

Este exemplar corresponde à redação final da
tese de mestrado defendida pelo aluno Alessandra
Abdala Ribeiro e aprovada pela comissão Julgadora
03/06/97 Fernando Cerdeira

Anisotropia Óptica em Poços
Quânticos de InGaAs crescidos
por MBE sobre substratos de
GaAs com orientação [113]

Alessandra Abdala Ribeiro

Orientador: Fernando Cerdeira

Tese apresentada no Instituto de
Física "Gleb Wataghin" da Uni-
versidade Estadual de Campinas
(UNICAMP), com parte dos req-
uisitos para a obtenção do título
de mestre em Física.

Campinas, abril de 1997.

UNIDADE	IFGW/1997
N.º CHAMADA:	UNICAMP
	R3540
V.	Ex
IMPRESSÃO	31243
PROG.	28197
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	25/07/97
N.º CPDC	M.99297-4

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW- UNICAMP**

R354a

Ribeiro, Alessandra Abdala

Anisotropia óptica em poços quânticos de InGaAs crescidos por MBE sobre substratos de GaAs com orientação [113] / Alessandra Abdala Ribeiro. - Campinas, SP: [s.n.], 1997.

Orientador: Fernando Cerdeira.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Anisotropia. 2. Poços quânticos. 3. * Heteroestruturas. I. Fernando Cerdeira. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE MESTRADO
ALESSANDRA ABDALA RIBEIRO

DATA: 20.05.97

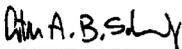
BANCA EXAMINADORA:



- Prof. Dr. FERNANDO CERDEIRA (Orientador)



- Prof. Dr. AYRTON ANDRÉ BÉRNUSSI



- Prof. Dr. PETER ALEXANDER BLEINROTH SCHULZ

**À minha mãe Miriam e
ao Gustavo**

Agradecimentos

Ao Prof. Fernando Cerdeira pela idéia que levou a esse trabalho, assim com por sua paciência e orientação ao longo desses dois anos.

À Professora Íris Torriani, pela assistência no trabalho desenvolvido para a caracterização estrutural das amostras.

Aos Professores Peter Schulz, Fernando Iikawa e Luiz E. Oliveira pelas sugestões e críticas muito importantes para a finalização deste trabalho.

Aos amigos e colegas de trabalho Evaldo Ribeiro e Marcos Araújo, por tudo o que me ensinaram, pelo apoio e pela amizade.

Ao Gustavo, por todo apoio, incentivo, paciência, compreensão e ajuda nos momentos mais críticos e decisivos deste trabalho.

À Lene, nossa querida secretária, por toda a amizade e ajuda.

Aos secretários da CPG, pela infinita paciência e por toda a ajuda burocrática.

Ao CNPq, à Comissão de Pós-Graduação do IFGW, e à FAEP pelo auxílio financeiro no decorrer deste trabalho.

Aos amigos, ao meu pai Aluizio e à todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

Muito Obrigada!

Abstract

Growth of Quantum Wells on substrates with non-symmetric orientations $[11N]$, $N \neq 1$, is sometimes used in the fabrication of quantum wires. The anisotropy in the optical properties (Reflectivity, absorption, photoluminescence, etc) for light polarized along or perpendicular to the quantum wire has been proposed as a quantitative indicator of the degree of lateral confinement in these structures. Here we study the modulated reflectivity of non-corrugated $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ quantum wells grown by MBE on $[113]$ GaAs substrates. Strong anisotropies are found, in spite of the absence of corrugation or quantum wire formation in our samples. The degree of this anisotropy is strongly dependent on the width of the 2D quantum wells. Analysing our results in the light of previously existing theoretical studies we conclude that the formation of quantum wires is not necessary for the appearance of these optical anisotropies and, consequently, that this anisotropy cannot be used as an indicator of lateral confinement, unless the growth axis is chosen along a symmetry direction such as $[001]$ or $[111]$.

Resumo

Crescimento de poços quânticos em substratos com orientação ao longo de direções não simétricas $[11N]$, $N \neq 1$, é às vezes usado na fabricação de fios quânticos. A anisotropia nas propriedades ópticas (refletividade, absorção, fotoluminescência, etc) para luz polarizada ao longo e perpendicular ao fio quântico foi proposta como um indicador quantitativo do grau de confinamento lateral nessas estruturas. Aqui nós estudamos a refletividade modulada de poços quânticos de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ crescidos por MBE em substratos $[113]$ de GaAs. Fortes anisotropias são encontradas, apesar da ausência de corrugação ou da formação de fios quânticos em nossas amostras. O grau de anisotropia é fortemente dependente da largura dos poços 2D. Analisando nossos resultados sob o ponto de vista de estudos teóricos já existentes, concluímos que a formação de fios quânticos não é necessária para a aparição de anisotropia óptica e, como consequência, essa anisotropia óptica não pode ser usada como um indicador de confinamento lateral, a menos que o eixo de crescimento seja escolhido ao longo de uma direção de simetria, como por exemplo $[001]$ ou $[111]$.

Índice

1	Introdução	3
2	Descrição das técnicas e principais resultados experimentais	6
2.1	Crescimento das Amostras	6
2.2	Orientação e caracterização das amostras	8
2.2.1	Identificação dos eixos	8
2.2.2	Difratometria de alta resolução	11
2.3	Caracterização Óptica	16
2.3.1	Técnica Experimental e montagem	16
2.3.2	Análise da forma de linha	18
2.3.3	Resultados experimentais	20
2.3.4	Anisotropia	21
3	Efeitos de tensão: Considerações geométricas	26
3.1	O tensor de tensão	27
3.2	Campos piezoelétricos	30
3.3	Anisotropia piezoelétrica	33
4	Efeitos de Tensão e de confinamento	35
4.1	Formulação geral do problema	36
4.2	O poço quântico tensionado	41
4.3	Material "bulk" tensionado a $\vec{k}=0$	43
4.4	Material "bulk" tensionado a $\vec{k} \neq 0$	44
4.5	Efeitos de confinamento quântico e tensão <i>bisotrópica</i> sobre o material a \vec{k} arbitrário	45
4.5.1	Caso tensionado	49
4.6	Resumo	50

5	Discussão dos resultados	53
5.1	Aplicação ao caso de crescimento ao longo de [001]	54
5.1.1	Definições úteis	57
5.1.2	Diagramas de energia de transição	58
5.2	Aplicação ao caso de crescimento ao longo de [113]	62
6	Conclusão	65

Capítulo 1

Introdução

A Estrutura eletrônica de elétrons espacialmente confinados em sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade tem sido objeto de intensos estudos há pelo menos duas décadas ([1], [2], [3], [4]). Os melhor estudados são os sistemas bidimensionais (2D) composto de um (SQW) ou mais (MQW) poços quânticos. Nesses casos, finas camadas de um material de menor “gap” de energia são “ensanduichados” entre camadas mais grossas de um outro material com um “gap” maior. A alternância periódica desses dois materiais resulta em um sistema tridimensional (3D) artificial chamado de superrede (SL). Um material arquetípico para esse tipo de construção é o GaAs/AlGaAs crescido ao longo de uma direção de alta simetria sobre um substrato de GaAs (em geral [001]).

Outros materiais também têm sido estudados, tais como InGaAs/GaAs ou Si/Ge. Esses, no entanto, resultam em estruturas que estão sujeitas a uma tensão no plano da amostra, de tal forma a acomodar a diferença de parâmetro de rede dos materiais “bulk” dos dois materiais constituintes. Essa tensão biaxial (ou *bisotrópica*, como explicado no Capítulo 3) altera a estrutura eletrônica. Mais recentemente, o confinamento eletrônico em fios quânticos unidimensionais (1D) e em pontos quânticos (QD's) zero-dimensionais (0D) foi obtido. O confinamento bidimensional ao longo de uma direção de alta simetria reduz a simetria de cúbica para tanto tetragonal [001] como trigonal [111]. A introdução de confinamento lateral (intra-planar) no plano perpendicular à direção de crescimento produz ainda uma redução maior da simetria. Essa redução da simetria devida ao confinamento lateral na produção de fios quânticos afeta as propriedades ópticas do material. Em particular, a equivalência dos eixos pertencentes ao plano será quebrada

pela produção dos fios e a transmissão, refletividade e fotoluminescência passarão a ser anisotrópicas, ou seja, suas intensidades serão diferentes para luz propagando-se ao longo do eixo de crescimento, porém com polarização ao longo ou perpendicular à direção dos fios. Assim sendo, se os fios originais forem crescidos ao longo de uma direção de alta simetria, essa anisotropia é uma espécie de assinatura (e indicador quantitativo) de confinamento lateral. O assunto (anisotropia óptica) nesse tipo de fios foi recentemente tratado teoricamente por Vouilloz et al [5].

Fios quânticos também podem ser produzidos ao se depositar a estrutura 2D em um substrato de GaAs de orientação [11N] ($N=0$ ou $N>2$). Trabalhos pioneiros em tais fios quânticos ([6] e [7]) tentaram usar a anisotropia óptica para determinar o grau de confinamento lateral em fios de AlGaAs/GaAs crescidos sobre substratos $z'=[113]$. Nesse caso os fios são formados espontaneamente ao longo da direção $x'=[\bar{3}32]$ com confinamento lateral ao longo de $y'=[1\bar{1}0]$. A anisotropia seria tirada das intensidades dos sinais de PL ou de refletividade para a luz polarizada ao longo dos eixos x' ou y' . Sob o ponto de vista de nossa discussão no presente trabalho, essa visão provou ser um pouco crua. Mesmo sendo verdade que o confinamento lateral vá introduzir anisotropia, outras fontes de anisotropia poderiam mascarar aquelas. Esta anisotropia adicional resultaria do fato de que o eixo de crescimento não é um eixo de simetria do tensor de massa da banda de valência. Assim sendo, confinamento 2D ao longo dessa direção poderia resultar em mistura de funções de onda de buraco leve (LH) e buraco pesado (HH), o que levará à anisotropia.

Quando demos início a esse trabalho não estava claro se o confinamento quântico 2D ao longo de tal direção não simétrica era ou não uma fonte principal de anisotropia. Experimentalmente, poderíamos conseguir respostas investigando propriedades ópticas de poços quânticos (QW) 2D crescidos (sem qualquer tipo de confinamento lateral) ao longo de eixos [11N]. Pelo que sabemos, nenhum estudo desse tipo foi relatado até o presente. Então nos propusemos a realizar tais experimentos utilizando fotoreletividade e fototransmissão moduladas em QW's crescidos sobre substratos [113] de GaAs. Nós utilizamos QW's de InGaAs/GaAs porque eram as amostras que possuíamos na época (ver seção 2.1), além de que nosso laboratório já tinha acumulado uma grande experiência de espectroscopia de modulação nesse tipo de material ([8], [9] e [10]). Um fator complicante surge nessas amostras: O descasamento dos parâmetros de rede do substrato (GaAs) e material do poço (InGaAs) é acomodado na forma de uma tensão *bisotrópica*

homogênea nos QW's de amostras de boa qualidade. Essa tensão complica a análise, na medida em que ela pode produzir sua própria anisotropia através de vários mecanismos. Portanto, uma caracterização trabalhosa e detalhada das amostras se torna indispensável.

O programa então consiste primeiramente na obtenção de QW's bidimensionais com orientações [001] e [113] de várias larguras de poço para pesar a importância do confinamento quântico sobre a tensão homogênea (que é independente da largura do poço para uma dada composição da liga de InGaAs). Em segundo lugar, várias técnicas devem ser usadas para determinar a precisão dos parâmetros nominais de crescimento, a orientação cristalográfica do sistema de coordenadas x' , y' e z' , a homogeneidade da tensão e a qualidade das interfaces. Feito isso, refletividade modulada e espectro de absorção devem ser tirados com luz polarizada ao longo dos eixos x' e y' . Finalmente, os resultados experimentais devem ser analisados tentando separar os efeitos de confinamento quântico daqueles introduzidos pela tensão. Por último, chegaríamos a alguma conclusão sobre a contribuição de cada fator à anisotropia observada. Esse programa está desenvolvido ao longo dessa tese da maneira explicada a seguir. O Capítulo 2 dá uma breve descrição das técnicas experimentais usadas tanto para caracterizar as amostras como para determinar a anisotropia óptica em amostras [113]. Essa parte envolve algumas técnicas de Raio-X assim como difração de Raio-X de duplo cristal e difração de Raio-X de baixo ângulo assim como medidas de refletividade e absorção moduladas. Os resultados experimentais obtidos através dessas medidas estão mostrados nesse mesmo Capítulo. No Capítulo 3 desenvolvemos os efeitos geométricos da tensão *bisotrópica* e examinamos a possível contribuição que os campos piezoelétricos associados a esta deformação podem dar à anisotropia óptica. No Capítulo 4 examinamos as contribuições da tensão e confinamento quântico para a anisotropia e no Capítulo 5 discutimos nossos resultados experimentais sob o enfoque do que tiramos dos Capítulos 3 e 4. Finalmente, no Capítulo 6, oferecemos as conclusões de nosso trabalho.

Capítulo 2

Descrição das técnicas e principais resultados experimentais

2.1 Crescimento das Amostras

As amostras medidas foram poços simples de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ não corrugados e sem nenhuma dopagem intencional, crescidos por MBE na USP-São Carlos, sobre substratos de GaAs [001], [113]A. O crescimento não foi interrompido nas interfaces, o que ajuda a diminuir os efeitos de segregação em amostras crescidas ao longo da direção [113]A. Foram encontradas significativas diferenças nas propriedades ópticas, dinâmica de crescimento e formação de defeitos para essas duas direções[11]. Por exemplo, a desordem da liga, segundo os crescedores[11], é menor nas amostras crescidas ao longo de [113]A que ao longo de [001] ou [113]B. Os mesmos atestam que o fato das amostras [113]A possuírem melhor qualidade cristalina pode ser uma consequência, como já havia sido sugerido por outros autores[12], da menor segregação do In (efeito bastante comum nesses materiais) para essa orientação. Também tentamos realizar as medidas em amostras crescidas sobre substratos de orientação [113]B, mas tivemos de descartá-las devido à má qualidade cristalina apresentada por elas, e já atestada anteriormente pelos crescedores. Segundo os mesmos, as amostras crescidas nessa orientação apresentam defeitos estruturais bem marcados. Os detalhes do crescimento e da caracterização dessas amostras, feitas pelos crescedores, estão descritos na referência [11]. As es-

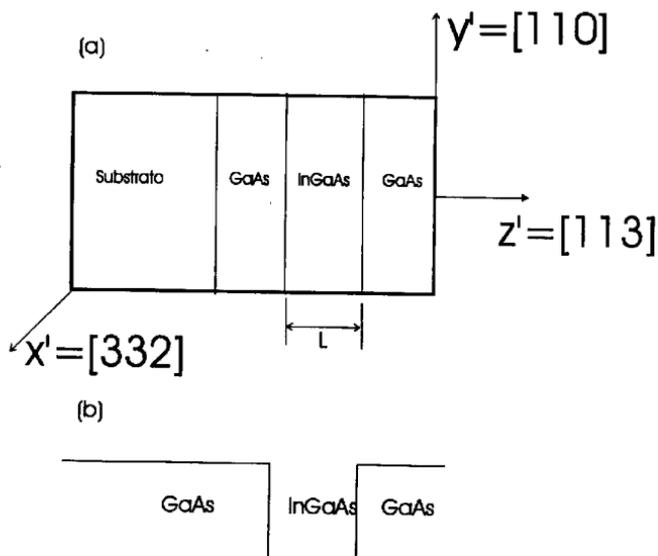


Figura 2.1: Esquema das amostras estudadas. Em (a) temos o esquema das amostras em si, e em (b) temos o perfil de potencial das mesmas.

As espessuras dos poços são $L=40 \text{ \AA}$ e $L=100 \text{ \AA}$, e a concentração nominal de In nos poços de ambas espessuras é de 20 % ($x=0.20$). A figura 2.1 é uma representação esquemática das amostras. A tabela 2.1 apresenta as espessuras e orientações das mesmas.

Tabela 2.1- Espessura do poço e orientação das amostras, com os respectivos nomes.

espessura/orientação	[100]	[311]
L=40 Å	40A	40B
L=100 Å	100A	100B

2.2 Orientação e caracterização das amostras

2.2.1 Identificação dos eixos

Para identificar os eixos cristalográficos das amostras de orientação [113] foram utilizadas técnicas de difração de raio-X. Primeiramente, verificou-se que a amostra estava paralelamente aos planos (113), detectando a reflexão correspondente a esses planos numa varedura $\theta - 2\theta$ com o difratômetro de pó. O próximo passo foi usar o método de Laue com registro por filme, para determinar a direção dos eixos principais $1\bar{1}0$ e $\bar{3}32$ contidos no plano da amostra e verificar se estes coincidiam com os eixos geométricos da amostra (cortada de forma retangular) que chamaremos de x' e y' . A amostra foi posicionada na câmara de Laue segundo mostra a figura 2.2.

