

EFEITOS DE PRESSÃO UNIAXIAL SOBRE AS RECOMBINAÇÕES
RADIATIVAS EM LASERS DE GaAs

MARIA SALETE SARTÓRIO

ORIENTADOR: Prof. Dr. Philippe Brosson

Tese apresentada ao Instituto
de Física "Gleb Wataghin" pa-
ra a obtenção do Título de -
Mestre em Ciências.

OUTUBRO DE 1975

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Philippe Brosson pelo interesse e pela dedicação durante a orientação.

Ao Prof. Dr. Navin B. Patel e ao Prof. Dr. José Ellis Ripper Filho pelas discussões e sugestões.

A Maria Beny Zakia Morosini e Francisco Carlos de Prince pelo apoio no trabalho experimental.

A José P. Molina pela execução do aparelho de pressão projetado.

A Rosa pela datilografia, a equipe de desenho e a Ercília pela cooperação.

A FAPESP pelo suporte financeiro.

A TELEBRÁS pelo financiamento parcial dos equipamentos utilizados.

A meus pais pelo incentivo em todas as horas.

A todas as pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

INDICE

Considerações Gerais	1
Capítulo I - Laser de Semicondutor	2
I-1. Princípios de Funcionamento.	2
I-2. Probabilidade de Transição e Ganho	6
Capítulo II - Propriedades de Simetria do GaAs	9
Capítulo III - Determinação das Bandas e das Funções de Onda sob Pressão Uniaxial	16
III-1. Hamiltoniana Total	16
III-2. Autovalores e Autofunções para \vec{k} e Pressão Pequenos	22
III-3. Autovalores e Autofunções para Pressão Pequena na em $\vec{k} = 0$	27
III-4. Pressão uniaxial na direção (111) e \vec{k} pequeno no	33
Capítulo IV - Elementos de Matriz e Probabilidades de Transição. ção.	36
IV-1. Pressão na Direção (001).	40
IV-2. Pressão na Direção (111).	42
Capítulo V - Variação da Frequência de Emissão com Pressão .	49
V-1. Emissão Espontânea	49
V-2. Emissão Estimulada	52
Capítulo VI - Montagem e Resultados Experimentais.	59
VI-1. Montagem Experimental	59
VI-2. Resultados Experimentais.	63
Comentários Finais	84
Referências.	86

Apêndice A - Matriz da Hamiltoniana com Pressão	A-1
Apêndice B - Autovalores da Hamiltoniana Perturbada	B-1
Apêndice C - Autofunções da Hamiltoniana Perturbada	C-1
Apêndice D - Tensor de Tensões e Constantes Elásticas	D-1
Apêndice E - Elementos de Matriz.	E-1

CONSIDERAÇÕES GERAIS

Este trabalho consiste de um estudo sobre algumas modificações causadas na banda de valência perto de $\vec{k} = 0$ e sua influência nas recombinações radiativas em lasers de junção de GaAs quando é aplicada pressão uniaxial sobre eles.

Como veremos no decorrer desta apresentação, a pressão uniaxial provoca deslocamentos da banda de valência com relação a banda de condução e levanta degenerescências em $\vec{k} = 0$ devido a redução de simetrias, como é previsto qualitativamente pela Teoria de Grupo.

Partindo da Hamiltoniana perturbada pela pressão, pudemos calcular esses deslocamentos, assim como as modificações nas funções de onda da banda de valência.

Através dos cálculos das probabilidades de transição da banda de condução para a banda de valência perturbada pela pressão, estimamos a variação da frequência do pico de emissão espontânea para polarização TE e TM com pressão uniaxial, numa aproximação em que não levamos em conta a existência dos níveis aceitadores próximos da banda de valência.

Essas variações foram medidas experimentalmente para pressão na direção (111), assim como a variação da frequência dos modos do laser com a pressão.

A seguir faremos algumas considerações sobre o funcionamento de um laser de semiconductor de junção e sobre probabilidades de transição e razão de recombinação que estão diretamente ligadas ao ganho nesses lasers.

CAPÍTULO I - LASER DE SEMICONDUTOR

I-1. PRINCÍPIOS DE FUNCIONAMENTO

O funcionamento de um laser consta basicamente de dois mecanismos: a amplificação da luz por meio de emissão estimulada e um mecanismo de realimentação que possibilite a oscilação da luz na região ativa do laser.

No laser de junção, a emissão estimulada é conseguida invertendo-se a população numa junção p-n degenerada (quase-níveis de Fermi dentro das bandas) aplicando-se voltagem direta a esta junção e a realimentação é feita por espelhos paralelos, que são constituídos pelas próprias faces do cristal clivado, como esquematizamos na Figura 1.

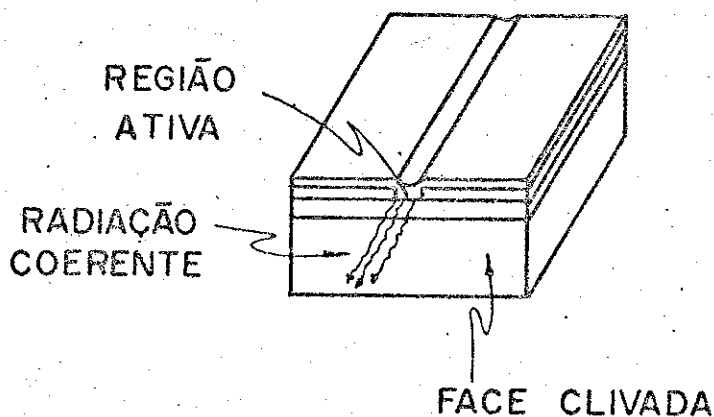


Fig.1 LASER DE SEMICONDUTOR

Na Figura 2-a mostramos o diagrama de bandas de energia de uma junção p-n, com os quase-níveis de Fermi dentro das bandas (de valência do lado p e de condução do lado n).

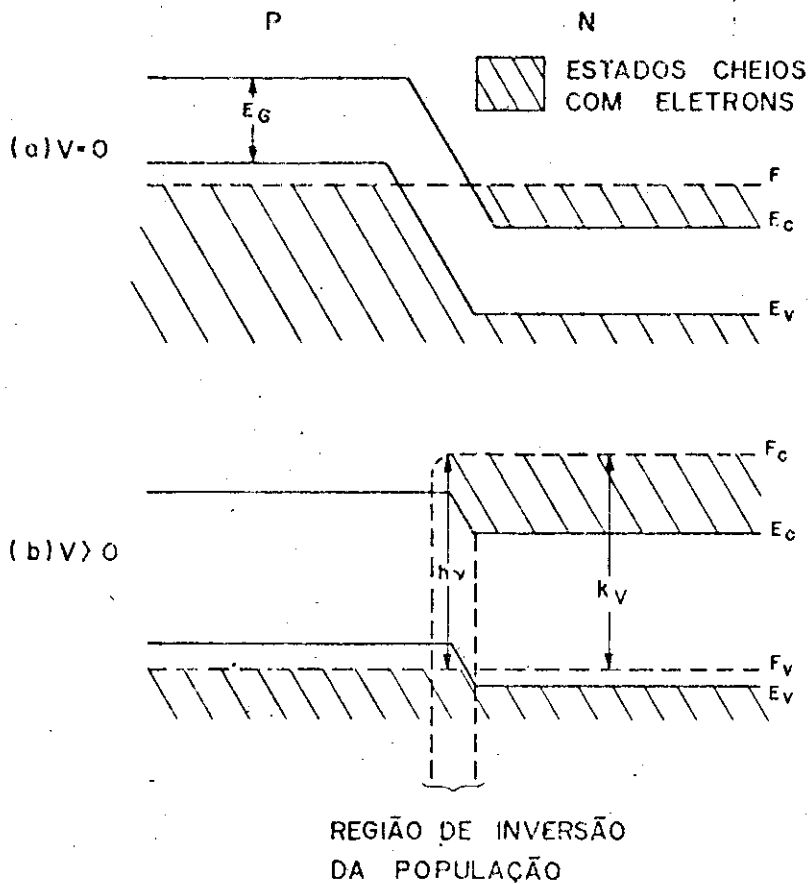


Fig 2 DIAGRAMA DE BANDAS DE ENERGIA DE UM LASER SEMICONDUTOR

Uma tensão direta a junções desse tipo faz com que -
 eletrons do lado n fluam para o lado p, como mostramos na Figura
 2-b. Temos, então, na região próxima a junção, uma inversão de po-
 pulação. Nessas condições, os eletrons que fluíram para o lado p
 podem recombinar-se com estados vazios da banda de valência, emi-
 tindo fotons com energia aproximadamente igual a energia do gap.

Na Figura 3 temos um diagrama da energia versus a den-
 sidade de estados para um semiconductor em equilíbrio e para um se-
 miconductor com a população invertida. Nesse último caso, fotons -

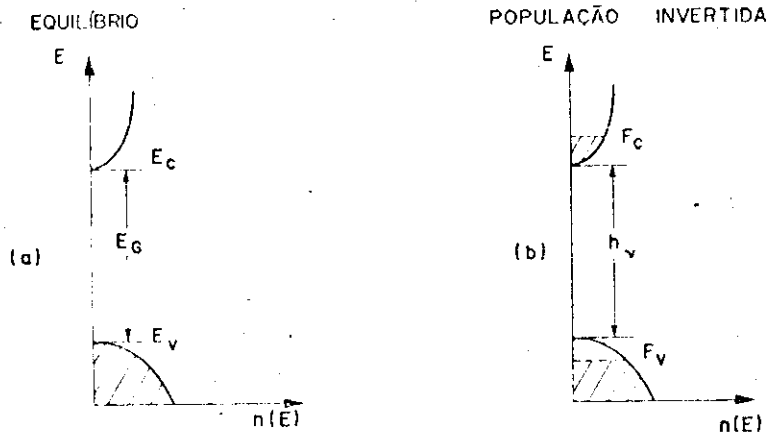


Fig. 3 ENERGIA VERSUS DENSIDADE DE ESTADOS PARA UM SEMICODUTOR RELATIVAMENTE PURO

com energia $h\nu$ tais que:

$$E_g < h\nu < (F_c - F_v) \quad (1)$$

onde F_c e F_v são quase-níveis de Fermi para as bandas de condução e valência, respectivamente, vão provocar transições de elétrons da banda de condução para estados vazios na banda de valência, causando, portanto, emissão estimulada.

