fig. I.8. Então, quando Γ é grande e a linha excitônica não é tão separada do continuum intensificado, a forma do limiar de absorção muda de uma raiz quadrada ($\alpha \propto \sqrt{\hbar\omega - E_0}$) para uma função degrau, característica de uma singularidade M_0 2D. Isto é ilustrado na Fig. I.8, onde o espectro de absorção do GaAs, tomado a diferentes temperaturas, é mostrado. Conforme a temperatura diminui, Γ também decresce e a absorção tipo atômica (Lorentziana) do éxciton se torna mais marcada e melhor separada do continuum. Entretanto, a absorção intensificada e o comportamento de escada do último podem ser observados em todas as temperaturas. Assim, para absorção (ou refletividade) modulada por campo elétrico a eq. (I.10) com $n = 3$ (forma de linha de derivada terceira de uma singularidade M_0 2D) também ajustará os dados em alguns casos onde efeitos excitônicos são importantes; e isso apenas em casos extremos, onde pode ser decidido por argumentos puramente físicos se essa escolha é melhor ou pior que $n = 2$ (derivada primeira de uma contribuição Lorentziana simples de um éxciton hidrogênico). No caso intermediário a forma de linha será bem reproduzida pelas duas escolhas, e resultará nos mesmos valores de E_0 [Aspnes 1980, Aspnes 1970c]. O valor de Γ , entretanto, depende mais de nossa escolha de n , assim como

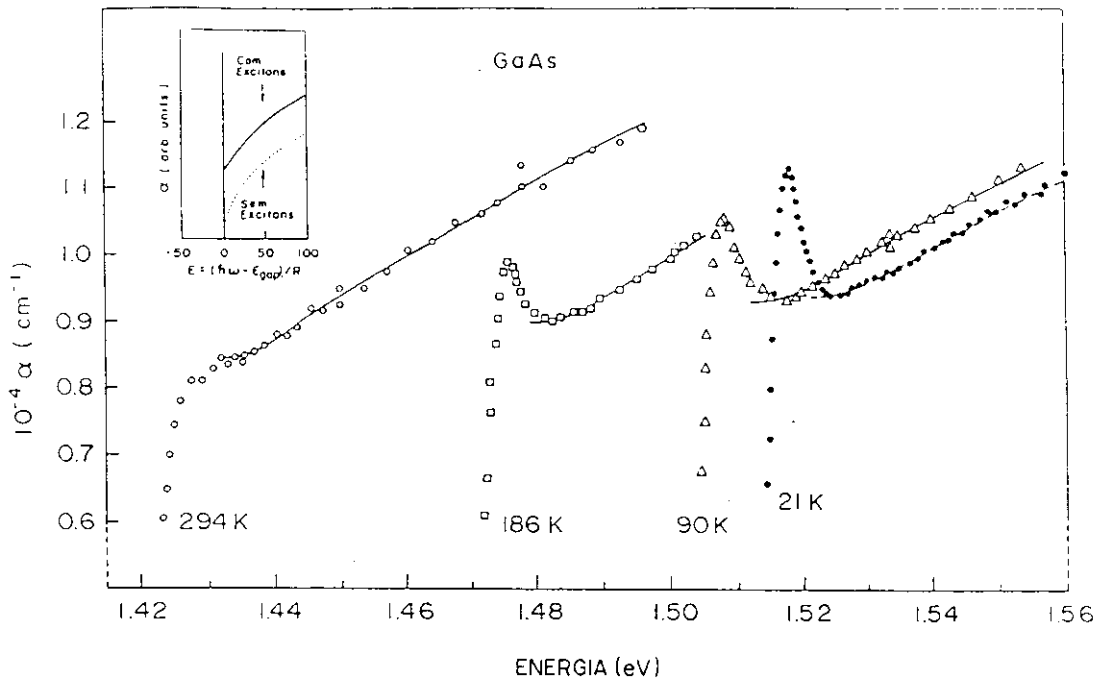


Figura I.8: Limiar de absorção do GaAs para diferentes temperaturas, após Sturge[Sturge 1962]. O inset mostra esquematicamente o efeito da interação elétron-buraco sobre a absorção.

os outros parâmetros ajustáveis (C e θ) na eq. (I.10). Portanto, ao tentarmos atribuir significado físico a C , θ e às vezes até a Γ , é preciso tomar cuidado para ter certeza que nossa escolha de n realmente descreva as condições físicas da experiência.

A discussão acima pode ser resumida ao dizer que, se estamos no regime de baixos campos, a eq. (I.10) é útil em todas as situações práticas que envolvem semicondutores “bulk” (sendo efeitos excitônicos importantes ou não). O uso dessa forma de linha para ajustar espectros experimentais fornece bons valores para as energias das transições e, na maioria dos casos, para as larguras de linha (Γ). Quando se toma o devido cuidado na escolha do n para a situação física em questão, informação sobre o tipo de singularidade pode ser obtido através do fator de fase (θ). A amplitude C é usada em geral para testar regras de seleção, comparando estruturas provenientes de diferentes transições no mesmo espectro ou acompanhando a dependência deste parâmetro para uma dada linha como função de alguma perturbação externa (pressão, campo elétrico aplicado, etc.)[Pollak 1968].

I.3.3 Aplicações a Microestruturas Semicondutoras

Ao se aplicar em microestruturas semicondutoras os resultados descritos acima, é necessário certificar-se que as suposições que levaram a formas de linha tais como as eqs. (I.8) a (I.10) continuem válidas. Em algumas dessas microestruturas os portadores estão confinados na direção do campo modulador. Este é o caso de poços quânticos simples (SQW) e múltiplos (MQW), separados por barreiras grandes, com o campo modulador na direção de crescimento. Nestes casos, os portadores não podem ser acelerados pelo campo elétrico e o termo intrabanda, que leva às formas de linha de derivada terceira (TDLS), não contribui para $\Delta\varepsilon$. Embora haja comunicações no sentido que formas de linha experimentais em MQW's são bem descritas por TDLS de pontos críticos 2D [Meynadier 1987, Shen 1986, Parayanthal 1986, Kangarlu 1986], isto não carrega significado físico. É verdade que a densidade conjunta de estados de um elétron é uma função degrau (M_0 2D), mas desde que o campo aplicado na direção de confinamento não acelera os portadores (termo intrabanda), não se produz nenhum termo de derivada terceira em $\Delta\varepsilon$. A isso se acrescenta que nestas estruturas as interações excitônicas são de grande importância mesmo à temperatura ambiente [Miller 1980, Miller 1982, Chemla 1983, Dawson 1983, Miller 1985]. Assim, ER de baixo campo nestes sistemas confinados deve produzir formas de linha de derivada primeira (FDLS), com $\Delta\varepsilon$ dado pela eq. (I.2). Antes de usar essa equação, entretanto, precisa-se em primeiro lugar determinar a forma apropriada de ε . O assunto foi recentemente discutido por Glembocki e Shanabrook [Shanabrook 1987, Glembocki 1989], que estudaram os espectros ER e PR (fotoreflexão) de alguns MQW's de AlGaAs/GaAs em temperaturas indo de 6 K até temperatura ambiente. Os espectros PR de mais baixa temperatura foram comparados aos dados de fotoluminescência de excitação (PLE). Tal comparação mostra que as linhas de PR provêm de uma transição excitônica modulada por campo elétrico e que suas energia e largura de linha são bem descritas, em baixas temperaturas, por FDLS de uma contribuição excitônica Lorentziana (hidrogênica) para ε , i.e., eq. (I.10) com $n = 2$. Para temperaturas $T \geq 150$ K, contudo, FDLS de uma função dielétrica com perfil Gaussiano ajusta melhor os dados [Glembocki 1989]. A natureza Gaussiana das linhas de absorção excitônicas pode provir de uma variedade de condições, incluindo forte acoplamento éxciton-fônon (como em altas temperaturas), perturbações inhomogêneas e interfaces rugosas [Ribeiro 1990]. Deve-se notar que essas linhas também são bem reproduzidas por TDLS de um ponto crítico 2D [eq. (I.10) com $n = 3$]. Esse ajuste resulta no

mesmo valor das energias de transições obtidos com FDLS de ε Gaussiana, embora discorde do anterior para os valores de Γ . Os autores das referências [Shanabrook 1987] e [Glembocki 1989] acreditam que isso é fortuito. Entretanto, a evidência que é dada em favor do perfil Gaussiano é quase totalmente empírica. Aspnes* sugere que o único pré-requisito para obter TDLS deve ser que a aceleração do portador (elétron ou buraco) pelo campo tenha significado físico. Em um poço quântico, movimento na direção do campo (z) corresponde a transições entre subbandas. Quando altas temperaturas ou interfaces rugosas fazem com que a separação intersubbanda seja da mesma ordem que as larguras de linha o campo, embora fraco, pode facilmente misturar funções de onda de diferentes subbandas o que, em termos semiclássicos, tem o efeito de uma aceleração ao longo da direção do campo. Esta situação é bem mais comum do que se pode imaginar pois, se em vez de pensarmos em elétrons, focalizarmos nossa atenção nos buracos pesados, que possuem massas efetivas maiores e que estão sujeitos a potenciais de confinamento mais rasos na maioria das microestruturas[Bastard 1989]. Sob esta óptica, a possibilidade de utilizar TDLS de singularidades 2D (uma vez que os elétrons ainda estão confinados na direção z) ganha significado físico. Outra situação na qual TDLS deveria ser apropriada é quando há “overlap” suficiente entre as funções de onda de portadores confinados em diferentes QW’s, de forma que é possível um tunelamento entre poços induzido pelo campo. O grau de “overlap” é determinado pela espessura das barreiras, pela profundidade dos poços e pela ordem do nível confinado; estados confinados de números quânticos altos localizam-se mais próximos à borda do poço quântico, produzindo “overlap” e larguras de linha maiores. Um caso extremo seria o de uma verdadeira superrede, quando os níveis confinados evoluem para minibandas contínuas de dispersão $\Delta \sim 10\text{--}50 \text{ meV} \gg \Gamma$. Neste caso os estados são realmente 3D, mas possuem uma massa consideravelmente maior ao longo da direção z , o que leva a TDLS de pontos críticos aproximadamente 2D, mesmo na presença de efeitos excitônicos.

Outro ponto em discussão é se, em tais sistemas, pode-se atingir uma compreensão total do espectro como derivadas de funções dielétricas localmente válidas, baseadas em expansões em termos de singularidades de van Hove localizadas, especialmente quando correlações elétron-buraco são levadas em conta. Essa descrição deve falhar quando tais singularidades possuem espaçamento em energia menor que (ou da ordem de) algumas outras energias significantes do problema, tais como a dispersão das minibandas (Δ), a energia de ligação do éxciton (E_{exc}), o alargamento dos estados de um elétron devido a seu tempo de vida médio (Γ) ou a energia típica que um portador

*Veja comentário de rodapé na p. 426 da ref. [Aspnes 1973a].

ganharia do campo elétrico por aceleração ($\hbar\Omega$). Cálculos recentes para SQW's mostram que até mesmo quando o tunelamento para poços vizinhos não é mais possível, a mistura intersubbandas e a dispersão no plano xy (\perp ao campo e à direção de propagação) produz estruturas no espectro ER que não podem ser previstas por uma análise de ponto crítico [Marques 1992].

A discussão acima mostra que a questão da forma de linha apropriada para ser usada em ajustes dos dados experimentais de refletividade ou absorção moduladas por campo elétrico é complexa e não está completamente respondida. Como uma espécie de “regra da mão direita”, TDLS de singularidades 2D [eq. (I.10) com $n = 3$] parece fornecer os melhores ajustes nas situações encontradas com mais freqüência. O mesmo pode ser dito de FDLS de perfis Gaussianos. Ambos ajustes resultam em valores confiáveis das energias de transição, mas para atribuir significado aos outros parâmetros do ajuste, se faz necessária uma boa compreensão da situação física do sistema.

I.4 Aplicação das Técnicas Experimentais: Gap das Ligas

No capítulo seguinte descreveremos aplicações das técnicas de refletividade e transmissão moduladas ao estudo de superredes, obtidas alternando-se camadas finas de GaAs e da liga $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Para entender os estados eletrônicos destas superredes é necessário, em primeiro lugar, dispor de valores confiáveis para os gaps de cada componente da estrutura em “bulk”. Assim, a primeira aplicação da técnica foi no estudo de um substrato de GaAs e de ligas grossas de InGaAs (depositadas sobre GaAs).

A tabela I.1 traz as especificações das amostras que estudaremos no presente trabalho. O conjunto é constituído por superredes, poços quânticos múltiplos e simples de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com x (fração molar de In) indo de 0,12 a 0,22. Além destas microestruturas, dispomos de duas amostras (TLA e TLB) que consistem em uma camada grossa de liga crescida sobre um substrato de GaAs. Para complementar estas duas referências, tomamos um pedaço da SLA 100 e extraímos toda a superrede até ficarmos apenas com o substrato[†].

Estas três últimas amostras são semicondutores “bulk”. A Fig. I.9 mostra os espectros de PR a 300 K destas amostras. Logo de início, notamos que além do conhecido E_0 do GaAs (subs.) em 1,426 eV temos um pico adicional em 1,380 eV. Esta última estrutura já foi identificada como

[†]Isto foi feito através de polimento mecânico, seguido de um ligeiro ataque químico para obter uma superfície adequada opticamente.

Tabela I.1: Especificações das amostras estudadas no presente trabalho. A nomenclatura carrega todas as informações necessárias para identificá-las: as duas primeiras letras indicam a estrutura (SL = superrede, QW = poço quântico simples, TL = camada espessa e PN = p-i-n), a terceira fornece a fração molar de In ($A = 0,12$, $B = 0,16$ e $C = 0,22$) e o número que segue é o período da estrutura (ou largura do poço na QWC).

Amostra	x	Estrutura
QWC 80	0,22	80 Å, poço simples
SLA 300	0,12	(100/200) x 20 ^(a)
SLA 200	0,12	(100/100) x 20 ^(a)
SLA 100	0,12	(50/50) x 20 ^(a)
SLB 100	0,16	(50/50) x 20 ^(a)
TLA	0,12	camada de liga ^(b)
TLB	0,16	camada de liga ^(b)
PNA 100	0,12	(50/50) x 15 p-i-n

^(a) $(d_A/d_B) \times n$, onde d_A (d_B) é a espessura da camada A (B) e n é o número de repetições da célula (d_A/d_B) .

^(b) Crescida sobre GaAs.

Tabela I.2: Valores do gap fundamental do GaAs ($x = 0$) e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ “bulk” não-tensionado. Para $x = 0,22$, os valor foi calculado através do seguinte ajuste quadrático (77 K): $E_0(x) = -0,0625x^2 - 1,509x + 1,507$.

x	$E_0(x)$ (eV)		Fonte
	77 K	300 K	
0,00	1,507	1,426	experiência (PR)
0,12	1,325	1,246	experiência (PR)
0,16	1,264	1,189	experiência (PR)
0,22	1,172	1,092	calculados

uma impureza associada ao GaAs com energia de ligação variando entre 36 e 42 meV, conforme a concentração de doadores[Brierley 1990]. Substratos de outras amostras também apresentaram esta estrutura em seus espectros, com intensidades variáveis[†]. As ligas, por sua vez, exibem apenas a transição E_0 (Fig. I.9). Estes três espectros foram ajustados com uma forma de linha TDLS (adequada segundo discussão acima) e os valores obtidos para 300 K estão listados na tabela I.2. Os dados de 77 K são qualitativamente semelhantes e, após seguir o mesmo procedimento, forneceram os valores listados na tabela I.2. Com estes dois conjuntos de dados, fizemos regressões quadráticas para poder acessar E_0 para $x = 0,22$, de cuja liga não dispomos de amostra. As regressões e os valores calculados para $x = 0,22$ completam a tabela I.2. Os valores da tabela I.2 estão em boa concordância com medidas de outros pesquisadores relizadas em amostras de InGaAs ‘bulk’ crescidas por outras técnicas diversas[Goetz 1983, Roth unp.]. Utilizamos os nossos dados em vez dos já existentes na literatura porque nossas ligas foram crescidas epitaxialmente e nas mesmas condições das superredes que compõem o presente conjunto de amostras (vide tabela I.1). Assim, qualquer variação observada na fração molar de In das ligas em torno de seu valor nominal estará presente nas outras microestruturas.

A extensão deste procedimento para as microestruturas envolve basicamente os mesmos

[†]Assim sendo, esta é uma transição que também aparece na maioria dos espectros das microestruturas estudadas nos capítulos II e IV e, por ser irrelevante na discussão que seguirá, não será levada em consideração.

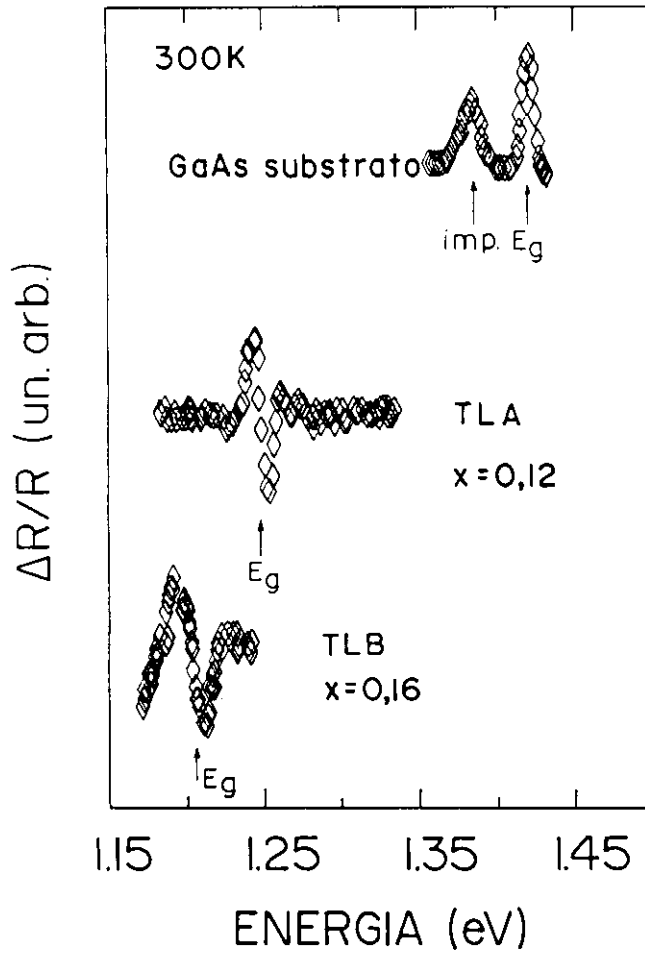


Figura I.9: Espectros de fotorefletância de GaAs (substrato) e de duas ligas de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ com $x = 0,12$ e $x = 0,16$ (TLA e TLB, respectivamente) tomados a 300 K. O substrato exibe um pico de impureza, situado 40 meV abaixo do gap do GaAs, presente também na maioria de nossas superredes.

passos: obtenção dos dados experimentais e utilização da forma de linha adequada para ajustá-los (segundo a última subseção). A inclusão de correções aos E_0 devidas à tensão e ao confinamento será feita nos próximos capítulos e permitirá caracterizar completamente a estrutura eletrônica das amostras da tabela I.1.

I.5 Conclusões

Neste capítulo introduzimos as técnicas de espectroscopia de modulação que serão utilizadas mais adiante e mostramos a ligação entre a quantidade medida ($\Delta R/R$) e a função resposta do sistema (ε). Analisamos detalhadamente o tipo de forma de linha que corresponde às diversas condições de modulação em semicondutores “bulk”, a contribuição de cada mecanismo definindo derivadas primeira ou terceira e também a relevância da informação obtida através de cada parâmetro do ajuste. Discutimos também a aplicação destas formas de linha para o caso de microestruturas, detalhando sua validade em virtude das características desse novo sistema e ponderamos sobre a alternativa de utilizar ε com perfil Gaussiano para casos onde perturbações externas (tais como alta temperatura, interfaces rugosas, etc.) exerçam influência marcante. Como demonstração do procedimento correto de análise de dados experimentais, determinamos os E_0 de algumas ligas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ para x indo de 0 a 0,22.

Capítulo II

Heteroestruturas de InGaAs/GaAs: “Band-offset” e Dispersão de Minibandas

II.1 Introdução

Nas condições de baixo campo [eqs. (I.3) and (I.4)], estruturas nos espectros foto-modulados de poços quânticos (simples ou múltiplos) e superredes são originadas por transições entre minibandas de elétron e buraco. Essas minibandas podem geralmente ser calculadas (em materiais de gap direto) usando-se variações de um modelo simples tipo Kronig-Penney [Bastard 1989] baseado no fato que os diferentes gaps dos materiais constituintes, para um portador livre na aproximação de massa efetiva, geram uma estrutura de potencial de poços quadrados periódicos. Para descrever esse potencial, o alinhamento das bandas dos dois lados da heterojunção precisam ser conhecidos. Assim, um dos mais importantes resultados deste tipo de espectroscopia é determinar o descasamento dessas bandas em diferentes heterojunções. Outra questão importante é determinar o grau de alargamento dos estados produzidos por esse potencial periódico em função do acoplamento entre poços vizinhos (dispersão de minibandas). A seguir discutiremos em detalhes essas duas questões para o sistema InGaAs/GaAs.

Ao crescermos camadas de um semiconductor A sobre um semiconductor B, não sabemos *a priori* como suas estruturas de banda (ou seus gaps) deveriam se alinhar na interface. Podemos

definir um parâmetro de descasamento de bandas como:

$$Q = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v^h}, \quad (\text{II.1})$$

onde ΔE_g é a diferença entre os gaps dos materiais A e B e ΔE_c (ΔE_v^h) é a fração desta descontinuidade que se encontra na banda de condução (valência, buraco pesado). A fig. II.1 exemplifica o alinhamento citado acima. O conhecimento do valor de Q é de particular importância neste sistema (InGaAs/GaAs), pois a tensão biaxial separa as bandas de buracos leves e pesados (que seriam degeneradas na ausência de deformações, vide apêndice A), produzindo diferentes perfis de potencial para cada tipo de portador. Assim, para uma certa faixa de valores de Q , é possível confinar buracos leves nas camadas de GaAs e buracos pesados nas de InGaAs (gap menor). Isto leva a uma situação interessante, onde temos uma superrede tipo I para buracos pesados e tipo II para leves. Além disso, todas as propriedades eletrônicas da correspondente estrutura dependem crucialmente do valor de Q , uma vez que ele também determina a profundidade dos poços de elétrons e buracos. Muitas experiências têm sido realizadas na intenção de determinar Q para vários sistemas diferentes, tais como AlGaAs/GaAs (onde se parece ter chegado a um consenso em torno do valor $Q = 0,65$) [Fu 1989, Pollak 1989] e, recentemente, em InGaAs/GaAs. Para este último, diversos autores chegaram a resultados bem diferentes. Experiências de espalhamento sugerem $Q \simeq 0,40$ [Menendez 1987] (tipo I para ambos tipos de buracos) enquanto outras técnicas ópticas [Marzin 1985, Ji 1987, Iikawa 1988a, Pan 1989, Reddy 1989, Arent 1989, Shen 1990] sugerem Q entre 0,60 e 0,80 (tipo II para buracos leves). Para tentar um consenso, Joyce *et al.* [Joyce 1988] propuseram uma dependência de Q com x . Outros resultados recentes (experimentos de fotocorrente [Yu 1989] e fotorefletância [Ksendzov 1990]) parecem reforçar esta interpretação. Mas ainda assim o problema da determinação de Q para uma interface InGaAs/GaAs estava longe de ser resolvido. Na intenção de tentar esclarecer melhor este ponto, estudamos um poço quântico e uma série de superredes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (para características das amostras vide tabela I.1) utilizando técnicas ópticas moduladas, tais como fotorefletância (PR) e fototransmissão (PT), já discutidas no capítulo anterior.