Um primeiro diagrama de difração foi obtido com incidência perpendicular à superfície da amostra (figura 2.3), foi identificado como possuindo a mesma simetria observada na projeção estereográfica padrão para uma rede cúbica na direção [113], mostrada na figura 2.4[13]. Em seguida, para determinar quais as direções cristalográficas coincidentes com os eixos x' e y' da amostra, decidimos girá-la ao redor do eixo y' para constatar se rodando os ângulos entre alguns polos principais escolhidos da mesma zona que contem o polo 113 (indicada com uma flecha na figura 2.4), conseguimos obter os diagramas correspondentes. Rodamos assim 29,5 graus (ângulo entre os planos (113) e (111)) para obter nosso segundo diagrama de difração, que correspondeu, como esperado, à simetria 111 e não é mostrado porque o filme foi sobre-exposto e resultou difícil de reproduzir cópia. Proseguindo, a partir da

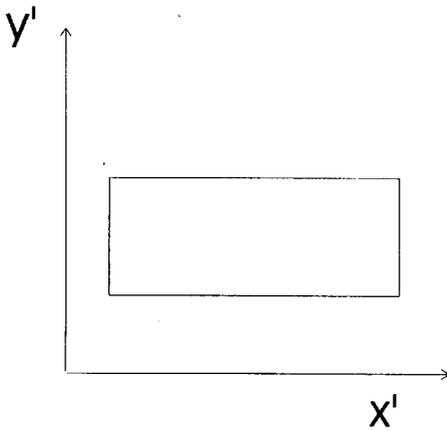


Figura 2.2: Posição da amostra na montagem da câmera de Laue. Todas as rotações feitas posteriormente usaram com referência o sistema de eixos dessa figura.

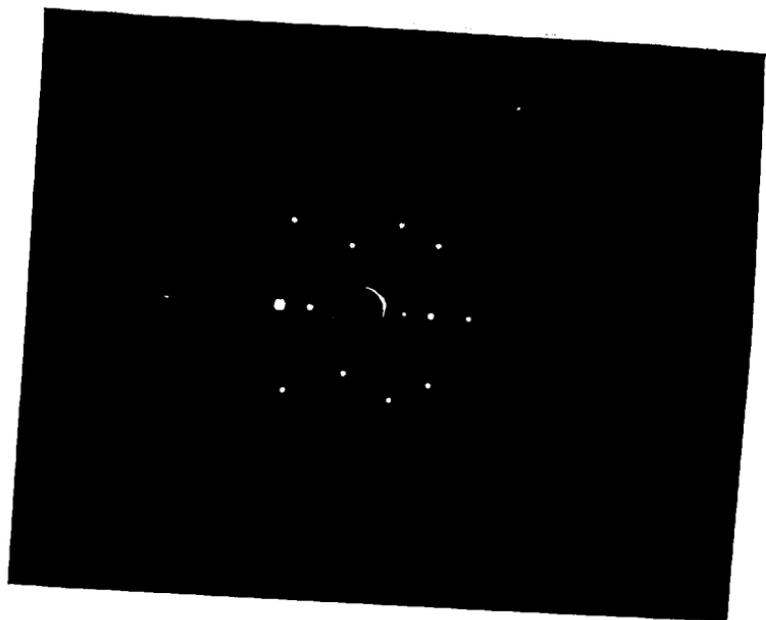


Figure 2.3: Diagrama de Laue de uma das amostras. A face irradiada foi a superfície plana da amostra, e pudemos verificar que corresponde à orientação 113 por comparação com a projeção estereográfica nessa direção.

posição anterior rodamos ainda 35.26 graus (ângulo entre os planos (111) e (110)) para encontrarmos o diagrama correspondente ao polo 110, mostrado na figura 2.5.

Para confirmar definitivamente a coincidência do eixo horizontal da amostra com a zona indicada com a flecha na figura 2.4, voltamos a amostra à posição original rodando em direção contrária à anterior até reencontrarmos o polo 113, e a partir daí um novo giro nessa mesma direção nos levou ao polo 001. O diagrama de difração está mostrado na figura 2.6. Todo este procedimento serviu para provar que os eixos de nossas amostras [113], de acordo com o que diz a figura 2.1, são:

$$\begin{aligned}x' &= [3\bar{3}2] \\y' &= [1\bar{1}0] \\z' &= [113]\end{aligned}\tag{2.1}$$

2.2.2 Difratometria de alta resolução

A difratometria de raio-X de alta resolução fornece informação sobre a perfeição estrutural de monocristais, e portanto é uma técnica indispensável na caracterização de filmes finos, multicamadas e heteroestruturas. A instrumentação necessária para a realização das experiências consiste em um feixe de raios-X altamente monocromático e paralelo juntamente com um goniômetro que permita varreduras com passos da ordem de segundos de arco. Um esquema do instrumento usado em nossas experiências se encontra na figura 2.7. Nas nossas medidas, foi usado um monocromador de Ge 022 e radiação de Cu $k(\alpha_1)$.

As curvas de difração, obtidas fixando a posição do detetor para a reflexão que corresponde à orientação do substrato e a da camada epitaxial e posteriormente oscilando ao redor desta posição, são chamadas curvas de *rocking*. Elas fornecem informação sobre a diferença entre os parâmetros de rede do substrato e da camada epitaxial (descasamento) obtida através da separação entre os picos de difração correspondentes a cada um deles. A largura do pico de difração da camada se usa frequentemente estimar qualitativamente a qualidade cristalina da camada. O método fornece também informação sobre a espessura da camada, quando a resolução instrumental

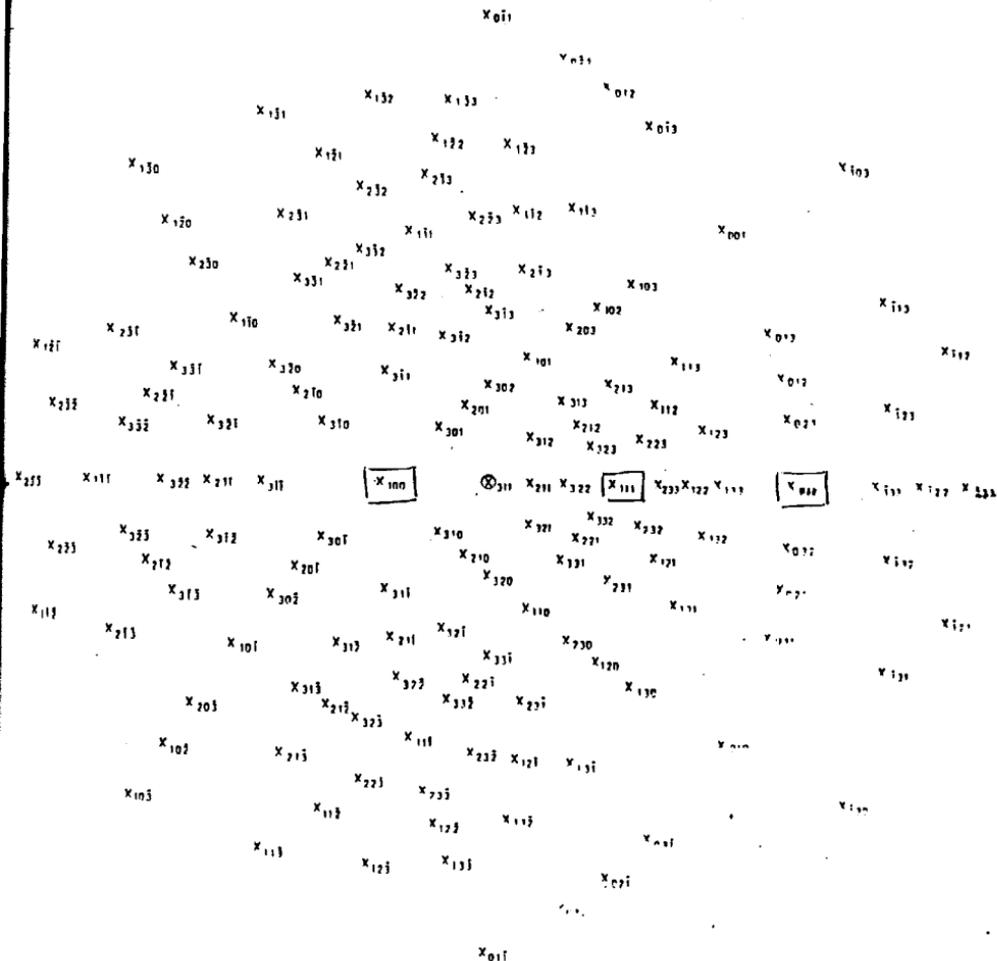


Figura 2.4: Projeção estereográfica de uma rede cúbica para a direção [113]. Indicamos com uma flecha a zona estudada, coincidente com o eixo x'' da amostra.

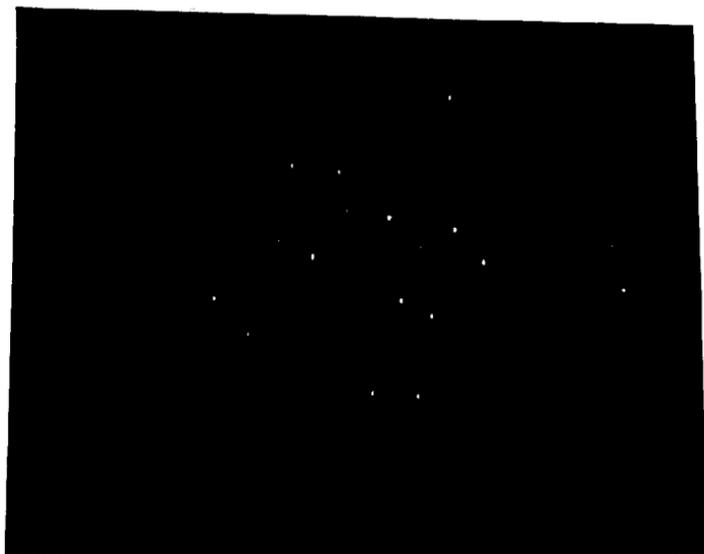


Figura 2.5: Laue de uma das amostras estudadas revela claramente que a face irradiada é um plano $[110]$.

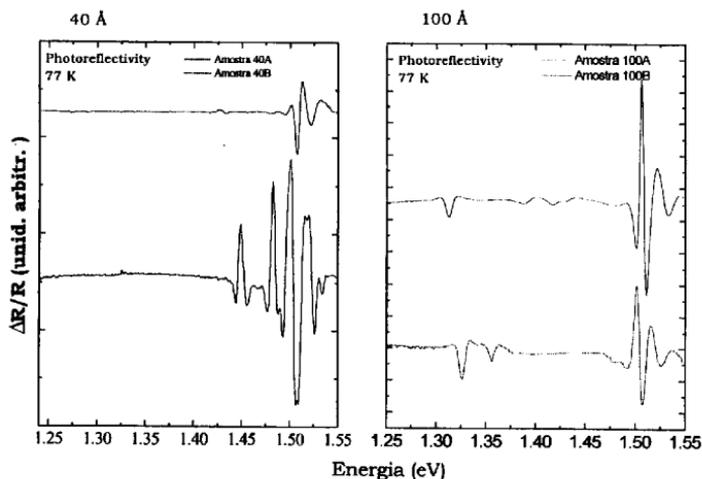


Figura 2.11: Espectros típicos de PR para cada uma das amostras estudadas.

2.13 estão as amostras de 100 Å de poço. As transições de interesse são mostradas por setas nestas figuras. A discussão desse resultados experimentais será feita nos Capítulos 5 e 6. Porém, pode-se apreciar de uma simples olhada que existe uma considerável diferença nas relações de intensidade entre as linhas de HH e LH para as polarizações x' e y' nas amostras crescidas ao longo da direção [113].

2.3.4 Anisotropia

As medidas polarizadas de refletividade modulada foram incentivadas pela desconfiança da existência de anisotropia na resposta óptica das medidas da refletividade modulada, mesmo para amostras crescidas sem corrugação.

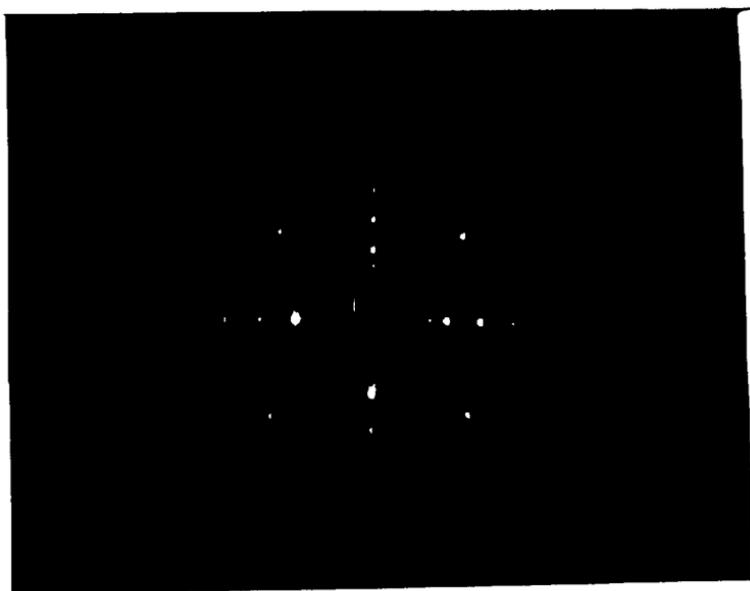


Figura 2.6: Laue de uma das amostras estudadas revela claramente que a face irradiada é um plano [100].

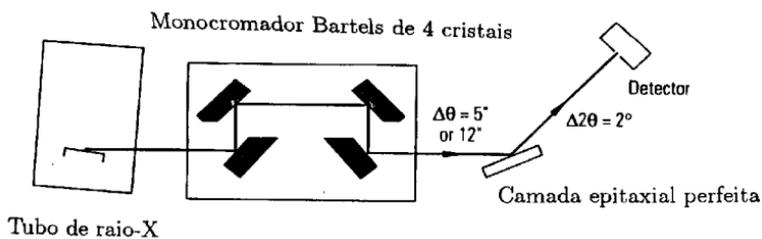


Figura 2.7: Esquema do arranjo experimental do espectrometro utilizado nas para a realizaço das medidas.

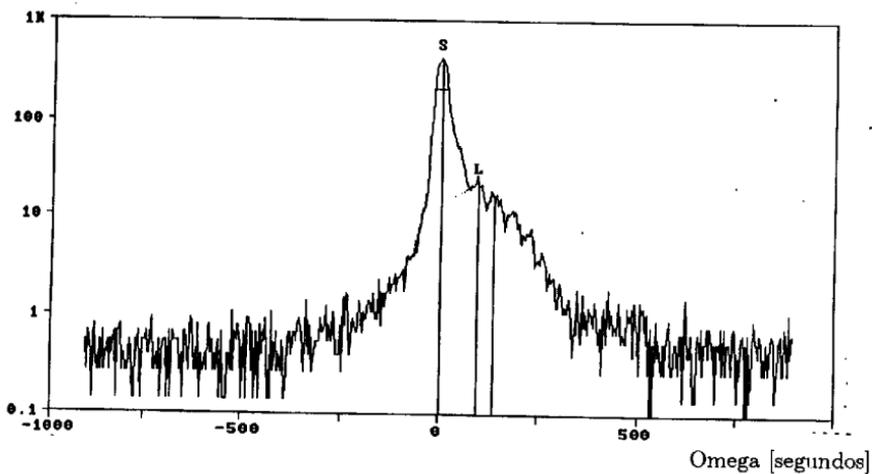


Figura 2.8: Curva de "rocking" correspondente  reflexo 004 da amostra (Poço de 40  de InGaAs/GaAs [113]).

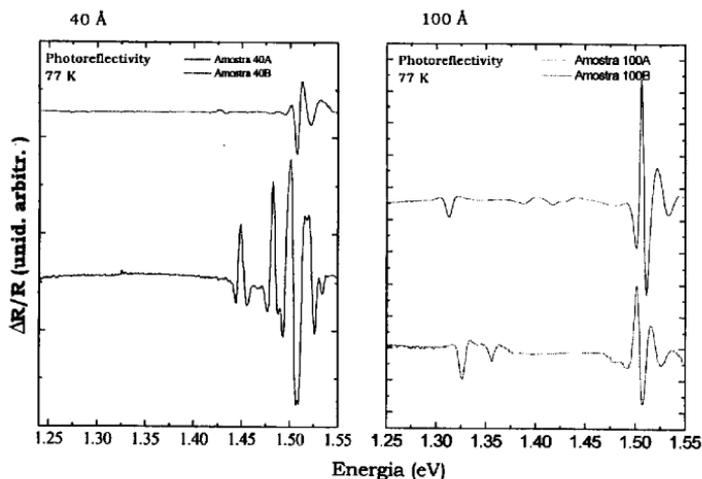


Figura 2.11: Espectros típicos de PR para cada uma das amostras estudadas.