A Equação (1) é a condição para lasamento de Bernard-Duraffourg. [1]

Quando tivermos grandes concentrações de impurezas, devemos modificar o diagrama da Figura 3, considerando a cauda de estados que se forma nas bandas devido a uma banda de doadores criada dentro do gap perto da banda de condução e a densidade de aceitadores que merge da banda de valência.

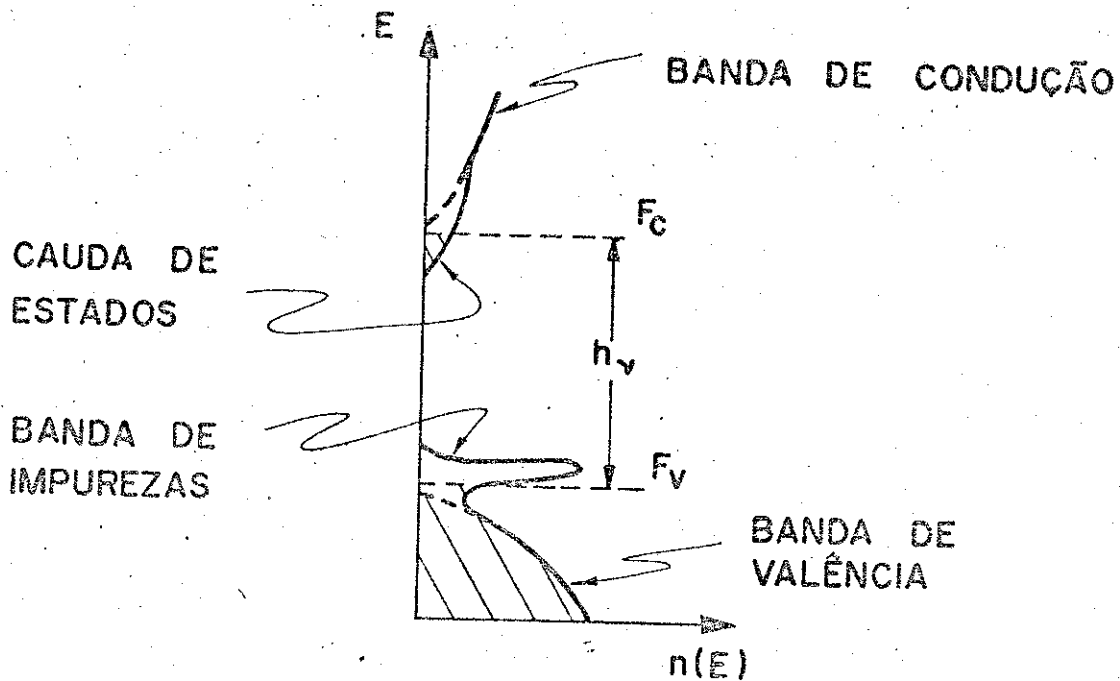


Fig. 4- ENERGIA VERSUS DENSIDADE DE ESTADOS PARA SEMICONDUTOR FORTEMENTE DOPADOS

Na Figura 4 mostramos um tipo possível de densidade de estados para esse caso, dentre os vários modelos propostos [2-3].

I-2. PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO E GANHO

I-2-a. PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO E RAZÃO DE EMISSÃO

A probabilidade de transição de um estado I para um estado J, de energia mais baixa, é dada por |2|:

$$T_{IJ}^{\lambda} = \frac{4e^2 E \eta}{m^2 \hbar^2 c^3} |M_{IJ}^{\lambda}|^2 \begin{cases} (N_{\nu\lambda} + 1) & \text{(emissão)} \\ N_{\nu\lambda} & \text{(absorção)} \end{cases} \quad (2)$$

onde:

$E \equiv h\nu = E_I^0 - E_J^0$, é a energia do foton

η é o índice de refração

$N_{\nu\lambda}$ é o número de ocupação dos ftons

λ indica a polarização do campo elétrico da radiação emitida

$M_{IJ}^{\lambda} = \langle J | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{e}_{\lambda} \cdot \vec{p} | I \rangle$ é o elemento de matriz, onde:

\vec{k} é o vetor de onda do foton

\vec{e}_{λ} é a direção de polarização

\vec{p} é o operador momento

Na Equação (2) foi assumida radiação isotrópica, fazendo $E_k = \frac{\hbar |\vec{k}| c}{\eta} \equiv h\nu$

Considerando-se o estado I pertencente a um grupo i de estados em equilíbrio, tendo um quase-nível de Fermi F_i e o estado J pertencente a um grupo de estados j em equilíbrio, tendo um quase-nível de Fermi F_j , a razão de emissão espontânea média por unidade de volume numa direção \vec{e}_{λ} de polarização do campo elétrico vai ser |2| :

$$r_{\text{esp}}^{\lambda} (e) = \frac{4 e^2 E}{V m^2 \hbar^2 c^3} \int d\vec{k}_I \int d\vec{k}_J g_{IJ}(E) |f_I(1-f_J)| |M_{IJ}^{\lambda}|^2 \delta(E_I - E_J - E) \quad (3)$$

onde f_I e f_J são distribuições de Fermi-Dirac:

$$f_I = \left(1 + \exp \left(\frac{E_I - F_I}{kT} \right) \right)^{-1} \quad (4)$$

$g_{IJ}(E)$ é a densidade de estados, ou seja, o número de estados eletrônicos que podem contribuir para a emissão de um foton na região de energia entre E e $E + dE$

V é o volume

Para emissão estimulada [2],

$$r_{est}^{\lambda}(E) = \left| 1 - e^{(F_J - F_I + E)/kT} \right| r_{esp}^{\lambda}(E) \quad (5)$$

I-2-b. GANHO E COEFICIENTE DE ABSORÇÃO

O coeficiente de absorção α_{ji} é definido por:

$$\alpha_{ji}^{\lambda} = - \frac{\pi^2 c^2 \hbar^3}{\eta^2 E^2} r_{ij}^{\lambda}(est) \quad (6)$$

para uma polarização \vec{e}_{λ} .

O ganho, equivalente a uma absorção negativa, é dado em tao por:

$$g_{ij}^{\lambda} = - \alpha_{ji}^{\lambda} = \frac{\pi^2 c^2 \hbar^3}{\eta^2 E^2} r_{ij}^{\lambda}(est) \quad (7)$$

I-2-c. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em semicondutores temos três tipos principais de transições possíveis: banda a banda, banda a impureza e impureza a impureza. Obviamente o primeiro tipo prevalecerá sobre os outros

dois para o caso de semicondutores relativamente puros. Caso contrário, prevalecerão as transições envolvendo níveis de impurezas. Devemos considerar ainda que, em se tratando de semicondutores puros, devemos acrescentar na expressão para a razão de recombinação a regra de seleção em \vec{k} . Entretanto, para semicondutores com uma densidade considerável de impurezas, estas provocarão espalhamentos, o que vai relaxar a regra de seleção. Além disso, para semicondutores altamente dopados, a densidade de estados deve também ser modificada, como vimos na seção I-1.

Esses casos já foram tratados para cálculos de ganho dos lasers em alguns trabalhos teóricos [1, 4 e 5], onde se assumiu, em todos eles, o elemento de matriz M_{IJ} constante, isto é, independente dos estados inicial e final. Tomou-se também para esse elemento uma média sobre todas as polarizações.

Achamos, então, de grande interesse iniciar um estudo sobre as diferenças que possam existir entre as duas polarizações do campo elétrico, TE (paralelo a junção) e TM (normal a junção) - para lasers de GaAs sob pressão uniaxial normal a junção.

Para obtermos os elementos de matriz para cada polarização procuramos conhecer as funções de onda correspondentes as bandas envolvidas na transição. Acrescentamos, portanto, a Hamiltoniana de um elétron no potencial periódico do cristal, a Hamiltoniana de pressão, como descrevemos nas próximas seções, considerando a pressão como perturbação. Nesse caso, podemos escrever as autofunções da Hamiltoniana com pressão (perturbada) como uma combinação linear das autofunções da Hamiltoniana sem pressão (não perturbada).

Neste capítulo vamos mostrar como a Teoria de Grupo prevê qualitativamente os resultados da aplicação de pressão uniaxial sobre o GaAs que vamos obter posteriormente para $\vec{k} = 0$.

A estrutura cristalina do GaAs, assim como da maioria dos semicondutores, é do tipo zinc-blende. Constitui-se essencialmente de duas redes cúbicas f.c.c. interpenetrantes, a primeira de Ga e a segunda de As, situada a $1/4$ da diagonal do cubo da primeira. Desse modo, um átomo de Ga ficará no centro de um tetraedro, rodeado por quatro átomos de As situados nos quatro vértices e vice-versa (Figura 5).

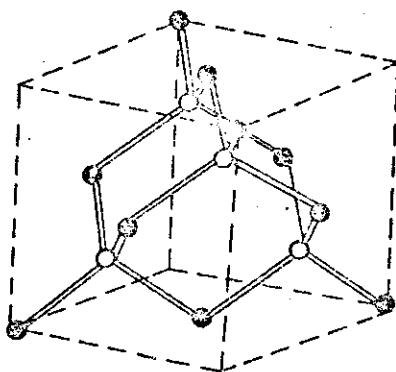


Fig.5 - ESTRUTURA CRISTALINA DO GA AS

Nessa situação, o topo da banda de valência situado em $\vec{k} = 0$ é triplamente degenerado como orbitais tipo p ($\ell=1$) e tem simetria orbital Γ_{15} , do grupo especial T_d , cuja tabela de caracteres está na Tabela 1, na ausência de spin.