Outro ponto abordado neste estudo foi a magnitude da dispersão das minibandas em superredes de InGaAs/GaAs e a possibilidade de resolver estruturas espectrais originadas por diferentes pontos singulares na minizona de Brillouin. O acoplamento entre os poços quânticos numa superrede transforma os níveis discretos em minibandas contínuas. Para uma dispersão

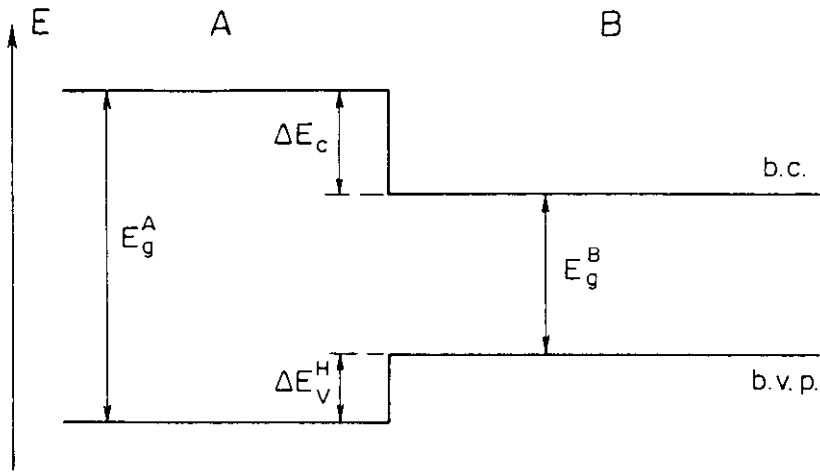


Figura II.1: Numa heterojunção A-B, a diferença de gaps ($E_g^A - E_g^B$) é dividida entre as bandas de condução (ΔE_c) e de valência (ΔE_v^H). Para heteroestruturas mais complicadas, como por exemplo poços quânticos e superredes, o valor exato de Q determina o potencial de confinamento (em cada banda) para os portadores e disso dependem todas as propriedades eletrônicas desses novos materiais.

suficientemente grande, esperaríamos que a absorção de luz devida a transições entre as minibandas de elétron e buraco exibisse estruturas pronunciadas somente na vizinhança de singularidades de van Hove na densidade conjunta de estados. Numa superrede de período D , composta de materiais de gap direto, o limiar de absorção é dado por transições entre minibandas que possuem singularidades nos pontos $k_z = 0$ (ponto Γ) ou $k_z = \pi/D$ (ponto π), com $k_x = k_y = 0$. Nestes pontos a densidade conjunta de estados tem mínimos (máximos) em função de k_z , resultando em singularidades tipo M_0 (M_1)*[Chu 1987]. A interação Coulombiana entre elétron e buraco (éxciton) provoca efeitos diferentes em cada tipo de singularidade. Como discutido anteriormente (capítulo I), um éxciton M_0 aumenta a força de oscilador (“oscillator strength”), produzindo um pico pronunciado (tipo hidrogênico) abaixo do limiar de absorção. Para uma singularidade M_1 , a interação Coulombiana também redistribui a força de oscilador mas não origina um pico hidrogênico como no caso M_0 . Assim sendo, espera-se que estruturas no espectro de modulação devidas a singularidades M_1 sejam bem menos intensas que suas análogas para M_0 [Chu 1987]. Assim, se a separação em energia entre essas singularidades (Δ) for da ordem da energia de ligação do éxciton (hidrogênico) M_0 (E_{exc}), a redistribuição de força de oscilador então produzida

*Na verdade, isto é válido para todos os níveis ou minibandas com N ímpar. Se n é par a dispersão é inversa, ou seja, temos máximos na densidade conjunta de estados no ponto Γ (M_1) e mínimos no ponto π (M_0).

destruiria a contribuição da singularidade M_1 para o espectro de absorção (i.e., a função de onda da minibanda como um todo deveria entrar na formação de um simples éxciton hidrogênico). Mesmo se a interação Coulombiana não fosse importante, essas duas singularidades não poderiam ser resolvidas se Δ fosse menor ou da ordem do alargamento das estruturas produzido pela vida média dos estados de um elétron (Γ). Assim, a observabilidade de duas linhas espectrais distintas no espectro de absorção modulada (provenientes dos pontos Γ e π da minizona) depende que Δ seja maior que Γ e $|E_{exc}|$. Valores típicos dessas quantidades são $\Gamma \sim 1-7$ meV e $|E_{exc}| \sim 10$ meV. A seguir mostraremos que espectros de PR e PT de algumas amostras contêm evidências destas estruturas espectrais distintas, fruto da dispersão de minibandas.

Concentraremos toda a discussão sobre os espectros de PT a 77 K, com exceção da amostra QWC 80, onde a região ativa é de apenas 80 Å e para a qual um bom sinal só foi obtido à temperatura ambiente. Em todos os outros casos, os espectros de PR são usados para corroborar os resultados de PT, e também para encontrar valores para as transições ópticas E_0 em GaAs “bulk” (substrato) e em ligas (TL’s), como discutido no capítulo I.

II.2 Determinação Experimental de Q

Transições originadas na região dos poços quânticos têm energias dadas por:

$$E_{ij} = E_0 + E_{exc} + \delta E_0(\varepsilon) + \lambda_j^e(k_z) + \lambda_i^h(k_z), \quad (\text{II.2})$$

onde E_0 é o gap direto da liga $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ “bulk” em ausência de tensões (vide tabela I.2, conforme o x da amostra), $\delta E_0(\varepsilon)$ é a variação deste gap introduzida pela tensão (vide tabela A.1) e $\lambda_j^e(k_z)$ ($\lambda_i^h(k_z)$) é a minibanda do elétron (buraco) medida a partir do fundo (topo) da banda de condução (valência) do material “bulk”. A obtenção destes valores de $\delta E_0(\varepsilon)$ para as diversas amostras está explicada em detalhes no apêndice A. Os λ 's são calculados através do modelo de Bastard (apêndice B) em função de Q e estão listados na tabela B.3. Assumiu-se, em todos os casos, uma energia de ligação excitônica $E_{exc} = -4$ meV. Espera-se que estruturas pronunciadas ocorram somente no centro ($k_z = 0$) ou na borda ($k_z = \pi/d$) da minizona de Brillouin, onde a densidade de estados apresenta singularidades de van Hove.

A amostra QWC 80 é a mais simples do conjunto. Consiste de um poço quântico

único[†] com 80 Å de espessura e $x = 0,22$. Temos na fig. II.2(a) os espectros de PT e PR (losangos abertos). Observamos três estruturas, denominadas A, B e C, além do pico da impureza discutido no capítulo anterior[‡]. Os valores de energia destas transições são obtidos através de ajustes teóricos (método de mínimos quadrados) utilizando formas de linha FDLS (discutidas no capítulo I), e estão indicados por setas no corpo da Fig. II.1(a). A identificação destas estruturas se obtêm através da comparação das energias experimentais acima com cálculos teóricos para as transições entre os níveis de energia da microestrutura. Porém estes cálculos dependem do descasamento de bandas, parâmetro ainda não determinado. O inset da Fig. II.1(a) permite solucionar este problema. Nele vemos as linhas horizontais (energias experimentais) interseparem as curvas sólidas que representam as transições calculadas através do modelo de Bastard em função de Q (apêndice B). Ao mesmo tempo que determinam individualmente as designações das estruturas A, B e C [H(11), L(11) e H(22)][§], respectivamente, vide Fig.II.1(a)], o conjunto de intersecções determina consistentemente um único valor de Q para a estrutura. Em nosso caso, encontramos valores para o descasamento de Q de 0,65, 0,69 e 0,61 (linhas A, B e C, respectivamente). Isto leva à escolha de $Q = (0,65 \pm 0,04)$ como um compromisso adequado.

Na seqüência estudamos a amostra SLA 300, superrede contituída por poços de 200 Å e barreiras de 100 Å. Devido à sua largura, o poço da banda de condução apresenta dois níveis confinados[¶] com pouca dispersão (as barreiras largas evitam um acoplamento mais efetivo entre os poços). A Fig. II.2(b) mostra dados de PT (losangos abertos) para 77 K e 300 K. Em ambos os casos os espectros foram bem ajustados (curvas sólidas) com duas linhas, A e B, cujas energias obtidas para os dados de 77 K estão indicadas por setas no corpo da figura. Os passos seguintes na identificação das transições e na determinação do descasamento são os mesmos descritos acima. O inset da Fig. II.1(b) mostra a comparação das energias experimentais com o cálculo das transições

[†]As ligas de InGaAs possuem gap menor que o GaAs. Assim sendo, daqui por diante nos referiremos às camadas de InGaAs como poços e às camadas de GaAs como barreiras.

[‡]Este pico corresponde à estrutura mais intensa que aparece em torno de 1,39 eV, mas ele não fornece informações relevantes para a determinação do descasamento de bandas.

[§]A nomenclatura H(ij) [L(ij)] significa transição do i-ésimo nível de buraco pesado (leve) para o j-ésimo nível de elétron.

[¶]A QWC 80 também apresentou dois níveis no poço de condução; embora seu poço fosse menos largo, era mais profundo devido à maior fração molar de In (quanto maior o x , maior a diferença de gaps). Já o poço de valência apresenta sempre um maior número de níveis que o de condução, pois a massa efetiva dos buracos pesados é bem maior que a dos elétrons.

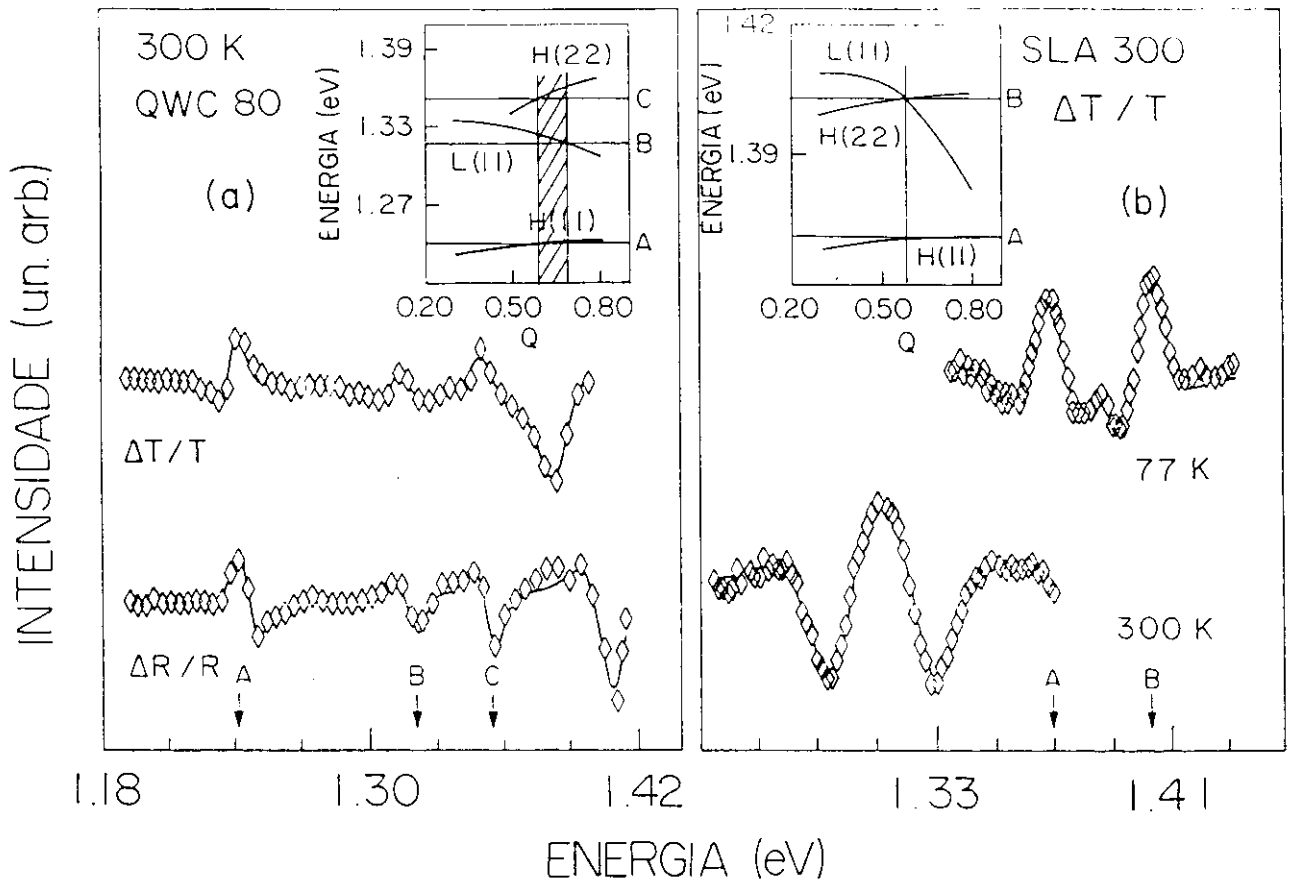


Figura II.2: Espectros das amostras (a) QWC 80 e (b) SLA 300 e respectivos ajustes (linhas sólidas). Os insets mostram a comparação entre essas energias (linhas horizontais) e o cálculo das transições ópticas em função de Q (curvas).

permitidas por paridade (apêndice B). A linha A é identificada imediatamente como H(11), praticamente insensível à escolha do parâmetro Q . Já a linha B coincide exatamente com o cruzamento das transições calculadas H(22) e L(11), sugerindo uma superposição entre elas. Esta interpretação é reforçada pela relação de intensidade entre as linhas A e B, pois a última é bem mais intensa que a primeira (apesar de A corresponder à absorção fundamental da amostra). Isto também pode ser colocado de outra forma: como B é mais intensa que A, o cruzamento das H(22) e L(11) calculadas determina de forma coerente e inequívoca o valor de Q para a SLA 300 como sendo $Q = 0,59$.

A amostra SLA 200 possui poços de 100 Å. Seus níveis de elétron estão mais próximos da borda do poço, possuindo funções de onda menos “localizadas” que as da SLA 300. Neste caso, a barreira é espessa o suficiente para permitir um certo acoplamento entre os poços da superrede, originando uma leve dispersão dos níveis eletrônicos^{ll}. O espectro de PT da amostra pode ser visto na fig. II.3(a) (losangos abertos). O ajuste teórico (curva sólida) fornece cinco estruturas, A–E [com energias indicadas por setas na fig. II.3(a)]. Imediatamente podemos atribuir as linhas A e C às transições H(11) e L(11), respectivamente. Não há necessidade de especificar o ponto de transição na minizona, pois as minibandas envolvidas não apresentam dispersão [vide Fig. II.3(b)]. Estas transições determinam $Q = 0,59$ [inset Fig. II.3(a)]. A energia de B não é determinada com muita precisão, visto que a linha aparece como um ombro no lado de altas energias de A. Associamo-la com a transição H(21), proibida por paridade, mas cuja energia calculada está de acordo com o ajuste [inset Fig. II.3(a)]. As duas linhas restantes rendem uma discussão interessante. Elas são fortes e bem definidas, porém não podem ser atribuídas a nenhuma transição (mesmo que proibida) no centro da minizona. Baseados no cálculo das minibandas para a SLA 200 [Fig. II.3(b), onde as linhas tracejadas representam os limites do poço], vemos que há um nível de elétron (o segundo) que apresenta grande dispersão, tendo um mínimo na fronteira da minizona e aumentando sua energia conforme diminuimos k_z , atingindo o continuum antes de chegar ao ponto Γ . Uma vez que os dois primeiros níveis de buraco não apresentam dispersão, transições destas bandas para o segundo nível de elétron [H(12) π e H(22) π] são possíveis por resultarem de singularidades M_0 na densidade conjunta de estados. Tais estruturas devem ser pronunciadas, como vimos anteriormente. Além disso, no centro da zona o segundo nível de

^{ll}A dispersão para buracos pesados é quase desprezível devido à diferença de massas efetivas citadas anteriormente. Já os buracos leves apresentam uma dispersão mais pronunciada.

elétron não está confinado [Fig. II.3(b)], e mesmo que estivesse, a singularidade resultante seria do tipo M_1 . Portanto, é coerente, do ponto de vista energético, identificar as linhas D e E como $H(12)\pi$ e $H(22)\pi$, respectivamente. O único ponto fraco desta argüição é que $H(22)\pi$ deveria ser mais intensa que $H(12)\pi$, por razões de paridade, e observamos o contrário. Mas, mesmo assim, a consistência geral de nossas atribuições é tão grande [todas as identificações fornecem $Q = 0,59$, vide inset Fig. II.3(a)] que estamos seguros em afirmar que estamos vendo uma clara evidência de dispersão de minibandas, na forma de transições na fronteira da minizona.

A SLB 100 apresenta poços e barreiras de 50 Å cada. A espessura do poço garante apenas um nível de elétron enquanto que a barreira fina permite um forte acoplamento entre os poços da superrede (o que é traduzido por uma maior dispersão dos níveis da estrutura). A fig. II.4(a) mostra o espectro de PT da amostra e seu respectivo ajuste teórico (curva sólida). Três estruturas, A, B e C, são necessárias para um bom “fitting”. Duas destas linhas (A e C) são intensas e bem caracterizadas. O inset mostra as transições permitidas por paridade em função de Q (curvas) e as energias do ajuste (linhas horizontais). A intersecção destes dois conjuntos determinam $Q = 0,60$. Assim, a linha A é identificada como a transição de mais baixa energia da superrede, $H(11)$, enquanto que C corresponde à equivalente de A para buracos leves, $L(11)^{**}$. A linha B é responsável pelo ombro existente entre as duas anteriores. Esta transição é realmente necessária, embora seja pouco intensa. Isto pode ser visto na Fig. II.4(a) onde o ajuste em linha tracejada exclui a estrutura B e não produz um “fitting” adequado. Assim como as linhas D e E da amostra anterior, ela também aparece numa região onde não existem transições (proibidas inclusive) ocorrendo no centro da minizona. Sua posição, entretanto, é próxima a uma singularidade M_1 na fronteira da minizona (ponto π , $k_z = \pi/d$). Tais transições são previstas teoricamente e há comunicações de sua aparição em espectros de fotoluminescência e fotorefletância de superredes de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ [Chu 1987, Shen 1987], assim como em fotocondutividade de amostra semelhante à nossa [Soucail 1990a, Soucail 1990b]. Shen *et al.* reportaram tal estrutura como um ombro na intensa transição associada ao nível fundamental no centro da minizona, num trabalho sobre superrede de $Al_{0,25}Ga_{0,75}As/GaAs$ com período 100 Å (estruturalmente semelhante à nossa). Neste mesmo artigo, o critério utilizado para diferenciar transições no ponto Γ das no

^{**}Apenas como informação adicional, a energia de C também coincide com uma suposta transição $H(21)$ que, além de proibida por paridade, é resultante de uma singularidade M_1 [por causa da dispersão do nível dois de buraco, claramente visível na Fig. II.4(b)].

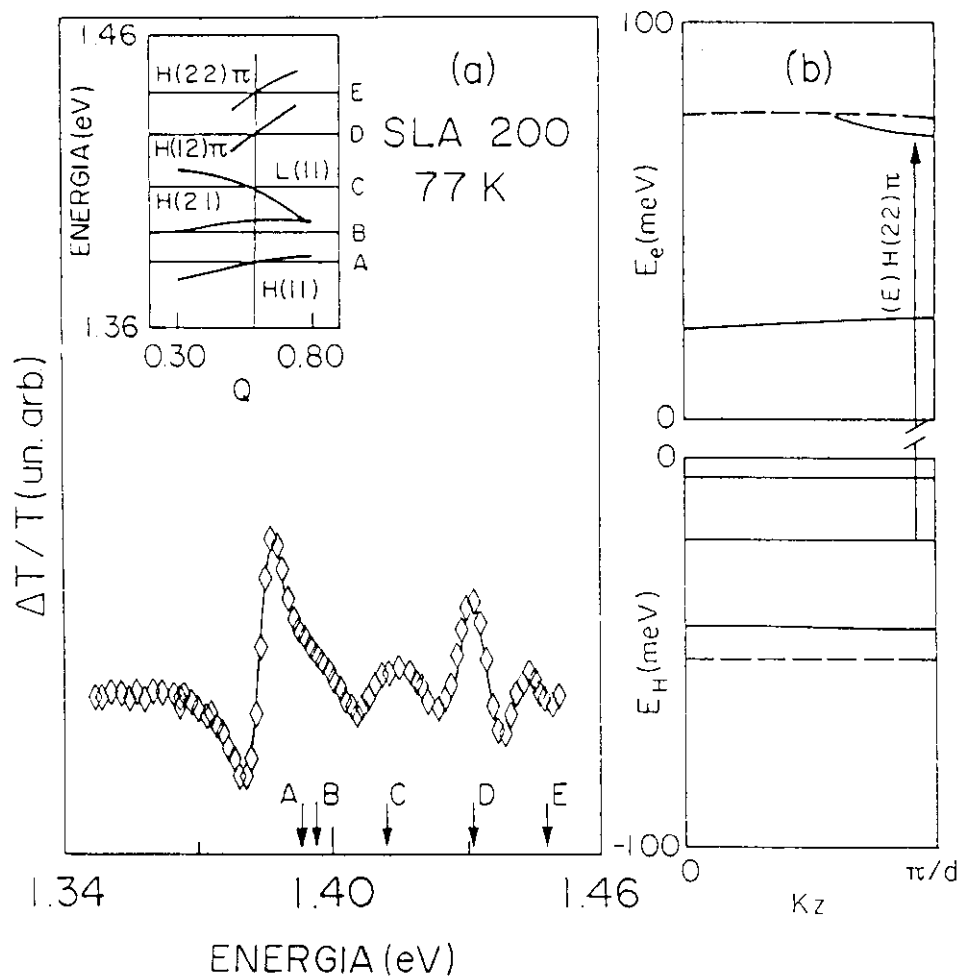


Figura II.3: (a) Espectro da amostra SLA 200 e respectivo ajuste (linha s3lida). As setas indicam a posi33o de cada linha utilizada no ajuste. No inset temos a compara33o destes valores (linhas horizontais) com as predi33oes do modelo te33rico para as transi33oes 33pticas em fun33o de Q (curvas); (b) minibandas de el33tron e buraco pesado para $Q = 0,59$. As linhas tracejadas indicam a altura dos po33os de condu33o e val33ncia.

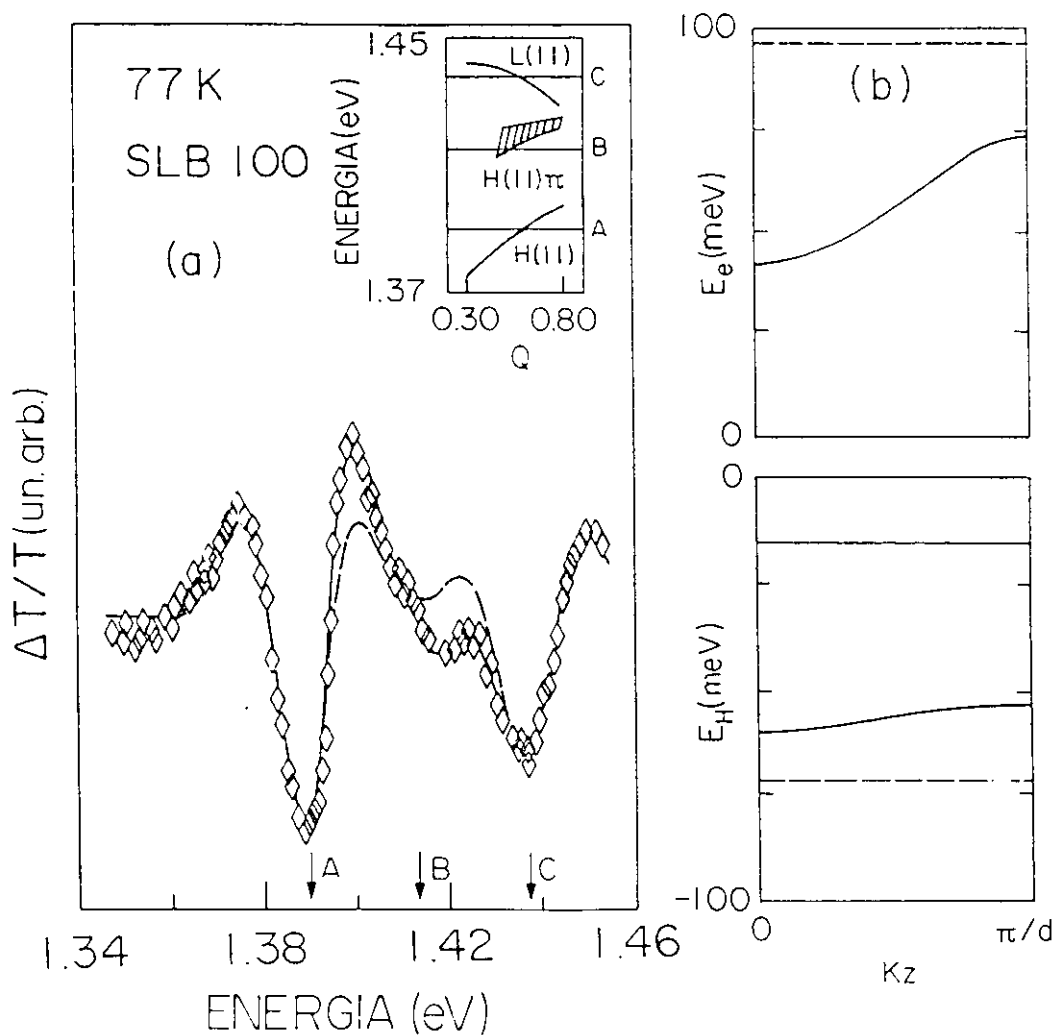


Figura II.4: (a) Espectro da amostra SLB 100 e respectivos ajustes com duas (linha tracejada) e três (linha sólida) estruturas. As energias provindas destes ajustes estão indicadas por setas. No inset temos a comparação destes valores (linhas horizontais) com as predições do modelo teórico para as transições ópticas em função de Q (curvas). O hachurado mostra uma flutuação de 5% em D ; (b) minibandas de elétron e buraco pesado para $Q = 0,60$. As linhas tracejadas indicam a altura dos poços de condução e valência.

ponto π é que a modulação produzida por um campo elétrico nestes dois pontos devem ter fase oposta. Nossos ajustes fornecem uma fase para B que é oposta àquela das linhas A e C. Além disso, as singularidades no centro (M_0) e na borda (M_1) da minizona deveriam estar separadas por uma energia de 33 meV [vide Fig. II.4(b)]. A separação entre nossas estruturas espectrais é de (25 ± 4) meV. A concordância entre esses valores é muito boa se considerarmos que a separação calculada não leva em conta efeitos excitônicos e também é muito sensível a pequenas flutuações no período da superrede, D [vide área hachurada na Fig. II.4(a)]. Com todos estes argumentos em vista, achamos que a melhor escolha para o descasamento de bandas é $Q = 0,60$ e que temos mais evidências convincentes da dispersão de minibandas neste sistema.