2.13 estão as amostras de 100 Å de poço. As transições de interesse são mostradas por setas nestas figuras. A discussão desse resultados experimentais será feita nos Capítulos 5 e 6. Porém, pode-se apreciar de uma simples olhada que existe uma considerável diferença nas relações de intensidade entre as linhas de HH e LH para as polarizações x' e y' nas amostras crescidas ao longo da direção [113].

2.3.4 Anisotropia

As medidas polarizadas de refletividade modulada foram incentivadas pela desconfiança da existência de anisotropia na resposta óptica das medidas da refletividade modulada, mesmo para amostras crescidas sem corrugação.

permite registrar as oscilações devidas às franjas de interferência devidas à presença da camada.

No caso de multicamadas e hetroestruturas as curvas de difração podem conter picos e oscilações difíceis de interpretar. Nesse caso, resulta útil realizar cálculos de simulação das curvas de difração para explicar os resultados experimentais. Vários tipos de cálculo podem ser feitos, usando a teoria cinemática ou a teoria dinâmica de difração. Estas teorias são usadas para simular os dados experimentais com bastante aproximação no caso de estruturas imperfeitas e quase perfeitas respectivamente.

Para caracterizar nossas amostras foram obtidas curvas de *rocking* de todas as amostras. Em todos os casos pode ser observado um casamento bastante bom dos poços quânticos com o substrato. Mostramos na figura 2.8 uma curva típica, obtida para a amostra 40A (40 Å de poço em substrato [113]). Podemos observar que a curva (S) do substrato de GaAs, se apresenta superposta à curva (L) do poço quântico de InGaAs. A diferença na posição dos picos denota um ligeiro descasamento, que pode considerar-se insignificante (~ 100 segundos de arco), já que correspondem a um $\Delta a/a < 0.07\%$. As pequenas oscilações correspondem a uma espessura de $0.4489 \mu\text{m}$, podem ser atribuídas à espessura da *capping layer* de GaAs de $0.5 \mu\text{m}$. A largura pronunciada da curva correspondente à camada pode ser proveniente de variações composicionais na camada de InGaAs.

Na figura 2.9 mostramos a curva de difração calculada para a amostra, a qual não prevê um deslocamento do pico da camada para ângulos menores, como se vê na curva experimental. As oscilações pequenas, entretanto, são visíveis e concordam aproximadamente na curva experimental e na calculada. Desta análise concluímos que as amostras apresentam características bem próximas dos parâmetros nominais da tabela 2.1.

2.3 Caracterização Óptica

2.3.1 Técnica Experimental e montagem

As técnicas utilizadas na caracterização óptica das amostras estudadas foram a Fotorefletividade Modulada (PR) e a Fototransmissão Modulada (TR). O equipamento utilizado está mostrado esquematicamente na fig 2.10. A espectroscopia de modulação mede a variação na reflexão ou transmissão óptica quando uma perturbação é aplicada ao sistema a ser estudado [8]. No caso

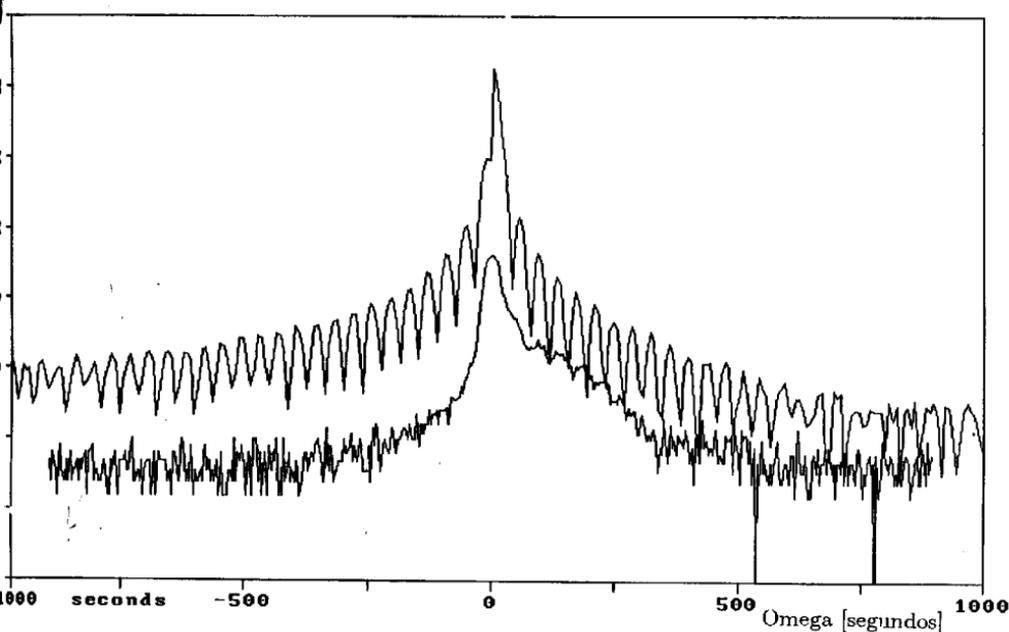


Figura 2.9: Comparação dos espectros calculado e experimental para amostra com poço quântico de 40 Å de InGaAs/GaAs [113].

das duas técnicas utilizadas, a perturbação é aplicada através de um feixe de luz secundário de energia superior à energia do gap fundamental do material a ser estudado. No caminho óptico desse feixe, coloca-se um chopper de frequência típica $10 \leq \Omega_m \leq 10^3$ Hz. O mecanismo exato através do qual os pares elétron-buraco injetados modulam os campos externos está muito além do que se pretende com essa discussão e varia de amostra para amostra. No entanto depende, na maior parte dos casos do efeito foto-voltáico, que consiste na redução do campo elétrico em alguma interface (substrato - "buffer", "capping layer"-ar, etc.) [8]. Este mecanismo é, em essência, o mesmo que produz a modulação em semicondutores "bulk" [16]. A detecção sensível à fase permite a medida da variação da transmissão ou refletividade da amostra tão pequenas como algumas partes em 10^5 ou 10^6 . O arranjo experimental da figura 2.10 é auto explicativo e já foi descrito em detalhes por alguns autores (por exêmplo em [14],[18]e[17]). Essa montagem é facilmente armada com equipamentos baratos disponíveis na maior parte dos laboratórios onde se realiza medidas ópticas. As variações introduzidas são pequenas e por essa razão o espectro resultante é relacionado a alguma derivada do espectro sem modulação. Dessa forma se suprimem "backgrounds" que não nos interessam, e, acima de tudo, a derivação do espectro nos permite localizar quais

são as energias do fóton incidente para as quais o material possui singularidades. A vantagem disso é que as singularidades, que são bem localizadas em energia, passam a poder ser analisadas através de modelos de bandas parabólicas válidos localmente.

As medidas aqui estudadas foram realizadas a 77 K. A quantidade diretamente medida é a variação fracionária da refletividade (R) ou da transmitância (T) do material, ou seja, $\Delta R/R$ ou $\Delta T/T$. Cálculos teóricos sempre nos resultam na função resposta dielétrica ($\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$). Variações dessa função resposta estão relacionadas a espectros obtidos experimentalmente por:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R}{R} &= \alpha\Delta\varepsilon_1 + \beta\Delta\varepsilon_2 = \text{Re}[(\alpha - i\beta)\Delta\varepsilon] \\ &= \text{Re}[Ce^{i\theta}\Delta\varepsilon] \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde α e β são os coeficientes de Seraphin [15]. Uma expressão semelhante pode ser obtida para $\Delta T/T$.

2.3.2 Análise da forma de linha

A simplicidade e a relativa facilidade na realização do experimento de foto-refletividade (ou transmissão) modulada se contrastam com a dificuldade na interpretação detalhada das formas de linha resultantes. Como com todas as técnicas de modulação, a perturbação externa introduz pequenas variações na função dielétrica complexa do material, ε . Quando a periodicidade é mantida pela Hamiltoniana da perturbação, o momento cristalino é um bom número quântico e as transições ópticas permanecem verticais. As mudanças dominantes introduzidas pela perturbação consistem de pequenas variações no "gap" de energia, aumento dos tempos de vida e nos elementos da matriz de transição. Como essas mudanças são pequenas, as correspondentes variações em ε também o são, e podemos aproximá-las através de primeiras derivadas da constante dielétrica não perturbada. Assim

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon &= \varepsilon(\omega, \xi) - \varepsilon(\omega, 0) = \\ &= \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial E_0} \frac{\partial E_0}{\partial\xi} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial\Gamma} \frac{\partial\Gamma}{\partial\xi} + \frac{\partial\varepsilon}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial\xi} \right) \Delta\xi, \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde ξ é a perturbação externa e E_0 , Γ e P são a energia de transição, o aumento do tempo de vida e o elemento de matriz num dado ponto crítico

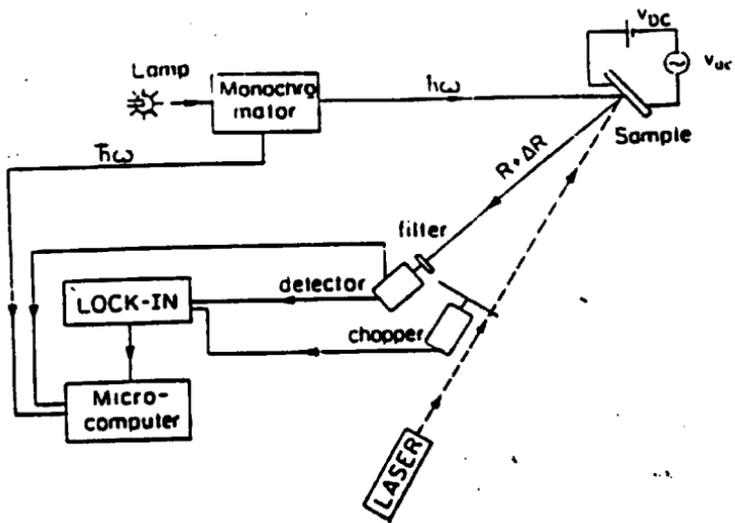


Figura 2.10: Esquema da montagem utilizada nas medidas de espectroscopia de modulação.

na zona de Brillouin respectivamente. Esses mecanismos são chamados de mecanismos inter-bandas, e descrevem os efeitos da maior parte dos mecanismos de modulação. Mas, em contraste com outras formas de modulação, quando se trata de campo elétrico, a coisa já não é tão simples. Acontece que o campo elétrico introduz um potencial perturbativo $V = -e\vec{F} \cdot \vec{r}$ (com \vec{F} campo elétrico) que destrói a simetria de translação da Hamiltoniana sem perturbação H_0 . Essa perda de periodicidade translacional resulta num segundo mecanismo de modulação, não mais inter-banda, mas sim intra-banda.

Nesse caso o campo acelera o elétron no espaço \vec{k} ($\hbar \vec{k} = -e\vec{F}$) dentro de uma dada banda. Esse processo introduz variações em ϵ que não podem mais ser expressas em termos de primeira derivada. Para o tipo de espectros obtidos através das técnicas utilizadas no presente trabalho (PR e TR), a forma de linha ideal a ser usada na análise dos resultados é a de terceira derivada. Não é o intuito desse trabalho a descrição detalhada da análise da forma de linha, ou de como se chega a conclusão que devemos usar a terceira derivada. Essa discussão está feita com detalhes nas referências [8], [19]- [24].

2.3.3 Resultados experimentais

Nesta seção mostrarei de forma breve os resultados experimentais obtidos por foto-refletividade modulada. A figura 2.11 mostra espectros típicos (de PR) de todas as amostras estudadas. A estrutura mais proeminente nestes espectros é o pico de refletividade do GaAs bulk, em $E=1.5$ eV. As estruturas que aparecem em energias menores são provenientes de transições ópticas na região do poço quântico de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. A designação das várias linhas destes espectros foi feita em detalhe em estudos anteriores [9], [39]. Aqui concentraremos nossa atenção em duas transições provenientes do primeiro e segundo nível confinado da banda de valência para o primeiro estado confinado da banda de condução. Em amostras crescidas ao longo da direção [001] estas transições são chamadas de HH e LH, já que os estados da banda de valência são inequivocamente identificados como sendo de buraco pesado (“heavy hole”, HH) e de buraco leve (“light hole”, LH) respectivamente. Já nas figuras 2.12 e 2.13, mostramos a região espectral que contém estas duas transições principais para luz polarizada paralelamente aos eixos x' e y' da amostra já com os respectivos “fittings” usando uma forma de linha de terceira derivada, como já discutido anteriormente na seção 2.3.2. Na figura 2.12 estão mostradas as amostras de 40 Å de poço, enquanto que na figura

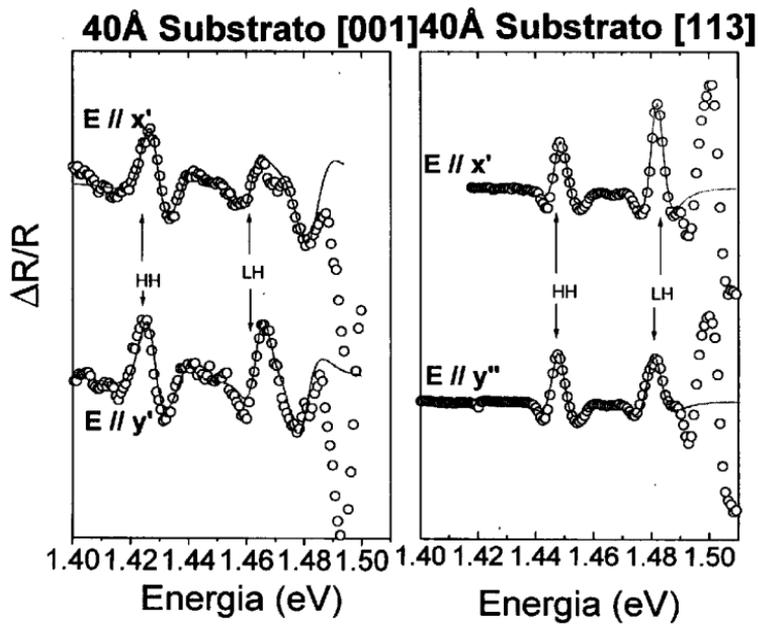


Figura 2.12: Dados de PR polarizados para as amostras de 40 Å de poço.

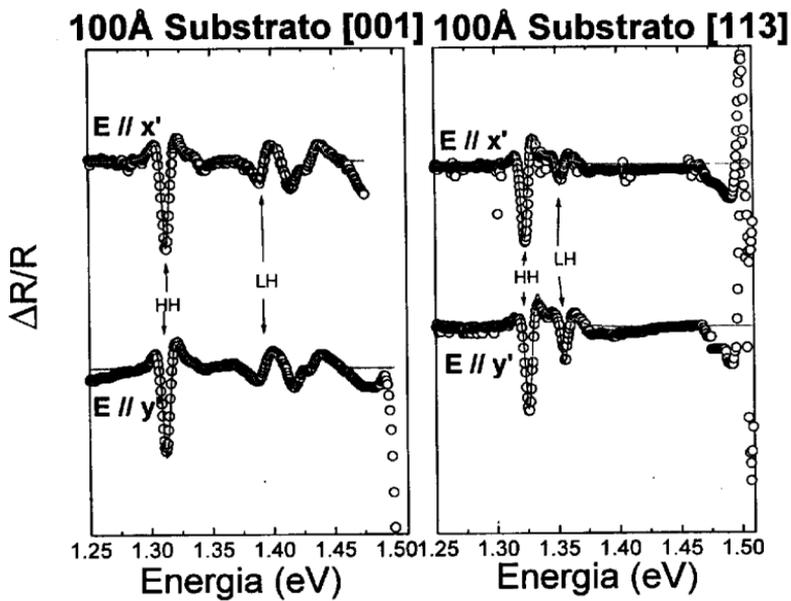


Figura 2.13: Dados de PR polarizados para as amostras de 100 Å de poço.