Quando incluímos spin, a função de onda total passa a ser o produto de uma função espacial por uma função de spin que se transforma como $D^{1/2}$. Agora, uma rotação de 2π , representada por \bar{E} , muda o sinal de função de onda e a identidade E corresponde a uma

	E	$3 C_4^2$	$6 JC_4$	$6 JC_2$	$8 C_3$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	1
Γ'_{12}	2	2	0	0	-1
Γ_{15}	3	-1	-1	-1	0
Γ'_{25}	3	-1	1	-1	0

TABELA 1 - TABELA DE CARACTERES DO GRUPO SIMPLES T_d

	E	\bar{E}	$3(C_4^2, \bar{C}_4^2)$	$6JC_4$	$6\bar{J}\bar{C}_4$	$6(JC_2, \bar{J}\bar{C}_2)$	$8 C_3$	$8 \cdot \bar{C}_3$	
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	
Γ_2	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	
Γ'_{12}	2	2	2	0	0	0	-1	-1	
Γ_{15}	3	3	-1	-1	-1	1	0	0	
Γ'_{25}	3	3	-1	1	1	-1	0	0	
Γ_6	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	1	-1	
Γ_7	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	1	-1	
Γ_8	4	-4	0	0	0	0	-1	1	
$15 \times D^{1/2}$	6	-6	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0	$\Gamma_7 + \Gamma_8$

TABELA 2 - TABELA DE CARACTERES DO GRUPO DUPLO T_d^2

rotação de 4π . A cada operação C_4 do grupo simples T_d será acrescentada, portanto outra operação $\bar{C}_4 = \bar{E} C_4$. Teremos, então, novas classes, ou seja, novas representações irredutíveis, formando o grupo duplo T_d^2 cuja tabela de caracteres está na Tabela 2 [6].

A função de onda total agora vai-se transformar como o produto direto:

$$\Gamma_1 \times D^{1/2}$$

onde Γ_1 são as representações do grupo simples.

Podemos então ver que a representação Γ_{15} , com a interação spin-órbita vai-se reduzir em:

$$\Gamma_{15} \times D^{1/2} = \Gamma_7 + \Gamma_8$$

onde Γ_7 é uma representação de dimensão dois e Γ_8 tem dimensão quatro.

Portanto, a banda de valência que, sem interação spin-órbita era triplamente degenerada transformando-se como Γ_{15} em $\vec{k} = 0$ e com spin seria seis vezes degenerada, vai-se separar em uma duplamente degenerada, com $j=l-s=1/2$, que se transforma como Γ_7 e em outra quatro vezes degenerada, com $j=l+s=3/2$, que se transforma como Γ_8 (Figura 6-a).

É fácil ver que uma pressão uniaxial na direção (001) vai reduzir a simetria, de cúbica, para tetragonal. Mais especificamente, vamos passar do grupo cúbico T_d para o tetragonal D_{2d} . A tabela de caracteres do grupo duplo D_{2d}^2 está na Tabela 3, assim como a tabela de compatibilidade com T_d^2 .

	E	\bar{E}	$C_4^2, \overline{C_4^2}$	$2(v_2, \overline{v_2})$	$2JC_4$	$2\overline{JC_4}$	$2(JC_2, \overline{JC_2})$	
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	
Γ_2	1	1	1	-1	1	1	-1	
Γ_3	1	1	1	1	-1	-1	-1	
Γ_4	1	1	1	-1	-1	-1	1	
Γ_5	2	2	-2	0	0	0	0	
Γ_6	2	-2	0	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	
Γ_7	2	-2	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	Tabela de compatibilidade
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	Γ_1
Γ_2	1	1	1	1	-1	-1	-1	Γ_2
Γ_{12}	2	2	2	2	0	0	0	$\Gamma_1 + \Gamma_3$
Γ_{16}	3	3	-1	-1	-1	-1	1	$\Gamma_4 + \Gamma_5$
Γ_{25}	3	3	-1	-1	1	1	-1	$\Gamma_2 + \Gamma_5$
Γ_6	2	-2	0	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	Γ_6
Γ_7	2	-2	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	Γ_7
Γ_8	4	-4	0	0	0	0	0	$\Gamma_6 + \Gamma_7$

TABELA 3 - TABELA DE CARACTERES DO GRUPO D_{2d}^2 E TABELA DE COMPATIBILIDADE COM T_d^2

(a) SEM PRESSÃO (b) COM PRESSÃO UNIAXIAL 001 (III)

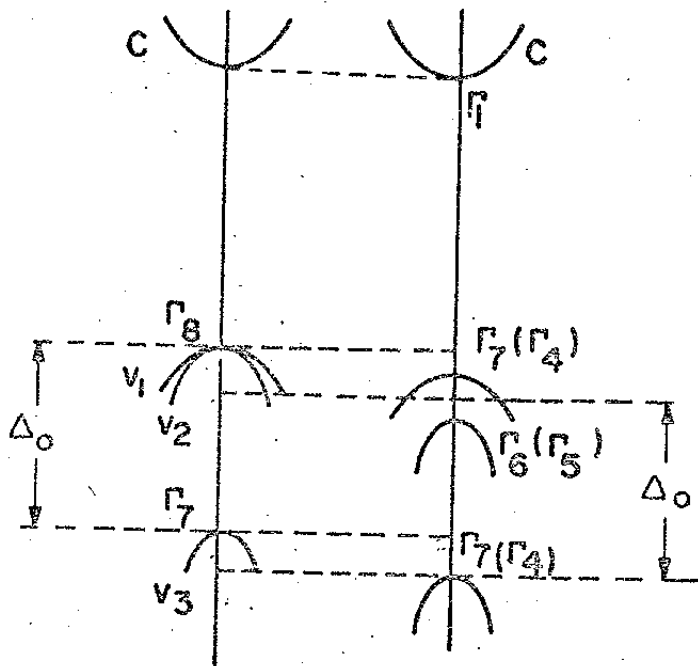


Fig.6-DIAGRAMA DE BANDAS DE ENERGIA DO $G_A A_s$ PRÓXIMO DE $\bar{k}=0$

Podemos ver, então, que a representação Γ_8 do grupo $c\bar{u}$ bico se reduz em:

$$\Gamma_8 = \Gamma_6 + \Gamma_7$$

onde Γ_6 e Γ_7 são representações de dimensão dois do grupo tetrago-
nal.

Portanto, a pressão uniaxial na direção (001) vai sepa-
rar a banda quatro vezes degenerada em $\bar{k} = 0$ no extremo da banda -
de valência em duas, cada uma duplamente degenerada, uma v_1 , de bu

	E	E	JC ₂	JC ₂	2C ₃	2C ₃	
Γ_1	1	1	1	1	1	1	
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	
Γ_3	2	2	0	0	-1	-1	
Γ_4	2	-2	0	0	1	-1	
Γ_5	1	-1	i	-i	-1	1	
Γ_6	1	-1	-i	i	-1	1	
Γ_1	1	1	1	1	1	1	Γ_1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	Γ_2
Γ'_{12}	2	2	0	0	-1	-1	Γ_3
Γ_{15}	3	3	1	1	0	0	$\Gamma_1 + \Gamma_3$
Γ'_{25}	3	3	-1	-1	0	0	$\Gamma_2 + \Gamma_3$
Γ_6	2	-2	0	0	1	-1	Γ_4
Γ_7	2	-2	0	0	1	-1	Γ_4
Γ_8	4	-4	0	0	-1	-1	$\Gamma_4 + \Gamma_5 + \Gamma_6$

TABELA 4 - TABELA DE CARACTERES DO GRUPO C_{3v}^2 E TABELA DE
 COMPATIBILIDADE COM O GRUPO T_d^2

racos pesados, correspondente aos estados $(3/2, \pm 1/2)$ e outra v_2 , de buracos leves, correspondente aos estados $(3/2, \pm 3/2)$. A banda v_3 $(1/2, \pm 1/2)$ continua duplamente degenerada (Figura 6-b).

Uma pressão uniaxial na direção (111) do GaAs vai mudar a simetria, de cúbica, para trigonal. O ponto Γ nessas condições terá a simetria do grupo C_{3v} .

Na Tabela 4 temos a tabela de caracteres do grupo C_{3v}^2 |6| e as relações de compatibilidade com T_d^2 . Como podemos ver, a representação Γ_8 do grupo T_d^2 , de dimensão quatro, reduz-se em Γ_4 , de dimensão dois e Γ_5 e Γ_6 , unidimensionais, do grupo C_{3v}^2 , o que provocaria o levantamento de uma degenerescência de spin em $\vec{k} = 0$, o que não ocorre no nosso caso, considerando que $\Gamma_5 = \Gamma_6^*$ e a Hamiltoniana de pressão com a qual vamos tratar é invariante sob inversão temporal.

Teremos, então, o ponto Γ no topo da banda de valência que era quatro vezes degenerado antes da pressão ser aplicada, desdobrando-se em duas bandas quando aplicamos pressão na direção (111), v_1 e v_2 , cada uma duplamente degenerada, como para pressão na direção (001).

CAPÍTULO III - DETERMINAÇÃO DAS BANDAS E DAS FUNÇÕES DE ONDA SOB PRESSÃO UNIAXIAL

III-1. HAMILTONIANA TOTAL

A equação de Schroedinger para um eletrón de energia E movendo-se no potencial periódico do cristal $V(\vec{r})$ é:

$$\left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \right\} \Psi = E \Psi \quad (8)$$

onde o último termo representa a interação spin-órbita.

Sabemos que as soluções dessa equação são funções de Bloch do tipo:

$$\Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (9)$$

onde $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ tem a periodicidade de $V(\vec{r})$, \vec{k} está na primeira zona de Brillouin e n é o índice da banda, estendendo-se sobre o conjunto completo de bandas.

Substituindo (9) em (8) obtemos:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{k}| \cdot \vec{\sigma} \right\} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \\ = E'_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (10)$$

onde

$$E'_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (11)$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$H_k = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad \text{é a Hamiltoniana } \vec{k} \cdot \vec{p}$$

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \quad \text{é a Hamiltoniana da interação spin-órbita independente de } \vec{k}$$

$$H'_{so} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{k}| \cdot \vec{\sigma} \quad \text{é a Hamiltoniana da interação spin-órbita dependente de } \vec{k}.$$

A contribuição H'_{so} é muito pequena [7] e vamos desprezã-la nos cálculos que seguem.