Como sumarizado na tabela II.1, os valores encontrados para o descasamento de bandas para o sistema InGaAs/GaAs giram em torno de $Q = 0,60$, indicando pouca ou quase nenhuma dependência com a fração molar de In. A observação consistente da transição L(11) com intensidade apreciável implica que o grau de confinamento do buraco leve nas barreiras, se existir, não pode ser muito grande (por uma questão de “overlap” de funções de onda). Isto será discutido na seção seguinte.

II.3 Confinamento dos Buracos Leves

As barreiras de potencial que confinam elétrons (V_e), buracos pesados (V_h) e buracos leves (V_l) nas camadas de InGaAs são dados por:

$$V_e = \Delta E_c = Q\Delta E_g^h \quad (\text{II.3})$$

$$V_h = \Delta E_v^h = (1 - Q)\Delta E_g^h \quad (\text{II.4})$$

$$V_l = \Delta E_v^l = \Delta E_g^l - \Delta E_c, \quad (\text{II.5})$$

onde ΔE_v^l (ΔE_g^l) é o mesmo que ΔE_v^h (ΔE_g^h) para buracos leves. Valores positivos (negativos) de V_i confinam os portadores i nos poços (barreiras). Observando as eqs. (II.3) e (II.4) vemos que elétrons e buracos pesados sempre estarão confinados às camadas de liga, constituindo uma superrede tipo I. Já os buracos leves dependem crucialmente do valor de V_l (ou seja, de Q). Em particular, sempre existe um valor Q_0 para o qual $V_l = 0$. Desta forma, se $Q < Q_0$ ($Q > Q_0$) o perfil de potencial para buracos leves é tipo I (tipo II). Pelas eqs. (II.5) e (II.3):

Tabela II.1: Energias (E_{ij}) em eV e intensidades relativas (I) providas dos ajustes teóricos das estruturas presentes nos espectros de PT a 77 K de nossas amostras (os valores para a QWC 80 referem-se à temperatura ambiente). Elas podem ser comparadas com o cálculo de função envelope (apêndice B), listados abaixo dos valores experimentais, e fornecem a identificação de cada transição observada. As últimas três colunas apresentam, para cada amostra, os valores de Q obtidos experimentalmente, os de Q_0 e os de V_i e $|E_B^i|$ (em meV), como discutido no texto.

Amostra	E_{ij} (I)					Q	Q_0	$V_i (E_B^i)$	
QWC 80	exp.	1,241 (100)		1,317 (45)	1,352 (64)	0,65	0,60	-10,0 (3,0)	
	teoria	1,241		1,320	1,357				
	origem	H(11)		L(11)	H(22)				
SLA 300	exp.	1,371 (100)		1,403 (140)		0,59	0,56	-5,0 (3,0)	
	teoria	1,370		1,403	1,403				
	origem	H(11)		L(11)	H(22)				
SLA 200	exp.	1,384 (100)	1,395 (30)	1,412 (16)	1,432 (60)	1,448 (20)	0,59	0,56	-6,0 (3,0)
	teoria	1,384	1,399	1,411	1,432	1,448			
	origem	H(11)	H(21)	L(11)	H(12) π	H(22) π			
SLB 100	exp.	1,390 (100)	1,415 (50)	1,438 (70)		0,60	0,57	-5,0 (2,5)	
	teoria	1,390	1,423	1,436					
	origem	H(11)	H(11) π	L(11)					
SLA 100	exp.	1,414 ^(a)					0,57	0,56	-4,6 (2,0)
	teoria	1,414							
	origem	H(11)							
SLA 100 recozida	exp.	1,414		1,446		0,57	0,56	-4,6 (2,0)	
	teoria	1,414		1,445					
	origem	H(11)		L(11)					

^(a) extrapolado do inset da fig. IV.1(a).

$$\begin{aligned}
V_l &= \Delta E_g^l - Q_0 \Delta E_g^h = 0 \\
Q_0 &= \frac{\Delta E_g^l}{\Delta E_g^h}.
\end{aligned} \tag{II.6}$$

Para amostras comensuradas,

$$\Delta E_g^l = E_g(\text{GaAs}) - E_g(x) - \delta E_v^l(\varepsilon) = \Delta E_g(x) - \delta E_v^l(\varepsilon) \tag{II.7}$$

$$\Delta E_g^h = E_g(\text{GaAs}) - E_g(x) - \delta E_v^h(\varepsilon) = \Delta E_g(x) - \delta E_v^h(\varepsilon), \tag{II.8}$$

onde os δE 's estão definidos no apêndice A, de tal forma que reescrevemos a eq. (II.6) como:

$$Q_0 = \frac{\Delta E_g(x) - \delta E_v^l(\varepsilon)}{\Delta E_g(x) - \delta E_v^h(\varepsilon)}. \tag{II.9}$$

Ignorando a fraca dependência quadrática em $\delta E_v^l(\varepsilon)$, a eq. (II.9) deveria ser independente de x . Podemos fazer uma estimativa deste número, usando as informações do apêndice A, tabela A.1 e os ajustes da tabela I.2:

$$\Delta E_g(x) = 1,518x \tag{II.10}$$

$$\delta E_v^h(\varepsilon) = [(2 - \Gamma)a - (1 + \Gamma)b] \varepsilon_p \tag{II.11}$$

$$\delta E_v^l(\varepsilon) = [(2 - \Gamma)a + (1 + \Gamma)b] \varepsilon_p \tag{II.12}$$

$$\varepsilon_p = \frac{a_0 - a(x)}{a_0}, \tag{II.13}$$

o que fornece um resultado de $Q_0 = 0,60$ para a QWC 80 e $Q_0 = 0,59$ para as outras. Isto indicaria que os buracos leves não estariam confinados a nenhuma camada semicondutora. Uma vez que algumas amostras relaxaram durante o processo experimental (vide apêndice A), os cálculos devem incluir o ε_p medido para cada caso. Estes resultados podem ser vistos na tabela II.1, e concordam razoavelmente com os valores de Q determinados experimentalmente. A partir destes descasamentos calculamos os V_l 's para cada amostra (vide tabela II.1). Vemos que em todos os casos as superredes apresentam leve comportamento tipo II ($V_l < 0$). Utilizando estes valores de V_l , podemos calcular as energias de ligação dos buracos leves, ou seja, a energia necessária para removê-los das camadas de GaAs:

$$|E_B^l| = |V_l| - \lambda^l, \quad (\text{II.14})$$

onde λ^l é a minibanda de buraco leve, calculada segundo o modelo de Bastard (apêndice B). Esta energia (vide tabela II.1) é sempre menor que a energia de ligação do éxciton^{††} ($|E_{exc}| > 4$ meV), de tal forma que a função de onda dos buracos leves é localizada dentro dos poços, permitindo “overlap” mais efetivo com a função de onda do elétron e produzindo uma intensa estrutura espectral que corresponde à transição L(11). De fato, Ksendzov *et al.*[Ksendzov 1990] provaram experimentalmente para este sistema (utilizando luz que se propaga paralelamente às camadas de superredes com $x = 0,11$ e $x = 0,19$) que a linha L(11) aparece sempre com uma intensidade quase comparável à da H(11). Se Q fosse suficientemente grande, tal que $|E_B^l| > |E_{exc}|$, a função de onda do buraco leve estaria confinada nas camadas de barreira, o “overlap” com as funções de elétron seria desprezível e esta estrutura não seria observada. Como não é o caso, devemos ter necessariamente $Q < 0,70$. Por outro lado, se $Q < 0,50$, transições como H(22) da amostra SLA 300 e as de ponto π nas SLA 200 e SLB 100 não poderiam existir [veja inset das Figs. II.2(b), II.3(a) e II.4(a)]. A observabilidade destas estruturas define os seguintes limites para o descasamento de bandas:

$$0,50 \leq Q \leq 0,70 \quad (\text{II.15})$$

para

$$0,11 \leq x \leq 0,22. \quad (\text{II.16})$$

Portanto, através de um processo coerente de análise dos espectros fotomodulados de amostras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, além de encontrar claras evidências de dispersão de minibandas (em forma de transições de borda de minizona), determinamos $Q \simeq 0,60$ (próximos de Q_0) para todos os casos, indicando perfis de potencial ligeiramente tipo II para buracos leves.

II.4 Conclusões

Determinamos o parâmetro de descasamento de bandas para o sistema $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ estudando um número variado de amostras de diferentes períodos e frações molares de In. Obtive-

^{††}Ou seja, a interação Coulombiana entre buraco leve e elétron é mais importante que o confinamento.

mos um único valor $Q \simeq (0,60 \pm 0,03)$, com nenhuma dependência apreciável de Q com x . Esse valor de Q corresponde a uma situação na qual os buracos leves estariam levemente confinados nas camadas de GaAs (barreiras). Porém o potencial de confinamento é menor que a energia de ligação do éxciton. Isto está ligado ao fato da transição banda de condução para banda de buraco leve [L(11)] estar sempre presente em nossos espectros e define um limite superior para o descasamento ($Q < 0,70$), uma vez que para valores maiores de Q o buraco leve estaria efetivamente confinado nas barreiras e o “overlap” entre sua função de onda e a dos elétrons seria desprezível [significando a desaparecimento de L(11) dos espectros]. Limites inferiores de Q ($Q \geq 0,50$) são estabelecidos pela presença de certas linhas espectrais, como a H(22) na Fig. II.2(b) e as transições na borda da minizona em outras amostras [Figs. II.3(a) e II.4(a)]. A consistência global dos resultados obtidos para todas as amostras define $Q \simeq 0,60$ como melhor a estimativa para este parâmetro.

Paralelamente, a evidência experimental discutida acima mostra que a dispersão de minibandas pode originar estruturas espectrais distintas, associadas com os dois pontos críticos (Γ e π) na minizona de Brillouin, que podem ser resolvidas quando Δ é grande o suficiente ($\Delta \gg |E_{exc}|$, $\Delta \gg \Gamma$).

Capítulo III

Semicondutores em Presença de um Campo Elétrico Externo

III.1 Introdução

O movimento de elétrons em sólidos (elétrons de Bloch) em campos elétricos e/ou magnéticos externos foi motivo de intensa investigação (teórica e experimental) em todos os períodos do desenvolvimento da física do estado sólido. A razão deste interesse é que muitas propriedades dos sólidos, em particular seu espectro de energia, podem ser medidas através de experimentos realizados sob campos externos. Durante anos, a natureza dos autoestados de um cristal na presença de um campo elétrico externo \mathbf{F} foi matéria de controvérsia. Seguindo-se aos trabalhos pioneiros (e quase simultâneos) de Franz[Franz 1958] e Keldysh[Keldysh 1958] (influência de \mathbf{F} na absorção óptica de um semicondutor ou isolante nas vizinhanças do limiar de absorção), iniciou-se uma polêmica[Wannier 1960, Wannier 1962, Zak 1968a, Zak 1968b, Wannier 1969, Zak 1969] na intenção de estabelecer uma formulação mais completa e elegante dos estados eletrônicos de um semicondutor em campos externos. Em meados da década de 70 já se dispunha de uma compreensão bem mais amadurecida do assunto (sintetizada por um artigo de revisão de Aspnes[Aspnes 1972c]). Basicamente são duas as abordagens mais comuns: a aproximação de massa efetiva, onde as autofunções são as funções de Airy (que são delocalizadas e correspondem a um espectro contínuo de energia), e um método mais geral, procurando as funções de onda soluções do problema [que predizem autoestados quantizados (“Stark-Wannier ladders”, SWL),

localizadas espacialmente numa extensão $\lambda = \Delta/eF$, onde Δ é a dispersão da banda e e é a carga eletrônica]. O primeiro tratamento é válido localmente nas proximidades de um ponto crítico na densidade conjunta de estados e para campos fracos o suficientes, de forma que os portadores não sejam acelerados para longe das vizinhanças da singularidade. O segundo, mais geral, não é restrito a regiões específicas dentro da zona de Brillouin, mas torna-se “suspeito” quando a queda de potencial total através de um período do cristal (eFa , onde a é o parâmetro de rede cristalino) for maior que o gap de energia do material.

Nenhuma evidência experimental de estados Stark-Wannier foi encontrada em materiais “bulk” (impossível atingir os elevados valores de F necessários), enquanto que os espectros eletro-ópticos tomados sob campos moderados confirmaram as predições da teoria de massa-efetiva (efeito Franz-Keldysh). Com o surgimento das heteroestruturas semicondutoras, em particular as superredes, foi possível alcançar os campos necessários à observação dos estados Stark-Wannier[Mendez 1988]. Na presença de campos bem mais fracos documentou-se o efeito Franz-Keldysh associado a um nível confinado de uma superrede[Cerdeira 1990]. Recentemente foi mostrado numa mesma experiência a evolução dos estados Stark-Wannier para os Franz-Keldysh, atingindo finalmente os estados eletrônicos em ausência de campo elétrico[Ribeiro 1992], o que será discutido em detalhes no Cap. IV.

III.2 Considerações Gerais

Nas seções que seguem discutiremos o modelamento teórico dos casos citados acima. Antes, porém, devemos tecer algumas considerações gerais.

Ambos os tratamentos partem da aproximação de um elétron (“one-electron approximation”[Ashcroft 1976]). Também supomos que a rede cristalina não é distorcida pelo campo e consideramos efeitos de \mathbf{F} apenas sobre os elétrons. A aplicação de um campo elétrico a um cristal quebra a simetria de seu Hamiltoniano na direção do campo ao introduzir um termo $e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$ de energia potencial, que varia linearmente com a posição. Assim o Hamiltoniano de um elétron (“one-electron Hamiltonian”) já não é mais invariante a translações na direção do campo (por conseqüência, o vetor de onda do elétron nesta direção não é mais um bom número quântico). Em outras palavras, o efeito do campo elétrico sobre o quasicontínuum de estados da banda será

“misturar” aqueles estados cujos vetores de onda forem conectados pela seguinte relação linear:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 - \frac{eFt}{\hbar}, \quad (\text{III.1})$$

com t sendo uma variável independente. Com o aumento do campo, temos um aumento nesta “mistura” intrabanda (“intraband mixing”) até que, quando o campo for alto o suficiente, elétrons tunelarão para bandas superiores (“interband mixing”). Este último processo é desprezível para pequenos campos, exceto em pontos de degenerescência*, onde o efeito não pode ser negligenciado mesmo para campos pequenos.

Uma abordagem alternativa aos efeitos de campo elétrico é considerar que o momento do elétron aumente linearmente no tempo, em resposta ao campo:

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}_0 - eFt. \quad (\text{III.2})$$

A situação física é semelhante à de uma partícula clássica acelerada uniformemente. Uma vez que (III.1) e (III.2) são idênticas, chegamos novamente à conclusão que as funções de onda do problema serão uma combinação linear de funções de Bloch cujos vetores de onda estejam conectados pela aceleração $-\frac{eF}{m}$. É esta aceleração que causa o tunelamento auxiliado por fótons (“photon-assisted tunneling”) ou efeito Franz-Keldysh, sendo também responsável pelo tunelamento Zener de elétrons entre bandas no regime de campos altos. Uma vez discutidos os fenômenos físicos envolvidos, passemos às formulações usuais do problema.

III.3 Aproximação de Massa Efetiva

Antes de explicitar o cálculo dentro desta aproximação, vamos introduzir o resultado final de uma maneira qualitativa, de modo a motivar e facilitar a compreensão posterior.

Dentro da aproximação de um-elétron, o efeito de um campo elétrico sobre um dado pacote de onda (vide Fig. III.1) é acelerá-lo por sua banda. Para campos intermediários, a aceleração produzida não é suficiente para compensar o espalhamento devido a colisões, ou seja, o tempo entre colisões é menor que o tempo que o pacote levaria para acelerar por uma porção apreciável da banda. Essa “perda de memória” do pacote acaba a restringi-lo às vizinhanças do

*Pontos de degenerescência são tratados assumindo-se “interband mixing” desprezível. Embora seja teoricamente incorreto, reproduz corretamente os resultados experimentais.

centro da zona de Brillouin[†]. Então pode-se pensar numa aproximação válida localmente (em torno dos pontos críticos). Na ausência de campos, o elétron “enxergaria” um potencial praticamente constante e teria como autofunções ondas planas delocalizadas [vide Fig. III.2(a)]. O “overlap” dessas funções para um par de bandas (condução e valência) permitiriam estruturas ópticas apenas para energias iguais ou maiores que o gap. Ao aplicarmos um campo elétrico numa dada direção, o elétron enxergaria um potencial linear em forma de rampa [vide Fig. III.2(b)]. O problema seria equivalente a um elétron num poço triangular, cuja solução [Landau 1985] são as funções de Airy, que se comportam como ilustrado na Fig. III.2(b). A cauda exponencial dentro da faixa proibida de energia permite o surgimento de estruturas ópticas abaixo do gap do semiconductor (que é o resultado principal dos artigos de Franz e Keldysh). A Fig. III.3 mostra, para (a) coeficiente de absorção normal e (b) absorção modulada, as estruturas decorrentes do “overlap” das funções de onda para cada caso [linha tracejada (contínua) para ausência (presença) de campo elétrico]. As estruturas oscilatórias da Fig. III.3(b) (curvas contínuas) são conhecidas como oscilações Franz-Keldysh (“Franz-Keldysh oscillation”, FKO) e já foram discutidas (no aspecto forma de linha) no Capítulo I.

O tratamento deste fenômeno baseia-se no formalismo de Elliot[‡] [Elliot 1957, Aspnes 1972c]. Na aproximação de um-elétron, o estado fundamental ψ_0 de um semiconductor pode ser descrito como um número de bandas de valência completamente ocupadas e separadas de bandas de condução completamente vazias por um gap de energia. No estado excitado ψ' , um elétron é excitado para a banda de condução. Ou seja:

$$\psi_0 = (N!)^{\frac{1}{2}} \mathcal{A} \phi_v(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \dots \phi_v(\mathbf{k}_N, \mathbf{r}_N) \quad (\text{III.3})$$

e

$$\psi' = (N!)^{\frac{1}{2}} \mathcal{A} \phi_v(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \dots \phi_c(\mathbf{k}'_l, \mathbf{r}_l) \dots \phi_v(\mathbf{k}_N, \mathbf{r}_N), \quad (\text{III.4})$$

onde \mathcal{A} é o operador de permutação antissimétrico. O valor total de \mathbf{k} do estado excitado é $\mathbf{K} = \mathbf{k}'_l - \mathbf{k}_l$ e sua energia total é $E(\mathbf{k}) = E_c(\mathbf{k}'_l) - E_v(\mathbf{k}_l)$. Também podemos pensar neste estado

[†]Assumindo que o material é de gap direto e que o mínimo da banda de condução esteja no ponto Γ (centro da zona)

[‡]Cabe lembrar que os tratamentos de Franz e Keldysh basearam-se em funções de Houston [Houston 1940], as primeiras funções de onda aproximadas para este tipo de problema, mas com o formalismo de Elliot dentro das aproximações de um-elétron e de massa efetiva, é possível obter soluções de forma fechada.

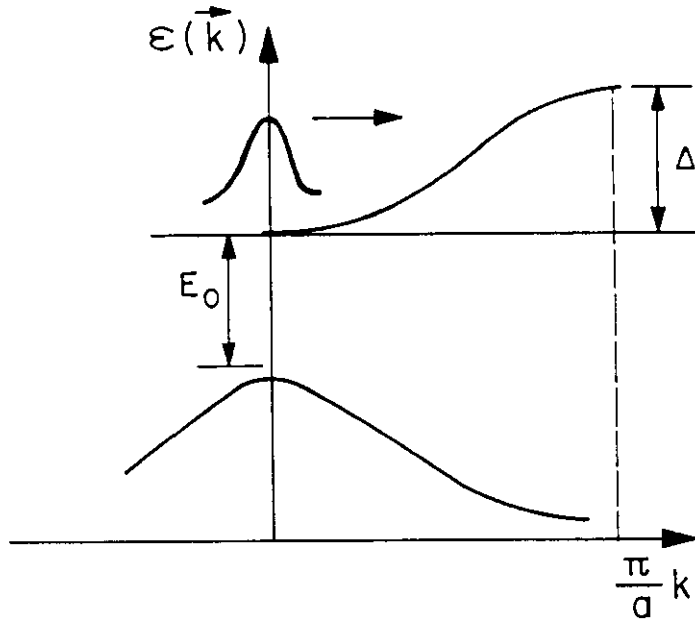


Figura III.1: Representação esquemática das bandas de condução e valência (a primeira de cada) dentro da zona de Brillouin (ZB) de um semicondutor de gap direto (E_0). Δ é a dispersão da banda de condução. A energia fornecida pelo campo elétrico externo acelera o pacote de onda em direção à borda da zona. Para campos baixos o pacote se restringe ao centro da ZB (devido às colisões), enquanto que para campos intensos tais que $eFa \sim \Delta$, o pacote percorre a banda em toda sua extensão.

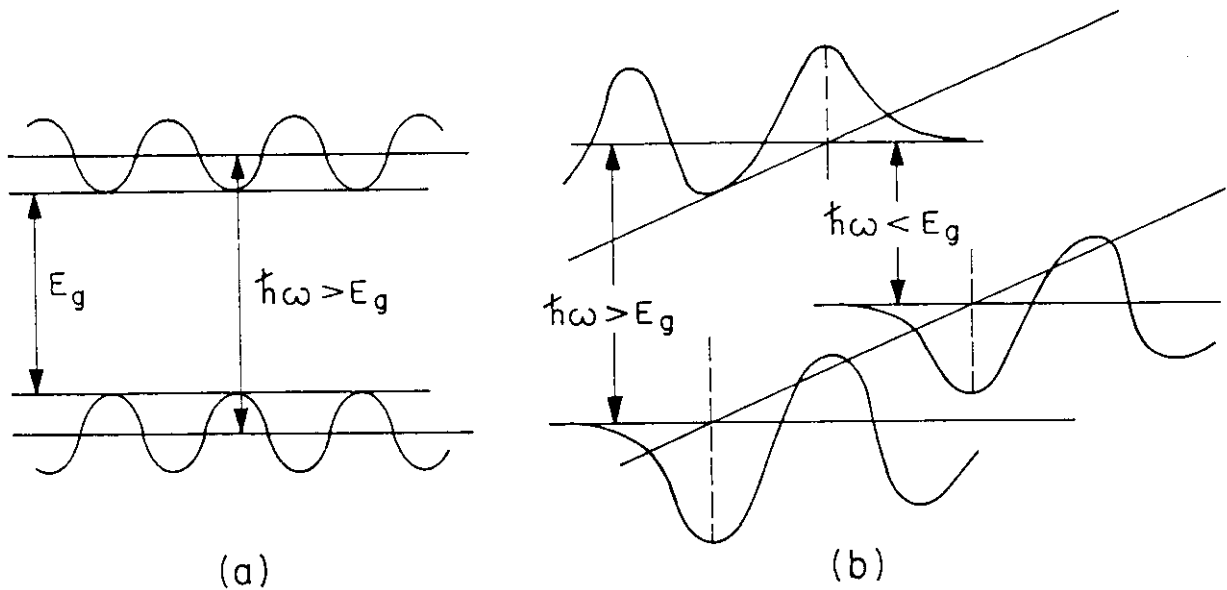


Figura III.2: Representação esquemática do perfil de potencial visto por um elétron (ou buraco) num semiconductor (a) em ausência e (b) na presença de um campo elétrico F , dentro da aproximação de massa efetiva. Em cada caso mostram-se as funções de onda nas bandas de valência e condução e as situações possíveis de “overlap” entre elas.

excitado como contendo duas partículas: um elétron na banda de condução com número de onda k'_l e um buraco com momento k_l , de forma a escrever[§]:

$$\psi(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) = \phi_v^*(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) \phi_c(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1). \quad (\text{III.5})$$

A aproximação de massa efetiva se dá tomando:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(\mathbf{r}_1) + \mathcal{H}_0(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (\text{III.6})$$

onde \mathcal{H}_0 é o Hamiltoniano de Bloch (ou de um elétron em um cristal) e $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ é um potencial perturbativo variando lentamente. A função tentativa bi-banda é dada em termos de funções de

[§]Mas deve-se lembrar que a representação verdadeira deste estado é dada pela eq. (III.4).