Baseado nas definições da referência [7] para amostras de fios quânticos de GaAs/AlAs de mesma orientação [113] crescidas com corrugação, definimos o seguinte parâmetro:

$$R_{x'(y')} = \frac{I_{x'(y')}(hh)}{I_{x'(y')}(lh)}. \quad (2.4)$$

Onde $I_{x'(y')}$ é a intensidade para luz polarizada na direção $x'(y')$ da transição referente a buraco pesado (hh) e a buraco leve (lh). Definimos o parâmetro em termos da razão de intensidades devido à dificuldade de definir intensidades absolutas de cada transição, já que a resposta tanto do espectrômetro como do polarizador é diferente para as direções vertical e horizontal. Assim sendo, é mais seguro definir um parâmetro em relação à razão entre as intensidades das duas transições que nos interessam para cada uma das polarizações, eliminando dessa forma os erros experimentais decorrentes desse fato. Definimos um parâmetro para a medida da anisotropia como

$$\eta = 1 - \frac{R_{x'}}{R_{y'}}. \quad (2.5)$$

Para um material “bulk”, a simetria cúbica garante que $R_{x'} = R_{y'}$ para qualquer sistema de eixos ortogonais escolhidos. Assim sendo teremos $\eta = 0$ a menos que haja alguma perturbação quebrando a simetria cúbica do cristal. Em nosso caso particular, deveríamos ter para a orientação [001] $\eta = 0$, e no caso das amostras [113]A, como o eixo [113] não é um eixo de simetria do sistema, existe a possibilidade de quebra da isotropia, o que nos daria $\eta \neq 0$. Temos vários candidatos possíveis à causadores dessa anisotropia:

- (i) Campo piezoelétrico interno induzido pela tensão biaxial;
- (ii) A própria tensão biaxial poderia introduzir misturas de funções de onda de buraco leve e pesado levando a $\eta \neq 0$ para $\vec{k} = 0$;
- (iii) A tensão biaxial em conjunção com a anisotropia do tensor de massa poderia gerar anisotropia óptica para $\vec{k} \neq 0$.
- (iv) O confinamento na direção de crescimento z' ($V(z')$).

A razão (i) obedece a considerações puramente geométricas e será discutida no Capítulo 3. As razões (ii) e (iii) dependem apenas da tensão e ocorreriam mesmo num material “bulk” ($L \rightarrow \infty$) tensionado, de modo que a anisotropia proveniente daí independeria da largura dos poços quânticos. Finalmente a razão (iv) depende da relação entre tensão biaxial, anisotropia do tensor de massa e confinamento quântico. Esta contribuição a η depende crucialmente da espessura do poço quântico (L). As causas (ii), (iii) e (iv)

serão discutidas no Capítulo 4. Os valores de η para as amostras estudadas, provenientes dos dados experimentais obtidos estão resumidos na tabela 2.2.

Tabela 2.2- Valores de η para cada uma das amostras estudadas.

	$I_{hh}(\hat{e}_{x'})$	$I_{hh}(\hat{e}_{y'})$	$I_{lh}(\hat{e}_{x'})$	$I_{lh}(\hat{e}_{y'})$	$R_{x'}$	$R_{y'}$	η
40 Å [001]	0.35	0.35	0.35	0.3	1	1.167	0.14
40 Å [113]	0.45	0.45	0.8	0.42	0.5625	1.071	0.47
100 Å [001]	1	0.6	0.33	0.15	3.030	4	0.24
100 Å [113]	0.25	0.45	0.07	0.2	3.571	2.25	-0.59

Podemos observar da tabela que temos $\eta \simeq 0$ para amostras com direção de crescimento $z'=[001]$ e $\eta \neq 0$ para $z'=[113]$. O fato de que para $z'=[001]$ o valor de η se desvie um pouco do valor esperado de $\eta = 0$ nos dá uma idéia do erro de nosso procedimento experimental. Já para $z'=[113]$ obtivemos valores bem altos de η , bem superiores ao erro experimental. Esses valores são fortemente dependentes da espessura do poço quântico, o que mostra que o confinamento quântico possui um papel decisivo na anisotropia observada. Uma discussão detalhada deste resultado será feita no Capítulo 5.

Capítulo 3

Efeitos de tensão: Considerações geométricas

Quando uma camada fina de um material semicondutor cuja estrutura cristalina é do tipo diamante ou "zinblende" cresce comensurada sobre um substrato de diferente parâmetro de rede, ele é submetido a uma tensão biaxial uniforme no plano perpendicular à direção de crescimento. Essa tensão é dada por:

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_s - a_0}{a_0}, \quad (3.1)$$

onde a_s é o parâmetro de rede do substrato e a_0 é o parâmetro de rede de equilíbrio do material da camada. Tensões bastante grandes podem ser acomodadas desta forma desde que a camada não ultrapasse uma dada espessura crítica (ver [25] e [26] para um modelo teórico e [27], [28] e [29] para espessuras críticas). Na maior parte dos casos, o eixo de crescimento da amostra é um eixo de alta simetria, como no caso de amostras [001] e [111]. Nesses casos o tensor de tensão é diagonal num sistema de eixos x' , y' , z' (onde z' é a direção de crescimento), e é dado por:

$$\overleftrightarrow{\epsilon'} = \epsilon_{\parallel} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

onde Γ é um número que pode ser facilmente obtido a partir de argumentos puramente geométricos. Para z' ao longo de eixos arbitrários de crescimento, $\overleftrightarrow{\epsilon'}$ não é mais necessariamente diagonal. Recentemente Anastassakis[30]

destinou um artigo a responder à questão de como obter as componentes desse tensor como função do descasamento do parâmetro de rede para qualquer direção arbitrária de crescimento. Resumiremos suas conclusões na próxima seção (3.1), assim como obteremos os parâmetros relevantes para nosso caso particular, ou seja, $z' = [113]$.

Outra consequência relacionada à tensão em materiais III-V é a aparição de uma componente da polarização do campo elétrico interno no plano de crescimento da amostra (campo piezo-elétrico). Este problema foi tratado recentemente por Smith e Mailhot [31]. Na seção 3.2 resumiremos seus resultados e exploraremos suas consequências para as amostras usadas em nossos experimentos (tabela 2.1). Finalmente, discutiremos na seção 3.3 os possíveis efeitos do campo piezo-elétrico na anisotropia óptica que obtivemos em nossos experimentos (tabela 2.2).

3.1 O tensor de tensão

Estamos interessados em crescimento comensurado ao longo de uma direção arbitrária z' . Em se tratando desses casos, a tensão inter-planar é determinada apenas pelo descasamento da rede, ilustrado na equação 3.1. Assim sendo, quaisquer que sejam os eixos, as duas componentes do tensor de tensão no plano de crescimento são iguais e dadas por

$$\epsilon_{x'x'} = \epsilon_{y'y'} = \epsilon_{\parallel}. \quad (3.3)$$

Por esta razão Anastassakis chama esta tensão de *bisotrópica*, a qual é mais simétrica que a tensão *biaxial*. Para a simetria biaxial, em geral $\epsilon_{x'x'} \neq \epsilon_{y'y'}$, ou seja, apesar da força ser igual para as duas direções no plano, a resposta em cada uma delas pode ser diferente, resultando portanto em deformações diferentes. Já o caso que estamos considerando, as forças não precisam ser iguais para as duas direções no plano (x' e y'), mas os ϵ são iguais (ou seja, $\epsilon_{x'x'} = \epsilon_{y'y'}$). Por isso a sugestão do nome *bisotrópica* para esse tipo de tensão, na qual as respostas são iguais ao longo das direções x' e y' . Chamando de (x,y,z) os eixos cúbicos e de (x',y',z') um sistema de eixos cujo z' está ao longo da direção de crescimento, podemos escrever de forma geral [30]:

$$x' = (l_1 m_1 n_1), y' = (l_2 m_2 n_2), z' = (l_3 m_3 n_3), \quad (3.4)$$

onde l_i, m_i e n_i são os cossenos diretores de cada um dos eixos. A transformação de um sistema de eixos para o outro é dada por:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \overleftarrow{a} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \text{ onde } \overleftarrow{a} = \begin{pmatrix} l_1 & m_1 & n_1 \\ l_2 & m_2 & n_2 \\ l_3 & m_3 & n_3 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

onde \overleftarrow{a} é a matriz de transformação. Ela pode ser usada para transformar o tensor de tensão $\overleftarrow{\epsilon}'$ do sistema de eixos (x', y', z') para o sistema de coordenadas cúbicas através da relação [30]:

$$\overleftarrow{\epsilon} = \overleftarrow{a}^T \overleftarrow{\epsilon}' \overleftarrow{a}, \quad (3.6)$$

onde \overleftarrow{a}^T é a matriz transposta de \overleftarrow{a} . Para (x', y', z') gerais, as condições para que a tensão seja *bisotrópica* nos levam a:

$$\begin{aligned} \epsilon_{x'x'} &= \epsilon_{y'y'} = \epsilon_{\parallel} & \epsilon_{x'y'} &= 0 \\ \epsilon_{z'z'} &= -\Gamma\epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_{x'z'} &= \alpha\epsilon_{\parallel} & \epsilon_{y'z'} &= \beta\epsilon_{\parallel} \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde α, β, Γ são fatores geométricos (positivos) que dependem das constantes elásticas do material. Esses fatores podem ser bem complicados para uma direção arbitrária z' [30], mas em nosso caso particular onde temos:

$$\begin{aligned} x' &= \frac{1}{\sqrt{22}}[\bar{3}\bar{3} \ 2], \\ y' &= \frac{1}{\sqrt{2}}[1 \ \bar{1} \ 0] \\ z' &= \frac{1}{\sqrt{11}}[113], \end{aligned} \quad (3.8)$$

obteremos:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{48}{1331\sqrt{2}}(C_{11} + 2C_{12})\frac{C}{\Delta}[C_{11} - C_{12} + 9C_{44}] \\ \beta &= 0 \\ \Gamma &= \frac{1}{\Delta}\left[2C_{12}C_{44}^2 + \frac{38}{121}\left(C\frac{C_{44}}{2}\right)(C_{11} + 3C_{12}) + \frac{9C^2}{1331}(2C_{11} + 4C_{12} - C_{44})\right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde

$$\begin{aligned} C &= C_{11} - C_{12} - 2C_{44} \\ \Delta &= C^3 \left\{ \left(\frac{1}{11} + \frac{C_{44}}{C} \right) \left[\left(\frac{C_{11}}{C} - \frac{38}{121} \right) \left(\frac{27}{121} + \frac{C_{44}}{C} \right) - \frac{1152}{14641} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.10)$$

e onde C_{ii} são constantes elásticas do material. Finalmente, levando isso em conta, o tensor nas coordenadas (x', y', z') fica:

$$\overleftrightarrow{\epsilon}' = \begin{pmatrix} \epsilon_{\parallel} & 0 & \alpha\epsilon_{\parallel} \\ 0 & \epsilon_{\parallel} & 0 \\ \alpha\epsilon_{\parallel} & 0 & -\Gamma\epsilon_{\parallel} \end{pmatrix}.$$

As constantes elásticas C_{ii} vão depender claramente da concentração de In no poço (ou seja, de x). Em geral o tensor de tensão pode ser escrito como a soma de uma componente hidrostática, invariante frente às mudanças de coordenadas, mais um tensor de cisalhamento de traço nulo, ao qual a transformação da equação 3.6 deve ser aplicada. Fazendo essa separação ficamos com:

$$\overleftrightarrow{\epsilon}' = \frac{1}{3}\epsilon_H \overleftrightarrow{1} + \epsilon_s \begin{pmatrix} 1 & 0 & \alpha_0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \alpha_0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \epsilon_H &= (2 - \Gamma)\epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_s &= (1 + \Gamma)\epsilon_{\parallel} \\ \alpha_0 &= \frac{\alpha}{(1 + \Gamma)}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Após a mudança de coordenadas a partir dos eixos definidos na equação 3.8, o tensor de cisalhamento em coordenadas cúbicas fica:

$$\overleftrightarrow{\epsilon}_s = \frac{1 + \Gamma}{3}\epsilon_{\parallel} \begin{pmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xy} \\ a_{xy} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{xy} & a_{yz} & a_{yy} \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

onde

$$a_{xx} = \frac{1}{11} [-16 - 2\sqrt{2}\alpha_0] \quad (3.14)$$

$$a_{xy} = \frac{1}{11} \left[-9 + \frac{7}{\sqrt{2}}\alpha_0 \right]$$

$$a_{yy} = \frac{1}{11} \left[8 + 3\sqrt{2}\alpha_0 \right]$$

$$a_{yz} = \frac{1}{11} \left[-3 + 3\sqrt{2}\alpha_0 \right].$$

Na tabela 3.1 mostramos os valores de α , α_0 , e Γ para GaAs, InAs e para a heteroestrutura de concentração nominal de In no poço (ou seja, para $x=0.2$).

Tabela 3.1- Constantes apropriadas para o cálculo das componentes da tensão para amostras crescidas comensuradas sobre substratos de GaAs [311].

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	Δ	C	α
GaAs	12.11	5.48	6.04	356.515	-5.450	0.54849
InAs	8.329	4.526	3.959	99.949	-4.115	0.71959
$\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$	11.3538	5.2892	5.6238	305.202	-5.183	0.58271
		α_0	Γ			
GaAs		0.317046	0.730			
InAs		0.379931	0.894			
$\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$		0.329623	0.763			

Com as expressões 3.14 e os valores acima podemos calcular as mudanças introduzidas pela tensão *bisotrópica* nos estados eletrônicos do cristal. Esse cálculo será deixado para o Capítulo 4.

3.2 Campos piezoelétricos

Em semicondutores do tipo “zincblende”, as componentes da tensão fora da diagonal (em coordenadas cúbicas) dão origem a polarizações de campo

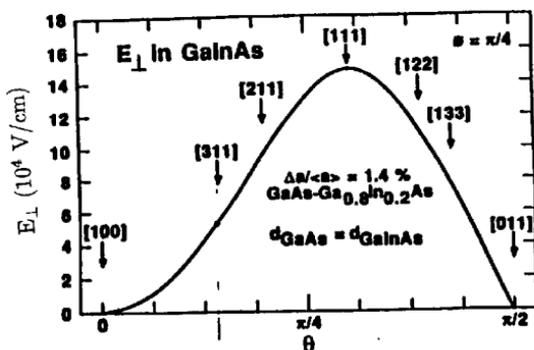


Figura 3.1: Campo elétrico longitudinal gerado pela tensão em superredes de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ como função da direção de crescimento. O ângulo azymutal está fixo em $\pi/4$ e os resultados estão mostrados como função do ângulo polar.

elétrico dados por [33],[32] :

$$P_i^S = 2e_{14}\epsilon_{ijk}, \quad (3.15)$$

onde P_i^S é a polarização induzida, e_{14} é a constante piezoelétrica e ϵ_{jk} é a componente da tensão em coordenadas cúbicas. Uma análise mais detalhada do problema, como a feita por Smith e Mailhot em [32] mostra que uma tensão *bisotrópica* produz um campo elétrico induzido na direção de crescimento. Esse campo elétrico pode possuir uma componente de sua polarização no plano $x'y'$ da amostra para uma direção arbitrária de crescimento (mas nunca um campo elétrico nesse plano, já que isso provocaria movimento espontâneo de portadores leves no plano). Resultados gerais para superredes $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ crescidas comensuradas sobre substratos de GaAs com crescimento na direção z' estão mostrados nas figuras 3.1 e 3.2. Nessas figuras foram usadas coordenadas polares, onde o ângulo θ é o ângulo entre a direção de crescimento z' e a direção [001], e ϕ é o ângulo azymutal.

Nota-se através das figuras que os campos induzidos podem ser significativos, podendo em princípio produzir grandes alterações nos estados eletrônicos [39]. Devemos tomar cuidado ao observar que existe apenas *polarização do*

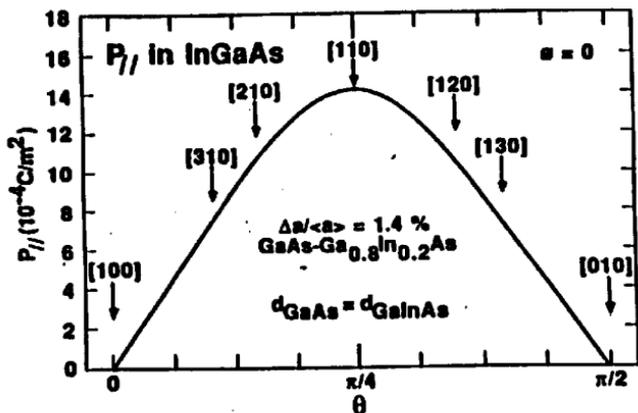


Figura 3.2: Polarização transversal gerada pela tensão em superredes de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ como função da direção de crescimento. O ângulo azymutal está fixo em zero e os resultados são mostrados como função do ângulo polar. Não há nenhum campo longitudinal gerado para esse valor de ângulo azymutal.

campo piezo-elétrico no plano da amostra. Essa polarização não pode mudar os estados eletrônicos do material da camada tensionada (no nosso caso o $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$), mas ela pode induzir uma certa quantidade de birrefringência ao distinguir duas direções dentro do plano: ao longo e perpendicular a ela. Em nosso caso particular, ou seja, para o sistema de eixos dado pela equação 3.8, é fácil mostrar [32] que a polarização está ao longo do eixo y' . Isso poderia fazer com que os índices de refração fossem diferentes para luz polarizada ao longo da direção da polarização (y'), e perpendicular à mesma (x'). Portanto produzir-se-ia uma anisotropia ao comparar-se as transições referentes a buraco leve e a buraco pesado (conforme parâmetro η definido no Capítulo 2) para as duas polarizações (x' e y'). Essa possibilidade será analisada na seção seguinte.