Ficamos então com a Hamiltoniana:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \quad (12)$$

e temos que resolver:

$$H \mu_{nk}^{\vec{r}} = E_n^k(\vec{k}) \mu_{nk}^{\vec{r}}$$

A aplicação de pressão uniaxial sobre um cristal vai deformã-lo, distorcendo seus eixos unitários \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} para novos eixos \hat{x}' , \hat{y}' , \hat{z}' que podem ser escritos em termos dos originais como [8]

$$\hat{x}' = (1 + e_{xx}) \hat{x} + e_{xy} \hat{y} + e_{xz} \hat{z}$$

$$\hat{y}' = e_{yx} \hat{x} + (1 + e_{yy}) \hat{y} + e_{yz} \hat{z} \quad (13)$$

$$\hat{z}' = e_{zx} \hat{x} + e_{zy} \hat{y} + (1 + e_{zz}) \hat{z}$$

Os coeficientes $a_{\alpha\beta}$ definem a deformação.

Agora a Hamiltoniana deve ser expressa em termos dos -
 ses novos eixos deformados [9-10] e as funções de onda devem obede-
 cer a novas condições de contorno, tendo a periodicidade do cristal
 deformado.

Desprezando a variação no termo de interação spin-órbi-
 ta*, temos agora uma Hamiltoniana na forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V(\vec{r}') + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \quad (14)$$

Se expressarmos H em função das coordenadas originias,
 podemos considerar a pressão como perturbação e expandir as fun-
 ções de onda perturbadas em função das não perturbadas, satisfazen-
 do as mesmas condições de contorno.

Ficamos então com:

$$H = H_0 + H_{so} + H_k + H_p \quad (15)$$

onde

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (16)$$

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \quad (17)$$

$$H_k = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad (18)$$

H_p é a correção introduzida em H_0 provocada pela pressão.

* A variação no termo de interação spin-órbita foi considerada por
 Suzuki-Hensel [11] e Lande-Pollak-Cardona [12] através de uma Ha-
 miltoniana de pressão dependente do spin e verificou-se que sua
 contribuição é realmente pequena.

Foi construída [16, 13 e 14] uma hamiltoniana para a pressão em termos do operador momento angular \vec{L} e do tensor de tensões $\epsilon_{\alpha\beta}$ definido no Apêndice D em termos dos $\epsilon_{\alpha\beta}$ de (13) como:

$$H_p = -a^{(i)} (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) - 3b^{(i)} [(L_x^2 - 1/3 L^2) \epsilon_{xx} + p.c.] + \\ - \frac{6d^{(i)}}{\sqrt{3}} [\{L_x, L_y\} \epsilon_{xy} + p.c.] \quad (19)$$

onde $a^{(i)}$ é o potencial de deformação hidrostático para a banda i , $b^{(i)}$ é o potencial de deformação uniaxial para tensões de simetria tetragonal e $d^{(i)}$ é o potencial de deformação uniaxial para tensões de simetria trigonal, sendo $a^{(i)}$, $b^{(i)}$ e $d^{(i)}$ negativos. Seus valores para o GaAs estão na Tabela 5.

$$\{L_x, L_y\} \equiv \frac{1}{2} (L_x L_y + L_y L_x)$$

p.c. indica permutações cíclicas.

A hamiltoniana $\vec{k} \cdot \vec{p}$, H_k , por sua vez, também é apresentada em termos dos mesmos operadores [15, 16 e 17].

$$H_k = A(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - 3B [(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) k_x^2 + p.c.] - \frac{6D}{\sqrt{3}} \\ [\{L_x, L_y\} k_x k_y + p.c.] \quad (20)$$

onde A , B e D são os parâmetros definidos por Dresselhaus, Kip e Kittel [15] e estão na Tabela 5 para o GaAs.

Das expressões acima, torna-se evidente que podemos tratar o problema de pressão de uma forma totalmente análoga ao problema $\vec{k} \cdot \vec{p}$, desde que tanto H_p como H_k podem ser escritos na

forma:

$$H = B_1 \text{tr}(v) - 3B_2 \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) v_{xx} + \text{p.c.} \right] +$$

$$- \frac{6 B_3}{\sqrt{3}} \left[\{L_x, L_y\} v_{xy} + \text{p.c.} \right] \quad (21)$$

Além disso, a soma $H_t = H_k + H_p$ resulta:

$$H_t = \left[Ak_x^2 - a^{(i)} \epsilon_{xx} + Ak_y^2 - a^{(i)} \epsilon_{yy} + Ak_z^2 - a^{(i)} \epsilon_{zz} \right] +$$

$$- \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) \{b^{(i)} \epsilon_{xx} + Bk_x^2\} + \text{p.c.} \right] +$$

$$- \frac{6}{\sqrt{3}} \left[\{L_x, L_y\} \{d^{(i)} \epsilon_{xy} + Dk_x k_y\} + \text{p.c.} \right] \quad (22)$$

Portanto, voltamos novamente a uma expressão análoga a (21).

Resumindo, tanto para H_p como para H_k ou $H_t = H_k + H_p$, devemos resolver o problema para H na forma (21) onde devemos substituir:

$$1) \text{ Para } H = H_p$$

$$B_1 = - a^{(i)} \quad B_2 = b^{(i)} \quad B_3 = d \quad (23)$$

$$v_{\alpha\alpha} = \epsilon_{\alpha\alpha} \quad v_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta} \quad \text{tr}(v) = \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha\alpha})$$

$$2) \text{ Para } H = H_k$$

$$B_1 = A \quad B_2 = B \quad B_3 = 0 \quad (24)$$

$$v_{\alpha\alpha} = k_{\alpha}^2 \quad v_{\alpha\beta} = k_{\alpha} k_{\beta} \quad \text{tr}(v) = \sum_{\alpha} (k_{\alpha}^2)$$

$$3) \text{ Para } H = H_z = H_p + H_k$$

$$B_1 = B_2 = B_3 = 1$$

$$v_{\alpha\alpha} = Bk_{\alpha}^2 + b^{(1)} \epsilon_{\alpha\alpha}$$

$$v_{\alpha\beta} = d^{(1)} \epsilon_{\alpha\beta} + Dk_{\alpha}^k k_{\beta}$$

(26)

$$\text{tr}(v) = Ak^2 - a^{(1)} \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha\alpha})$$

A fim de encontrar os autovalores e as autofunções de (15) vamos tomar uma base na qual a Hamiltoniana:

$$H_1 = H_0 + H_{so} \quad (27)$$

já é diagonal

Dessa forma, o problema tornar-se-á mais simples quando tratamos a Hamiltoniana H como perturbação (\vec{k} ou pressão pequenos).

Essa base será constituída pelas autofunções do momento angular total $J = L + S$, $|j, m_j\rangle$, com $\ell=1$ e $s=\frac{1}{2}$ para a banda de valência e são dadas a seguir [9 e 16]:

$$\begin{aligned} |3/2, 3/2\rangle &= |v_{2+}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} | (X + i Y)\uparrow\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle &= |v_{1+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} | 2Z\uparrow - (X + i Y)\uparrow\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle &= |v_{3+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} | -Z\uparrow - (X + i Y)\uparrow\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle &= |v_{3-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} | Z\uparrow - (X - i Y)\uparrow\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle &= |v_{1-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} | 2Z\uparrow + (X - i Y)\uparrow\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle &= |v_{2-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} | (X - i Y)\uparrow\rangle^* \end{aligned} \quad (28)$$

* As funções X, Y e Z estão definidas no Apêndice A em termo das harmônicas esféricas.

Desde que o primeiro termo da Hamiltoniana H de (21) é um escalar, vamos calcular os elementos de matriz apenas de:

$$H' = H - B_1 \text{tr}(v) \quad (29)$$

e depois acrescentar o termo $B_1 \text{tr}(v)$ aos elementos da diagonal da matriz (H') .

Obtivemos [9] (ver Apêndice A), na base (28) a seguinte matriz para a Hamiltoniana H'

$$H' = H_{so} + H'_1$$

$$H'_1 = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} |v_{2+}\rangle & |v_{1+}\rangle & |v_{1-}\rangle & |v_{2-}\rangle & |v_{3+}\rangle & |v_{3-}\rangle \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccccc} -R & S & T & 0 & -\sqrt{1/2} S & -\sqrt{2} T \\ S^* & R & 0 & T & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S \\ T^* & 0 & R & -S & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R \\ 0 & T^* & -S^* & -R & \sqrt{2} T^* & -\sqrt{1/2} S^* \\ -\sqrt{1/2} S^* & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S & \sqrt{2} T & -\Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2} T^* & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R & -\sqrt{1/2} S & 0 & -\Delta_0 \end{array} \right] \end{array} \quad (30)$$

onde:

$$R = \frac{B_2}{2} (2v_{zz} - v_{xx} - v_{yy}) \quad (31)$$

$$S = -B_3 (v_{xz} - i v_{yz}) \quad (32)$$

$$T = -\frac{\sqrt{3}}{2} B_2 (v_{xx} - v_{yy}) + i B_3 v_{xy} \quad (33)$$

Δ_0 é a separação entre os multipletos $j = \frac{3}{2}$ e $j = \frac{1}{2}$ devido à interação spin-órbita.