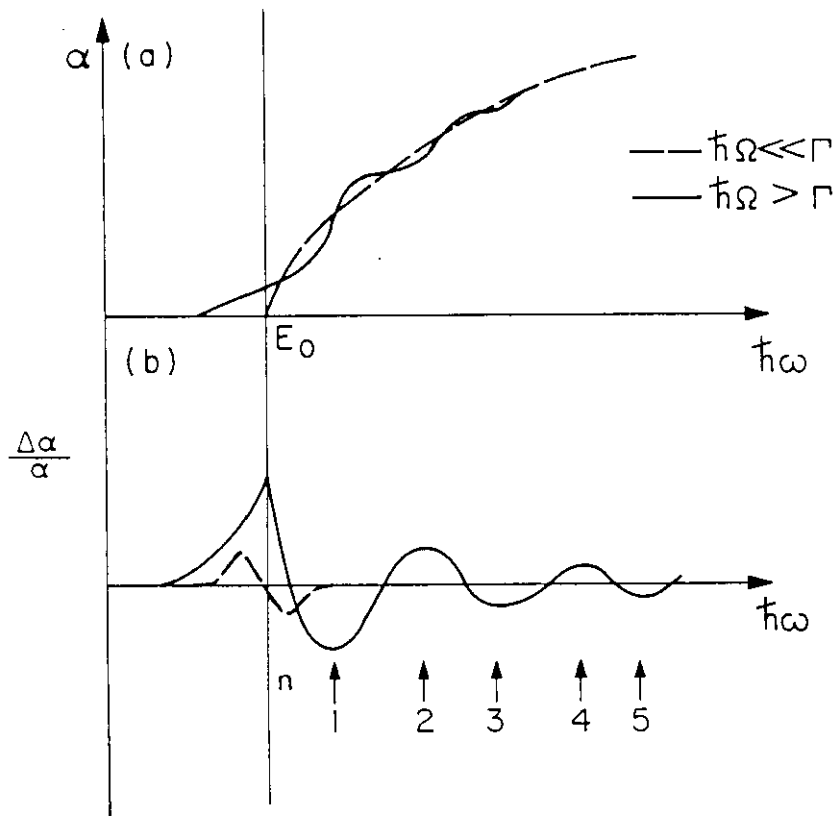


Figura III.3: (a) Coeficiente de absorção e (b) absorção modulada de um semicondutor de gap direto em ausência (linha tracejada) e na presença (linha sólida) de um campo elétrico externo. As oscilações presentes nos espectros de linha sólida são frutos do “overlap” indicado na Fig. III.2(b).

Wannier[¶]:

$$\psi_{vc}(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{q}_2, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2} B(\mathbf{q}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{q}_2, \mathbf{R}_2) a_v^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2) a_c(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1), \quad (\text{III.7})$$

onde B é uma função que varia lentamente. ψ_{vc} deve satisfazer a seguinte equação:

$$\mathcal{H}\psi_{vc}(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{q}_2, \mathbf{r}_2) = W(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)\psi_{vc}(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}_1; \mathbf{q}_2, \mathbf{r}_2), \quad (\text{III.8})$$

onde \mathbf{q}_1 e \mathbf{q}_2 são os números quânticos relevantes para os autovalores W . Utilizando os métodos da aproximação de massa efetiva[Smith 1961, Aspnes 1972c], B deve ser solução de:

$$\left\{ E_c(-i\nabla_{\mathbf{x}_1}) - E_v(i\nabla_{\mathbf{x}_2}) + V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) - W(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \right\} B(\mathbf{q}_1, \mathbf{x}_1; \mathbf{q}_2, \mathbf{x}_2) \big|_{\mathbf{x}_1=\mathbf{R}_1, \mathbf{x}_2=\mathbf{R}_2} = 0, \quad (\text{III.9})$$

onde \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 são tratadas como variáveis contínuas. B e ψ estão devidamente normalizadas. A aproximação parabólica permite expandir em segunda ordem as energias em termos de operadores gradiente. Então a eq. (III.9) representa um Hamiltoniano efetivo de duas partículas que pode ser separado em coordenadas relativas ρ e de centro de massa. Considerando apenas interação Coulombiana e campo elétrico, o potencial é independente das coordenadas de centro de massa, sendo que a equação para estas últimas variáveis tem como solução ondas planas. Escolhendo um sistema local de coordenadas que diagonalize o tensor de massa efetiva nas vizinhanças de um ponto crítico de energia $E_g = \hbar\omega_g$, a equação para coordenadas relativas fica:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\mu_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{\mu_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{\mu_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + e\mathbf{F} \cdot \rho + W(\mathbf{q}) \right\} B'(\mathbf{q}, \rho), \quad (\text{III.10})$$

onde B' é a parte de B em coordenadas relativas. A eq. (III.10) é separável em coordenadas cartesianas $\rho = (x, y, z)$. Com as componentes de \mathbf{F} ao longo dos eixos principais, a solução de (III.10) pode ser escrita como[Aspnes 1966]:

$$b(\mathbf{q}, \rho) = C_x C_y C_z \text{Ai} \left(\frac{-eF_x x - E_x}{\hbar\theta_x} \right) \text{Ai} \left(\frac{-eF_y y - E_y}{\hbar\theta_y} \right) \text{Ai} \left(\frac{-eF_z z - E_z}{\hbar\theta_z} \right), \quad (\text{III.11})$$

onde Ai são as funções de Airy, C_i são coeficientes de normalização a determinar e $\hbar\theta_i$ são dados por:

$$\hbar\theta_i = \left[\frac{e^2 F_i^2 \hbar^2}{2\mu_i} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{III.12})$$

[¶]As funções de Wannier são definidas como:

$$a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) = (N)^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l) \phi_n(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),$$

vide [Wannier 1960b].

Os números quânticos gerais q_i são apenas as energias E_i , e:

$$W(\mathbf{q}) = E_g + E_x + E_y + E_z. \quad (\text{III.13})$$

O cálculo da parte imaginária da função dielétrica fornece, após algumas manipulações matemáticas[Aspnes 1972b]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_2^{vc}(\omega, \mathbf{F}) &= \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{P}_{vc}|^2 \frac{e^2 |F_x F_y F_z|}{\hbar^6 \theta_x^2 \theta_y^2 \theta_z^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dE_x dE_y dE_z \text{Ai}^2\left(\frac{-E_x}{\hbar\theta_x}\right) \text{Ai}^2\left(\frac{-E_y}{\hbar\theta_y}\right) \text{Ai}^2\left(\frac{-E_z}{\hbar\theta_z}\right) \delta(E_g + E_x + E_y + E_z - \hbar\omega), \end{aligned} \quad (\text{III.14})$$

para um par simples de bandas (c,v) na aproximação de massa efetiva. Já vimos no Capítulo I que o espectro experimental modulado está relacionado com ε_2 . Mas o que nos interessa é uma expressão assintótica de $\frac{\Delta R}{R}$, dada por Aspnes[Aspnes 1973a]:

$$\frac{\Delta R}{R} \simeq (\hbar\omega - E_g)^{-\frac{(d+1)}{4}} \exp\left(\frac{\Gamma(\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}}}{(\hbar\Omega)^{\frac{3}{2}}}\right) \cos\left[\frac{2}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\Omega}\right)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}(d-1)\right], \quad (\text{III.15})$$

onde d representa a dimensão do ponto crítico e:

$$\hbar\Omega = 2^{-\frac{2}{3}} \hbar\omega = \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{8\mu}\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{III.16})$$

A expressão (III.15) mostra claramente o comportamento das FKO's: uma parte oscilatória (cosseno) amortecida por uma envoltória (exponencial), como pode ser visto num espectro típico (Fig. I.5). Dentro desta aproximação assintótica, os máximos e mínimos consecutivos da parte oscilatória podem ser aproximados por[Sydor 1989]:

$$E_n = E_g + \hbar\Omega X_n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{III.17})$$

onde

$$X_n = \left[\frac{3\pi(n - \frac{1}{2})}{2}\right]^{\frac{2}{3}}, \quad (\text{III.18})$$

que são expressões extremamente úteis na caracterização das FKO's. Por exemplo, uma regressão linear dos extremos do espectro experimental em termos de (III.17) forneceria E_g (a energia da singularidade a que se associam as oscilações) e F (o campo elétrico na amostra).

III.4 Funções de Houston

A descrição utilizada na seção anterior era bem limitada: restringia-se à vizinhança de um ponto crítico, ao redor do qual é justificado pensar em banda parabólica, utilizar a aproximação de massa-efetiva e estudar o comportamento do problema neste formalismo localmente válido. A proposta de Wannier[Wannier 1960a] foi partir do Hamiltoniano do sistema, escolher sabiamente um conjunto de funções (contendo todas as propriedades e simetrias desejadas) e finalmente calcular os autovalores do problema. Algumas passagens de seu trabalho foram motivo de crítica, gerando uma polêmica com Zak[Wannier 1960a, Wannier 1962, Zak 1968a, Zak 1968b, Wannier 1969, Zak 1969]. Uma característica deste formalismo (que não está presente na aproximação de massa efetiva) é a aparição de uma estrutura fina devida à natureza discreta da rede[Callaway 1963], conhecida como “Stark-Wannier ladders” (SWL), ou escadas de Stark-Wannier. Os insucessos na observação deste efeito acabaram por realçar as críticas ao formalismo, chegando-se inclusive a duvidar que tais escadas, se existissem, pudessem ser observadas experimentalmente.

O Hamiltoniano de um-elétron na presença de um campo elétrico é:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}, \quad (\text{III.19})$$

onde \mathcal{H}_0 já foi definido na seção anterior. Assumimos que o sólido é infinito, fazendo com que os números quânticos \mathbf{k} (definidos numa zona de Brillouin fundamental) formem um quasicontinuum. A equação a ser resolvida é:

$$\left[\mathcal{H}_0 + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi(\mathbf{q}, \mathbf{r}, t) = 0. \quad (\text{III.20})$$

Apesar das dificuldades que se apresentam para encontrar ψ [Aspnes 1972c], Houston[Houston 1940] propôs uma solução aproximada para (III.20)^{||}:

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \exp \left\{ \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{T_0}^t E_n[\mathbf{k}(t')] dt' \right\} \phi_n[\mathbf{k}(t), \mathbf{r}], \quad (\text{III.21})$$

onde $\phi_n[\mathbf{k}(t), \mathbf{r}]$ é uma função de Bloch com energia $E_n[\mathbf{k}(t)]$. Após algumas manipulações matemáticas, pode-se calcular o valor esperado de $i\hbar(\partial/\partial t)$, ou $(\mathcal{H}_0 + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r})$, obtendo a constante[Aspnes

^{||}Existe uma outra formulação para este problema, conhecida como Representação de Momento Cristalino, que também parte de funções de Bloch. Os resultados obtidos são idênticos, pois a solução neste formalismo é a transformada de Fourier no tempo da solução de Houston.

1972c]:

$$W_{n,v}(\mathbf{k}_\perp) = ne|\mathbf{F}|a + \bar{U}_n(\mathbf{k}_\perp), \quad (\text{III.22})$$

onde \bar{U} é a energia interbanda e a é o parâmetro de rede na direção do campo \mathbf{F} . Esta equação mostra um conjunto de níveis igualmente espaçados por todo o cristal, com espaçamento em energia dado por:

$$\Delta W = e|\mathbf{F}|a, \quad (\text{III.23})$$

que é o “passo” das escadas de Stark-Wannier.

Embora os detalhes do cálculo não tenham sido mostrados aqui, uma boa compreensão dos fenômenos envolvidos pode ser alcançada se fizermos uma “análise clássica” do problema**. As variáveis naturais para um tratamento quasiclássico são o momento cristalino $\hbar\mathbf{k}$ e o vetor da rede \mathbf{r} , que são conjugados e comutam com o índice de banda q . Deixando de lado problemas de degenerescência de bandas, reescrevemos o Hamiltoniano para um q fixo como:

$$\mathcal{H} = W_q(\mathbf{k}) + V(\mathbf{r}), \quad (\text{III.24})$$

onde $W_q(\mathbf{k})$ é idêntico ao \mathcal{H}_0 de (III.19) e $V(\mathbf{r})$ é o potencial externo. As equações de Hamilton derivadas a partir de (III.24) são:

$$\hbar \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial W_q(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad (\text{III.25})$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (\text{III.26})$$

Vejamos nosso caso de interesse, um campo elétrico uniforme:

$$V(\mathbf{r}) = -e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}. \quad (\text{III.27})$$

Neste caso, (III.26) fica:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e\mathbf{F}. \quad (\text{III.28})$$

**Reversão à mecânica clássica para elétrons em sólidos não é um procedimento óbvio, e inclusive não pode ser uma reversão direta[Wannier 1960b]. As bandas de energia importantes são as que possuem números quânticos baixos e, além disso, as bandas são originadas essencialmente pelo caráter ondulatório do elétron; nenhum procedimento clássico poderia descrever suas propriedades. Porém, em uma banda lidamos com um quasicontinuum contendo um enorme número de estados, a partir dos quais pacotes de onda podem ser formados. Uma das propriedades das funções de Wannier[Wannier 1960b, p. 174] permite que tais pacotes podem ser comprimidos à dimensão de uma cela primitiva. Assim, se o fenômeno abrange muitas celas primitivas, pode-se utilizar procedimentos clássicos, mantendo-se em mente suas limitações inerentes.

Supondo \mathbf{F} na direção \hat{x} , integramos a equação acima para obter:

$$k_x - \frac{e}{\hbar} Ft = k_0 = \text{constante}, \quad (\text{III.29})$$

$$k_y = \text{constante}, \quad (\text{III.30})$$

$$k_z = \text{constante}. \quad (\text{III.31})$$

A eq. (III.29) é a generalização, para Hamiltonianos periódicos, da lei de aceleração constante em campos uniformes. Das eqs. (III.25), só a componente x fornece resultado interessante:

$$\begin{aligned} r_x(t) &= r_x(0) + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{\partial W_q(\mathbf{k})}{\partial k_x} dt \\ &= r_x(0) + \frac{1}{eF} \int_{k_0}^{k_x} \frac{\partial W_q(\mathbf{k})}{\partial k_x} dk_x, \end{aligned}$$

ou

$$r_x(t) = r_x(0) + \frac{1}{eF} \{W_q(k_x, k_y, k_z) - W_q(k_0, k_y, k_z)\}. \quad (\text{III.32})$$

Para simplificar, supomos que \mathbf{F} é perpendicular a um plano cristalino, coincidente com o plano yz de coordenadas. A direção x , por sua vez, é uma direção da rede recíproca^{††}. Suponha que o período do cristal nesta direção seja b . De (III.29) vemos que o movimento no espaço k é periódico no tempo, pois o portador atinge um ponto equivalente após um período T dado por:

$$T = \frac{\hbar b}{eF}, \quad (\text{III.33})$$

Observando a eq. (III.32) vemos que o movimento não só é periódico no espaço k , mas também o é na direção x :

$$r_x(T) = r_x(0). \quad (\text{III.34})$$

O resultado desta análise, entretanto, acaba por perder o significado se ocorrerem muitas colisões em um período T . Como o tempo entre colisões é da ordem de 10^{-12} segundos, são necessários campos extremamente elevados para manter T menor que este valor^{††}. Mas as conclusões são interessantes e vale a pena investigá-las sob a óptica da mecânica quântica. Os pontos básicos a serem verificados são dois: $k_x - (eFt/\hbar)$ é uma constante de movimento e, exceto

^{††}Basta lembrar dos índices de Miller: se \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 e \mathbf{b}_3 são vetores da rede recíproca, $\mathbf{k} = \hbar\mathbf{b}_1 + \mathbf{k}\mathbf{b}_2 + \mathbf{l}\mathbf{b}_3$ é perpendicular aos planos (hkl) [Ashcroft 1976].

^{††}Esta é basicamente a razão da impossibilidade de observação de SWL em semicondutores “bulk”. Este ponto será retomado mais adiante.

para deslocamentos perpendiculares à direção do campo, o movimento é periódico com período T dado por (III.33). Tomando o mesmo Hamiltoniano que temos usado,

$$\mathcal{H} = W_q(\mathbf{k}) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}, \quad (\text{III.35})$$

podemos verificar facilmente estas duas conclusões. Uma constante de movimento \hat{A} , na mecânica quântica, satisfaz[Cohen-Tannoudji 1985]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\hat{A}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{A}) - [\hat{\mathcal{H}}\hat{A}] = 0.$$

De fato,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left(k_x - \frac{eFt}{h} \right) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(k_x - \frac{eFt}{h} \right) - \left[\mathcal{H} \left(k_x - \frac{eFt}{h} \right) - \left(k_x - \frac{eFt}{h} \right) \mathcal{H} \right] \\ &= -\frac{ieF}{2\pi} + eF(r_x k_x - k_x r_x) \\ &= 0, \end{aligned}$$

se lembrarmos que \mathbf{r} e $\hbar\mathbf{k}$ são variáveis conjugadas e que se pode escrever[Wannier 1960b]:

$$r_i k_j - k_j r_i \approx \frac{i}{2\pi} \delta_{ij}.$$

A existência de um período T dado por (III.33) expressa-se na teoria quântica pelo desdobramento Stark, em cada banda, com componentes localizadas espacialmente numa extensão \hbar/T ou eFa (onde a é o recíproco de b). Isto pode ser verificado a partir de (III.35). Suponha uma função $\phi_q(\mathbf{r})$ que é a solução de (III.35):

$$\{W_q(\mathbf{k}) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}\} \phi_q(\mathbf{r}) = E\phi_q(\mathbf{r}).$$

Então uma função geometricamente deslocada $\phi_q(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ aplicada no mesmo Hamiltoniano resulta em:

$$\{W_q(\mathbf{k}) - e\mathbf{F} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{a})\} \phi_q(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = E\phi_q(\mathbf{r} + \mathbf{a}),$$

ou, com leve manipulação,

$$\{W_q(\mathbf{k}) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}\} \phi_q(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = (E + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{a})\phi_q(\mathbf{r} + \mathbf{a}), \quad (\text{III.36})$$

o que significa que $\phi_q(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ é solução do mesmo Hamiltoniano com autovalores deslocados, que constituem as SWL. Uma das razões da controvérsia citada anteriormente é que o verdadeiro Hamiltoniano não é (III.35), mas:

$$\mathcal{H} = W_q(\mathbf{k}) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{x}, \quad (\text{III.37})$$

sendo que o último termo não comuta com q e produz transições interbanda. Wannier argumentou que a prova dada para (III.35) se transfere para (III.37)[Wannier 1960b, Wanier 1969]. Porém o processo de tunelamento interbanda ainda é possível, e é conhecido como efeito Zener[Zener 1934, Houston 1940]. No artigo original, Wannier utiliza seu formalismo para calcular as energias e obtém[Wannier 1960a]:

$$E_q(n) = \frac{a}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{a}} W_q(k) dk + neFa, \quad (\text{III.38})$$

similar a (III.22) e explicitando a multiplicidade de estruturas que compõem as escadas de Stark-Wannier. Retomando a discussão sobre os valores de \mathbf{F} necessários para observar este fenômeno, havíamos dito que T precisa ser menor que o tempo médio entre colisões (10^{-12} s). Ou seja, o pacote de onda deve deslocar-se pela banda sem sofrer espalhamento. Em termos energéticos, seria suficiente que a energia fornecida pelo campo elétrico fosse maior que Δ (a dispersão da banda):

$$eFa > \Delta, \quad (\text{III.39})$$

o que significa que o pacote de onda seria acelerado até a borda da zona de Brillouin (vide Fig. III.1). Uma vez que em semicondutores “bulk” temos $\Delta \sim 1$ eV e $a \sim 6$ Å, o campo elétrico necessário deveria ser da ordem de 10^7 V/cm, valor extremamente difícil de ser atingido sem danificar irreversivelmente o material. Ou seja, é praticamente impossível observarmos SWL em semicondutores “bulk”.

O surgimento das superredes sanou esta deficiência intrínseca, uma vez que seus parâmetros estruturais poderiam ser ajustados para satisfazer a condição (III.39) com campos razoáveis. Com períodos estruturais típicos da ordem de 100 Å e minibandas de poucas dezenas de meV, bastaria um campo de aproximadamente $10^4 - 10^5$ V/cm para atingir o regime das SWL. A primeira observação destas escadas foi feita por Mendez[Mendez 1988] numa experiência de fotocorrente [Fig. III.4(a), note as componentes da escada e respectiva numeração], seguida por medidas de Voisin[Voisin 1988] empregando refletividade eletromodulada [vide Fig. III.4(b)]. A

eq. (III.38) agora pode ser escrita de forma mais simples[Mendez 1989]:

$$E_n = E_0^{SQW} + neFD, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (\text{III.40})$$

onde E_0^{SQW} é a energia de um poço quântico isolado (com mesma largura dos poços da superrede) e D é o período da superrede. A localização das funções de onda é facilmente visualizada. Na Fig. III.5(a) temos o perfil de potencial para uma superrede e o comportamento das funções de onda dos portadores, as quais estão completamente delocalizadas por causa do acoplamento entre os poços (as barreiras são finas). Com a aplicação de um campo elétrico na direção de quantização os níveis de cada poço passam a não ter mais a mesma energia e há um desacoplamento progressivo dos poços [Fig. III.5(b)]. As funções de onda sofrem um processo de localização espacial (já previsto pela teoria original de Wannier) e restringem-se a poucos poços. Já para campos fortes o suficiente, as funções estão completamente confinadas dentro de cada poço [Fig. III.5(c)], que se comportam como poços quânticos isolados [daí o termo E_0^{SQW} em (III.40)]. Finalmente, pela simplicidade da eq. (III.40) notamos que é possível obter de forma direta duas informações extremamente relevantes a partir dos espectros experimentais [como os mostrados nas Fig. 3.4 (a) e (b)]. Basta numerar as estruturas de forma coerente e graficar a energia de cada uma delas em função do n correspondente. A regressão linear desses pontos fornece, segundo (III.40), a energia da singularidade que originou as SWL (coeficiente linear, E_0^{SQW}) e a intensidade do campo elétrico F responsável pela formação das mesmas (coeficiente angular, eFD).

III.5 Conclusões

Neste capítulo mostramos os modelos mais simples empregados no cálculo dos estados eletrônicos de semicondutores na presença de um campo elétrico externo. Para campos moderados, obtivemos expressões para as conhecidas oscilações Franz-Keldysh, enquanto que para campos altos verificamos a formação das escadas de Stark-Wannier.