3.3 Anisotropia piezoelétrica

A refletividade normal para incidência ao longo do eixo de crescimento é [2]:

$$R_i = \frac{(1 - n_i)^2 + k^2}{(1 + n_i)^2 + k^2} \quad (3.16)$$

onde n_i é a parte real do índice de refração para a luz polarizada ao longo do eixo i (onde $i = x'$ ou y'), e k é a parte imaginária desse mesmo índice de refração. A parte imaginária k é isotrópica, já que ela depende da absorção (ou seja, dos estados eletrônicos), que não é afetada pela polarização do campo elétrico. Já a diferença entre $n_{x'}$ e $n_{y'}$ pode levar a uma birrefringência mensurável.

É difícil calcular essa quantia. Variações de índice de refração em GaAs “bulk” sujeito a tensão uniaxial foram medidas utilizando a birrefringência induzida pela deformação de n_{\parallel} e n_{\perp} (\parallel ou \perp à força aplicada)[33]. A diferença entre $n_{x'}$ e $n_{y'}$ deveria ser inferior àquela medida nestas experiências. Esta última produz de 4 a 5 oscilações na transmissão de luz através de polarizadores cruzados em amostras de espessura da ordem de 1 mm. Isso implica em

$$\left| \frac{n_{x'} - n_{y'}}{\bar{n}} \right| \leq \frac{\delta n_{\perp}}{n_{\parallel}} \sim 10^{-4} - 10^{-5}. \quad (3.17)$$

A contribuição dessa diferença na anisotropia é portanto muito pequena para ser medida por nosso experimento, e não nos levaria a valores de η tão grandes como os que medimos (ver tabela 2.2). Descartamos assim o

campo piezoelétrico como principal fonte de anisotropia e nos concentraremos de agora em diante nas mudanças das autofunções eletrônicas produzidas pelos efeitos combinados da tensão e do confinamento na banda de valência. Esse problema é abordado no próximo Capítulo.

Capítulo 4

Efeitos de Tensão e de confinamento

Aqui discutiremos as causas para a anisotropia na refletividade normal (ou seja, luz incidente e refletida ao longo de z') para luz polarizada ao longo dos eixos x' e y' com:

$$\begin{aligned}x' &= \frac{1}{\sqrt{2N^2 + 4}} [NN2] \\y' &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \end{bmatrix} \\z' &= \frac{1}{\sqrt{N^2 + 2}} [11N].\end{aligned}\tag{4.1}$$

Consideraremos apenas a refletividade na região dos gaps diretos, e tomaremos como medida da anisotropia nos espectros de refletividade o nosso parâmetro η definido na equação 2.5 do Capítulo 2. No Capítulo 3 disscrevemos a geometria da tensão *bisotrópica* associada ao descasamento da rede como consequência do crescimento na direção z' . Lá também discutimos os campos piezoelétricos associados com esse tipo de tensão. Tendo concluído que esses campos não são a razão principal para os altos parâmetros anisotrópicos observados nos nossos experimentos (tabela II do Capítulo 2), discutiremos aqui as outras causas para a anisotropia. Essa anisotropia grande deve então resultar da complexidade da banda de valência dos materiais III-V. Nas próximas seções tentaremos confirmar essa origem, separando em três principais contribuições provenientes dessa complexidade:

- (i) Tensão em $\vec{k} = 0$;

- (ii) Tensão a \vec{k} finito;
- (iii) Confinamento quântico.

4.1 Formulação geral do problema

Em semicondutores III-V “bulk” as bandas de valência a $\vec{k} = 0$ são descritas por um sextupeto ($J = \frac{3}{2}$, $J = \frac{1}{2}$). A interação spin-órbita (Δ_0) separa parcialmente essa degenerescência em um quadrupeto de $J = \frac{3}{2}$ e um dupeto $J = \frac{1}{2}$. A parte de cisalhamento da tensão separa ainda o quadrupeto $J = \frac{3}{2}$ em dois dupletos. A figura 4.1 mostra esquematicamente essas separações.

Consideraremos aqui que a separação (Δ_0) é muito grande comparada com qualquer outra energia envolvida no problema. Portanto, as contribuições da tensão a \vec{k} finito e do confinamento quântico podem ser tratados num subespaço 4×4 de $J = \frac{3}{2}$, $m_j = \pm \frac{3}{2}$ (“buraco pesado”) e $J = \frac{3}{2}$, $m_j = \pm \frac{1}{2}$ (“buraco leve”). Em termos das propriedades de transformação de espaços, as funções de onda podem ser escritas como (veja em [2], em particular as equações 2.48 a 2.50):

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= |HH\rangle = -\frac{|x\rangle + i|y\rangle}{\sqrt{2}} \alpha \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= |LH\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} (-|x\rangle + i|y\rangle) \beta + \sqrt{\frac{2}{6}} |z\rangle \alpha \end{aligned} \quad (4.2)$$

e seus conjugados invertidos no tempo. Nas equações acima LH é buraco leve (light hole), HH buraco pesado (heavy hole), α e β são as matrizes de Pauli para spin para cima e para baixo. A força de oscilador¹ de cada transição óptica no gap E_0 está diretamente relacionada ao único elemento de matriz de dipolo elétrico não nulo (na referencia [2], equação 2.51):

$$\langle x|P_x|c\rangle = \langle y|P_y|c\rangle = \langle z|P_z|c\rangle = iP. \quad (4.3)$$

Na equação acima z é o eixo de quantização do operador momento angular \vec{J} e x , y e z são os eixos cristalográficos cúbicos. Em $\vec{k} = 0$ e na ausência de tensão ou de confinamento quântico a escolha de eixos é arbitrária e a mesma expressão pode ser escrita para um conjunto arbitrário de eixos ortogonais

¹Força do oscilador é proporcional à intensidade do pico na transição óptica.

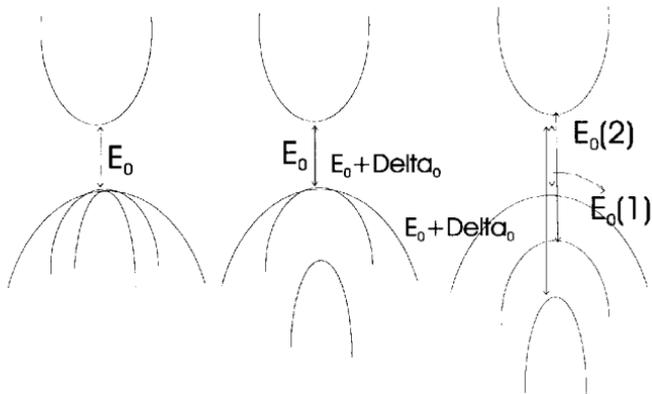


Figura 4.1: Estrutura de bandas de um semiconductor de estrutura cristalina zinc-blende. A primeira figura é na ausência de interação spin-órbita, a segunda é na presença de spin-órbita, e na terceira temos ainda uma tensão $\epsilon_p < 0$ (compressão) sobre a estrutura.

x' , y' , z' . Sob essas condições, a força de oscilador de cada transição é dada por:

$$\begin{aligned} f_x(HH) &\propto |\langle HH|P_x|c\rangle|^2 & f_y(HH) &\propto |\langle HH|P_y|c\rangle|^2 \\ f_x(LH) &\propto |\langle LH|P_x|c\rangle|^2 & f_y(LH) &\propto |\langle LH|P_y|c\rangle|^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Usando as equações 4.2 e 4.3 obteremos:

$$R_y = R_x = \frac{P^2/2}{P^2/6} = 3 \Rightarrow \eta \equiv 0. \quad (4.5)$$

Esse tratamento negligencia interações excitônicas e superposição da função envelope para transições quanticamente confinadas.

No que se segue, porque as perturbações estudadas preservam a invariância sob inversão temporal, o caso mais geral pode frequentemente ser reduzido a um problema perturbativo 2×2 , cuja perturbação é dada por um potencial arbitrário U . O mesmo pode ser escrito de maneira geral como:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & |HH\rangle & |LH\rangle \\ \hline \langle HH| & U_{HH} & U \\ \hline \langle LH| & U^* & U_{LH} \\ \hline \end{array}, \quad (4.6)$$

que resulta nos seguintes autovalores e autovetores:

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2}(U_{HH} + U_{LH}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(U_{HH} - U_{LH})^2 + |U|^2} \quad (4.7)$$

$$|1\rangle = \gamma|HH\rangle + \delta|LH\rangle \quad (4.8)$$

$$|2\rangle = -\delta^*|HH\rangle + \gamma|LH\rangle,$$

onde ε_1 é a primeira transição óptica e ε_2 é a segunda transição óptica e onde

$$\frac{\delta}{\gamma} = \frac{\Delta - F}{U} \quad (4.9)$$

e

$$\Delta^2 = \frac{1}{2}(U_{HH} - U_{LH})^2 + |U|^2 \quad (4.10)$$

$$F = \frac{1}{2}(U_{HH} - U_{LH}).$$

Para pequenas perturbações ($|U| \ll F$) a equação 4.9 se reduz a:

$$\frac{\delta}{\gamma} = \frac{U^*}{2F}. \quad (4.11)$$

É fácil calcular o efeito da pequena perturbação U no índice de anisotropia η numa base bem geral. De fato, usando as equações 4.3 e 4.4 obtemos:

$$\begin{aligned} \langle c|P_x|HH\rangle &= \frac{\langle c|P_x|X\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{iP}{\sqrt{2}} \\ \langle c|P_y|HH\rangle &= -\frac{P}{\sqrt{2}} \\ \langle c|P_x|LH\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle c|P_x|X\rangle = -\frac{iP}{\sqrt{6}} \\ \langle c|P_y|LH\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{6}} \langle c|P_y|Y\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}}P \end{aligned} \quad (4.12)$$

Então, para o sistema não perturbado:

$$f_x(HH) = f_y(HH) \propto \frac{P^2}{2} \quad f_x(LH) = f_y(LH) = \frac{1}{6} \quad (4.13)$$

$$R_x = \frac{f_x(HH)}{f_x(LH)} = R_y = \frac{f_y(HH)}{f_y(LH)} = 3 \quad (4.14)$$

ou

$$\alpha = \frac{R_x}{R_y} = 1 \quad e \quad \eta = 1 - \alpha \equiv 0 \quad (4.15)$$

Agora consideremos o caso em que a perturbação é não nula, onde $|HH\rangle$ e $|LH\rangle$ estão misturados por elementos fora da diagonal. Nesse caso:

$$\begin{aligned} \langle c|P_x|+\rangle &= \gamma \langle c|P_x|HH\rangle + \delta \langle c|P_x|LH\rangle \\ &= \gamma \frac{iP}{\sqrt{2}} - \frac{iP}{\sqrt{6}}\delta = \frac{i\gamma P}{\sqrt{2}} \left[1 - \frac{i\delta/\gamma}{\sqrt{3}} \right] \\ \langle c|P_y|+\rangle &= -\gamma \frac{P}{\sqrt{2}} - \frac{P}{\sqrt{6}}\delta = -\frac{\gamma P}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{\delta/\gamma}{\sqrt{3}} \right] \\ \langle c|P_x|-\rangle &= -\delta^* \frac{iP}{\sqrt{2}} - \gamma \frac{iP}{\sqrt{6}} = \frac{i\gamma P}{\sqrt{6}} \left[1 + \sqrt{3}\delta^*/\gamma \right] \\ \langle c|P_y|-\rangle &= \delta^* \frac{P}{\sqrt{2}} - \gamma \frac{P}{\sqrt{6}} = \frac{-\gamma P}{\sqrt{6}} \left[1 - \sqrt{3}\delta^*/\gamma \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

e daí temos:

$$\begin{aligned} f_x(+) &= \frac{\gamma^2 P^2}{2} \left| 1 - \frac{i\delta/\gamma}{\sqrt{3}} \right|^2 & f_y(+) &= \frac{\gamma^2 P^2}{2} \left| 1 + \frac{\delta/\gamma}{\sqrt{3}} \right|^2 \\ f_x(-) &= \frac{\gamma^2 P^2}{6} \left| 1 + \sqrt{3}\delta^*/\gamma \right|^2 & f_y(-) &= \frac{\gamma^2 P^2}{6} \left| 1 - \sqrt{3}\delta^*/\gamma \right|^2. \end{aligned} \quad (4.17)$$

E para R_x e R_y obtemos:

$$\begin{aligned} R_x &= \frac{f_x(+)}{f_x(-)} = 3 \left| \frac{1 - \frac{\delta/\gamma}{\sqrt{3}}}{1 + \sqrt{3}\delta^*/\gamma} \right|^2 \\ R_y &= 3 \left| \frac{1 + \frac{\delta/\gamma}{\sqrt{3}}}{1 - \sqrt{3}\delta^*/\gamma} \right|^2. \end{aligned} \quad (4.18)$$

O resultado para o parâmetro α ligado à anisotropia nesse caso é:

$$\alpha = \frac{R_x}{R_y} = \frac{\left| 1 - \frac{\delta/\gamma}{\sqrt{3}} \right|^2 \left| 1 - \sqrt{3}\delta^*/\gamma \right|^2}{\left| 1 + \sqrt{3}\delta^*/\gamma \right|^2 \left| 1 + \frac{\delta/\gamma}{\sqrt{3}} \right|^2}, \quad (4.19)$$

uma expressão extremamente complicada, mas que se reduz a

$$\alpha = 1 - 9.24 \frac{\delta + \delta^*}{\gamma} \quad \text{para} \quad |\delta|/\gamma \ll 1 \quad (4.20)$$

e finalmente teremos para a anisotropia:

$$\eta = 1 - \alpha = 9.24 \frac{\delta + \delta^*}{\gamma} \simeq 9.24 \frac{U^* + U}{2F}. \quad (4.21)$$

A expressão acima indica que mesmo para pequenas misturas teremos uma grande anisotropia. O único caso em que a mesma se anularia seria para δ imaginário puro, enquanto que se δ fosse real, teríamos anisotropias enormes.

O resultado genérico acima deve agora ser traduzado para nosso caso particular, o que faremos nos próximos itens deste Capítulo. Note que como a anisotropia do tensor de massa não está presente nesses cálculos, os resultados aqui descritos são válidos para uma orientação arbitrária dos eixos x' , y' e z' .

4.2 O poço quântico tensionado

A Hamiltoniana total que descreve o espectro de energia para a banda de valência de um poço quântico na presença de tensão pode ser escrita como [34]:

$$H = H_h + H_\epsilon, \quad (4.22)$$

onde H_h representa a hamiltoniana de Luttinger-Kohn para todos os estados e H_ϵ representa a hamiltoniana de tensão, dadas por:

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left[\frac{1}{2} \gamma_1 K^2 - \gamma_2 \left(J_x^2 - \frac{1}{3} \mathbf{J}^2 \right) k_x^2 + p.c. \right] + 2\gamma_3 \frac{\hbar^2}{m_0} (\{J_x, J_y\} k_x k_y + p.c.) - V_h(z) \quad (4.23)$$

e

$$H_\epsilon = \frac{2}{3} D_u \left[\left(J_x^2 - \frac{1}{3} \mathbf{J}^2 \right) \epsilon_{xx} + p.c. \right] + \frac{4}{3} D'_u (\{J_x, J_y\} \epsilon_{xy} + p.c.), \quad (4.24)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre, D'_u e D_u são potenciais de deformação para as bandas de valência, ϵ_{ij} são as componentes do tensor de tensão², J_i são as matrizes de momento angular correspondentes a um estado de spin $-\frac{3}{2}$, p.c. significa permutação cíclica dos índices, e finalmente $\{a, b\} = \frac{1}{2}(ab + ba)$. Aqui, k_x , k_y e k_z são componentes do vetor de onda de um buraco ao longo dos eixos x, y e z respectivamente, e

$$K^2 \equiv k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (4.25)$$

O buraco está confinado na direção z por um poço de potencial $V_h(z)$, com uma largura de poço L e uma barreira de potencial V_0 . Assumimos que os parâmetros de Luttinger-Kohn γ_1 , γ_2 e γ_3 variam com z da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \gamma_i &= \gamma_{ip} & \text{se} & \quad |z| \leq L/2, \quad i = 1, 2, 3 \\ \gamma_i &= \gamma_{ib} & \text{se} & \quad |z| > L/2, \quad i = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (4.26)$$

²O tensor $\overleftrightarrow{\epsilon}$ contém apenas a parte da tensão de cisalhamento. A parte hidrostática da tensão está incluída na banda de condução.

onde os subíndices p e b se referem a poço e barreira respectivamente. Adotando unidades efetivas:

$$V = \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2}, a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} \quad (4.27)$$

para energia e comprimento respectivamente, a hamiltoniana total pode ser escrita como uma matriz 4x4:

$$H = \begin{pmatrix} P+Q & V & -S & 0 \\ V^* & P-Q & 0 & S \\ -S^* & 0 & P-Q & V \\ 0 & S^* & V^* & P+Q \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

com

$$P \pm Q = \left[\frac{1}{2} (\gamma_1 \pm \gamma_2) k^2 + \frac{1}{2} (\gamma_1 \mp 2\gamma_2) k_z^2 \right] \pm D_u \left[\epsilon_{zz} - \frac{1}{2} (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \right] + V_h(z), \quad (4.29)$$

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - i2\gamma_3 k_x k_y \right] + \left(\frac{D_u}{\sqrt{3}} (\epsilon_{yy} - \epsilon_{xx}) + i \frac{2}{\sqrt{3}} D'_u \epsilon_{xy} \right), \quad (4.30)$$

$$S = \left[i\gamma_3 \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z \right] - \left(\frac{2}{\sqrt{3}} D'_u (\epsilon_{yz} + i\epsilon_{zx}) \right), \quad (4.31)$$

onde $k = k_x^2 + k_y^2$. Como proposto por Broido e Sham (olhar em [34] e [35]), essa hamiltoniana total 4x4 pode ser reduzida a duas matrizes 2x2 através de uma transformação unitária apropriada, ficando com:

$$\begin{bmatrix} P+Q-E & |V|-i|S| & 0 & 0 \\ |V|+i|S| & P-Q-E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P-Q-E & |V|-i|S| \\ 0 & 0 & |V|+i|S| & P+Q-E \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Psi'_1 \\ \Psi'_2 \\ \Psi'_3 \\ \Psi'_4 \end{pmatrix} = 0. \quad (4.32)$$

Aqui Ψ'_1 e Ψ'_2 referem-se à primeira e à segunda transição óptica respectivamente. Nas equações acima, x, y e z se referem sempre aos eixos cúbicos. Devido à forma distorcida (“warped”) da banda de valência, transformar essas equações para eixos arbitrários é uma tarefa um tanto quanto trabalhosa. Mas isso foi feito por Xia em [36]. Seus resultados são bastante úteis no que se refere a cálculos numéricos, mas não os leva a nenhuma aproximação intuitiva. Antes de discutí-los, tentaremos isolar o efeito de cada perturbação em si fazendo uma análise qualitativa.