Diagonalizando a matriz $[H']$ temos para os autovalores $|9|$ (ver Apêndice B), em aproximação de primeira ordem:

$$\begin{aligned} E'_1 &= (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \\ E'_2 &= - (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \\ E'_3 &= - \Delta_0 \end{aligned} \quad (34)$$

Acrescentando o termo $B_1 \text{tr}(v)$, obtemos os autovalores da Hamiltoniana perturbada pela pressão com a origem de energia no topo da banda de valência não perturbada (em $\vec{k} = 0$ e sem pressão).

$$\begin{aligned} E_1 &= B_1 \text{tr}(v) + (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \text{ buracos pesados} \\ E_2 &= B_1 \text{tr}(v) - (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \text{ buracos leves} \\ E_3 &= - \Delta_0 + B_1 \text{tr}(v) \end{aligned} \quad (35)$$

As autofunções de H (ver Apêndice C) perturbadas serão:

$$\begin{aligned} \phi_{v_{2+}} &= \phi_{v_{2+}}^{(0)} + \alpha_{2+} |v_{3+}\rangle + \beta_{2+} |v_{3-}\rangle \quad \text{buracos leves} \\ \phi_{v_{1+}} &= \phi_{v_{1+}}^{(0)} + \alpha_{1+} |v_{3+}\rangle + \beta_{1+} |v_{3-}\rangle \quad \text{buracos pesados} \\ \phi_{v_{1-}} &= \phi_{v_{1-}}^{(0)} + \alpha_{1-} |v_{3+}\rangle + \beta_{1-} |v_{3-}\rangle \quad \text{buracos pesados} \end{aligned}$$

$\phi_{v_{2-}}^{(0)} = \phi_{v_{2-}}^{(0)} : \alpha_{2-} |v_{3+}\rangle + \beta_{2-} |v_{3-}\rangle$ baricous levels

$$\phi_{v_{3+}} = \phi_{v_{3+}}^{(0)} + \frac{\sqrt{1/2} S}{\Delta_0} |v_{2+}\rangle + \frac{\sqrt{2} R}{\Delta_0} |v_{1+}\rangle - \frac{\sqrt{3/2} S^*}{\Delta_0} |v_{1-}\rangle +$$

$$- \frac{\sqrt{2} T^*}{\Delta_0} |v_{2-}\rangle$$

$$\phi_{v_{3-}} = \phi_{v_{3-}}^{(0)} + \frac{\sqrt{2} T}{\Delta_0} |v_{2+}\rangle - \frac{\sqrt{3/2} S}{\Delta_0} |v_{1+}\rangle - \frac{\sqrt{2} R}{\Delta_0} |v_{1-}\rangle +$$

$$+ \frac{\sqrt{1/2} S^*}{\Delta_0} |v_{2-}\rangle$$

onde, para $E \neq |R|$

$$\phi_{v_{2+}}^{(0)} = a_0 \left[\frac{S}{R - E} |v_{2+}\rangle + |v_{1+}\rangle + \frac{T^*}{R - E} |v_{2-}\rangle \right]$$

$$\phi_{v_{1+}}^{(0)} = b_0 \left[\frac{S}{R + E} |v_{2+}\rangle + |v_{1+}\rangle + \frac{T^*}{R + E} |v_{2-}\rangle \right]$$

$$\phi_{v_{1-}}^{(0)} = b_0 \left[\frac{T}{R + E} |v_{2+}\rangle + |v_{1-}\rangle - \frac{S^*}{R + E} |v_{2-}\rangle \right]$$

$$\phi_{v_{2-}}^{(0)} = a_0 \left[\frac{T}{R - E} |v_{2+}\rangle + |v_{1-}\rangle - \frac{S^*}{R - E} |v_{2-}\rangle \right]$$

(37)

$$\phi_{v_{3+}}^{(0)} = |v_{3+}\rangle$$

$$\phi_{v_{3-}}^{(0)} = |v_{3-}\rangle$$

E é uma constante positiva definida como:

$$E = + (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2}$$

(38)

$$a_0^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R}{E} \right)$$

$$b_0^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{R}{E} \right)$$

R, S e T são dados por (31), (32) e (33)

$$\alpha_{2+} = \frac{a_0}{\Delta_0} \left[- \frac{|S|^2}{\sqrt{2} (R-E)} - \sqrt{2} R + \frac{\sqrt{2} |T|^2}{R-E} \right]$$

$$\beta_{2+} = \frac{a_0}{\Delta_0} \left[- \frac{3 S T}{\sqrt{2} (R-E)} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} S \right]$$

$$\alpha_{1+} = \frac{b_0}{\Delta_0} \left[- \frac{|S|^2}{\sqrt{2} (R+E)} - \sqrt{2} R + \frac{\sqrt{2} |T|^2}{R+E} \right]$$

$$\beta_{1+} = \frac{b_0}{\Delta_0} \left[- \frac{3 S T}{\sqrt{2} (R+E)} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} S \right]$$

$$\alpha_{2-} = \beta_{2+}^* \quad \beta_{2-} = -\alpha_{2+}$$

$$\alpha_{1-} = \beta_{1+}^* \quad \beta_{1-} = -\alpha_{1+}$$

para $E = \pm R$ as autofunções são dadas por (36) com:

$$\phi_{v_{i\pm}}^{(0)} = |v_{i\pm}\rangle \quad \text{para } i = 1, 2, 3$$

$$\alpha_{1+} = -\sqrt{2} R \quad \beta_{1-} = \sqrt{2} R \quad (39)$$

$$\alpha_{2\pm} = \beta_{2\pm} = \beta_{1+} = \alpha_{1-} = 0$$

III-3. AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES PARA PRESSÃO PEQUENA EM $\vec{k} = 0$

III-3-a. PRESSÃO UNIAXIAL NA DIREÇÃO (111)

Para pressão uniaxial na direção (111), teremos as seguintes componentes para o tensor de tensões (ver Apêndice D):

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = (S_{11} + 2 S_{12}) \frac{X}{3} \quad (40)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = \frac{S_{44}}{2} \frac{X}{3} \quad (41)$$

onde S_{ij} são as constantes elásticas e X é a tensão. No nosso caso temos X negativa, desde que a tensão é compressiva. Fazemos então $X = -P$, com P positivo.

Substituindo em (31), (32) e (33) o tensor v pelo tensor de tensões com as componentes dadas em (40) e (41), temos:

$$R = 0 \quad (42)$$

$$S = d \epsilon_{xy} (i-1) \quad (43)$$

$$T = i d \epsilon_{xy} \quad (44)$$

Substituindo R , S e T em (35) vem:

$$E_1 = -3a \epsilon_{xx} + \sqrt{3} d \epsilon_{xy}$$

$$E_2 = -3a \epsilon_{xx} - \sqrt{3} d \epsilon_{xy} \quad (45)$$

$$E_3 = -\Delta_0 - 3a \epsilon_{xx}$$

Definindo

$$\delta_H = -a (S_{11} + 2S_{12}) \quad (46)$$

$$\delta\mu_{111} = -\frac{d}{\sqrt{3}} S_{44} \quad (47)$$

vamos ter:

$$E_1 = -\delta_H P + \frac{1}{2} \delta\mu_{111} P \quad \text{buracos pesados}$$

$$E_2 = -\delta_H P - \frac{1}{2} \delta\mu_{111} P \quad \text{buracos leves} \quad (48)$$

$$E_3 = -\Delta_0 - \delta_H P$$

onde P é a pressão; δ_H , $\delta\mu_{111}$ e P são definidos positivos. Os valores de δ_H e $\delta\mu_{111}$ para o GaAs estão na Tabela 5.

Esses resultados concordam com aqueles obtidos por Pollak e Cardona [14], I.N. Bandeira [18] e Cerdeira [9] para pressões pequenas em $\vec{k} = 0$.

Substituindo R , S e T de (42), (43) e (44) em (36), (37) e (38) obtemos para pressão pequena em $\vec{k} = 0$ as autofunções:

$$\phi_{v_{2+}} = \phi_{v_{2+}}^{(0)}$$

$$\phi_{v_{1+}} = \phi_{v_{1+}}^{(0)} - \frac{(1+i)}{2} \frac{\delta\mu_{111} P}{\Delta_0} |v_{3-}\rangle$$

$$\phi_{v_{1-}} = \phi_{v_{1-}}^{(0)} - \frac{(1-i)}{2} \frac{\delta\mu_{111} P}{\Delta_0} |v_{3+}\rangle$$

$$\phi_{v_{2-}}^{(0)} = \phi_{v_{2-}}^{(0)}$$

(49)

$$\begin{aligned} \phi_{v_{3+}}^{(0)} = & \phi_{v_{3+}}^{(0)} - \frac{(1-i)}{2\sqrt{2}} \frac{\delta\mu_{111}^P}{\Delta_0} |v_{2+}\rangle + \\ & + \frac{(1+i)}{2\sqrt{2}} \frac{\delta\mu_{111}^P}{\Delta_0} |v_{1-}\rangle + \frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\delta\mu_{111}^P}{\Delta_0} |v_{2-}\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_{v_{3-}}^{(0)} = & \phi_{v_{3-}}^{(0)} - \frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\delta\mu_{111}^P}{\Delta_0} |v_{2+}\rangle + \\ & + \frac{(1-i)}{2\sqrt{2}} \frac{\delta\mu_{111}^P}{\Delta_0} |v_{1+}\rangle - \frac{(1+i)}{2\sqrt{2}} \frac{\delta\mu_{111}^P}{\Delta_0} |v_{2-}\rangle \end{aligned}$$

onde:

$$\phi_{v_{2+}}^{(0)} = \frac{(1-i)}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1+}\rangle + \frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle$$

$$\phi_{v_{1+}}^{(0)} = -\frac{(1-i)}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1+}\rangle - \frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle \quad (50)$$

$$\phi_{v_{1-}}^{(0)} = \frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1-}\rangle + \frac{(1+i)}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle$$

$$\phi_{v_{2-}}^{(0)} = -\frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1-}\rangle - \frac{(1+i)}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle$$

$$\phi_{v_{3+}}^{(0)} = |v_{3+}\rangle$$

$$\phi_{v_{3-}}^{(0)} = |v_{3-}\rangle$$

III-3-b- PRESSÃO UNIAXIAL NA DIREÇÃO (001)

Para o caso de pressão uniaxial na direção (001) temos as seguintes componentes para o tensor de tensões (Apêndice D):

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = S_{12} X \quad (51)$$

$$\epsilon_{zz} = S_{11} X \quad (52)$$

$$\epsilon_{\alpha\beta} = 0 \text{ para } \alpha \neq \beta$$

Resultando:

$$S = T = 0$$

$$R = \frac{b}{2} (2S_{11}X - 2S_{12}X) = \frac{1}{2} \delta\mu_{001}P \quad (53)$$

onde

$$\delta\mu_{001} = -2b (S_{11} - S_{12}) \quad (54)$$

onde $\delta\mu_{001}$ e P são positivos. Os valores de b e $\delta\mu_{001}$ estão na Tabela 5 para o GaAs.