Os resultados obtidos nas seções precedentes descrevem os estados eletrônicos dentro da aproximação de um-elétron. Vamos revisar as aproximações inerentes aos formalismos, pois elas determinam os limites de validade das soluções encontradas. Primeiramente, utilizamos, funções de onda de um-elétron, o que significa que todas as interações eletrônicas foram descartadas (a

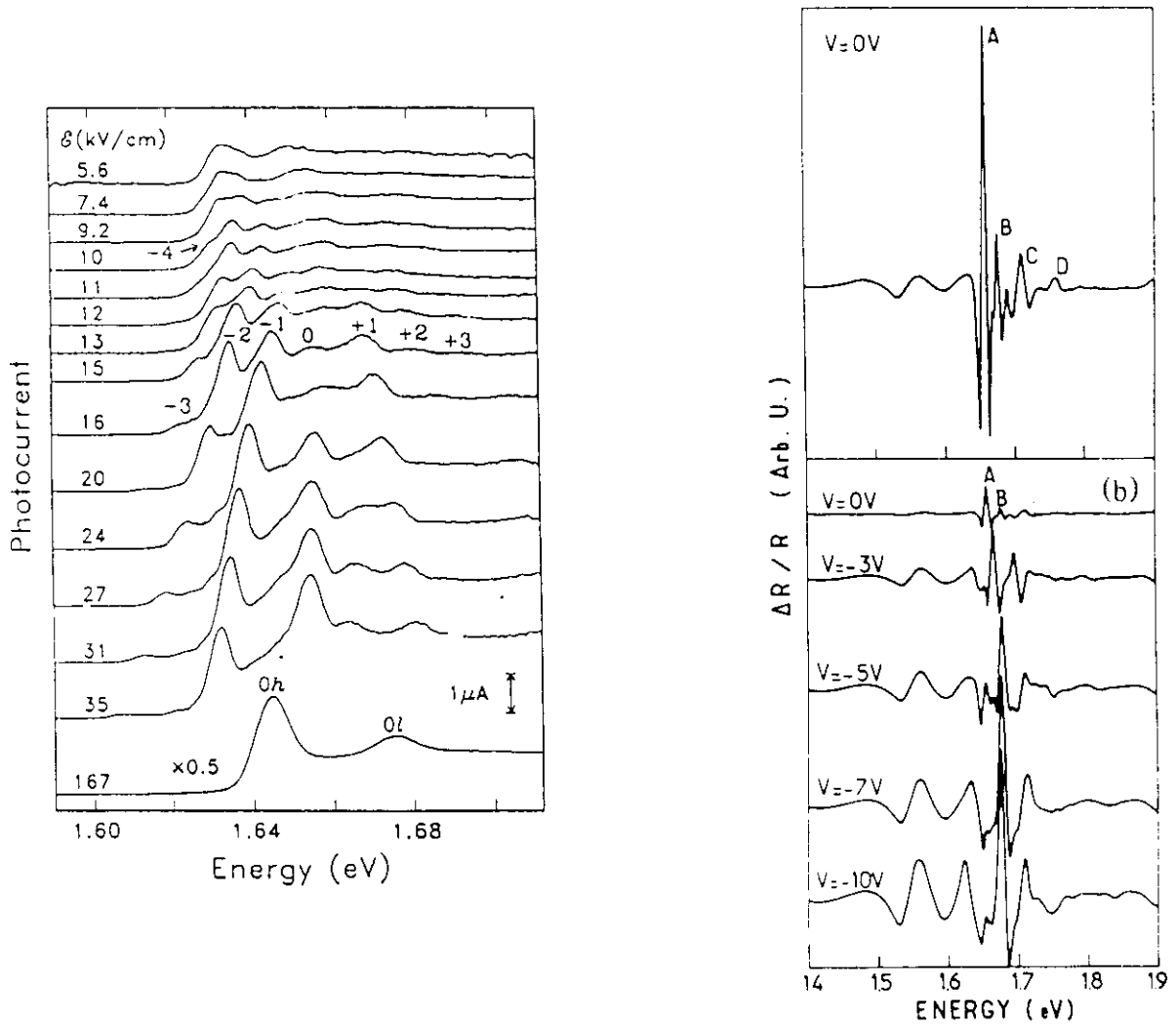


Figura III.4: (a) Primeira observação das escadas de Stark-Wannier[Mendez 1988], obtida através de uma experiência de fotocorrente ($T = 5$ K) com uma superrede de AlGaAs/GaAs com período 60 Å. Os índices em campos intermediários numeram as escadas de Stark-Wannier para os elétrons. Em campos altos, vemos apenas a transição entre estados de buraco e elétron totalmente localizados. (b) Escadas de Stark-Wannier em espectros de eletrorefletância[Voisin 1988] a baixa temperatura em amostra semelhante à anterior. As intensas estruturas do GaAs (substrato) mascaram o sinal da superrede, de forma que a numeração das escadas (embora presentes) torna-se difícil.

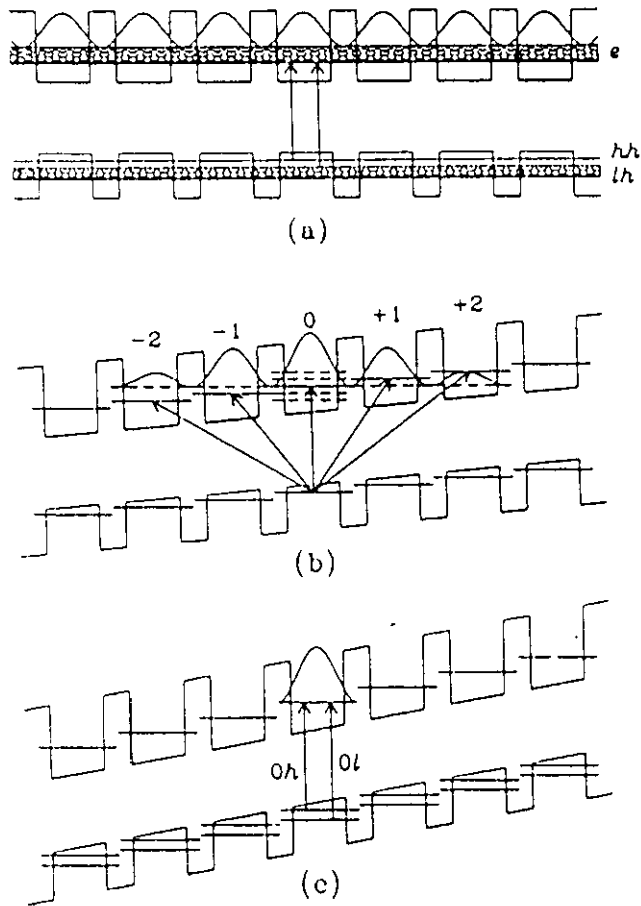


Figura III.5: (a) Sem campo aplicado as funções de onda dos portadores estão delocalizadas e as transições se dão entre minibandas. (b) Em campos moderados, os estados de buraco leve e de elétron estão parcialmente delocalizadas enquanto que os de buraco pesado estão completamente localizados. Transições interbanda produzem escadas de Stark-Wannier, devido à localização parcial da função eletrônica, representada na figura. (c) Para campos intensos, todas as funções de onda estão completamente localizadas e as transições se dão entre níveis correspondentes aos de um poço quântico isolado.

aproximação mais séria foi negligenciar a interação Coulombiana). Como as funções de onda representam uma expansão de uma-banda (“one-band expansion”), os resultados serão bons se o “interband mixing” for desprezível, o que a princípio restringe os resultados a bandas não-degeneradas ou regiões distantes de pontos de degenerescência. Ainda em acréscimo, o efeito do tempo de vida finito do elétron em um dado estado não foi considerado. No caso da aproximação de massa efetiva, além das condições acima o tratamento só é válido localmente, nas vizinhanças de um ponto crítico. Apesar de tudo isso, deve-se ressaltar que as soluções são exatas dentro de seus limites.

Em suma, os dois pontos fundamentais deste capítulo são as expressões obtidas para a energia das estruturas presentes no espectro óptico de semicondutores, que serão ferramentas extremamente úteis na análise dos dados experimentais. Dentro das limitações de cada aproximação, temos:

campos intermediários:

$$E_n = E_0 + \hbar\Omega X_n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{III.41})$$

com

$$X_n = \left[\frac{3\pi(n - \frac{1}{2})}{2} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (\text{III.42})$$

para

$$eFD \ll \Delta, \quad (\text{III.43})$$

campos intensos:

$$E_n = E_0^{SQW} + n eFD, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (\text{III.44})$$

para

$$eFD > \Delta, \quad (\text{III.45})$$

Capítulo IV

Efeitos de Campo Elétrico em Superredes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

IV.1 Introdução

O efeito de um campo elétrico externo (\mathbf{F}) nos estados eletrônicos de um semicondutor pode ser formulado em termos relativamente simples para dois casos extremos, como discutido no capítulo anterior. Para campos fracos usa-se a aproximação de massa efetiva e os autoestados são representados por funções de Airy, que são delocalizadas e possuem um espectro contínuo de energia (efeito Franz-Keldysh). Já os campos muito fortes produzem localização da função de onda numa extensão $\lambda = \Delta/eF$, onde Δ é a largura em energia da banda em ausência de campo. Os autoestados deste problema são conhecidos como estados de Stark-Wannier. As regiões de validade destas aproximações podem ser definidas em termos de um campo elétrico efetivo $f = \frac{eFD}{\Delta}$, onde D é a periodicidade da rede na direção do campo elétrico. Quando $f \ll 1$, a natureza oscilatória das funções de Airy produz uma série de oscilações na dependência com a frequência da constante dielétrica e outros coeficientes ópticos relacionados. Essas oscilações Franz-Keldysh (FKO's) ocorrem acima do limiar de absorção e seu período é proporcional a $F^{2/3}$. Para $f \sim 1$ deveriam se formar estados Stark-Wannier. Eles se manifestam pelo surgimento de uma série de estruturas igualmente espaçadas nas constantes ópticas, conhecidas como escadas de Stark-Wannier (SWL's). Detalhes destes dois casos extremos podem ser encontrados no capítulo III. Este regime não pode ser atingido em semicondutores "bulk" ($\Delta \sim 1$ eV, $D \sim 6$ Å), mesmo

para campos muito intensos. Por outro lado, em uma superrede semicondutora existe a possibilidade de manipular a largura da minibanda (Δ) e o período (D) de tal maneira a obter $f \simeq 1$ com a aplicação de campos relativamente modestos ($F \simeq 10^4 - 10^5$ V/cm). Após as primeiras observações de formação das SWL[Mendez 1988, Voisin 1988], o regime de campos intensos em superredes semicondutoras tem sido estudado através de uma variedade de técnicas por diferentes autores. O regime de campos fracos, porém, não foi devidamente estudado. A primeira observação de oscilações Franz-Keldysh numa superrede semicondutora é a de Cerdeira *et al.*[Cerdeira 1990], que faz parte do presente trabalho. Aqui estudamos os espectros de refletividade e transmissão fotomodulados de uma superrede de $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ com um campo elétrico interno (não-intencional) de $F \approx 7$ kV/cm e encontramos um comportamento oscilatório que foi atribuído a FKO's. Os parâmetros desta amostra (vide SLA 100, tabela I.1) são tais que existem apenas uma minibanda de elétron ($\Delta = 37$ meV) e outra de buraco pesado com dispersão desprezível ($\Delta = 1$ meV). Os buracos leves não estão confinados (capítulo I) e são deslocados para menores energias pela tensão biaxial (apêndice A). Posteriormente, a mesma estrutura de $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ foi crescida entre uma camada “buffer” ($\text{GaAs } n^+$) e outra “capping” ($\text{GaAs } p^+$), de modo a permitir um campo elétrico quase constante em toda a região dos poços quânticos, que pode ser variado externamente através de uma voltagem dc externa, V_b . A intenção deste estudo detalhado é confirmar a existência das FKO's e observar a evolução deste regime para o de SWL. A observação das FKO's e os resultados obtidos em função de V_b estão discutidos nas seções seguintes.

IV.2 Primeira Observação de Oscilações Franz-Keldysh em Superredes

A amostra SLA 100 pertence ao conjunto analisado no capítulo II, onde determinamos o parâmetro de descasamento de bandas para este sistema ($\text{InGaAs}/\text{GaAs}$). Porém, o resultado surpreendente observado (fruto de felizes coincidências estruturais por ocasião do crescimento) possibilitou-nos a opção de abordarmos o assunto deste capítulo.

Os espectros da SLA 100 [Fig. IV.1(a)] exibem um comportamento oscilatório. Na tentativa de ajustar estes espectros em termos de FDLS's, seguindo o procedimento descrito no capítulo anterior, é necessário empregar seis transições. O cálculo teórico, por sua vez, fornece

no máximo quatro estruturas, mesmo se levarmos em conta transições proibidas por paridade. A Fig. IV.1(c) mostra uma comparação entre esses cálculos (curvas) e as seis energias providas dos ajustes (linhas horizontais). Pode-se notar que o espaçamento praticamente constante entre estas últimas torna impossível qualquer designação coerente que convirja para algum valor de Q . Porém o comportamento oscilatório amortecido que observamos nos espectros em muito se assemelha a um fenômeno em materiais volumétricos conhecido como oscilações Franz-Keldysh (FKO, vide capítulo III). De fato, basta comparar as Figs. IV.1(a) e IV.1(d) (esta última é um espectro típico de GaAs) para perceber a semelhança de nossos espectros experimentais com as FKO's em "bulk"*. Com base nesta semelhança, utilizamos o procedimento padrão para identificar as FKO's: graficamos as energias dos máximos e mínimos consecutivos dos espectros em função de X_n [dado pela eq. (III.42)]. O inset da Fig. IV.1(a) mostra a regressão linear destes dados, cujo coeficiente linear fornece $E_0 = 1,414$ eV [vide eq. (III.41)]. Voltando à Fig. IV.1(c), vemos que este valor de energia determina $Q = 0,57$, descasamento previamente sugerido por Iikawa *et al.*[Iikawa 1988a] (fotoluminescência e absorção a 2 K)[†]. O período das oscilações seria explicado pela existência de um campo elétrico (não-intencional) de $F \simeq 7$ kV/cm, gerado durante o crescimento. Uma dispersão de minibandas de $\Delta \simeq 38$ meV [vide Fig. IV.1(b)] é obtida através de um cálculo usando formalismo de função envelope (apêndice B), e com esses dados calculamos o campo reduzido f (interno) ao qual a amostra está sujeita: $f = 0,18$. Tal valor de campo satisfaz a inequação (III.43) do capítulo III, reforçando nossa interpretação. Uma pequena estrutura que aparece ligeiramente abaixo do limiar de absorção [vide Fig. IV.1(a)] pode sugerir uma possível interpretação em termos de escadas de Stark. Se fosse o caso, cada estrutura obtida dos ajustes FDLS seria membro de uma escada de Stark-Wannier, definida pela eq. (III.44) do capítulo anterior. Fazendo a regressão das energias da suposta SWL em termos desta equação, vemos que os pontos comportam-se como uma reta e o valor do campo elétrico obtido é $F = 10,4$ kV/cm, em boa concordância com o resultado em termos de FKO's. A extrapolação para $n = 0$ resulta em $E_0 = 1,413$ eV, também concordando bem com o valor anteriormente calculado para H(11) em uma superrede. Mas essa

*Mas como nossos dados de transmissão não permitem a observação de estruturas do GaAs (vide capítulo I), as oscilações da SLA 100 são inequivocamente produzidas pela superrede.

[†]Apenas a título de informação, a análise do espectro de PT a 300 K indica H(11) como a singularidade à qual as FKO's estão associadas e confirma $Q = 0,57$. O comportamento oscilatório, porém, é bem mais amortecido, uma vez que aumentando a temperatura aumentamos o tempo de vida dos estados eletrônicos e diminuimos o comprimento de coerência espacial das funções de onda, condição necessária à existência das FKO's.

aparente equivalência é o mais forte argumento contra a interpretação em termos de SWL's, uma vez que elas devem estar associadas ao nível fundamental de um poço isolado e não de uma superrede [Cerdeira 1990]. Como para nosso caso $E_0^{SQW} = 1,427$ eV [13 meV acima da H(11) para superrede], a extrapolação SWL está em completo desacordo com o que se esperaria do modelo teórico. Além disso, a forma dos espectros da Fig. IV.1(a) é típica de FKO's em materiais 3D [vide Fig. IV.1(d)] e não se assemelha aos dados experimentais de SWL's obtidos através de espectroscopia de modulação [Voisin 1988][†]. Assim sendo, descartamos a hipótese das SWL's e podemos afirmar que nossos resultados são a primeira evidência experimental de um regime de campo apresentando oscilações Franz-Keldysh associadas a níveis confinados de superrede.

Como completeza, submetemos um pedaço da SLA 100 a um tratamento térmico (850° durante 30 minutos em uma atmosfera de $AsH_3 + H_2$). O efeito deste recozimento é aumentar a rugosidade das interfaces, o que destrói as oscilações [vide Fig. IV.1(e)]. O ajuste FDLS deste espectro fornece apenas duas estruturas, $A = 1,414$ eV e $B = 1,446$ eV [setas na Fig. IV.1(e)]. Uma rápida comparação entre estes valores e a Fig. IV.1(c) nos permite identificar A como H(11) e B como L(11), confirmando o descasamento de $Q = 0,57$.

IV.3 Evolução dos Estados Eletrônicos de uma Superrede em Função do Campo Elétrico: de FKO's até SWL's

Inspirados no resultado da seção anterior, solicitamos que nos fosse crescida uma amostra idêntica, porém em configuração p-i-n. O esquema estrutural da amostra e sua curva característica $i \times V$ podem ser vistas na Fig. IV.2. Isto nos permitiria variar o campo elétrico sobre a superrede e tentar estudar a evolução entre campo zero (como na SLA 100 recozida), FKO's (SLA 100 original) e SWL (campos intensos), fazendo um levantamento completo que ainda não havia sido feito até o momento e tentando confirmar independentemente a existência das FKO's em superredes, o que será descrito a seguir.

Na Fig. IV.3 mostramos espectros representativos de transmissão modulada da amostra PNA 100 (tabela I.1) tomados em valores diferentes de V_b . Quatro regiões de voltagem de po-

[†]Em particular, as escadas de Stark-Wannier [eq. (III.44)] apresentam oscilações tanto para energias maiores ($n > 0$) como menores ($n < 0$) que E_0^{SQW} , de forma quase sempre simétrica. Nosso espectro de PR apresenta apenas o $n = -1$ contra os $n = 1-4$, enquanto que o de PT nem $n = -1$ possui.

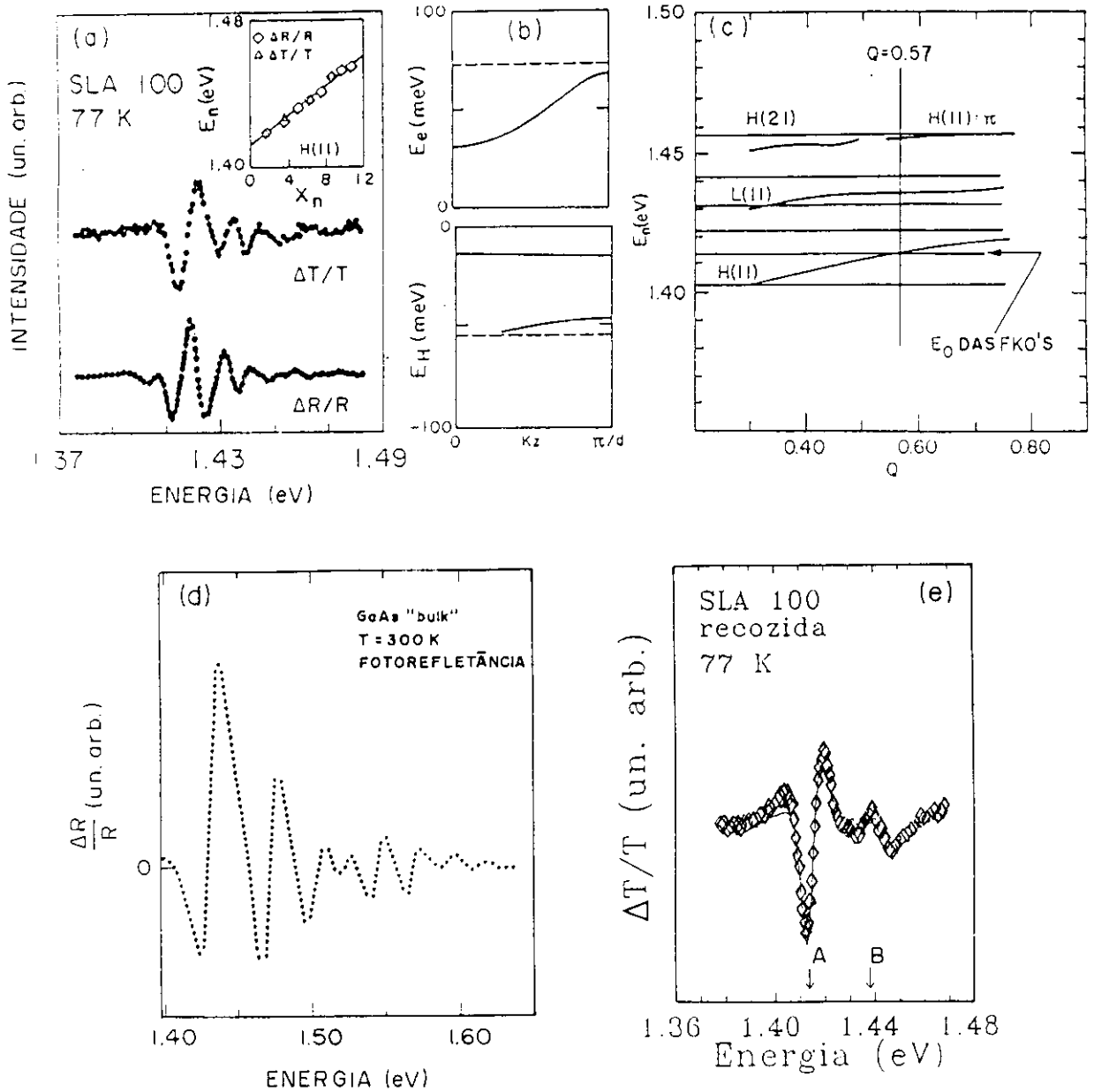


Figura IV.1: (a) Espectros de transmissão e refletividade moduladas da amostra SLA 100, exibindo as FKO's. O inset mostra a regressão para ambos os espectros, fornecendo um valor de $F = 7$ kV/cm (ver texto). (b) Minibandas da SLA 100 calculadas para $Q = 0.57$. As linhas tracejadas representam os limites dos poços. (c) Comparação entre as energias dos ajustes TDLs (linhas horizontais) com as energias previstas teoricamente em função de Q (curvas sólidas). Indicada por seta a energia da singularidade que gera as FKO's da parte (a). (d) Espectro típico de GaAs "bulk" mostrando FKO's. A comparação com os dados de (a) indica a semelhança e confirma a interpretação dada no texto. (e) Espectro de transmissão modulada da SLA 100, mostrando as duas únicas transições [H(11) e L(11)], cujas energias estão indicadas por setas.

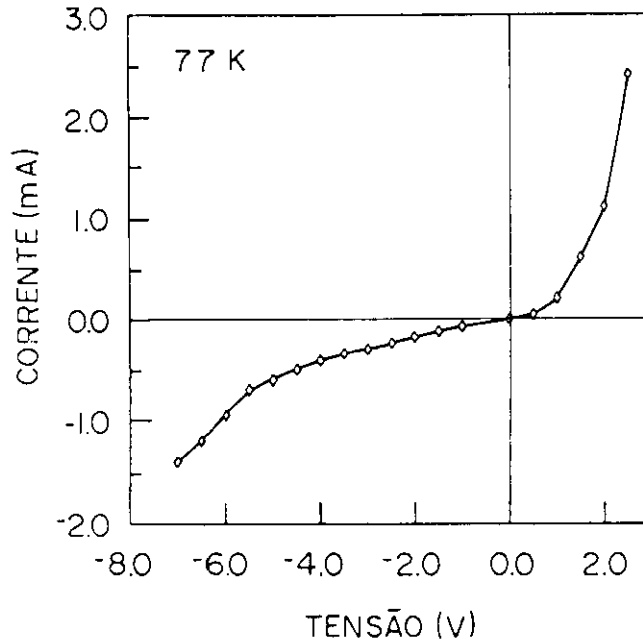
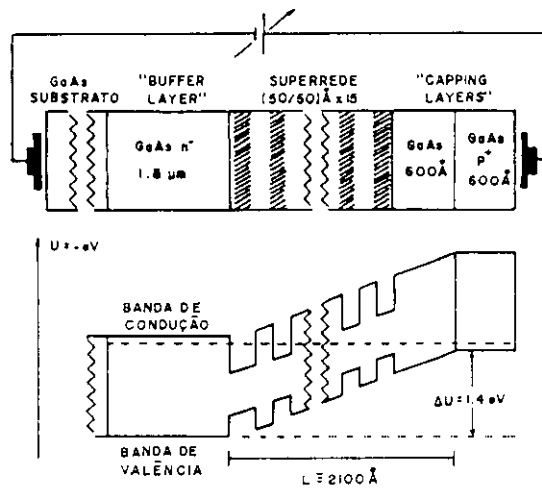


Figura IV.2: Na parte superior da figura temos um esquema estrutural da amostra PNA 100, com o respectivo perfil de potencial. O material hachurado é a liga $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$. Os contatos foram feitos com cola prata. A parte inferior traz uma curva característica $i \times V$ da amostra, a qual se comporta como um diodo. A curva foi utilizada para evitar passagem de corrente excessiva durante as experiências subsequentes.

larização (“bias voltage”) podem ser identificadas . Dentro de cada uma delas os espectros são similares entre si, mas na transição entre regiões observamos significativas mudanças qualitativas. Denomina-las-emos regiões I a IV, em ordem decrescente de V_b (ordem crescente de campo elétrico). O espectro (a) da Fig. IV.3 corresponde a uma polarização direta $V_b = 1,7$ V) que cancela aproximadamente o campo elétrico produzido sobre a superrede pela configuração p-i-n e é um exemplo típico da região I ($0 \leq V_b \leq 1,7$ V). Duas estruturas (A e B) podem ser observadas e são atribuídas a transições entre as minibandas de condução e as de valência (buraco pesado, HH e buraco leve, LH) de acordo com os resultados prévios do capítulo II. As energias destas duas estruturas são obtidas através de ajustes FDLS (conforme o capítulo I). Na Fig. IV.4 graficamos essas energias assim obtidas em função da voltagem de bias (região I). Para ambas transições essas energias aparentam ser essencialmente independentes de V_b . Os valores médios para E_A e E_B estão listados na tabela IV.1, onde são comparados com um cálculo de função envelope para uma superrede em ausência de campos (Apêndice B). O valor encontrado para a linha de mais baixa energia ($E_A = 1,429 \pm 0,001$ eV) também coincide com a posição do pico de fotoluminescência (PL) tomado sob as mesmas condições, no intervalo $+2,0$ V $\leq V_b \leq -3,2$ V [vide Fig. IV.5(a)], reforçando a designação H(11) para A. A experiência de PL mostrou que apenas um único pico, sempre na mesma energia e com intensidade progressivamente menor com a diminuição de V_b [§]. Na Fig. IV.5(b) graficamos a intensidade do pico de PL em função de V_b , onde a diminuição citada acima pode ser visualizada.