4.3 Material “bulk” tensionado a $\vec{k}=0$

A coisa mais simples é tratar primeiramente os efeitos da tensão a $\vec{k}=0$ na ausência de confinamento quântico. Nesse caso a hamiltoniana é:

$$\begin{bmatrix} F - E & |G| - i|Q| \\ |G| + i|Q| & -F - E \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Psi'_1 \\ \Psi'_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.33)$$

com

$$\begin{aligned} F &= -b \left(\frac{\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}}{2} - \epsilon_{zz} \right) \\ G &= -\frac{\sqrt{3}}{2} b (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) + id\epsilon_{xy} \\ Q &= -d (\epsilon_{xz} - i\epsilon_{yz}). \end{aligned} \quad (4.34)$$

As soluções da equação 4.33 são:

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \pm \sqrt{|F|^2 + |G|^2 + |Q|^2} \\ &= \sqrt{d^2 (\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{yz}^2 + \epsilon_{zx}^2) + \frac{b^2}{2} \{ (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + (\epsilon_{yy} - \epsilon_{zz})^2 (\epsilon_{xx} - \epsilon_{zz})^2 \}}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Nas equações acima, temos:

$$b = \frac{2}{9} D_u \quad d = \frac{2\sqrt{3}}{9} D'_u. \quad (4.36)$$

Apesar das expressões acima implicarem na escolha de eixos cúbicos, sob modificações adequadas das constantes b e d (potenciais de deformação) o mesmo poderia ser escrito para uma orientação (x', y', z') arbitrária. Isso porque estamos em $\vec{k}=0$, onde é irrelevante se os eixos são eixos principais do tensor de massa ou não. A forma da tensão biaxial para tal sistema arbitrário de eixos está dada no Capítulo 3. Comparando as equações 4.11, 4.21 e 4.33 chegamos a conclusão que a eventual anisotropia introduzida por uma tensão *bisotrópica* nesse caso particular ($\vec{k}=0$) seria dado por:

$$\begin{aligned} \eta &= 9.24 \frac{\delta + \delta^*}{\gamma} = 9.24 \frac{U + U^*}{2F} \\ &= 9.24 \sqrt{\frac{\frac{3}{4} b^2 (\epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'})^2 + d^2 \epsilon_{x'y'}^2}{b^2 \left(\frac{\epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{2} - \epsilon_{z'z'} \right)^2}}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Como visto no Capítulo 3, para uma tensão *bisotrópica* perpendicular ao eixo z' temos

$$\begin{aligned}\epsilon_{x'x'} &= \epsilon_{y'y'} = \epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_{z'z'} &= -\Gamma\epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_{x'y'} &= 0,\end{aligned}\tag{4.38}$$

o que nos leva a

$$\eta = 0.$$

Desse resultado portanto concluímos que uma tensão *bisotrópica* a $\vec{k}=0$ na ausência de confinamento quântico preserva a isotropia do material “bulk”, mesmo se a direção de crescimento não for uma direção de alta simetria. Assim sendo, a tensão por si própria não pode ser a responsável pela anisotropia observada.

4.4 Material “bulk” tensionado a $\vec{k} \neq 0$

Esse caso já é um pouco mais complicado. Se quiséssemos escrever nossas equações de uma maneira simples, teríamos que usar ao invés do sistema x' , y' , z' , os eixos principais do tensor de massa. Mas isso só seria possível para z' ao longo de uma direção de alta simetria, tal como [001] ou [111], e isso não nos interessa aqui. Queremos realizar o cálculo para uma direção mais geral, caso em que não é óbvio se a tensão biaxial produz ou não anisotropia na força de oscilador em $\vec{k} \neq 0$. As interações excitônicas fazem com que a a força do oscilador de uma transição óptica receba contribuições de uma região finita de \vec{k} ao redor da zona de Brillouin. As dimensões desta região são da ordem de:

$$|\vec{k}| \sim \frac{1}{a_{exc}},\tag{4.39}$$

onde $a_{exc} \sim 100 \text{ \AA}$ é o raio excitônico. Uma tensão uniaxial ao longo da direção z' (com $z'=[11N]$) poderia em princípio produzir tais anisotropias. Isso porque a tensão uniaxial introduziria deformações diferentes em x' e y' , a menos que $N=1$ ou $N \rightarrow \infty$. No entanto, para nossa tensão *bisotrópica* $\epsilon_{x'x'} = \epsilon_{y'y'}$ e $\epsilon_{x'y'} = 0$. Isso significa que uma tensão *bisotrópica*, mesmo a $\vec{k} \neq 0$, deveria preservar a isotropia do material, o que nos deixaria ainda com $\eta \equiv 0$.

Até agora já discutimos a possibilidade do campo piezoelétrico causar anisotropia, da própria tensão tanto a $\vec{k} = 0$ como a \vec{k} finito, e todas os casos resultaram em $\eta \equiv 0$. Isso nos leva a deduzir que a anisotropia somente acontece quando existe confinamento quântico. Esse será o tema da próxima seção.

4.5 Efeitos de confinamento quântico e tensão *bisotrópica* sobre o material a \vec{k} arbitrário

Esse problema é bastante interessante. Ele já foi parcialmente tratado por Xia [36] em alguns casos particulares. Entretanto nenhum desses casos particulares coincide com o nosso. Mas antes de partir para o nosso caso particular, uma discussão do que fez Xia será bastante esclarecedora. O caso anisotrópico discutido por ele corresponde a $N=0$ (direção $[11\bar{N}]$ com $N=0$), mas seus resultados contêm fatores qualitativos que são aplicáveis ao nosso caso onde $N=3$. Ele examina primeiramente o caso não tensionado, onde a anisotropia vem da combinação entre confinamento e distorção (“warping”), e depois o caso de tensão uniaxial (que é menos simétrico que nosso caso de tensão *bisotrópica*).

A figura 4.2 (tirada de [36]) mostra a relação de dispersão dos autovalores da equação 4.32 para $N \rightarrow \infty$ ($z'=[001]$, $x'=[110]/\sqrt{2}$, $y'=[\bar{1}10]/\sqrt{2}$), $N=1$ e $N=0$ respectivamente para o caso não tensionado. A mistura das funções de onda de $|HH\rangle$ e $|LH\rangle$ a \vec{k} finito são evidentes nessas figuras, mesmo quando o poço quântico é crescido ao longo de uma direção de alta simetria (fig.4.2 (a) e (c)). Isso vai alterar a massa efetiva de ambos os portadores (veja figura 4.3) e a intensidade relativa da primeira e segunda transições, mas não introduz nenhuma anisotropia entre os eixos x' e y' , levando portanto a $\eta \equiv 0$. Para $N=0$, no entanto, a banda toda (ver figura 4.2(b)) é nitidamente anisotrópica, como mostrado pela dispersão ao longo das direções $k_{x'}$ e $k_{y'}$, que possuem uma diferença marcante. Essa anisotropia dos níveis de energia se torna evidente ao calcular o elemento de matriz da transição óptica para cada uma das transições. Isso está ilustrado na figura 4.4. Nessa figura podemos ver que apesar de não existir anisotropia entre os eixos x' e y' para qualquer valor de \vec{k} quando o eixo de crescimento é $[001]$ ou $[111]$, uma anisotropia grande é vista a \vec{k} finito para $N=0$. Xia, em [36], não calcula $f_{x'}(\vec{k})$ e $f_{y'}(\vec{k})$, mas sim apenas uma destas duas quantias em função da orientação em \vec{k} .

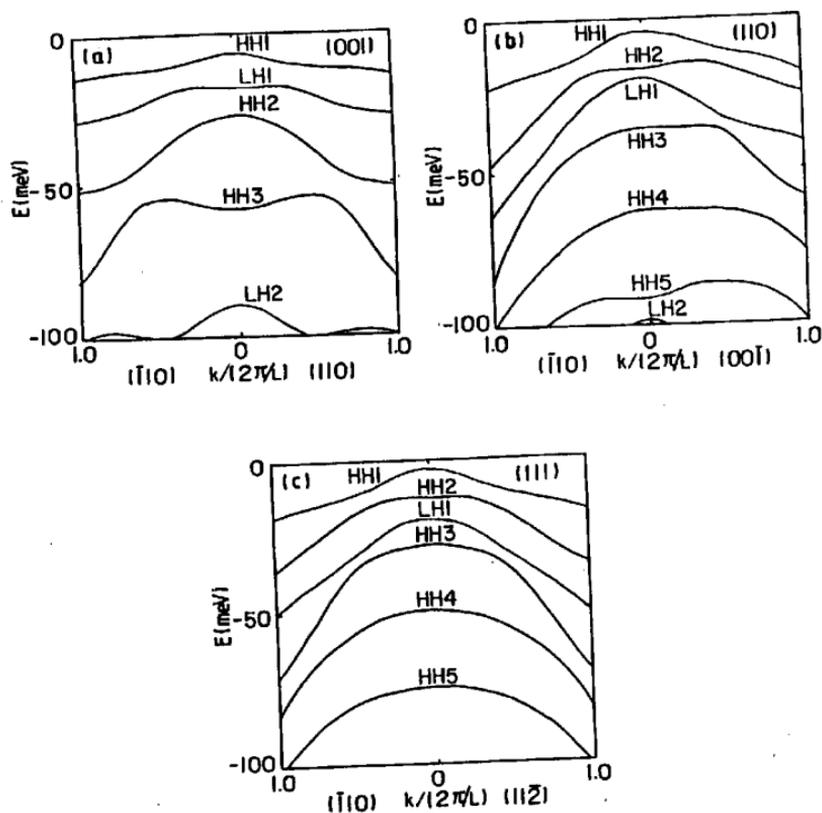


Figura 4.2: Subbandas de buraco para superredes crescidas sob orientação $[11\bar{N}]$. Os cálculos foram feitos para superredes de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ com largura de poço (barreira) de 100 \AA (50 \AA), e (a) $N = \infty$, (b) $N = 0$, (c) $N = 1$.

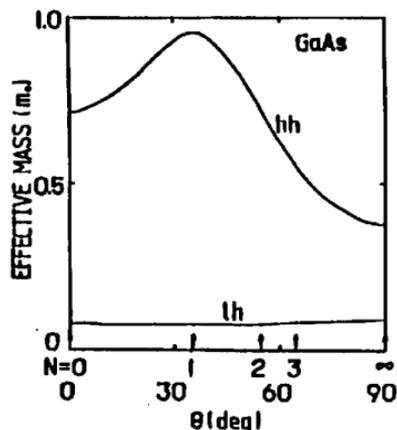


Figura 4.3: Massas efetivas de buraco pesado (HH) e buraco leve (LH) como função de θ (ângulo entre a direção de crescimento (z') e a direção cúbica [001]).

Mesmo assim, a anisotropia existente para $f_{\parallel}(k_{x'}) \neq f_{\parallel}(k_{y'})$ faz suspeitar que $f_{x'}$ poderia ser diferente de $f_{y'}$ mesmo em $\vec{k} = 0$. Esta suspeita é confirmada pelo cálculo de Kajikawa em [38], que calcula $f_{x'}$ e $f_{y'}$ em $\vec{k} = 0$ para estruturas de GaAs/AlGaAs crescidas em substratos $z'=[110]$ [$x'=[001]$ e $y'=(1\bar{1}0)$] em função de uma tensão uniaxial aplicada ao longo do eixo de crescimento (ver figura 4.5). Nessas figuras podemos apreciar dois fatos:

(i) Mesmo em amostras não tensionadas existem diferenças apreciáveis entre as forças de oscilador para polarizações ao longo dos eixos x' e y' para as duas primeiras transições ópticas. No caso da figura 4.5, na ausência de tensão teríamos $\eta = 0.5$.

(ii) Outro fato a ser observado é que conforme se aplica tensão, a anisotropia aumenta enormemente, muda de sinal e pode até apresentar singularidades.

Este último fato é um efeito da “sintonização” (tuning) dos níveis de energia da banda de buracos produzido pela tensão que leva a anti-cruzamentos entre estes níveis. Este aspecto será discutido melhor na seção seguinte.

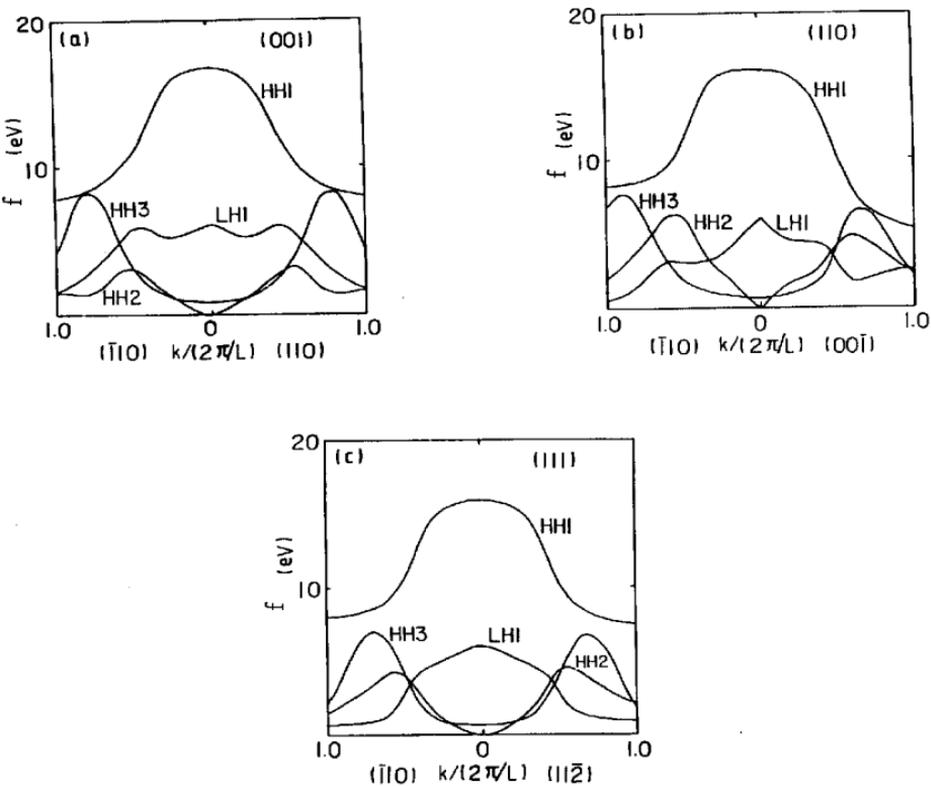


Figura 4.4: Elemento da matriz de transição óptica no plano para (a) $N \rightarrow \infty$, (b) $N = 0$ e (c) $N = 1$.