Definindo δ_H como em (46) e substituindo em (35) chegamos a:

$$E_1 = -\delta_H P + \frac{1}{2} \delta\mu_{001}P \quad (55)$$

$$E_2 = -\delta_H P - \frac{1}{2} \delta\mu_{001}P$$

$$E_3 = -\Delta_0 - \delta_H P$$

Esses resultados também estão de acordo com os obtidos por I.N. Bandeira [18], Pollak-Cardona [14] e Cerdeira [9].

É fácil verificar que as autofunções de [14] também coincidem com as nossas, quando fazemos $S = T = 0$ e $R = \frac{1}{2} \delta\mu_{001} P$ em (36) e (39).

Nesse caso temos:

$$\begin{aligned} \phi_{v_{2+}} &= |v_{2+}\rangle \\ \phi_{v_{2-}} &= |v_{2-}\rangle \\ \phi_{v_{1+}} &= |v_{1+}\rangle - \frac{\delta\mu_{001} P}{\sqrt{2} \Delta_0} |v_{3+}\rangle \\ \phi_{v_{1-}} &= |v_{1-}\rangle + \frac{\delta\mu_{001} P}{\sqrt{2} \Delta_0} |v_{3-}\rangle \\ \phi_{v_{3+}} &= |v_{3+}\rangle + \frac{\delta\mu_{001} P}{\sqrt{2} \Delta_0} |v_{1+}\rangle \\ \phi_{v_{3-}} &= |v_{3-}\rangle - \frac{\delta\mu_{001} P}{\sqrt{2} \Delta_0} |v_{1-}\rangle \end{aligned} \quad (56)$$

Podemos observar que em $\vec{k} = 0$ a perturbação de pressão uniaxial mistura os estados de mesmo m_j , $|v_{1\pm}\rangle$ e $|v_{3\pm}\rangle$, que tem $m_j = \pm \frac{1}{2}$. Os estados $|v_{2\pm}\rangle$ não se misturam.

A ($\hbar^2/2m$)	B ($\hbar^2/2m$)	C ($\hbar^2/2m$)	δ_H ev/atm	b ev	d ev	$\delta\mu_{001}$ ev/atm	$\delta\mu_{111}$ ev/atm
-7,99	-4,93	25,65	$4,0 \times 10^{-6}$	-2,0	-6,0	$6,0 \times 10^{-6}$	$5,9 \times 10^{-6}$

TABELA 5 - PARÂMETROS A, B, C, δ_H , b E d PARA O GaAs

Sintetizando os resultados de III-3-a e III-3-b, podemos dizer que a pressão uniaxial atuando sobre um semiconductor do tipo do GaAs vai produzir dois efeitos sobre os níveis de energia das bandas v_1 , v_2 e v_3 .

1) Sua componente hidrostática vai deslocar uniformemente esses três níveis de $-\delta_H P$.

2) Sua componente uniaxial vai levantar parcialmente a degenerescência que existia entre os níveis correspondentes as bandas v_1 ($\frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$) e v_2 ($\frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}$) em $\vec{k} = 0$, antes da pressão ser aplicada. Essa componente provocará deslocamentos das bandas v_1 e v_2 de $\pm \frac{1}{2} \delta_U P$, respectivamente, como esquematizamos na Fig. 7.

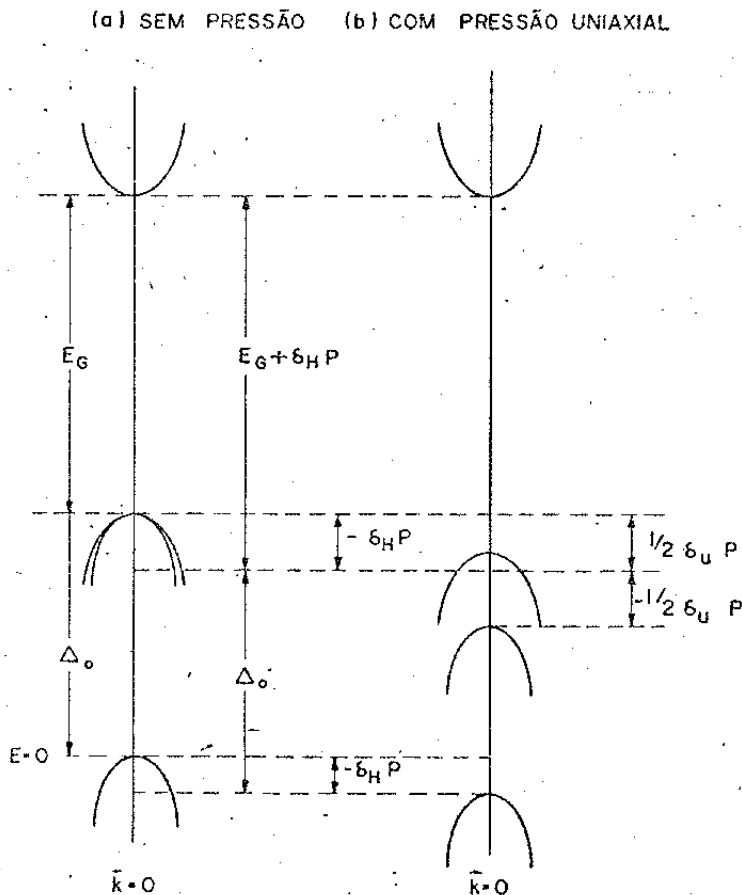


Fig.7-DIAGRAMA DE BANDAS DE ENERGIA DO $GaAs$ PRÓXIMO DE $\vec{k} = 0$

III-4. PRESSÃO UNIAXIAL NA DIREÇÃO (111) e \vec{k} PEQUENO

Como nossos resultados experimentais foram obtidos com pressão uniaxial na direção (111), vamos escrever a expressão geral para as energias de uma maneira mais explícita para esse caso.

Somando a (42), (43) e (44) a parte dependente de \vec{k} em R, S e T de (31), (32) e (33), ficamos com:

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{B}{2} (2 k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) \\
 S &= d \epsilon_{xy} (i-1) - D(k_x k_z - i k_y k_z) \\
 T &= i d \epsilon_{xy} - \frac{\sqrt{3}}{2} B (k_x^2 - k_y^2) + i D k_x k_y
 \end{aligned} \tag{57}$$

Substituindo em (34) e (35), definindo $C^2 = D^2 - 3B^2$ e utilizando as definições de δ_H e $\delta\mu_{111}$ de (46) e (47), obtemos:

$$\begin{aligned}
 E_{\frac{1}{2}} &= AK^2 - \delta_H P \pm \left[B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2) + \frac{1}{4} \delta\mu_{111}^2 P^2 + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{3}} \delta\mu_{111} P D (k_x k_y + k_y k_z + k_z k_x) \right]^{1/2}
 \end{aligned} \tag{58}$$

$$E_3 = -\Delta_0 + AK^2 - \delta_H P$$

Mais uma vez podemos verificar que obtemos expressões corretas fazendo $P = 0$ em (58). Temos assim:

$$E_{\frac{1}{2}} = AK^2 \pm \left[B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2) \right]^{1/2} \tag{59}$$

$$E_3 = \Delta_0 + Ak^2$$

que são os resultados de Dresselhaus, Kip e Kittel [15-16].

CAPÍTULO IV - ELEMENTOS DE MATRIZ E PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO

Consideremos o laser da Figura 8-a. Chamamos o modo de TE quando o campo elétrico é paralelo a junção e TM para o campo elétrico na direção da pressão aplicada.

Já vimos na seção I-2-a que o elemento de matriz para a transição de um estado I para um estado J, com o campo elétrico polarizado na direção \vec{e}_λ é dado por:

$$M_{IJ} = \langle I | \vec{e}_\lambda \cdot \vec{p} | J \rangle \quad (60)$$

onde \vec{p} é o operador momento.

Desprezando mistura entre estados S da banda de condução (tipo s) e os estados da banda de valência, os elementos de matriz para transições de um estado S da banda de condução para um estado $\phi_{v_{i\pm}}$ ($i=1,2,3$) na banda de valência perturbada pela pressão para o modo TE serão dados por:

$$M_{c\uparrow\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TE} = \langle S\uparrow\downarrow | \vec{e}_{TE} \cdot \vec{p} | \phi_{v_{i\pm}} \rangle \quad (61)$$

e para o modo TM por:

$$M_{c\uparrow\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TM} = \langle S\uparrow\downarrow | \vec{e}_{TM} \cdot \vec{p} | \phi_{v_{i\pm}} \rangle \quad (62)$$

Nas expressões anteriores desprezamos \vec{k} do foton. Desde que as funções $\phi_{v_{i\pm}}$ são combinações lineares de $v_{i\pm}$, vamos calcular os elementos de matriz entre a banda de condução e $v_{1\pm}$, $v_{2\pm}$, $v_{3\pm}$ de (28), não perturbadas, ou seja, para $\vec{k} = 0$ e $P = 0$ para as