Na região II ($0 \geq V_b \geq -1,7$ V) os espectros [Fig. IV.3(b)] apresentam várias oscilações que não podem ser interpretadas consistentemente em termos de FDLS's e transições eletrônicas, comportamento idêntico ao discutido em detalhes na seção anterior. Esta é a região Franz-Keldysh, da qual a Fig. IV.3(b) é um exemplo representativo. O espectro começa com uma cauda exponencial em energias imediatamente abaixo do limiar de absorção da superrede (E_0^{SL}) e apresenta máximos e mínimos consecutivos com amplitude decrescente para energias maiores que E_0^{SL} ,

[§]Não foi possível diminuir V_b abaixo de -3,2 V, pois para voltagens mais negativas o sinal praticamente desaparecia. Isto também já era esperado, uma vez que as funções de onda de elétron e buraco vão se separando espacialmente de forma a diminuir progressivamente o “overlap” entre elas. Para campos suficientemente altos (no caso, $V_b < -3,0$), não há mais “overlap”.

Tabela IV.1: Comparação entre energias de transição para buracos leve e pesado obtidas dos dados experimentais (ver texto) e calculadas para uma superrede (SL) ou poço quântico simples (SQW) segundo o apêndice B. Os intervalos de campo efetivo (f) para cada região estão listados na última coluna.

Região	Designação	\bar{E}_0 (eV)				Intervalo de f
		HH		LH		
		Experimental	Calculado	Experimental	Calculado	
I	Superrede	$1,429 \pm 0,001^\dagger$	$1,429$ (SL)	$1,463 \pm 0,001^\dagger$	$1,466$ (SL)	$0 \leq f \leq 0,08$
II	FKO	$1,428 \pm 0,001^\ddagger$	-	$1,467 \pm 0,001^\dagger$	-	$0,08 \leq f \leq 0,21$
III	Intermediária	$1,428$ a $1,442^\dagger$	-	$1,468 \pm 0,001^\dagger$	-	$0,21 \leq f \leq 0,29$
	SWL	$1,442 \pm 0,001^\S$	-	-	-	
IV	Confinamento total	$1,441 \pm 0,001^\dagger$	$1,441$ (SQW)	-	$1,478$ (SQW)	$f \geq 0,29$

† Obtidos de ajustes TDLS.

‡ Extrapolado da eq. (III.41).

§ Extrapolado da eq. (III.44).

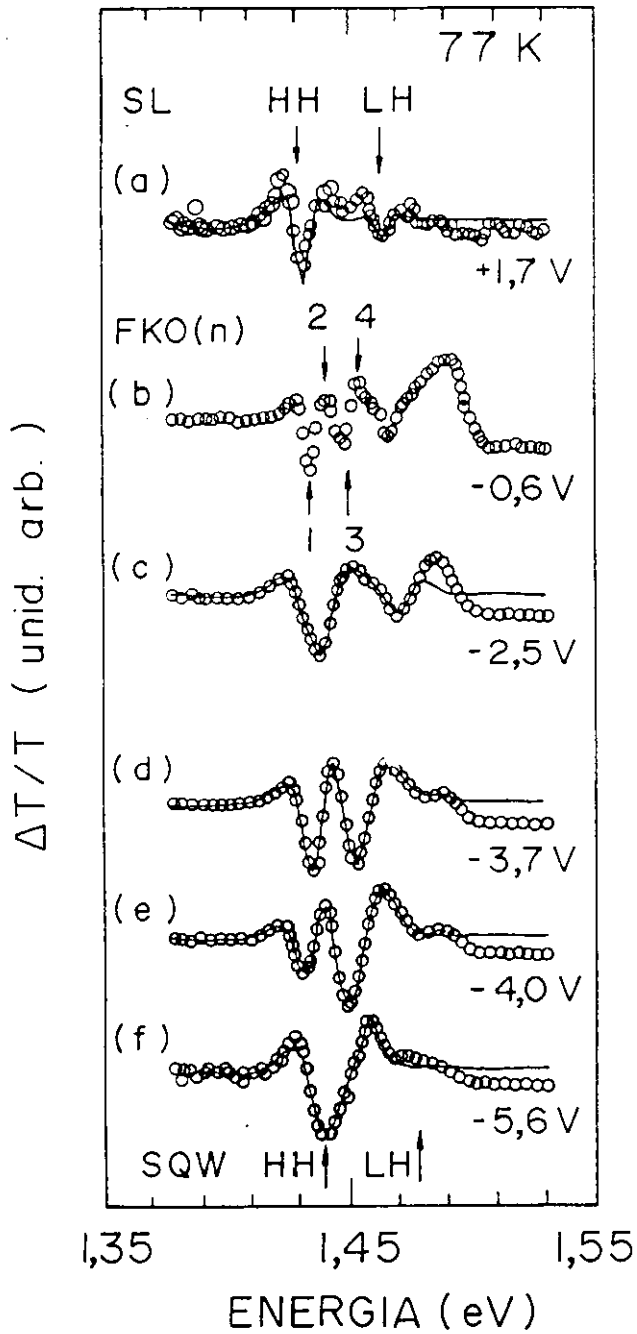


Figura IV.3: Transmissão modulada (77 K) da PNA 100 para diferentes valores da voltagem de bias. Círculos abertos representam dados experimentais enquanto que linhas sólidas são ajustes com formas de linha adequadas. Estão indicadas por setas as transições de buraco pesado (HH) e leve (LH) para uma superrede (SL) ou para um poço quântico simples (SQW). Em (b) as FKO's estão indexadas ($n = 1, 2, \dots$).

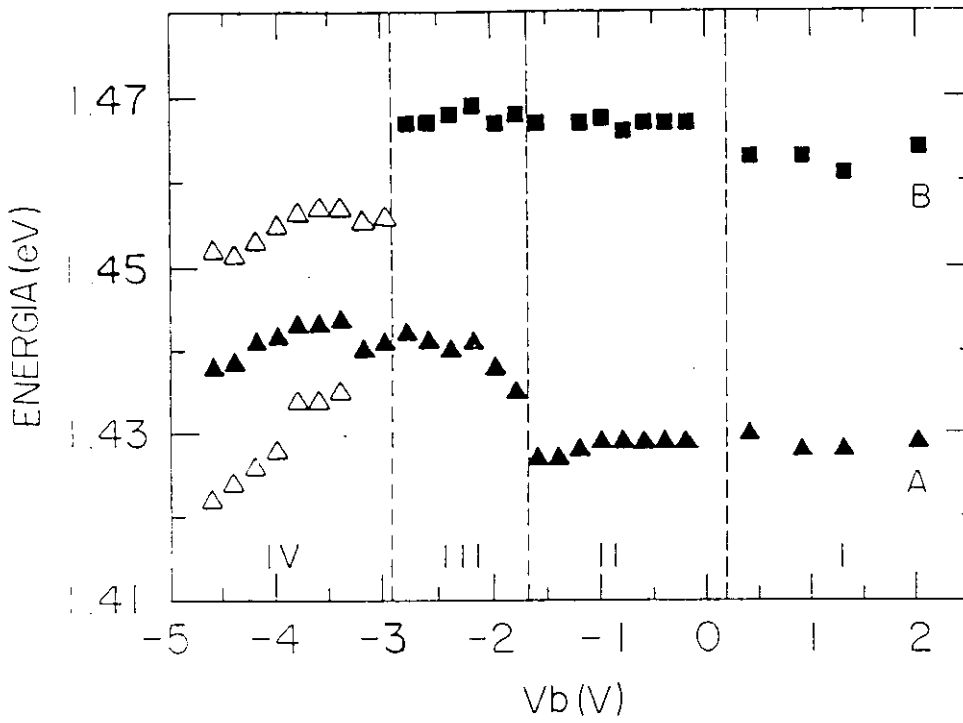


Figura IV.4: Energias das transições de buraco pesado (A) e leve (B) para cada região de voltagem aplicada.

seguinto a seqüência (capítulo III):

$$E_n = E_0^{SL} + \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{8\mu} \right)^{\frac{1}{3}} X_n \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (IV.1)$$

com

$$X_n = \left[\frac{3\pi}{2} \left(n - \frac{1}{2} \right) \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (IV.2)$$

onde e é a carga eletrônica, μ é a massa efetiva reduzida elétron-buraco e o inteiro n numera os extremos positivos e negativos das oscilações em ordem crescente de energia [vide Fig. IV.3(b)]. Graficando E_n contra V_b (inset da Fig. IV.6) podemos usar a eq. (IV.1) para obter o campo na superrede para cada valor de V_b dentro desta região, assim como o valor de E_0^{SL} (por extrapolação em $V_b = 0$). Na Fig. IV.4 plotamos E_0^{SL} (triângulos cheios) contra V_b (região II). Esta linha não apresenta dependência em V_b e se comporta como uma continuação da transição A da região I, o que é reforçado pelos espectros de PL [vide Fig. IV.5]. O valor médio de E_0^{SL} na região II está listado na tabela IV.1, e coincide com o valor calculado para II(11) de uma superrede em ausência de campos. Isto testemunha em favor da consistência de nossa interpretação.

Duas estruturas adicionais podem ser observadas no lado de altas energias das oscilações

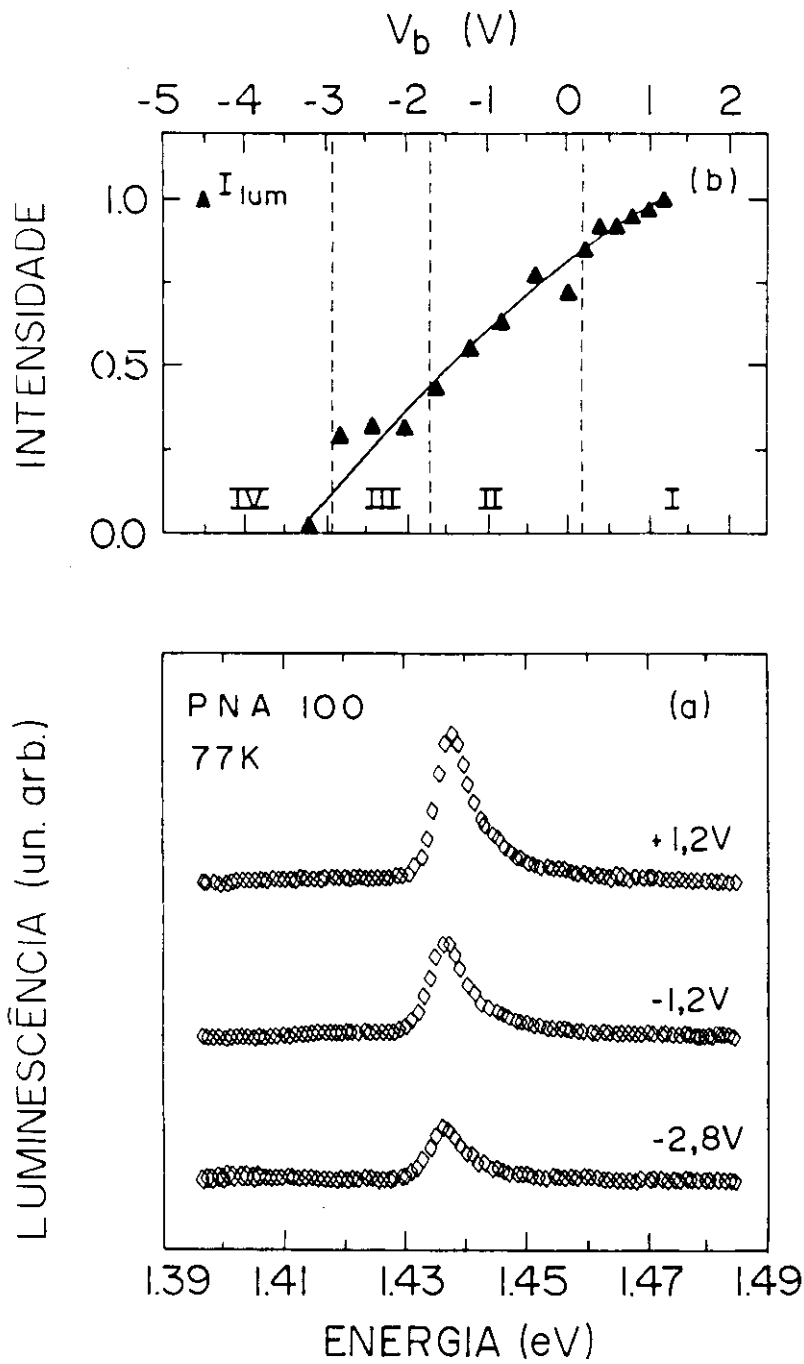


Figura IV.5: (a) Espectros representativos da fotoluminescência da amostra PNA 100 em função da voltagem de polarização (V_b). O único pico presente permanece fixo em energia mas sua intensidade diminui com o aumento da voltagem reversa. (b) Intensidade dos picos de fotoluminescência contra V_b . Vemos que a luminescência praticamente desaparece na fronteira entre as regiões III e IV (vide texto).

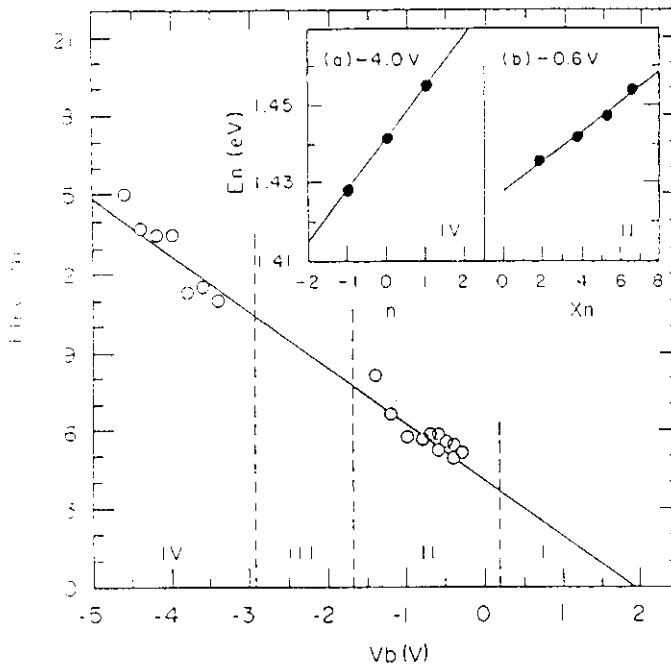


Figura IV.6: Campos elétricos obtidos a partir das eqs. (IV.1) (região II) e (IV.3) (região IV) do texto (círculos abertos). A linha reta é uma regressão linear que ajusta os pontos. Insets mostram exemplos da aplicação de (IV.1) e (IV.3) no cálculo de F .

da Fig. IV.3(b): (i) a transição da banda de condução para a de buraco leve (linha B), que persiste em energia aproximadamente constante para todos os valores de V_b e (ii) a linha de impureza comentada anteriormente. Não se descarta a possibilidade de um conjunto de FKO's associado à transição L(11) (ou B), mas a proximidade da intensa estrutura da impureza mascara as possíveis oscilações que se fariam presentes. Outra possível contribuição para esta linha seria a transição elétron-buraco pesado na borda da minibanda [Satzke 1991, Vázquez-López 1991] que, para nossa escolha de parâmetros da amostra, coincide com a energia de L(11). Entretanto, a presença de B em regiões de campo elétrico onde o conceito de minibandas não mais se aplica (região III na Fig. IV.4, discutida a seguir), reforça a idéia que essa linha é produzida principalmente pela transição de buraco leve. As energias de B para cada V_b também se encontram na Fig. IV.4, mas nem ela nem a impureza citada acima são pertinentes à discussão que segue, e não serão analisadas em detalhe.

O comportamento oscilatório desaparece bruscamente para $V_b \leq -1.7$ V. Ao aumentarmos a polarização reversa até $V_b \simeq -3.0$ V os espectros comportam-se como ilustrado na Fig. IV.3(c). Aqui apenas uma linha larga é observada na vizinhança da transição H(11) enquanto que a linha B (e a impureza) ainda aparece nos espectros, embora com amplitudes progressivamente

menores. As energias destas duas estruturas (A e B, obtidas de ajustes TDLS) estão graficadas na Fig. IV.4 (região III). O comportamento de A parece sugerir uma região de transição contínua e suave entre os regimes FKO e SWL. Novamente, a experiência de PL parece reforçar nossa interpretação, pois a transição H(11) da superrede praticamente desaparece na fronteira entre as regiões III e IV [vide Fig. IV.5(b)][¶]. Mas como um outro efeito do campo é diminuir o “overlap” entre funções de onda de elétron e buraco, qualquer conclusão sobre o mecanismo desta região de transição seria precipitada. Além disso, a descrição teórica é complicada, pois a aproximação de massa efetiva já não pode ser utilizada e a função de onda eletrônica não parece estar localizada o suficiente para que o sistema seja bem descrito por um modelo Stark-Wannier.

Finalmente, para $V_b \leq -3,0$ V, a linha A se divide em componentes [Figs. IV.3(d) e (e)], cujas posições em energia (região IV da Fig. IV.4) são bem descritas (capítulo III) por:

$$E_n = E_0^{SQW} + neFD \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (IV.3)$$

Este comportamento é característico da formação de SWL's. Ao graficarmos as estruturas dos espectros segundo a eq. (IV.3) para cada valor de V_b (veja como exemplo o inset da Fig. IV.6), obtemos o mesmo valor de E_0^{SQW} em toda a região. Este coincide muito bem com a energia calculada para a transição H(11) num poço quântico isolado (SQW, vide tabela IV.1). Os bons ajustes proporcionados pela eq. (IV.3) e a coincidência dos valores extrapolados e calculados para E_0^{SQW} mostram que esta região de campo é caracterizada por escadas de Stark-Wannier [Mendez 1988, Voisin 1988, Bleuse 1988, Mendez 1989, Satzke 1991]. Continuando a aumentar progressivamente V_b , na máxima voltagem reversa atingida ($V_b = -5,6$ V) o espectro é reduzido a uma linha simples [Fig. IV.3(f)]. A energia desta estrutura (vide tabela IV.1) coincide com o valor de E_0^{SQW} , indicando que a função de onda do elétron já está quase totalmente confinada a um único poço quântico pela ação do campo elétrico (confinamento Stark total).

Os resultados descritos acima identificam as regiões II e IV como os regimes FKO e SWL, respectivamente. Na região I, o campo não afeta essencialmente os estados da superrede, enquanto que na região III observamos a transição entre os regimes FK e SW. Na intenção de corroborar esta interpretação, calculamos a intensidade do campo elétrico, F [baseando-nos na

[¶]Como estaríamos passando de uma região onde ainda se aplica o conceito de minibandas para outra onde os poços quânticos estão desacoplados pelo efeito do campo elétrico, esperaríamos que a luminescência do limiar de absorção da superrede realmente desaparecesse.

eq. (IV.1) para II e na eq. (IV.3) para IV], e graficamo-la em função de V_b na Fig. IV.6 (círculos abertos). O campo decresce linearmente com o aumento de V_b , embora as duas regiões envolvidas sejam modeladas por aproximações diferentes. A linha reta (regressão linear para os pontos experimentais) extrapola a zero em $V_b = 1,9$ V e fornece $F = 16,2$ kV/cm em $V_b = -5,6$ V. Levando em conta a dispersão da minibanda de elétron ($\Delta = 37$ meV), nossas regiões de campo podem ser expressas em termos do campo efetivo f (definido anteriormente). Isto completa a tabela IV.1 e pode ser resumido como:

(a) $0 \leq f \leq 0,08$ define um regime no qual o efeito do campo é imperceptível e as linhas espectrais têm origem em transições ente minibandas, modificadas pela interação excitônica;

(b) $0,08 \leq f \leq 0,21$ define o regime Franz-Keldysh (campos intermediários), onde a aproximação de massa efetiva ainda pode ser utilizada;

(c) $0,21 \leq f \leq 0,29$ é um intervalo no qual a aproximação acima perde sua validade e a função de onda eletrônica ainda não está suficientemente localizada para que a situação seja bem descrita por um modelo de Stark-Wannier;

(d) $f \geq 0,29$, onde a descrição em termos de estados de Stark-Wannier é adequada e podemos observar o progressivo aumento de localização da função de onda eletrônica desde a formação das SWL's até seu confinamento total num único poço [Fig. IV.3(f)].

Embora os resultados acima talvez não sejam universalmente válidos, essa evolução passo-a-passo dos estados eletrônicos em função do campo elétrico constitui uma abordagem didática e ilustrativa, que pode servir de ponto de partida para um entendimento mais completo do assunto em todos os seus detalhes.

IV.4 Conclusões

Neste capítulo estudamos a ação de um campo elétrico sobre uma das nossas superredes semicondutoras. Mostramos que, devido à possibilidade de manipular os parâmetros estruturais, regimes de campo que não podiam ser alcançados em semicondutores “bulk” podem agora ser estudados com campos corriqueiramente obtidos em laboratório. Discutimos a primeira observação de um regime de campo intermediário nestas microestruturas, traduzido pela presença de oscilações Franz-Keldysh associadas à transição de menor energia da superrede. A seguir, a partir de uma amostra projetada para esta finalidade, estudamos os estados eletrônicos de uma

superrede de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ em função de um campo elétrico aplicado externamente. Os espectros evoluíram continuamente com o aumento do campo, passando por quatro regiões distintas: (a) uma região onde as transições da superrede não são afetadas sensivelmente pelo campo; (b) outra onde as oscilações Franz-Keldysh dominam os espectros; (c) uma região intermediária, ainda não entendida em profundidade e (d) uma de altos campos, onde as escadas de Stark-Wannier formam-se e evoluem progressivamente até um confinamento Stark total. Assim sendo, nossos dados fornecem um registro passo-a-passo da evolução dos estados eletrônicos da superrede desde um regime de campos fracos (FKO) até campos fortes (SWL), passando por uma região intermediária cuja descrição teórica ainda está por ser formulada. As nossas regiões estão definidas por intervalos de valores de um campo efetivo $f = \frac{eFD}{\Delta}$. O campo assim definido independe das características da amostra empregada no estudo. Isto nos leva a especular se a divisão encontrada é uma característica particular do sistema estudado ou, talvez, uma divisão com caráter mais universal entre regiões de validade das diversas aproximações utilizadas nas descrições de estados eletrônicos em presença de campos elétricos.

Apêndice A

Efeitos de Tensão em Semicondutores

Pode-se crescer heteroestruturas com semicondutores apresentando significativa diferença no parâmetro de rede e, mesmo assim, obter interfaces de boa qualidade[Marzin 1990]. Porém essa qualidade depende crucialmente da eficiência com que a estrutura acondicionará o descasamento dos parâmetros de rede dos diferentes materiais componentes. Se a interface apresentar alto grau de deslocamentos, ligações pendentes e outros defeitos, as “armadilhas” aí formadas não só farão com que ela seja ruim como também destruirão as propriedades ópticas da estrutura. Por outro lado, se os materiais tensionarem-se de forma que o cristal cresça com um único parâmetro de rede, sem relaxamento, as interfaces serão de ótima qualidade, de forma que é fundamental estudar os efeitos de tensões nos estados eletrônicos das heteroestruturas.

Uma pressão hidrostática aplicada a um semicondutor produz uma diminuição de seu parâmetro de rede, alterando sua estrutura de bandas e, portanto, levando a mudanças em suas propriedades ópticas e eletrônicas*. Já uma tensão uniaxial tem como efeito principal uma redução na simetria do material (e conseqüentes modificações em sua estrutura de bandas). Como estamos interessados em estudar semicondutores III-V (GaAs, InAs), a discussão que segue estará restrita a cristais com estrutura zinc-blende.

* Neste caso podem-se distinguir duas classes de efeitos provocados pela tensão: a) mudança das posições relativas das bandas, o que influencia todas as propriedades determinadas por transições interbandas (função dielétrica e outras constantes ópticas); e b) deformação de bandas individuais, o que altera a densidade de estados e, por conseguinte, a massa efetiva dos portadores[Madelung 1964].