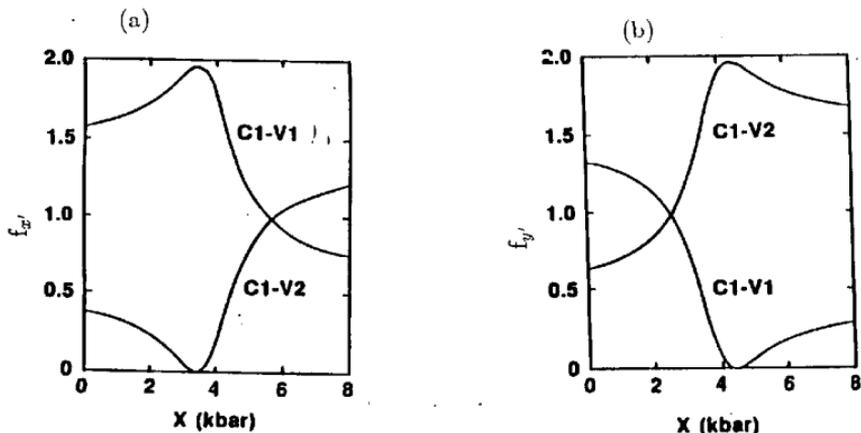


Figura 4.5: Subbanda de buracos para superredes orientadas ao longo de [110] sob tensão uniaxial entre $X=0$ e 8 kbar.

4.5.1 Caso tensionado

Aqui os resultados de Xia já não são tão elaborados, mas passam a ser somente um guia crú para nossos resultados experimentais. Primeiramente ele trata tensões uniaxiais em poços quânticos com a força aplicada ao longo da direção z' , caso menos simétrico que o de nossa tensão *bisotrópica*. Depois ele realiza um cálculo explícito apenas para o caso de $N=1$, onde nenhuma anisotropia interplanar pode ocorrer. Mesmo assim, as figuras ?? e 4.6 (autovalores e elementos de matriz óptica interplanar) mostram uma mistura dramática entre estados de $|HH\rangle$ e $|LH\rangle$, afetando fortemente os elementos de matriz ópticos. O quanto os estados vão se misturar vai depender crucialmente da tensão aplicada. Para alguns valores da tensão, os estados não perturbados de $|HH\rangle$ e $|LH\rangle$ podem cruzar a algum valor de \vec{k} . A natureza da Hamiltoniana nessas junções exige que esses “crossings” se tornem “anti-crossings” quando as funções de onda para $|HH\rangle$ e $|LH\rangle$ trocam de papel. Assim sendo, ao sintonizarmos a força aplicada e a espessura do poço podemos conseguir mudanças dramáticas nas intensidades relativas da primeira e segunda linhas espectrais, como mostrado na fig 4.6. Isto é revelado de forma dramática no paper de Kajikawa [38], cujos resultados são mostrados nas figuras 4.5 (a) e (b). Desta figura pode-se observar que para $z'=[110]$ partimos

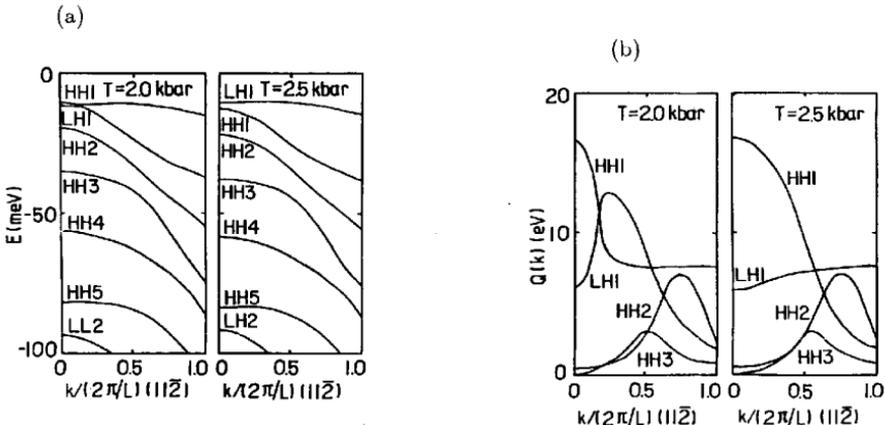


Figura 4.6: (a) Subbandas de buracos para superredes orientadas $[111]$ sob tensão uniaxial $X=2.0$ e 2.5 kbar. Em (b)

de $\eta = 0.5$ no caso não tensionado, e passamos a ter uma grande variação de η com a tensão, como se pode observar da figura 4.7, construída a partir da figura [38]. Note que esta curva está feita apenas para um valor de largura do poço (no caso $L=100$ Å), e que no entanto a anisotropia, como depende do confinamento, varia enormemente também com L . Os cálculos mostrados também estão feitos para o caso de uma tensão uniaxial aplicada, mas acreditamos que o comportamento de com a tensão não seria muito diferente disso no caso da tensão *bisotrópica* de nossas amostras.

4.6 Resumo

Os resultados acima podem ser aplicados ao nosso caso com as seguintes principais conclusões:

- (i) A tensão *bisotrópica* por si só não pode produzir anisotropia.
- (ii) O confinamento quântico ao longo de uma direção de baixa simetria resulta, em geral, em $\eta \neq 0$.

Nesse último caso, confinamento e tensão, quando agem juntos, podem ser sintonizados de tal forma a resultar em “anti-crossings”, o que pode tornar η bastante grande. Uma interpretação quantitativa dos resultados mostrados

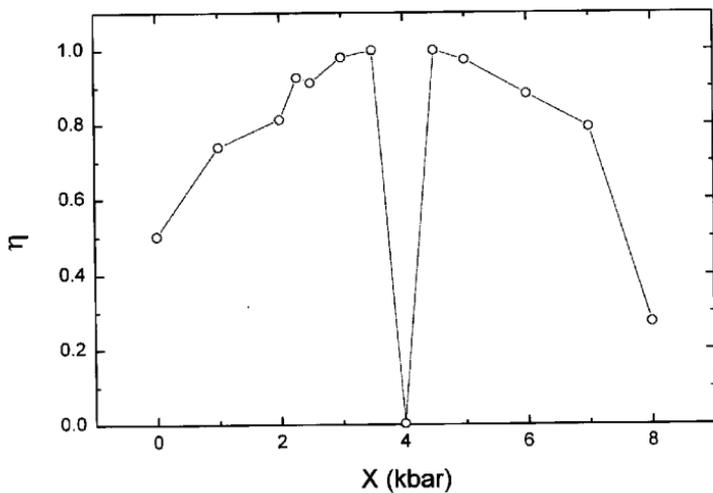


Figura 4.7: Valores de η em função de X extraídos a partir das figuras 4.5 (a) e (b).

na tabela 2.2 requereria uma repetição dos cálculos de Xia e Fujikawa para o caso de material tensionado isotropicamente e com $N=3$. Um fator complicante na realização desse cálculo é o efeito misturador de $V(z)$ e sintonizador da tensão para $\vec{k} \neq 0$, já que a interação Coulombiana poderia resultar numa intensidade que é obtida integrando num volume de \vec{k} finito. O problema em toda sua extensão é bastante complicado. Tal cálculo é passível de ser feito, mas excede o objetivo dessa tese de mestrado. No próximo Capítulo aplicamos esses resultados para obter uma interpretação semi quantitativa de nossos resultados experimentais (apresentados no Capítulo 2).

Capítulo 5

Discussão dos resultados

A discussão do Capítulo anterior nos mostra que os efeitos combinados do tensor de massa anisotrópico, da tensão *bisotrópica* e do confinamento ao longo de uma direção de baixa simetria são os responsáveis pela anisotropia observada na refletividade modulada. A hamiltoniana do confinamento somada a tensão é diagonal para crescimento ao longo de $[001]$, mas mesmo neste caso alguma mistura entre os estados de $|HH\rangle$ e $|LH\rangle$ pode ser observada a \vec{k} finito. Estas mudanças, no entanto, são as mesmas para ambas as direções mutuamente perpendiculares no plano da amostra. Nesse caso, as duas perturbações ($V(z)$ e tensão) são diagonais e podem ser tratadas como estados não degenerados, com exceção sendo feita no caso de eventuais mudanças no tensor de massa e na força de oscilador. Nesse caso os buracos leve e pesado são tratados separadamente, ambos sujeitos a potenciais de confinamento de alturas diferentes. Esse problema foi exaustivamente tratado por muitos autores ([9], [39]), e seus resultados serão brevemente resumidos na próxima seção. Lá também mostraremos algumas aplicações a nossas amostras crescidas ao longo da direção $[001]$. Na seção seguinte aplicaremos o mesmo tratamento, mas agora **incorreto**, para as amostras crescidas ao longo de $[113]$. Discutiremos os desvios entre o tratamento teóricos e os resultados experimentais dentro do contexto dos resultados obtidos no Capítulo 4. Finalmente, na última seção, analisaremos os resultados experimentais da tabela 2.2 sob o enfoque do que já foi discutido ao longo desse trabalho.

5.1 Aplicação ao caso de crescimento ao longo de [001]

Estamos interessados nos níveis eletrônicos de buraco leve e buraco pesado, e vamos, para efeito de simplicidade na hora de fazer as contas para a direção [113], desprezar efeitos quadráticos. Assim sendo, desprezaremos acoplamentos entre estados de $J=3/2$ e $J=1/2$. Trabalharemos portanto com o Hamiltoniano no subespaço $J=3/2$. Utilizaremos para o cálculo a representação $|j, m_j\rangle$ (que pode ser escrita em termos da base $|l, s; m, \varepsilon\rangle$)¹ para indicar os estados de valência ou condução dos semicondutores de estrutura zinc-blende. As bandas de valência em nossa representação são escritas como:

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2}; 1, \uparrow \right\rangle & HH \quad (5.1) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \downarrow \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \uparrow \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, \downarrow \right\rangle & LH \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \downarrow \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \uparrow \right\rangle. \end{aligned}$$

Temos ainda para a banda de valência:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| 0, \frac{1}{2}; 0, \downarrow \right\rangle & (5.2) \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \left| 0, \frac{1}{2}; 0, \uparrow \right\rangle. \end{aligned}$$

Escrevemos o Hamiltoniano de tensão como:

$$\begin{aligned} H_\varepsilon^{(\nu)} &= -a(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) - 3b^{(\nu)} \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3} \mathbf{L}^2 \right) \epsilon_{xx} + p.c. \right] & (5.3) \\ &\quad - \frac{6d^{(\nu)}}{\sqrt{3}} \left[\frac{(L_x L_y + L_y L_x)}{2} \epsilon_{xy} + p.c. \right], \end{aligned}$$

¹A base $|l, s; m, \varepsilon\rangle$ é constituída de autoestados dos operadores \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , L_x e S_x , com $\mathbf{L}(\mathbf{S})$ sendo o momento angular orbital (de spin). A representação $|j, m_j\rangle$ que será usada daqui por diante é formada por autovetores de \mathbf{J}^2 e J_x , onde \mathbf{J} é o momento angular total.[40]

onde p.c. significa permutação cíclica, e a , b e d são potenciais de deformação. Observando a forma do Hamiltoniano acima, nota-se de imediato que os estados eletrônicos da banda de condução, por possuírem momento angular orbital nulo, somente sofrerão influência da parte hidrostática². Simplificaremos portanto se escolhermos $a = a^{(v)} - a^{(c)}$ (a = potencial de deformação hidrostático), de tal forma a incluir também na banda de condução toda a contribuição hidrostática da banda de valência (essa afirmação é geral, e vale para qualquer orientação). Aplicamos finalmente o Hamiltoniano total para Γ_1 , com:

$$H_\epsilon^{(c)} = -a(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (5.4)$$

nos estados degenerados da banda de condução e obtemos

$$E_c = E_0 + \frac{1}{3}\Delta_0 + a(2 - \Gamma)\epsilon_{\parallel} = E_0 + \frac{1}{3}\Delta_0 + \delta E_c(\epsilon), \quad (5.5)$$

onde Γ é um fator geométrico, descrito em [30] para um caso mais geral, e cujos valores estão na tabela 5.1 para nosso caso mais simples de orientação [001]. ϵ_{\parallel} está dado por

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_s - a_0}{a_0}, \quad (5.6)$$

onde a_s é o parâmetro de rede do substrato, e a_0 é o parâmetro de rede que o material teria se não estivesse tensionado (como já definido anteriormente na equação 3.1), e seus valores também estão mostrados na tabela 2.1.

No caso da banda de valência, $H_\epsilon^{(v)}$ contém apenas a componente de cisalhamento³ (essa afirmação também é geral e vale para qualquer direção). Novamente aplicamos o Hamiltoniano total para a banda de valência, com

$$H_\epsilon^{(v)} = -3b^{(v)} \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3}L^2 \right) \epsilon_{xx} + p.c. \right] - \frac{6d^{(v)}}{\sqrt{3}} \left[\frac{(L_x L_y + L_y L_x)}{2} \epsilon_{xy} + p.c. \right] \quad (5.7)$$

nos estados de buraco leve e buraco pesado da banda de valência e obtemos o seguinte sistema:

$$H_\epsilon^{(v)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}\Delta_0 - \eta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}\Delta_0 + \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3}\Delta_0 + \eta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3}\Delta_0 - \eta \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

²Vide equação 3.11 para componentes de $\hat{\epsilon}_H$.

³Vide equação 3.11 para componentes de $\hat{\epsilon}_S$.

na base ordenada $\left\{ \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \right\}$, e onde

$$\eta = b(1 + \Gamma)\epsilon_{\parallel}, \quad (5.9)$$

e cujos valores também estão mostrados na tabela 2.1. Teremos então como autoestados para buraco leve (E_v^l) e buraco pesado (E_v^h) as seguintes energias:

$$\begin{aligned} E_v^h &= \frac{1}{3}\Delta_0 + \eta = \frac{1}{3}\Delta_0 + \delta E_v^h(\epsilon) \\ E_v^l &= \frac{1}{3}\Delta_0 - \eta = \frac{1}{3}\Delta_0 + \delta E_v^l(\epsilon). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Na tabela 5.2 estão ilustrados alguns valores para os δE 's.

Tabela 5.1- Valores de Γ , a_0 e ϵ_{\parallel} para amostras com crescimento ao longo de [001] e para x nominal (x=0.20).

	Γ	a_0	ϵ_{\parallel}
GaAs	0.901	5.6533	
InAs	1.088	6.0583	
In _{0.2} Ga _{0.8} As	0.938	5.7343	-0.01413

Tabela 5.2: Valores de δE 's para as amostras [100] utilizadas para x nominal (ou seja, x=0.20). As duas últimas colunas mostram os valores da variação nos gaps de buracos pesado e leve devida à tensão biaxial.

x	$\delta E_c(\epsilon)$ (meV)	$\delta E_v^h(\epsilon)$ (meV)	$\delta E_v^l(\epsilon)$ (meV)
0.22	111.026	56.9	-56.9
0.20	101.451	51.8	-51.8
0.18	91.609	46.6	-46.6

x	$\delta E_0^h(\varepsilon)$ (meV)	$\delta E_0^l(\varepsilon)$ (meV)
0.22	54.126	167.926
0.20	49.651	153.251
0.18	45.009	138.209

5.1.1 Definições úteis

A altura da barreira que confina os portadores está dada por:

$$\begin{aligned}
 V_c &= \Delta E_c = Q \Delta E_g^h & (5.11) \\
 V_h &= \Delta E_v^h = (1 - Q) \Delta E_g^h \\
 V_l &= \Delta E_v^l = \Delta E_g^l - \Delta E_c,
 \end{aligned}$$

onde os ΔE_g 's são calculados com base nos δE 's da seção passada e cujos valores estão ilustrados na tabela 5.3. O Q nada mais é que um parâmetro de descasamento de bandas, definido da seguinte forma:

$$Q = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g^h}. \quad (5.12)$$

Tabela 5.3-Valores de ΔE_g 's para alguns valores de concentração de In no poço.

x	ΔE_g^h [meV]	ΔE_g^l [meV]
x=0.22	251.124	137.324
x=0.20	229.349	125.749
x=0.18	207.441	114.241

5.1.2 Diagramas de energia de transição

Para calcularmos a energia de transição em função de Q , utilizamos uma versão simplificada do modelo de Bastard [41], [42], bastante conhecido e já bastante usado para descrever o estado eletrônico de heteroestruturas com base no modelo de Kane para a dispersão “bulk” dos materiais constituintes [9], [39]. Este modelo é válido quando os materiais que constituem a amostra têm o gap no centro da Zona de Brillouin e quando a parte periódica da função de Bloch é similar em ambos os materiais. 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 nada mais são que: continuidade das funções e de sua primeira derivada pesada pela massa efetiva da camada, ou seja:

$$\chi_A(z) = \chi_B(z) \quad (5.13)$$

e

$$\frac{1}{\mu_A(E, z)} \frac{d\chi_A(z)}{dz} = \frac{1}{\mu_B(E, z)} \frac{d\chi_B(z)}{dz}, \quad (5.14)$$

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[3]:

$$E = \frac{\hbar^2 k_A^2}{2\mu_A(E)} \quad (5.15)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_B^2}{2\mu_B(E)}.$$

Para uma superrede com poços (barreiras) de largura L_A (L_B), a periodicidade presente requer que sejam satisfeitas as condições 5.13 e 5.14 para apenas duas interfaces, o que nos deixa com um sistema de quatro equações lineares. Esse sistema somente terá solução se o determinante da matriz associada ao mesmo for nulo, o que nos leva à relação de dispersão da superrede:

$$\cos(qD) = \cos(k_A L_A) \cos(k_B L_B) - \frac{1}{2} \left(\xi + \frac{1}{\xi} \right) \sin(k_A L_A) \sin(k_B L_B) \quad (5.16)$$

com

$$\xi = \frac{k_A}{\mu_A(E)} \frac{\mu_B(E)}{k_B}, \quad (5.17)$$

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. 5.15. No caso de estados ligados dentro do poço, 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:

$$\cos(qD) = \cos(k_A L_A) \cos(\kappa_B L_B) - \frac{1}{2} \left(-\tilde{\xi} + \frac{1}{\tilde{\xi}} \right) \sin(k_A L_A) \sin(\kappa_B L_B) \quad (5.18)$$

com

$$\tilde{\xi} = i \frac{k_A}{m_A} \frac{m_B}{k_B}. \quad (5.19)$$

Os k 's carregam informação fundamental do sistema.