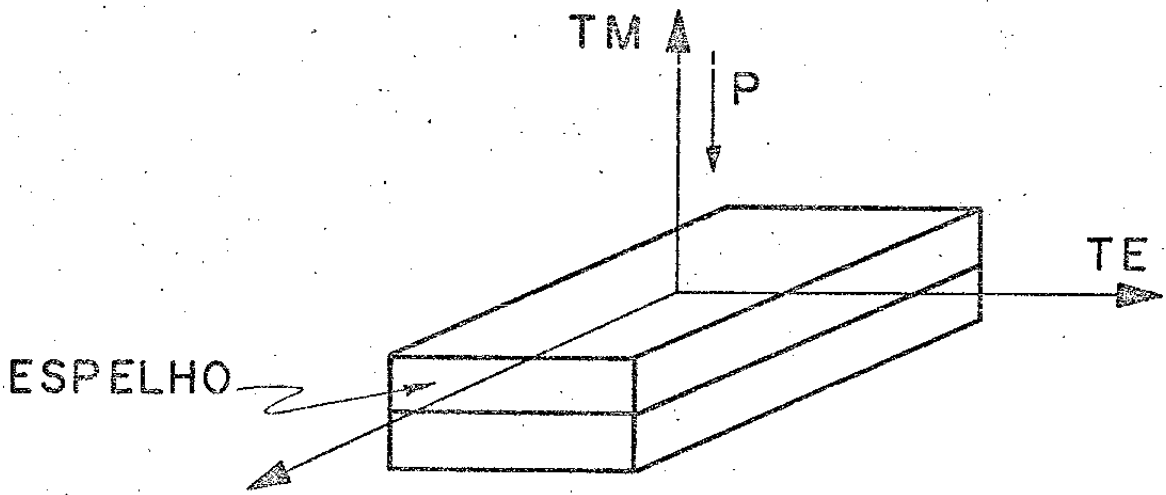


Fig. 8-a

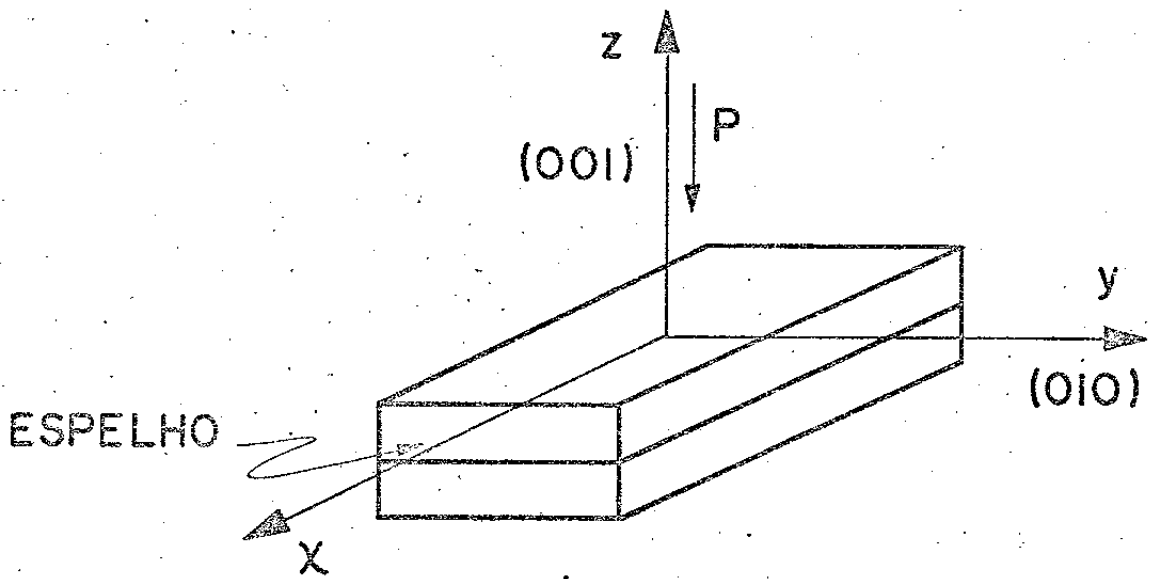


Fig. 8-b

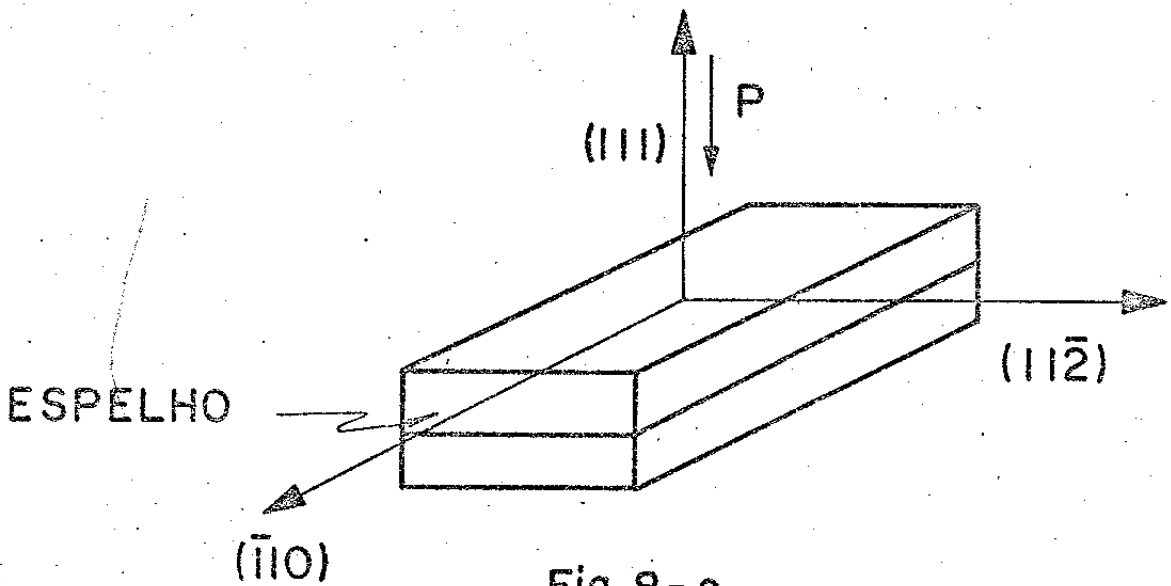


Fig. 8-c

três direções possíveis do campo elétrico, \vec{e}_x , \vec{e}_y e \vec{e}_z , onde x, y e z são eixos cartesianos fixos no cristal, ou seja:

x corresponde a direção (100) do cristal

y corresponde a direção (010) do cristal

z corresponde a direção (001) do cristal

Sabendo |20| que os únicos elementos de matriz do momento diferentes de zero vão ser:

$$\langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle = \langle S | p_z | Z \rangle = P' \quad (63)$$

obtivemos os elementos de matriz que estão na Tabela 6 (ver os cálculos no Apêndice E), a menos do fator P' .

Como os elementos de matriz da banda de condução para a banda de valência perturbada para uma direção qualquer de \vec{k} e de P' não nos interessam no momento, nós os mencionamos apenas no Apêndice E.

	P_x	P_y	P_z
$M_{c\uparrow, v_{1+}}$	0	0	$\frac{2}{\sqrt{6}} P'$
$M_{c\downarrow, v_{1+}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} P'$	$-\frac{i}{\sqrt{6}} P'$	0
$M_{c\uparrow, v_{1-}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}} P'$	$-\frac{i}{\sqrt{6}} P'$	0
$M_{c\downarrow, v_{1-}}$	0	0	$\frac{2}{\sqrt{6}} P'$
$M_{c\uparrow, v_{2+}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} P'$	$-\frac{i}{\sqrt{2}} P'$	0
$M_{c\downarrow, v_{2+}}$	0	0	0
$M_{c\uparrow, v_{2-}}$	0	0	0
$M_{c\downarrow, v_{2-}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} P'$	$-\frac{i}{\sqrt{2}} P'$	0
$M_{c\uparrow, v_{3+}}$	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}} P'$
$M_{c\downarrow, v_{3+}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} P'$	$-\frac{i}{\sqrt{3}} P'$	0
$M_{c\uparrow, v_{3-}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} P'$	$\frac{i}{\sqrt{3}} P'$	0
$M_{c\downarrow, v_{3-}}$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}} P'$

TABELA 6

PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO DA BANDA DE CONDUÇÃO PARA

AS BANDAS $v_{1\pm}$, $v_{2\pm}$, $v_{3\pm}$

IV-1. PRESSÃO NA DIREÇÃO (001)

Vamos supor o sistema de eixos cartesianos localizado no laser como na Fig. 8-b. Desse modo, a pressão é aplicada na direção (001) do cristal, ou seja, é paralela ao eixo z. Portanto o modo TM também será paralelo a esse eixo. O modo TE corresponde rá a direção (010) do cristal, ou seja, ao campo elétrico na direção y.

Assim, para o modo TE os elementos de matriz serão:

$$M_{c\uparrow\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TE} = \langle S\uparrow\downarrow | P_y | \phi_{v_{i\pm}} \rangle$$

e para o modo TM

$$M_{c\uparrow\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TM} = \langle S\uparrow\downarrow | P_z | \phi_{v_{i\pm}} \rangle$$

Utilizando a Tabela 6 e as autofunções (36), (39) e (56) obtivemos os elementos de matriz da Tabela 7 para P (001) e $\vec{k} = 0$ ou \vec{k} paralelo a P , onde $\delta\mu_0 = \delta\mu_{001}$ definido em (54).

Como vimos na seção I-2-a, as probabilidades de transição da banda de condução para as bandas $\phi_{v_{i\pm}}$ são dadas por:

$$P_{c, \phi_{v_i}}^\lambda \propto |M_{c, \phi_{v_i}}^\lambda|^2 \quad (64)$$

onde λ é a direção de polarização.