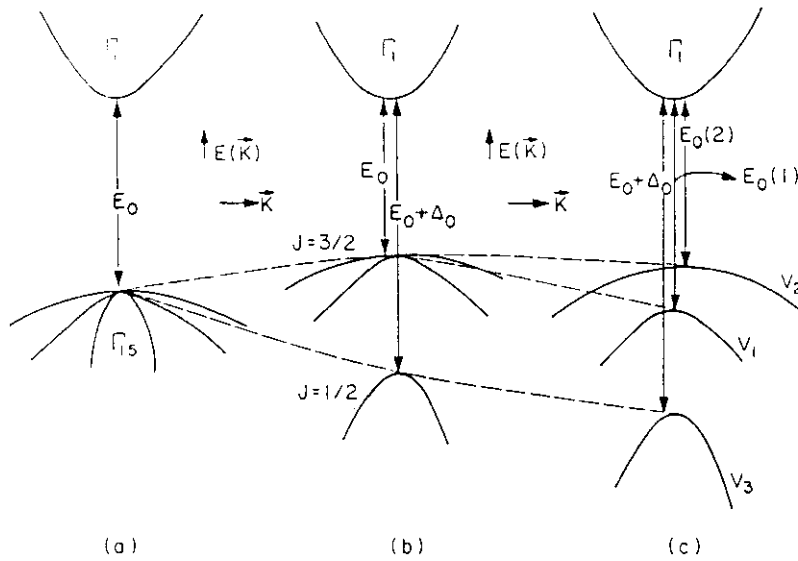


Figura A.1: Estrutura de bandas de um semiconductor de estrutura cristalina zinc-blende. (a) sem e (b) com interação spin-órbita; (c) efeito de uma tensão $\varepsilon_p < 0$ (compressão) sobre a estrutura de (b).

Efeitos de Tensão em Materiais com Simetria Cúbica

Na ausência de tensão e interação spin-órbita, a banda de valência de um semiconductor tipo zinc-blende em $k = 0$ (centro da zona de Brillouin) consiste de um multipletto de funções de onda “tipo p” 6 vezes degenerado com simetria orbital Γ_{15} [Bassani 1966]. A interação spin-órbita levanta parcialmente esta degenerescência, dando origem a um quadrupletto $p_{3/2}$ ($j = 3/2, m_j = \pm 3/2, \pm 1/2$)[†] e a um dupletto $p_{1/2}$ ($j = 1/2, m_j = \pm 1/2$). Uma pressão hidrostática altera as posições de $p_{3/2}$ e $p_{1/2}$ em relação à banda de condução Γ_1 . A quebra de simetria introduzida por uma tensão uniaxial separa o quadrupletto em dois dupletos $p_{3/2}$ ($m_j = \pm 3/2$ e $m_j = \pm 1/2$). Esta seqüência de fenômenos pode ser observada de forma esquemática na Fig. A.1. Como o objetivo deste apêndice é avaliar a contribuição da tensão para os estados eletrônicos, escrevemos nosso Hamiltoniano como[Pollak 1968]:

$$\mathcal{H}^{(\nu)} = \mathcal{H}_{so} + \mathcal{H}_{\varepsilon}^{(\nu)}, \quad (\text{A.1})$$

onde (ν) é um índice que determina a banda, \mathcal{H}_{so} é o Hamiltoniano do sistema em ausência de tensão (mas incluindo interação spin-órbita) e $\mathcal{H}_{\varepsilon}^{(\nu)}$ é o Hamiltoniano da tensão, dado por:

[†] Usaremos notação de harmônicos esféricos, onde j é autovalor de \mathbf{J} , momento angular total, e m_j é o autovalor de sua componente na direção de quantização.

$$\mathcal{H}_\varepsilon^{(\nu)} = -a^{(\nu)}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - 3b^{(\nu)} \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3} \mathbf{L}^2 \right) \varepsilon_{xx} + p.c. \right] - \frac{6d^{(\nu)}}{\sqrt{3}} \left[\frac{(L_x L_y + L_y L_x)}{2} \varepsilon_{xy} + p.c. \right]. \quad (\text{A.2})$$

Na equação acima, ε_{ij} são componentes do tensor de deformação, \mathbf{L} é o operador momento angular orbital, p.c. significa permutações cíclicas das coordenadas x, y e z, a é o potencial de deformação hidrostático e b (d) é o potencial de deformação uniaxial para simetria tetragonal (romboédrica). O tensor de deformação (ε_{ij}) se relaciona com o de tensão (X_{ij}) através da transformação[‡]:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{xx} \\ X_{yy} \\ X_{zz} \\ X_{xy} \\ X_{yz} \\ X_{zx} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

onde S_{ij} são constantes de deformação elásticas [Madelung 1964, Kittel 1971].

O sistema que estamos estudando consiste em superredes de InGaAs/GaAs crescidas sobre um substrato de GaAs com orientação (001). A diferença de parâmetros de rede ($a_{\text{InGaAs}} > a_{\text{GaAs}}$) é acomodada na forma de uma deformação biaxial no plano perpendicular à direção de crescimento (ε_p). O tensor de tensão, neste caso, se resume a

$$X_{xx} = X_{yy} = X, \quad (\text{A.4})$$

sendo que as outras componentes de \vec{X} são nulas. Usando a equação (A.3), temos

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = (S_{11} + S_{12})X = \varepsilon_p \\ \varepsilon_{zz} &= 2S_{12}X = -\Gamma\varepsilon_p \\ \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

com

[‡]A eq. (A.3) é uma representação reduzida da lei de Hooke aplicada a todas as componentes da deformação [Kittel 1971] para cristais com simetria cúbica.

$$\Gamma = -\frac{2S_{12}}{S_{11} + S_{12}} \quad (\text{A.6})$$

e

$$\varepsilon_p = \left(\frac{a - a_0}{a_0} \right), \quad (\text{A.7})$$

onde a (a_0) é o parâmetro de rede do material tensionado (em ausência de tensão). Mas como toda deformação pode ser representada pela soma de uma compressão uniforme e de uma tensão uniaxial (ou de cisalhamento)[Landau 1967], podemos reescrever o tensor $\hat{\varepsilon}$ como:

$$\hat{\varepsilon} = \frac{1}{3} (\text{tr } \hat{\varepsilon}) \hat{\mathbb{1}} + \left[\hat{\varepsilon} - \frac{1}{3} (\text{tr } \hat{\varepsilon}) \hat{\mathbb{1}} \right] = \hat{\varepsilon}_H + \hat{\varepsilon}_S$$

ou

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_p \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \varepsilon_H \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{3} \varepsilon_S \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

onde

$$\varepsilon_H = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = (2 - \Gamma)\varepsilon_p \quad (\text{A.9})$$

é a componente hidrostática e

$$\varepsilon_S = (1 + \Gamma)\varepsilon_p \quad (\text{A.10})$$

é a componente de cisalhamento (uniaxial). Numa estrutura em equilíbrio os parâmetros de rede finais de ambos os materiais são iguais. As tensões presentes em cada camada (A e B) são limitadas por dois extremos: a chamada condição “free-standing” e a condição comensurada. Na primeira, supomos que não há a mínima influência do substrato, de forma que as duas camadas estão totalmente livres para encontrar o parâmetro de rede que minimizará a energia da estrutura. Para que isso ocorra, as seguintes relações devem ser satisfeitas:

$$|\varepsilon_p^A| + |\varepsilon_p^B| = |\varepsilon_{max}| \quad (\text{A.11})$$

e

$$d_A \varepsilon_p^A + d_B \varepsilon_p^B = 0, \quad (\text{A.12})$$

onde d_A (d_B) é a espessura da camada do material A (B) e

$$|\varepsilon_{max}| = \frac{a_A^0 - a_B^0}{a_A^0}. \quad (\text{A.13})$$

Nesse caso, as tensões em cada camada são dadas por:

$$\varepsilon_p^A = \frac{d_B}{d_A + d_B} \varepsilon_{max} \quad (\text{A.14})$$

$$\varepsilon_p^B = -\frac{d_A}{d_A + d_B} \varepsilon_{max}. \quad (\text{A.15})$$

Já no caso comensurado, a estrutura manterá o mesmo parâmetro de rede que o substrato, de forma que:

$$\varepsilon_p^A = \frac{a_{SL} - a_A^0}{a_A^0} = 0 \quad (\text{A.16})$$

$$\varepsilon_p^B = \frac{a_{SL} - a_B^0}{a_B^0} = \varepsilon_{max} \quad (\text{A.17})$$

A tabela A.1 mostra os valores de ε_p^A e ε_p^B medidos para cada amostra e calculados para os dois limites acima. Todas as amostras foram crescidas comensuradas (uma vez que estamos sempre abaixo da espessura crítica do InGaAs sobre GaAs[§]), mas devido a sucessivos resfriamentos necessários para as experiências, algumas delas sofreram processo de relaxação (a amostra SLA 300, por exemplo, praticamente “descolou” do substrato, estando bem próxima da condição “free-standing”). Uma vez compreendida a origem destas deformações, estudaremos na seqüência seus efeitos a) nos fônons e b) na estrutura de bandas.

[§]A espessura crítica de um material é definida como o tamanho da camada que se consegue crescer sobre outro material sem que haja distorções, deslocamentos e defeitos do gênero (os quais praticamente “destroem” as propriedades ópticas do filme)[Orders 1987].

Tabela A.1: Valores de tensão medidos e calculados para cada amostra. Variação decorrente na energia de gap.

Amostra	$\bar{\omega}$ (cm^{-1})	$\delta\omega$ (cm^{-1})		$10^2 \varepsilon_p$		$10^2 \varepsilon_p$ (calculado)			
				experimental		FS		com.	
				A	B	A	B	A	B
SLA 100	291,2	-0,8	3,4	0,167	-0,703	0,430	-0,430	0,000	-0,860
SLA 200	290,5	-1,5	2,7	0,310	-0,558	0,430	-0,430	0,000	-0,860
SLA 300	290,7	-1,3	2,9	0,269	-0,599	0,287	-0,573	0,000	-0,860
SLB 100	291,5	-0,5	-	0,103	-1,047	0,575	-0,575	0,000	-1,146
QWC 80	-	-	-	0,000	-1,650	-	-	0,000	-1,576
TLA	287,8	-4,2	0,0	-	-	-	-	-	-
PNA 100	292,0	0,0	-4,2	0,000	-0,860	0,430	-0,430	0,000	-0,860

Efeitos de Tensão Nos Modos Vibracionais

Os fônons ópticos de cristais com estruturas tipo diamante são triplamente degenerados em $\mathbf{k} = 0$ na ausência de pressão. Já os cristais tipo GaAs (semicondutores polares, estrutura zinc-blende) apresentam uma redução de simetria devida ao campo Coulombiano, o que leva à separação entre o modo óptico de vibração longitudinal (LO) e os dois modos ópticos (degenerados) de vibração transversal (TO). As equações dinâmicas para a rede cristalina, na aproximação harmônica, são dadas por[Ganesan 1970]:

$$M_n \omega^2 U_i(lk) = \sum_{j l' m'} \hat{\Phi}_{ij}(l, m; l', m') U_j(l', m'), \quad (\text{A.18})$$

onde M_n é a massa dos íons n , ω é a frequência do modo vibracional, U_i é uma componente do deslocamento de um átomo individual e Φ_{ij} são constantes efetivas de mola. No estudo de fônons é interessante introduzir uma amplitude de deslocamento relativa de dois átomos, u_i . Isto permite eliminar as equações de coordenadas do centro de massa, de tal modo que as frequências dos três modos ópticos em $\mathbf{k} = 0$ são dadas pela solução de

$$\overline{M}\omega^2 u_i = \sum_j K_{ij} u_j, \quad (\text{A.19})$$

onde

$$K_{ij} = -2 \sum_{l'} \hat{\Phi}_{ij}(0, 1; l', 2) \quad (\text{A.20})$$

e \overline{M} é a massa reduzida de dois átomos. Os coeficientes K_{ij} podem ser expandidos em potências da deformação:

$$K_{ij} = K_{ij}^{(0)} + \sum_{lm} \varepsilon_{lm} K_{ijlm}^{(1)} + \dots, \quad (\text{A.21})$$

onde

$$K_{ij}^{(0)} = \overline{M}\omega_0^2 \delta_{ij} \quad (\text{A.22})$$

e ω_0 é a frequência de vibração da rede não deformada. Fazendo uso das eqs. (A.21) e (A.22), reescrevemos a eq. (A.19) como:

$$\overline{M}\omega^2 u_i = \overline{M}\omega_0^2 u_i + \sum_{jlm} K_{ijlm}^{(1)} \varepsilon_{lm} u_j. \quad (\text{A.23})$$

O tensor $K_{ijlm}^{(1)}$ para cristais cúbicos é invariante perante operações do grupo puntual T_d , de tal forma que terá apenas três componentes independentes:

$$\begin{aligned} K_{xxxx}^{(1)} &= K_{11} \\ K_{xxyy}^{(1)} &= K_{12} \\ K_{xyxy}^{(1)} &= K_{44}. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

As frequências das vibrações da rede deformada podem ser encaradas como perturbações em ω_0 :

$$\begin{aligned} \omega^2 &= (\omega_0 + \Delta\omega)^2 \cong \omega_0^2 + 2\omega_0\Delta\omega \\ \Delta\omega &= \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega_0}. \end{aligned}$$

Definindo um parâmetro adimensional λ dado por:

$$\lambda = \frac{2\Delta\omega}{\omega_0} = \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{\omega_0^2}, \quad (\text{A.25})$$

e introduzindo as constantes (cujos valores estão listados na tabela A.2):

$$\tilde{K}_{ij} = \frac{K_{ij}}{\omega_0^2}, \quad (\text{A.26})$$

podemos escrever a equação secular geral (A.23), válida para deformação aplicada em direção arbitrárias, como:

$$\begin{vmatrix} \tilde{K}_{11}\varepsilon_{xx} + \tilde{K}_{12}(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \lambda & 2\tilde{K}_{44}\varepsilon_{xy} & 2\tilde{K}_{44}\varepsilon_{xz} \\ 2\tilde{K}_{44}\varepsilon_{yx} & \tilde{K}_{11}\varepsilon_{yy} + \tilde{K}_{12}(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) - \lambda & 2\tilde{K}_{44}\varepsilon_{yz} \\ 2\tilde{K}_{44}\varepsilon_{zx} & 2\tilde{K}_{44}\varepsilon_{zy} & \tilde{K}_{11}\varepsilon_{zz} + \tilde{K}_{12}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{A.27})$$

Para nosso caso particular, usamos as ε_{ij} dadas pelas eqs. (A.5) e reescrevemos a eq. (A.27) como:

$$\begin{vmatrix} \tilde{K}_{11}\varepsilon_p + \tilde{K}_{12}(1 - \Gamma)\varepsilon_p - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{K}_{11}\varepsilon_p + \tilde{K}_{12}(1 - \Gamma)\varepsilon_p - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma\tilde{K}_{11}\varepsilon_p + 2\tilde{K}_{12}\varepsilon_p - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{A.28})$$

As raízes da eq. (A.28) mantêm as degenerescências originais:

$$\lambda_1 = [2\tilde{K}_{12} - \Gamma\tilde{K}_{11}] \varepsilon_p \quad (\text{LO, não degenerado}) \quad (\text{A.29})$$

$$\lambda_2 = [\tilde{K}_{11} + (1 - \Gamma)\tilde{K}_{12}] \varepsilon_p \quad (\text{TO, duplamente degenerado}). \quad (\text{A.30})$$

Usando a expressão para λ (eq. (A.25)), podemos obter a variação na frequência para cada modo, introduzida pela tensão:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0^{LO}} = \left[\frac{2\tilde{K}_{12} - \Gamma\tilde{K}_{11}}{2} \right] \varepsilon_p = \beta\varepsilon_p \quad (\text{A.31})$$

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0^{TO}} = \left[\frac{\tilde{K}_{11} + (1 - \Gamma)\tilde{K}_{12}}{2} \right] \varepsilon_p = \gamma\varepsilon_p, \quad (\text{A.32})$$

onde ω_0^{LO} (ω_0^{TO}) é a frequência de vibração do modo LO (TO) em ausência de tensão. Vemos que o efeito da tensão biaxial no espectro de fônons ópticos é traduzido como um deslocamento linear em frequência dos picos Raman da amostra. Se esta experiência for realizada em configuração “backscattering”, a simetria de espalhamento será tal que apenas o modo LO é ativo [Hayes 1978]. As ligas de InGaAs apresentam um comportamento conhecido como “two-mode behavior”, pois seu espectro de fônons apresenta estruturas do “tipo” GaAs (estão próximas às estruturas do GaAs bulk) e do “tipo” InAs (idem para o InAs). Mas como em nosso caso a fração molar de In é baixa, a intensidade do último ramo é praticamente desprezível. Se pensarmos na dispersão de fônons da superrede, temos um ramo LO do GaAs puro nas camadas de barreira e um ramo LO “tipo” GaAs nas camadas de poço, os quais se superpõem devido aos efeitos da tensão biaxial. Portanto, nossas amostras apresentam um único ramo LO (comum à superrede) [Iikawa 1988a, Iikawa 1988b, Venkateswaran 1990, Lemos 1992], o que implica em apenas uma estrutura em seu espectro Raman. A partir desta única frequência ω_{SL} podemos determinar com bastante precisão a tensão ε_p presente nas camadas de cada material. Para isso, basta utilizar a eq. (A.31) com o valor de β calculado para GaAs “bulk”[¶] e

$$\Delta\omega^{LO} = \omega_{SL}^{LO} - \omega^{LO}. \quad (\text{A.33})$$

Este método vem sendo usado com muito sucesso e rende valores de ε_p em boa concordância com os resultados obtidos a partir de medidas de difração de raios-X por duplo cristal (X-Ray Double Crystal Diffraction) [Venkateswaran 1990].

Efeitos de Tensão nos Estados Eletrônicos

Utilizaremos a representação $|j, m_j\rangle$ (que pode ser escrita em termos da base $|l, s; m, \varepsilon\rangle$)^{||}

[¶]Nos cálculos usamos o mesmo valor de β para ambos os materiais (vide tabelas A.1 e A.2), uma vez que este parâmetro varia muito pouco para pequenas concentrações de In.

^{||}A base $|l, s; m, \varepsilon\rangle$ é constituída por autoestados dos operadores \hat{L}^2 , \hat{S}^2 , \hat{L}_z e \hat{S}_z , com \mathbf{L} (\mathbf{S}) sendo o momento angular orbital (de spin). A representação $|j, m_j\rangle$ que será usada daqui por diante consiste de autovetores de \mathbf{J}^2 e J_z , onde \mathbf{J} é o momento angular total [Cohen-Tannoudji 1985]. Estes estados também podem ser escritos em termos de orbitais p (componentes x, y e z) e s , de modo a explicitar a simetria de cada autovetor [Kittel 1967].

Tabela A.2: Constantes diversas usadas no cálculo de $\delta E(\varepsilon)$.

Material	a(Å)	Γ	β	a	b	Δ_0	η	LO		
								\tilde{K}_{11}	\tilde{K}_{12}	\tilde{K}_{44}
GaAs	5,6533	0,901	1,67	-8,93	-1,73	0,341	-	-2,00	-2,70	-0,53
InAs	6,0583	1,088	1,57	-6,0	-1,8	0,380	-	-1,75	-2,33	-0,70
In _{0,12} Ga _{0,88} As	5,7019	0,901	1,67	-8,93	-1,73	0,346	-0,028	-2,00	-2,70	-0,53
In _{0,16} Ga _{0,84} As	5,7181	0,901	1,67	-8,93	-1,73	0,347	-0,038	-2,00	-2,70	-0,53
In _{0,22} Ga _{0,78} As	5,7424	0,901	1,67	-8,93	-1,73	0,350	-0,052	-2,00	-2,70	-0,53

para indicar os estados de valência e de condução dos semicondutores de estrutura zinc-blende. Sabemos que a banda de valência (Γ_{15}) é descrita por orbitais “p” e a banda de condução (Γ_1) por orbitais “s”. Na base $|j, m_j\rangle$, estes estados são escritos como:

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2}; 1, \uparrow \right\rangle && \text{HH} \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \downarrow \right\rangle \\
 \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \uparrow \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, \downarrow \right\rangle && \text{LH} \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \downarrow \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \uparrow \right\rangle && \text{(A.34)} \\
 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, \downarrow \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \uparrow \right\rangle && \text{SO} \\
 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \downarrow \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \uparrow \right\rangle,
 \end{aligned}$$

para a banda de valência (HH = buraco pesado, LH = buraco leve, SO = “spin-orbit splitting”), e

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \left| 0, \frac{1}{2}; 0, \downarrow \right\rangle$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \left| 0, \frac{1}{2}; 0, \uparrow \right\rangle. \quad (\text{A.35})$$

para a banda de condução.

Observando a forma do Hamiltoniano de tensão (eq. (A.2)), nota-se de imediato que os estados eletrônicos da banda de condução, por possuírem momento angular orbital nulo, somente serão influenciados pela parte hidrostática. Podemos então simplificar nosso estudo se escolhermos $a = a^{(\nu)} - a^{(c)}$, de tal forma a incluir também na banda de condução toda a contribuição hidrostática** da banda de valência. Feito isto, aplicamos o Hamiltoniano total para Γ_1 , dado pela eq. (A.1) com

$$\mathcal{H}_\varepsilon^{(c)} = -a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (\text{A.36})$$

nos estados degenerados (A.35) e obtemos

$$E_c = E_0 + \frac{1}{3}\Delta_0 + a(2 - \Gamma)\varepsilon_p = E_0 + \frac{1}{3}\Delta_0 + \delta E_c(\varepsilon). \quad (\text{A.37})$$

Para a banda de valência, $\mathcal{H}_\varepsilon^{(\nu)}$ contém apenas a componente de cisalhamento††. Da mesma forma que antes, aplicamos o Hamiltoniano total para a banda de valência, dado pela eq. (A.1) com

$$\mathcal{H}_\varepsilon^{(\nu)} = -3b^{(\nu)} \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3}\mathbf{L}^2 \right) \varepsilon_{xx} + p.c. \right] - \frac{6d^{(\nu)}}{\sqrt{3}} \left[\frac{(L_x L_y + L_y L_x)}{2} \varepsilon_{xy} + p.c. \right] \quad (\text{A.38})$$

nos estados (A.34) e obtemos o sistema‡‡

$$\mathcal{H}^{(\nu)} = \begin{bmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \frac{1}{3}\Delta_0 - \eta & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}\Delta_0 + \eta & \sqrt{2}\eta \\ 0 & \sqrt{2}\eta & -\frac{2}{3}\Delta_0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.39})$$

onde

**Vide eq. (A.8) para componentes de $\hat{\varepsilon}_H$.

††Vide eq. (A.8) para componentes de $\hat{\varepsilon}_S$.

‡‡Todas as bandas apresentam degenerescência de Kramers (a qual não é levantada pela tensão): a matriz para os m_j negativos é idêntica a (A.39).

$$\eta = b(1 + \Gamma)\varepsilon_p. \quad (\text{A.40})$$

Diagonalizando a matriz do subespaço $m_j = \frac{1}{2}$,

$$\begin{aligned} E_{v2} = E_v\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) &= E_v^h = \frac{1}{3}\Delta_0 - \eta \\ E_{v1} = E_v\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) &= E_v^l = -\frac{1}{6}\Delta_0 + \frac{1}{2}\eta + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 - 2\eta\Delta_0 + 9\eta^2} \\ E_{v3} = E_v\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= E_v^{so} = -\frac{1}{6}\Delta_0 + \frac{1}{2}\eta - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 - 2\eta\Delta_0 + 9\eta^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

onde E_v^h (E_v^l) é a energia da banda de buraco pesado (leve) e E_v^{so} é o mesmo para a banda “split-off”. Como em nosso caso $|\eta| \ll \Delta_0$, podemos expandir a raiz quadrada presente em (A.41) em potências de $\frac{\eta}{\Delta_0}$, o que nos leva a:

$$\begin{aligned} E_v^h &= \frac{1}{3}\Delta_0 - \eta = \frac{1}{3}\Delta_0 + \delta E_v^h(\varepsilon) \\ E_v^l &= \frac{1}{3}\Delta_0 + \eta + \frac{2\eta^2}{\Delta_0} + \dots = \frac{1}{3}\Delta_0 + \delta E_v^l(\varepsilon) \\ E_v^{so} &= -\frac{2}{3}\Delta_0 - \frac{2\eta^2}{\Delta_0} + \dots = -\frac{2}{3}\Delta_0 + \delta E_v^{so}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Pode-se notar pela eq. (A.39) que a tensão não acopla o estado $\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle$ aos outros restantes. Isto é traduzido pela dependência linear de $\delta E_v^h(\varepsilon)$ com ε . O mesmo não ocorre com os estados de $m_j = \frac{1}{2}$, onde os termos não diagonais (que indicam uma repulsão entre essas bandas) são responsáveis pela não-linearidade de $\delta E_v^l(\varepsilon)$ e $\delta E_v^{so}(\varepsilon)$. A tabela A.1 mostra valores de Γ , β , Δ_0 e η relativos à nossa amostra. Uma vez que $\frac{\eta}{\Delta_0} \cong 0,08$, a aproximação utilizada nesta seção (expansão até η^2) é adequada. Os valores para os δE 's obtidos experimentalmente para todas as amostras da tabela I.1 estão listados na tabela A.3.

Tabela A.3: Valores experimentais dos δE 's (para cada camada constituinte) das amostras da tabela I.1, segundo as eqs. (A.37) e (A.42). do texto e tabelas A.1 e A.2. As duas últimas colunas mostram os valores da variação nos gaps de buracos pesado e leve devida à tensão biaxial.