Os níveis de energia do poço (que chamaremos de λ^e , λ^h e λ^l) são calculados para cada valor de Q usando as alturas das barreiras definidas nas equações 5.11 e os valores para as massas efetivas para cada banda⁴. Os valores dessas massas efetivas estão ilustrados na tabela 5.4. Para calcular os estados eletrônicos, fixamos q no centro da minizona e encontramos as raízes da eq. 5.18 pelo conhecido método das secantes[43]. Variando Q e escrevendo a energia de transição como:

$$E_{ij} = E_0 + \delta E_0 + \lambda_i^h + \lambda_j^e,$$

obtemos as curvas de energia de transição da amostra em questão em função de Q para um dado ponto de alta simetria da zona de Brillouin da estrutura. Essas curvas podem ser comparadas com os valores experimentais obtidos por PR, e mostrados no Capítulo 2, permitindo então que identifiquemos a que transição corresponde cada estrutura observada experimentalmente. Essa comparação entre os valores experimentais está ilustrada nas figuras ?? e ?? para as amostras de 40 Å e 100 Å respectivamente. Foi usando esse método que identificamos as transições referentes a LH e HH, para somente então calcular nosso parâmetro de anisotropia definido na equação 2.5 e cujos valores experimentais estão na tabela 2.2.

⁴Embora o modelo inclua uma massa dependente da energia, o sistema InGaAs/GaAs não apresenta não parabolicidade marcante, o que nos permite usar massas efetivas constantes.

Substrato [001]

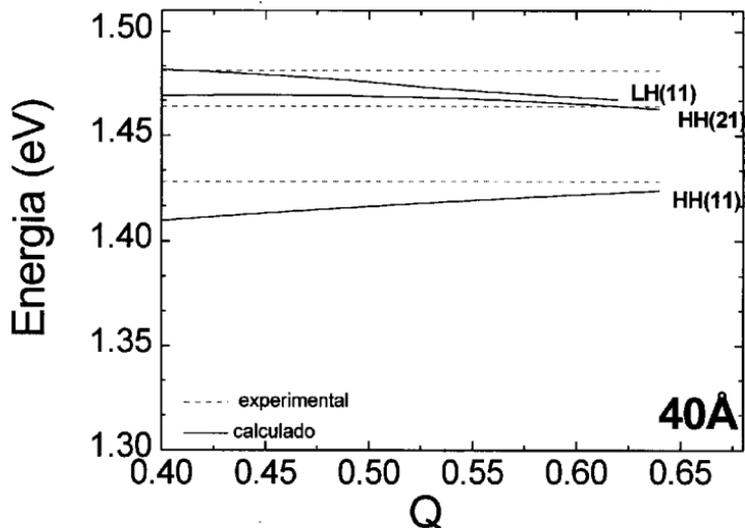


Figura 5.1: Comparação das transições obtidas em função de Q através do modelo de Bastard com os valores obtidos experimentalmente por PR para as amostras de 40 Å.

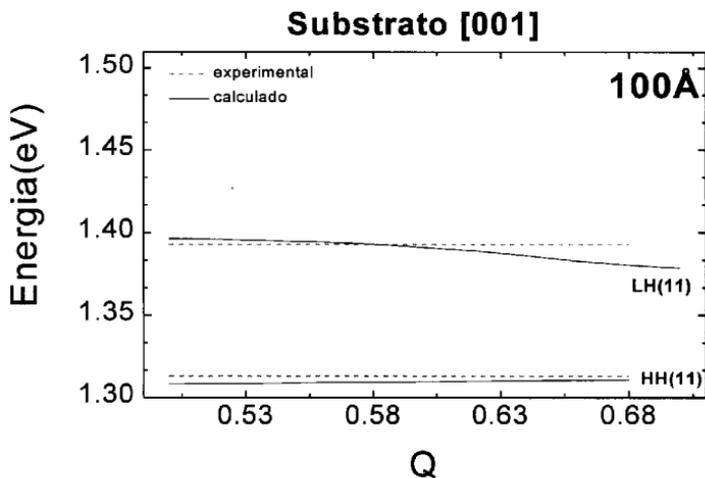


Figura 5.2: Comparação das transições obtidas em função de Q através do modelo de Bastard com os valores experimentais obtidos por PR para as amostras de 100 Å.

Tabela 5.4- Valores das massas efetivas para alguns valores de concentração de In no poço.

x	m_e	m_{hh}	m_{lh}
x=0.22	0.0568	0.4346	0.0804
x=0.20	0.0577	0.4360	0.0816
x=0.18	0.0586	0.4374	0.0828

As figuras 5.1 e 5.2 mostram que é possível encontrar um acordo razoável entre as previsões deste modelo simples para as energias de transição e os valores encontrados experimentalmente na região de parâmetro de descasamento de bandas $Q \simeq 0.6$. Isto coincide com resultados anteriores para esse tipo de material [9], [39].

5.2 Aplicação ao caso de crescimento ao longo de [113]

Aplicando o mesmo procedimento às amostras crescidas sobre substratos [113] obtemos os resultados mostrados nas figuras 5.3 e 5.4. Vemos que aqui os resultados do cálculo não coincidem mais com os níveis de energia obtidos experimentalmente. Em princípio, isto era de se esperar, se tivermos em vista a discussão do Capítulo 4. Por outro lado, vemos nestas figuras que para $Q \simeq 0.6$ os valores calculados para as transições $|LH\rangle$ e $|HH\rangle$ se cruzam. Estes cruzamentos no cálculo (feito conforme discussão para [001]) resultariam em anti-cruzamentos no cálculo completo, com a conseqüente mistura **total** de funções de onda de $|LH\rangle$ e $|HH\rangle$. Neste caso, as duas primeiras transições não mais podem ser atribuídas a buracos leve ou pesado, já que as funções de onda do 1° e 2° estados da banda de valência são fortes misturas de ambos. Assim, o cálculo simplório (mas válido no caso [001]) tem a virtude de alertar para os anti-cruzamentos que resultam em fortes anisotropias.

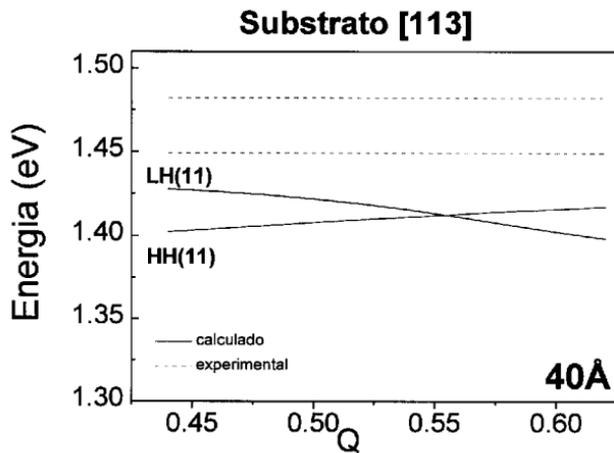


Figura 5.3: Cálculo usando modelo de Bastard (como o feito para [100]) para a amostra de $L=40$ Å depositada sobre substrato [113]. Os cruzamentos do cálculo correspondem a anti-cruzamentos num cálculo mais realista.

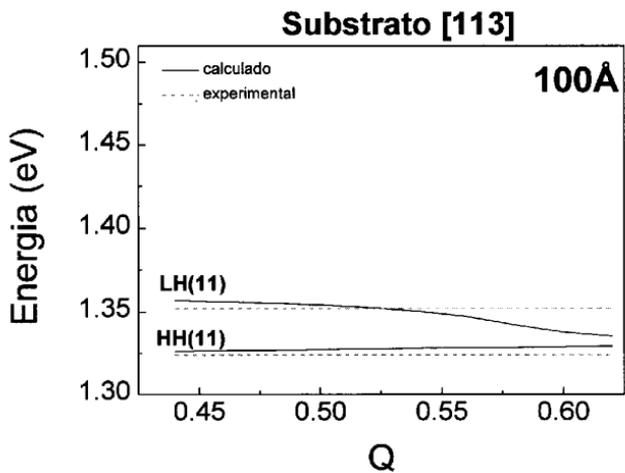


Figura 5.4: O mesmo da figura, mas agora para a amostra de 100 Å depositada sobre substrato [113].

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho fizemos um estudo de todas as possíveis causas de anisotropia óptica no plano da amostra para poços quânticos crescidos em direções [11N]. Após examinar todas as causas concluímos que as principais fontes de anisotropia são as misturas provocadas pelo potencial de confinamento entre as funções de onda de buracos leve e pesado. Estas misturas (e as consequentes anisotropias) são particularmente fortes naquelas partes onde um cálculo perturbativo ingênuo preveria cruzamento entre os níveis de energia destes portadores. Na verdade, para $N \neq 1$, os estados de banda de valência não mais podem ser caracterizados como sendo de buraco leve e pesado. A tensão, quer seja uniaxial (aplicada externamente) ou *bisotrópica* (embutida na amostra) serve como agente sintonizador destes cruzamentos e pode dar origem a grandes variações nos índices de anisotropia. Anisotropias adicionais aparecem quando, além do confinamento ao longo da direção de crescimento, são introduzidas corrugações nos planos levando a confinamento lateral dos portadores (fios quânticos). Isto está demonstrado no trabalho recente de Vouilloz et al [5], no qual estudam-se fios quânticos ao longo da direção [100] em amostras não tensionadas depositadas em substratos de GaAs [001]. Neste caso, a anisotropia é uma boa medida do confinamento lateral. Por outro lado, quando os substratos são de orientação [11N] com $N \neq 1$ é difícil separar quanto da anisotropia provém de confinamento 2D ao longo de uma direção que não coincide com uma das direções principais do tensor de massa efetiva da banda de valência. Consequentemente, para fios quânticos contidos nesse tipo de amostras a anisotropia óptica não constitui um indicador confiável do confinamento lateral, contrariamente ao que foi proposto nos primeiros trabalhos sobre este assunto ([7], [6]).

Bibliografia

- [1] Tanto que as propriedades eletrônicas e vibracionais de poços quânticos já forma até mesmo incluídas em livros texto de Física de Semicondutores. Veja por exemplo o Capítulo 9 da referência [2] e as referências aí contidas.
- [2] Peter Y. Yu e M. Cardona em “Fundamentals of Semiconductor Physics”, Springer-Verlag, Berlin (1996).
- [3] G. Bastard em “Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures” (Les Éditions de Physique, France 1989).
- [4] C. Weisbuch em *Semiconductors and Semimetals*, editado por R. Dingle (Academic San Diego, 1987), Vol. 24, Cap. 1.
- [5] F. Vouilloz, D. Y. Oberli, M.-A. Dupertuis, A. Gustafsson, F. Reinhardt e E. Kapon, Phys. Rev. Lett., aceito para publicação (1997).
- [6] R. Nötzel, L. Däweritz e K. Ploog, Phys. Rev. B **46**, 4736 (1992).
- [7] E. Ribeiro, F. Cerdeira e A. Cantarero, Phys. Rev. B **51**, 7890 (1995).
- [8] F. Cerdeira, The Braz. J. of Phys. **23**, 3 (1993).
- [9] C. Vásquez-Lopes, E. Ribeiro, F. Cerdeira, P. Motisuke, M. A. Sacilotti e A. P. Roth, J. Apl. Phys. **69**, 7836 (1991).
- [10] C. K. Inoki, E. Ribeiro, V. Lemos, F. Cerdeira, P. Finnie e A. P. Roth, Rapid Commun. of the Phys. Rev. B **49**, 2246 (1994).
- [11] F. E. G. Guimarães, D. Lubyshev, V. A. Chitta, P. Basmaji, Superlattices and Microstructures **15**, 361 (1994).

- [12] J. F. Zheng, J. D. Walker, M. B. Salmeron e E. R. Weber, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2414 (1994).
- [13] A. T. Davenport e A. R. Booth em *Stereographic Projections of the cubic and close packed hexagonal lattices*, ed. Butterworths (1970).
- [14] F. H. Pollak, em *Superlattices and Microstructures* **6**, 203 (1989).
- [15] B. O. Seraphin, *Optical Properties os Solids*, ed. Abeles (North Holland, Amsterdam 1972).
- [16] F. Cerdeira and M. Cardona, *Solid State Commun.* **7**, 879 (1969).
- [17] D. E. Aspnes, *Solid State Commun.* **8**, 267(1970).
- [18] M. Cardona, *Modulation Spectroscopy*, *Soli State Physics Suppl.* 11, eds. Seitz and Turnbull (Academic Press, New York 1969).
- [19] D. E. Aspnes, *Surf. Sci.* **B10**, 4228 (1973).
- [20] D. E. Aspnes in *Handbook on Semiconductors*, ed. T. S. Moss (North Holland, Amsterdam 1980) p. 109.
- [21] D. E. Aspnes, A. A. Studna, *Phys. Rev.* **B7**, 4605 (1973).
- [22] D. E. Aspnes, J. E. Rowe, *Solid State Commun.* **8**, 1145 (1970).
- [23] D. E. Aspnes, J. E. Rowe, *Phys. Rev.* **B5**, 4022 (1972).
- [24] D. E. Aspnes, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 168 (1972).
- [25] J. W. Matthews e A. E. Blakeslee, *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
- [26] R. People e J. C. Bean, *Appl. Phys. Lett* **47**, 322 (1985) e *Ibid* **49**, 229 (1986).
- [27] I. J. Fritz, S. T. Picraux, L. R. Dawson, T. J. Drummond, L. D. Laidig e N. G. Anderson, *Appl. Phys. Lett* **46**, 967 (1985).
- [28] P. J. Orders e B. F. Usher, *Appl. Phys. Lett* **50**, 980 (1987).
- [29] T. G. Anderson, Z. G. Chen, V. D. Kulakovskii, A. Uddin e J. T. Valim, *Appl. Phys. Lett* **51**, 752 (1987).

- [30] E. Anastassakis, J. Apl. Phys. **68**, 4561 (1990).
- [31] D. L. Smith, C. Mailhot, J. Apl. Phys. **63**, 2717 (1988).
- [32] J. F. Nye, em Physical Properties of Semiconductors, ed. Oxford (1972), p. 111-125.
- [33] B. Koopmans, P. Etchegoin, P. Santos e M. Cardona, Solid State Commun. **97**, 261 (1995).
- [34] J. Lee, M. O. Vassel, Phys. Rev. B, **37**, 8855 (1988).
- [35] D. A. Broido e L. J. Sham, Phys. Rev B **31**, 888 (1985).
- [36] Jian-Bai Xia, Phys. Rev. B, **43**, 9856 (1991).
- [37] Y. Kajikawa, Phys. Rev. B, **47**, 3649 (1993).
- [38] F. Cerdeira, E. Ribeiro, Philosophical Magazine B **70**, 481 (1994).
- [39] E. Ribeiro, Tese de Mestrado defendida no IFGW, Unicamp (1993).
- [40] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Lalöe, “Quantum Mechanics”, vol. II, cap. X e complementos, onde detalhes sobre a soma de momentos angulares envolvendo as bases citadas podem ser encontrados.
- [41] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981).
- [42] G. Bastard, Phys. Rev. B **25**, 7584 (1982).
- [43] M. A. G. Ruggiero e V. L. R. Lopes, em “Cálculo Numérico, Aspectos Teóricos e Computacionais” (Mc. Graw-Hill, São Paulo 1987).