Amostra	δE_c (meV)		δE_v^h (meV)		δE_v^l (meV)		δE_0^h (meV)		δE_0^l (meV)	
	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B
QWC 80	0,0	161,9	0,0	54,3	0,0	-37,4	0,0	107,6	0,0	199,3
SLA 300	-26,4	58,8	-8,8	19,7	9,3	-17,5	-17,6	39,1	-35,7	76,3
SLA 200	-30,4	54,8	-10,1	18,4	10,6	-16,5	-20,3	36,4	-41,0	71,3
SLA 100	-16,4	69,0	-5,5	23,2	5,7	-20,0	-10,9	45,8	-22,1	89,0
SLB 100	-10,1	102,8	-3,4	34,4	3,5	-27,7	-6,7	68,4	-13,6	130,5
PNA 100	0,0	84,4	0,0	28,5	0,0	-23,7	0,0	55,9	0,0	108,1

Apêndice B

O Modelo de Bastard para Heteroestruturas

O presente modelo é bem conhecido na literatura e foi desenvolvido por Bastard[Bastard 1981, Bastard 1982] para descrever os estados eletrônicos de superredes com base no modelo de Kane da dispersão “bulk” de seus materiais constituintes. Este modelo é válido quando os últimos têm seu gap no centro da zona de Brillouin e a parte periódica da função de Bloch em ambos os materiais é similar. O portador é, então, descrito dentro da aproximação de massa efetiva mediante uma função envelope $\chi(z)$ que varia lentamente (em escala atômica). Nesta descrição o problema se resume a encontrar as condições de contorno que essas funções envelope devem satisfazer nas interfaces, que são: continuidade simples das funções e continuidade de sua derivada pesada pela massa efetiva da camada:

$$\chi_A(z) = \chi_B(z) \quad (\text{B.1})$$

e

$$\frac{1}{\mu_A(E, z)} \frac{d\chi_A(z)}{dz} = \frac{1}{\mu_B(E, z)} \frac{d\chi_B(z)}{dz}. \quad (\text{B.2})$$

onde $\mu(E, z)$ é a massa efetiva dependente da energia que aparece no modelo de Kane quando as relações de dispersão podem ser escritas da forma[Bastard 1989]:

$$E = \frac{\hbar^2 k_A^2}{2\mu_A(E)} \quad (\text{B.3})$$

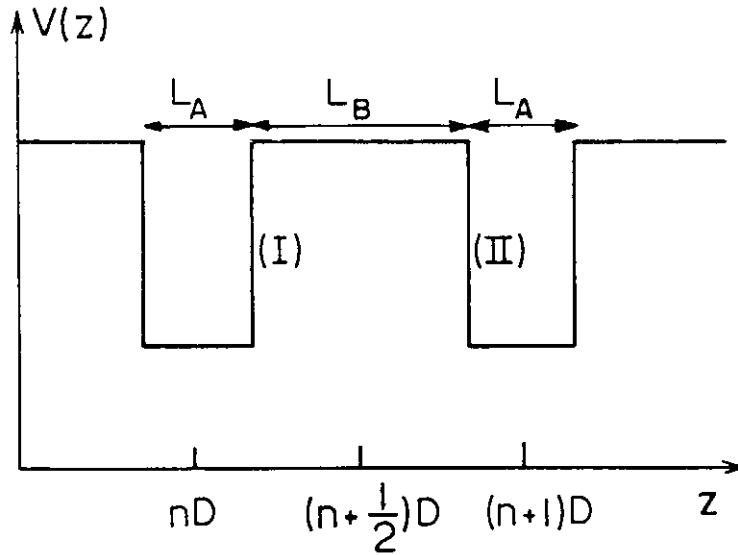


Figura B.1: Perfil de potencial de um segmento de uma superrede, constituída por uma seqüência infinita de poços quânticos.

e

$$E = \frac{\hbar^2 k_B^2}{2\mu_B(E)}. \quad (\text{B.4})$$

Para uma superrede com poços (barreiras) de largura L_A (L_B) (vide Fig. B.1), a periodicidade presente requer que sejam satisfeitas as condições (B.1) e (B.2) para apenas duas interfaces, levando a um sistema de quatro equações lineares. Estas só podem ser satisfeitas se o determinante da matriz associada ao sistema for zero, o que nos leva à relação de dispersão da superrede:

$$\cos(qD) = \cos(k_A L_A) \cos(k_B L_B) - \frac{1}{2} \left(\xi + \frac{1}{\xi} \right) \sin(k_A L_A) \sin(k_B L_B) \quad (\text{B.5})$$

com

$$\xi = \frac{k_A}{\mu_A(E)} \frac{\mu_B(E)}{k_B}, \quad (\text{B.6})$$

onde q é o vetor da minizona de Brillouin da estrutura, D é o período da superrede e os k 's estão definidos pelas eqs. (B.3) e (B.4). No caso de estados ligados dentro dos poços, as funções envelope da barreira se propagam evanescentemente, o que significa que k_B é imaginário. Fazendo $k_B = i\kappa_B$ nas equações acima, temos:

$$\cos(qD) = \cos(k_A L_A) \cosh(\kappa_B L_B) - \frac{1}{2} \left(-\tilde{\xi} + \frac{1}{\tilde{\xi}} \right) \sin(k_A L_A) \sinh(\kappa_B L_B) \quad (\text{B.7})$$

com

$$\tilde{\xi} = i \frac{k_A m_B}{m_A \kappa_B}. \quad (\text{B.8})$$

Os k 's carregam a informação fundamental do sistema, a altura da barreira que confina os portadores, definida para cada um deles como:

$$V_e = \Delta E_c = Q \Delta E_g^h \quad (\text{B.9})$$

$$V_h = \Delta E_v^h = (1 - Q) \Delta E_g^h \quad (\text{B.10})$$

$$V_l = \Delta E_v^l = \Delta E_g^l - \Delta E_c, \quad (\text{B.11})$$

onde os ΔE_g 's foram calculados com base nos δE 's do apêndice A e estão listados na tabela B.1.

Os níveis de energia dos poços da superrede (que denominaremos λ^e , λ^h e λ^l) são calculados, para um Q fixo, usando o V_i conforme as eqs. (B.10) e os valores para as massas efetivas para cada banda*. Para tanto, fixamos q para o centro da minizona e encontramos as raízes da eq. (B.7) pelo conhecido método das secantes[Ruggiero 1987]. Variando Q e compondo a energia das transições como:

$$E_{ij} = E_0 + \delta E_0 + \lambda_i^h + \lambda_j^e, \quad (\text{B.12})$$

ficamos com curvas das energias de todas as transições da superrede em função de Q , para um determinado ponto de alta simetria da minizona de Brillouin da estrutura. Estas curvas

*Embora o modelo inclua uma massa dependente da energia, o sistema InGaAs/GaAs não apresenta não-parabolicidades marcantes, de modo que podemos usar as massas efetivas constantes listadas na tabela B.2.

Tabela B.1: Diferenças de gap para buracos pesado e leve. Valores finais para V_e , V_h e V_l , após a determinação do parâmetro de descasamento Q .

Amostra	ΔE_g^h	ΔE_g^l	V_e	V_h	V_l
	(meV)		(meV)		
QWC 80	227	136	136,2	90,8	-10,0
SLA 300	126	70	75,6	50,4	-5,6
SLA 200	126	70	75,6	50,4	-5,6
SLA 100	126	71	75,6	50,4	-4,6
SLB 100	163	93	97,8	70,2	-4,8
PNA 100	126	74	75,6	50,4	-1,6

Tabela B.2: Massas efetivas utilizadas no cálculo dos λ 's.

Material	m_e	$m_h h$	$m_l h$
	(un. massa eletrônica)		
GaAs	0,067	0,45	0,087
InAs	0,024	0,44	0,026
$\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$	0,062	0,44	0,080
$\text{In}_{0,16}\text{Ga}_{0,84}\text{As}$	0,060	0,44	0,077
$\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}$	0,058	0,44	0,074

Tabela B.3: Energias dos níveis confinados para cada amostra e cada tipo de portador, em meV. Pode-se ter idéia da dispersão de minibandas comparando as energias de um mesmo nível nos pontos Γ e π . Alguns dos níveis $n = 2$ não estão confinados.

λ 's	QWC 80	SLA 300	SLA 200	SLA 100	SLB 100	PNA 100
$\lambda_1^e(\Gamma)$	40,1	8,7	21,6	31,4	40,9	31,4
$\lambda_1^e(\pi)$	nd ^(a)	9,1	24,2	69,1	73,7	69,1
$\lambda_1^h(\Gamma)$	8,3	1,7	5,3	14,0	15,1	14,0
$\lambda_1^h(\pi)$	nd	1,7	5,3	15,0	15,8	15,0
$\lambda_1^i(\Gamma)$	3,0	3,0	3,2	2,0	2,5	1,0
$\lambda_2^e(\Gamma)$	136,8	36,1	–	–	–	–
$\lambda_2^e(\pi)$	nd	33,1	69,4	–	–	–
$\lambda_2^h(\Gamma)$	32,3	6,6	20,8	–	59,1	–
$\lambda_2^h(\pi)$	nd	6,6	20,7	46,3	51,8	46,3

^(a) não há dispersão (poço isolado).

podem ser comparadas com os valores experimentais de espectroscopia de modulação para que possamos não só identificar as estruturas espectrais mas também determinar o Q para a amostra. Fixando q na borda da minizona ($q = \pi/D$; $D = L_A + L_B$), repetimos o procedimento acima e obtemos as E_{ij} de transições de ponto π . O cálculo das minibandas para as amostras é obtido ao se variar q (mantendo fixo o Q final) desde $k_z = 0$ até $k_z = \pi/D$. Estes $\lambda(k_z)$ podem ser vistos em algumas figuras do capítulo II. Os λ 's calculados com os Q 's determinados estão listados na tabela B.3.

Referências

- [Arent 1989] D. J. Arent, D. Deneffe, C. van Hoof, J. Deboeck and E. Borgms, *J. Appl. Phys* 66, 1739 (1989).
- [Ashcroft 1976] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “*Solid State Physics*” (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- [Aspnes 1966] D. E. Aspnes, *Phys. Rev.* 147, 554 (1966).
- [Aspnes 1970a] D. E. Aspnes, *Solid State Commun.* 8, 267 (1970).
- [Aspnes 1970b] D. E. Aspnes and J. D. Rowe, *Solid State Commun.* 8, 1145 (1970).
- [Aspnes 1970c] D. E. Aspnes and A. Frova, *Phys. Rev. B* 2, 1037 (1970).
- [Aspnes 1972a] D. E. Aspnes and J. E. Rowe, *Phys. Rev. B* 5, 4022 (1972).
- [Aspnes 1972b] D. E. Aspnes, *Phys. Rev. Lett.* 28, 168 (1972).
- [Aspnes 1972c] D. E. Aspnes and N. Bottka, “*Semiconductors and Semimetals*” Vol. 9, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic Press, New York 1972).
- [Aspnes 1973a] D. E. Aspnes, ^{Phys. Rev.} ~~Surf. Sci.~~ *B* 10, 4228 (1973).
- [Aspnes 1973b] D. E. Aspnes and A. A. Studna, *Phys. Rev. B* 7, 4605 (1973).
- [Aspnes 1980] D. E. Aspnes em “*Handbook on Semiconductors*”, editado por T. S. Moss (North Holland, Amsterdam 1980) p. 109.

- [Bassani 1966] F. Bassani, “*Semiconductors and Semimetals*”, editado por R. K. Willardson e A. C. Beer (Academic Press, 1966), vol. 1, cap. 2, apresenta um tratamento das bandas em função de representações irredutíveis de grupos de simetria.
- [Bastard 1981] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 5693 (1981).
- [Bastard 1982] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 25, 7584 (1982).
- [Bastard 1989] G. Bastard, “*Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*” (Les Éditions de Physique, France 1989).
- [Bleuse 1988] J. Bleuse, G. Bastard and P. Voisin, *Phys. Rev. Lett.* 60, 220 (1988).
- [Brierley 1990] S. K. Brierley and D. S. Lehr, *J. Appl. Phys.* 67, 3878 (1990).
- bibitem[Callaway 1963]14b J. Callaway, *Phys. Rev.* 130, 549 (1963).
- [Cardona 1969] M. Cardona, “*Modulation Spectroscopy*”, Solid State Physics Suppl. 11, editado por Seitz e Turnbull (Academic Press, New York 1969). Este livro traz uma revisão compreensível da história, das técnicas experimentais e de resultados obtidos até a época.
- [Cerdeira 1969] F. Cerdeira and M. Cardona, *Solid State Commun.* 7, 879 (1969).
- [Cerdeira 1990] F. Cerdeira, C. Vázquez-López, E. Ribeiro, P. A. M. Rodrigues, V. Lemos, M. A. Sacilotti and A. P. Roth, *Phys. Rev. B* 42, 9480 (1990).
- [Chemla 1983] D. S. Chemla, T. C. Damen, B. A. B. Miller, A. C. Gossard and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 42, 864 (1983).
- [Chu 1987] H. Chu and Y. C. Yang, *Phys. Rev. B* 36, 2946 (1987).
- [Cohen-Tannoudji 1985] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, “*Quantum Mechanics*”, vol. II, cap. X e complementos, onde detalhes sobre a soma de momentos angulares envolvendo as bases citadas podem ser encontrados.
- [Dawson 1983] P. Dawson, G. Duggan, H. I. Ralph and K. Woodbridge, *Phys. Rev. B* 28, 7381 (1983).

- [Dow 1976] J. D. Dow em “*Optical Properties of Solids: New developments*”, editado por B. O. Seraphin (North Holland, Amsterdam 1976) p. 33.
- [Elliot 1957] R. J. Elliot, *Phys. Rev.* 108, 1384 (1957).
- [Franz 1958] W. Franz, *Z. Naturforsch.* 13a, 484 (1958).
- [Fu 1989] Y. Fu and K. A. Chao, *Phys. Rev. B* 40, 8349 (1989).
- [Ganesan 1970] S. Ganesan, A. A. Maradudin and J. Oitmaa, *Annals of Physics* 56, 556 (1970).
- [Glembocki 1989] O. J. Glembocki and B. V. Shanabrook, *Superlattices and Microstructures* 3, 235 (1987); *ibid.* 5, 603 (1989).
- [Goetz 1983] K. H. Goetz, D. Bimberg, H. Jürgensen, J. Selder, A. V. Solomonov, G. F. Glinskii and M. Razegi, *J. Appl. Phys* 54, 4543 (1983)
- [Hayes 1978] W. Hayes and R. Loudon, “*Scattering of Light by Crystals*” (John Wiley & Sons, 1978), p.167.
- [Hoof 1989] C. van Hoof, K. Deneffe, J. De Boeck, D. J. Arendt and J. Borghs, *Appl. Phys. Lett.* 54, 608 (1989).
- [Houston 1940] W. V. Houston, *Phys. Rev.* 57, 184 (1940).
- [Hove 1953] L. van Hove, *Phys. Rev.* 89, 1189 (1953).
- [Iikawa 1988a] F. Iikawa, F. Cerdeira, C. Vázquez-López, P. Motisuke, M. A. Sacilotti, A. P. Roth and R. A. Masut, *Phys. Rev. B* 38, 8473 (1988).
- [Iikawa 1988b] F. Iikawa, F. Cerdeira, C. Vázquez-López, P. Motisuke, M. A. Sacilotti, A. P. Roth and R. A. Masut, *Solid State Commun.* 68, 1397 (1988).
- [Ji 1987] G. Ji, D. Huang, U. K. Reddy, T. S. Henderson, R. Houdré and H. Morkoç, *J. Appl. Phys.* 62, 3366 (1987).
- [Ji 1989] G. Ji, W. Dobbelaere, D. Huang and H. Morkoç, *Phys. Rev. B* 39, 3216 (1989).
- [Joyce 1988] M. J. Joyce, M. J. Johnson, M. Gal and B. F. Usher, *Phys. Rev. B* 38, 10978 (1988).

- [Kangarlu 1986] A. Kangarlu, H. R. Chandrasekhar, M. Chandrasekhar, F. A. Chambers, B. A. Vojak and J. M. Meese, *Superlattices and Microstructures* 2, 569 (1986).
- [Keldysh 1958] L. V. Keldysh, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* 34, 1138 (1958) [*Sov. Phys. JETP* 34, 788 (1958)].
- [Kittel 1967] C. Kittel, *“Théorie Quantique du Solide”* (Dupod, 1967), p.300.
- [Kittel 1971] C. Kittel, *“Introduction to Solid State Physics”* (John Wiley & Sons, 1986).
- [Ksendzov 1990] A. Ksendzov, H. Shen, F. H. Pollak and D. P. Bour, *Surf. Sci.* 228, 326 (1990); *Solid State Commun.* 73, 11 (1990).
- [Landau 1967] L. Landau et E. Lifshitz, *“Théorie de L’Élasticité”* (Éditions Mir, 1967), p.19.
- [Landau 1985] L Landau e E. Lifshitz, *“Mecânica Quântica”* (Mir, Moscou 1974, tradução brasileira Moscou 1985).
- [Lemos 1992] V. Lemos, C. K. Inoki, F. Cerdeira, T. Ritter and B. Weinstein, *Solid State Commun.*, submitted.
- [Madelung 1964] O. Madelung, *“Physics of III-V Compounds”* (John Wiley & Sons, 1964).
- [Marques 1992] G. E. Marques, A. M. Cohen, P. A. M. Rodrigues, F. Iikawa, P. Motisuke and F. Cerdeira, *Proceedings of the 19th International Conference on the Physics of Semiconductors*, in print.
- [Marzin 1985] J. Y. Marzin, M. H. Charasse and B. Sermage, *Phys. Rev. B* 31, 8298 (1985).
- [Marzin 1990] J. Y. Marzin, J. M. Gérard, P. Voisin and J. A. Brum in *Strained-Layer Superlattices: Physics*, vol. 32 (editado por T. P. Pearsall) da série *Semiconductors and Semimetals*, editada por R. K. Willardson e A. C. Beer (Academic Press 1990).
- [Mendez 1988] E. E. Mendez, F. Agulló-Rueda and J. M. Hong, *Phys. Rev. Lett.* 60, 2426 (1988).
- [Mendez 1989] E. E. Mendez and F. Agulló-Rueda, *J. Lumin.* 44, 223 (1989).
- [Menendez 1987] J. Menendez, A. Pinczuk, D. J. Werder, S. K. Sputz, R. C. Miller, D. L. Sivco and Y. Cho, *Phys. Rev. B* 36, 8165 (1987).

- [Meynadier 1987] M. H. Meynadier, R. E. Nahory and M. C. Tamargo, *Solid State Commun.* **63**, 463 (1987).
- [Miller 1980] R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. A. Norland and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **22**, 863 (1980).
- [Miller 1982] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, D. J. Eilemberger, P. W. Smith, A. C. Gossard and W. T. Tsang, *Appl. Phys. Lett.* **41**, 679 (1982).
- [Miller 1985] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Woud and C. A. Burrus, *Phys. Rev. B* **32**, 1043 (1985).
- [Orders 1987] P. J. Orders and B. F. Usher, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 980 (1987).
- [Pan 1988] S. H. Pan, H. Shen, Z. Hang, F. H. Pollak, W. Zhuang, Q. Xu, A. P. Roth, R. A. Masut, C. Lacelle and D. Morris, *Phys. Rev. B* **38**, 3375 (1988).
- [Parayanthal 1986] P. Parayanthal, H. Shen, F. H. Pollak, O. J. Glembocki, B. V. Shanabrook and W. T. Beard, *Appl. Phys. Lett.* **48**, 1261 (1986).
- [Phillips 1956] J. C. Phillips, *Phys. Rev.* **104**, 1263 (1956).
- [Pollak 1968] F. H. Pollak and M. Cardona, *Phys. Rev.* **172**, 816 (1968).
- [Pollak 1989] F. H. Pollak, *Superlattices and Microstructures* **6**, 203 (1989).
- [Pollak 1991] F. H. Pollak, *Superlattices and Microstructures* **10**, 333 (1991).
- [Reddy 1989] U. K. Reddy, G. Ji, T. Henderson, D. Huang, R. Houdré and H. Morkoç, *J. Vac. Sci. Technol. B* **7**, 1106 (1989).
- [Ribeiro 1990] E. Ribeiro, C. Vázquez-López, F. Cerdeira, P. Motisuke, M. A. Sacilotti and A. P. Roth, *Proceedings of the Fifth Brazilian School on Semiconductor Physics*, ed. J. R. Leite (World Scientific, Singapore 1990).
- [Roth unp.] A. P. Roth, R. A. Masut, M. A. Sacilotti and B. Watt (unpublished)
- [Ruggiero 1987] M. A. G. Ruggiero e V. L. R. Lopes, em “*Cálculo Numérico, Aspectos Teóricos e Computacionais*” (Mc. Graw-Hill, São Paulo 1987).

- [Satzke 1991] K. Satzke, G. Weiser and W. Stoltz, *Phys. Rev. B* 43, 2263 (1991)
- [Seraphin 1972] B. O. Seraphin, “*Optical Properties of Solids*”, editado por Abeles (North Holland, Amsterdam 1972).
- [Shanabrook 1987] B. V. Shanabrook, O. J. Glembocki and T. Beard, *Phys. Rev. B* 5, 2540 (1987).
- [Shen 1986] H. Shen, P. Parayanthal, F. H. Pollak, M. Tomkiewicz, T. J. Drummond and J. N. Schulman, *Appl. Phys. Lett.* 48, 653 (1986).
- [Shen 1987] H. Shen, S. H. Pang, F. H. Pollak, M. Dutta and T. R. AuCoin, *Phys. Rev. B* 36, 9384 (1987).
- [Shen 1990] S. C. Shen, X. M. Fang and W. Fang, in *Proceedings of The 20th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Thessaloniki, Greece, 1990, edited by E. M. Anastassakis and J. D. Joannopoulos (World Scientific, Singapore, 1990), p. 921.
- [Smith 1961] R. A. Smith, “*Wave Mechanics of Crystalline Solids*” (Chapman & Hal, London 1961).
- [Soucail 1990a] B. Soucail, N. Dupuis, R. Ferreira, P. Voisin, A. P. Roth, D. Morris, K. Gibb and C. Lacelle, *Phys. Rev. B* 41, 8568 (1990).
- [Soucail 1990b] B. Soucail, R. Ferreira, P. Voisin, A. P. Roth, D. Morris, K. Gibb and C. Lacelle, in *Proceedings of The 20th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Thessaloniki, Greece, 1990, edited by E. M. Anastassakis and J. D. Joannopoulos (World Scientific, Singapore, 1990), p. XXX
- [Sturge 1962] M. D. Sturge, *Phys. Rev.* 127, 768 (1962).
- [Sydor 1989] M. Sydor, J. Angelo, J. J. Wilson, W. C. Mitchel and M. Y. Yen, *Phys. Rev. B* 40, 8473 (1989).
- [Vázquez-López 1991] C. Vázquez-López, E. Ribeiro, F. Cerdeira, P. Motisuke, M. A. Sacilotti and A. P. Roth, *J. Appl. Phys.* 69, 7836 (1991).
- [Venkateswaran 1990] U. D. Venkateswaran, T. Burnett, L. J. Cui, M. Li, B. A. Weinstein, H. M. Kim, C. R. Wie, K. Elcess, C. G. Fonstad and C. Mailhot, *Phys. Rev. B* 42, 3100 (1990).

- [Voisin 1988] P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Alibert and A. Regreny, *Phys. Rev. Lett.* 61, 1639 (1988).
- [Wannier 1960a] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* 117, 432 (1960).
- [Wannier 1960b] G. H. Wannier, “*Elements of Solid State Theory*” (University Press, Cambridge 1960).
- [Wannier 1962] G. H. Wannier, *Rev. Mod. Phys.* 34, 645 (1962).
- [Wannier 1969] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* 181, 1364 (1969).
- [Weinstein 1970] F. C. Weinstein, J. D. Dow and B. Y. Lao, *Phys. Rev. B* 4, 1037 (1970).
- [Williardson 1972] O volume 9 da série “*Semiconductors and Semimetals*”, editada por R. K. Williardson e A. C. Beer (Academic Press, New York 1972) contém vários artigos sobre o assunto.
- [Yu 1989] P. W. Yu, G. D. Sanders, R. Evans, D. C. Reynolds, K. K. Bajaj, C. E. Stutz and R. L. Jones, *Appl. Phys. Lett.* 54, 2230 (1989).
- [Zak 1968a] J. Zak, *Phys. Rev.* 168, 686 (1968).
- [Zak 1968b] J. Zak, *Phys. Rev. Lett.* 20, 1477 (1968).
- [Zak 1969] J. Zak, *Phys. Rev.* 181, 1366 (1969).
- [Zener 1934] C. Zener, *Proc. Roy. Soc. A* 145, 523 (1934).