Vamos definir $T_{c, \phi_{v_i}}^\lambda$ proporcional a probabilidade de transição como:

$$T_{c, \phi_{v_i}}^\lambda = |M_{c, \phi_{v_i}}^\lambda|^2$$

Desse modo, desprezando os termos em $(\frac{\delta\mu_o P}{\Delta_o})^2$, temos

as probabilidades de transição para pressão na direção (001) e $\vec{k} = 0$ proporcionais a:

$$T_{c\uparrow\downarrow, \phi_{V_{4\pm}}}^{TM} = \frac{4}{3} \left[1 + \frac{\delta\mu_o P}{\Delta_o} \right]$$

$$T_{c\uparrow\downarrow, \phi_{V_{2\pm}}}^{TM} = 0$$

$$T_{c\uparrow\downarrow, \phi_{V_{3\pm}}}^{TM} = \frac{2}{3} \left[1 - 2 \frac{\delta\mu_o P}{\Delta_o} \right]$$

(65)

$$T_{c\uparrow\downarrow, \phi_{V_{1\pm}}}^{TE} = \frac{1}{3} \left[1 - 2 \frac{\delta\mu_o P}{\Delta_o} \right]$$

$$T_{c\uparrow\downarrow, \phi_{V_{2\pm}}}^{TE} = 1$$

$$T_{c\uparrow\downarrow, \phi_{V_{3\pm}}}^{TE} = \frac{2}{3} \left[1 + \frac{\delta\mu_o P}{\Delta_o} \right]$$

Na Tabela 8 temos os $T_{c, \phi_{V_i}}^\lambda$ proporcionais as probabi-

lidades de transição para polarizações TE e TM para P(001) com

$\vec{k} = 0$ e \vec{k} paralelo a P.

IV-2. PRESSÃO NA DIREÇÃO (111)

Os nossos resultados experimentais foram obtidos com pressão na direção (111).

Nesse caso, o modo TM corresponderá ao campo elétrico na direção (111) do cristal ou $\vec{e}_{TM} = (\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$. O plano de clivagem é $(\bar{1} 1 0)$ e, para o modo TE, o campo elétrico é paralelo a direção $(1 1 \bar{2})$ ou $\vec{e}_{TE} = (\frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{-2}{\sqrt{6}})$, como mostramos na Figura 8-c.

Os elementos de matriz para o modo TE serão dados por:

$$M_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{i\pm}}}^{TE} = \frac{1}{\sqrt{6}} \langle S\uparrow\uparrow | p_x + p_y - 2p_z | \phi_{V_{i\pm}} \rangle$$

e para o modo TM

$$M_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{i\pm}}}^{TM} = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle S\uparrow\uparrow | p_x + p_y + p_z | \phi_{V_{i\pm}} \rangle$$

Na Tabela 7 temos os elementos de matriz para P (111) com $\vec{k} = 0$ e \vec{k} paralelo a P e na Tabela 8 as probabilidades de transição (ou $T_{c, \phi_{V_i}}^\lambda$).

Especificamente para $\vec{k} = 0$ e P na direção (111) temos, desprezando os termos em $(\frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0})^2$:

$$T_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{1\pm}}}^{TM} = \frac{4}{3} \left(1 + \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0} \right)$$

$$T_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{2\pm}}}^{TM} = 0$$

$$T_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{3\pm}}}^{TM} = \frac{2}{3} \left[1 - 2 \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0} \right] \quad (66)$$

$$T_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{1\pm}}}^{TE} = \frac{1}{3} \left[1 - 2 \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0} \right]$$

$$T_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{2\pm}}}^{TE} = 1$$

$$T_{c\uparrow\uparrow, \phi_{V_{3\pm}}}^{TE} = \frac{2}{3} \left[1 + \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0} \right]$$

onde $\delta\mu_1 = \delta\mu_{111}$ definido em (47).

Nas Tabelas 9, 10 e 11 temos os elementos de matriz para P na direção (111) e \vec{k} nas direções (001) , (100) e (010) , a menos do fator P' .

Observando (65) e (66) podemos notar, como era de se esperar, que para $P(001)$ e $P(111)$ temos expressões semelhantes para as probabilidades de transição, apenas trocando $\delta\mu_0$ por $\delta\mu_1$.

	P(111)		P(001)	
	TE	TM	TE	TM
$M_{c\uparrow, \phi_{V_{2+}}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$-\frac{i}{\sqrt{2}}$	0
$M_{c\downarrow, \phi_{V_{2+}}}$	0	0	0	0
$M_{c\uparrow, \phi_{V_{2-}}}$	0	0	0	0
$M_{c\downarrow, \phi_{V_{2-}}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$-\frac{i}{\sqrt{2}}$	0
$M_{c\uparrow, \phi_{V_{1+}}}$	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	0	$\frac{2}{\sqrt{6}} \left(1+\frac{\delta_2}{2}\right)$
$M_{c\downarrow, \phi_{V_{1+}}}$	$-\frac{(1+i)}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$-\frac{(1+i)}{3} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}(1-\delta_2)$	0
$M_{c\uparrow, \phi_{V_{1-}}}$	$\frac{(1-i)}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{(1-i)}{3} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	$-\frac{i}{\sqrt{6}}(1-\delta_2)$	0
$M_{c\downarrow, \phi_{V_{1-}}}$	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	0	$\frac{2}{\sqrt{6}} \left(1+\frac{\delta_2}{2}\right)$
$M_{c\uparrow, \phi_{V_{3+}}}$	$\frac{2}{3\sqrt{2}} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	$\frac{1}{3}(1-\delta_1)$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(1-\delta_2)$
$M_{c\downarrow, \phi_{V_{3+}}}$	$-\frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	$-\frac{(1+i)}{3}(1-\delta_1)$	$-\frac{i}{\sqrt{3}} \left(1+\frac{\delta_2}{2}\right)$	0
$M_{c\uparrow, \phi_{V_{3-}}}$	$-\frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	$-\frac{(1-i)}{3}(1-\delta_1)$	$\frac{i}{\sqrt{3}} \left(1+\frac{\delta_2}{2}\right)$	0
$M_{c\downarrow, \phi_{V_{3-}}}$	$-\frac{2}{3\sqrt{2}} \left(1+\frac{\delta_1}{2}\right)$	$-\frac{1}{3}(1-\delta_1)$	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}(1-\delta_2)$
$\delta_1 (\vec{k}=0)$	$\delta_1 = \delta\mu_{111} P/\Delta_0$		$\delta_2 = \delta\mu_{001} P/\Delta_0$	
$\delta_1 (\vec{k} // P)$	$\delta_1 = (\delta\mu_{111} P + 2\sqrt{3} Dk^2)/\Delta_0$		$\delta_2 = (\delta\mu_{001} P + 2Bk^2)/\Delta_0$	

TABELA 7 - ELEMENTOS DE MATRIZ COM PRESSÃO UNIAXIAL PARA $\vec{k} = 0$ ou $\vec{k} // P$

P (111)		P (001)	
$\vec{k} = 0$	$\vec{k} (111)$	$\vec{k} = 0$	$\vec{k} (001)$
TE $T_{c\uparrow\downarrow}, \phi_{V_{1\pm}}$	$\frac{1}{3} (1-2 \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0})$	$\frac{1}{3} (1-2 \frac{\delta\mu_0 P}{\Delta_0})$	$\frac{1}{3} (1-2 \frac{\delta\mu_0 P + 2BK^2}{\Delta_0})$
TE $T_{c\uparrow\downarrow}, \phi_{V_{2\pm}}$	1	1	1
TE $T_{c\uparrow\downarrow}, \phi_{V_{3\pm}}$	$\frac{2}{3} (1 + \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0})$	$\frac{2}{3} (1 + \frac{\delta\mu_0 P}{\Delta_0})$	$\frac{2}{3} (1 + \frac{\delta\mu_0 P + 2BK^2}{\Delta_0})$
TM $T_{c\uparrow\downarrow}, \phi_{V_{1\pm}}$	$\frac{4}{3} (1 + \frac{\delta\mu_1 P}{\Delta_0})$	$\frac{4}{3} (1 + \frac{\delta\mu_0 P}{\Delta_0})$	$\frac{4}{3} (1 + \frac{\delta\mu_0 P + 2BK^2}{\Delta_0})$
TM $T_{c\uparrow\downarrow}, \phi_{V_{2\pm}}$	0	0	0
TM $T_{c\uparrow\downarrow}, \phi_{V_{3\pm}}$	$\frac{2}{3} (1 - \frac{2\delta\mu_1 P}{\Delta_0})$	$\frac{2}{3} (1-2 \frac{\delta\mu_0 P}{\Delta_0})$	$\frac{2}{3} (1-2 \frac{\delta\mu_0 P + 2BK^2}{\Delta_0})$

TABELA 8 - PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO COM PRESSÃO UNIAXIAL PARA $\vec{k} = 0$ e $\vec{k} // P$

M_{ct}^{TM}, ϕ_{v1+}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{(R+E)}{E} \left[\frac{\delta_{UP}}{R+E} + \frac{2}{\sqrt{6}} \right] \right\} - \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \alpha_{1+} + \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{1+} \right]$
M_{ct}^{TM}, ϕ_{v1-}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{(1+i)}{2\sqrt{3}} \frac{(R+E)}{E} \left[-1 - \frac{\delta_{UP}}{2(R+E)} \right] - \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{1+} + \frac{1}{\sqrt{3}} \beta_{1+} \right\}$
M_{ct}^{TM}, ϕ_{v2+}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{(E-R)}{E} \left[\frac{\delta_{UP}}{R-E} + 2 \right] - \frac{1}{\sqrt{3}} \alpha_{2+} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{2+} \right\}$
M_{ct}^{TM}, ϕ_{v2-}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{(1+i)}{2\sqrt{3}} \left[-1 - \frac{\delta_{UP}}{2(R-E)} \right] \frac{(E-R)}{E} \left[\frac{1}{2} - \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{2+} + \frac{1}{\sqrt{3}} \beta_{2+} \right] \right\}$
M_{ct}^{TE}, ϕ_{v1+}	$\frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{(R+E)}{E} \left[\frac{\delta_{UP}}{2(R+E)} - 2 \right] + \frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{1+} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{1+}$
M_{ct}^{TE}, ϕ_{v1-}	$\frac{(1+i)}{6\sqrt{2}} \frac{(R+E)}{E} \left[\frac{\delta_{UP}}{R+E} \right] - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{1+} + \frac{2}{3\sqrt{2}} \beta_{1+}$
M_{ct}^{TE}, ϕ_{v2+}	$\frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{(E-R)}{E} \left[\frac{\delta_{UP}}{2(R-E)} - 2 \right] + \frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{2+} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{2+}$
M_{ct}^{TE}, ϕ_{v2-}	$\frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{(E-R)}{E} \left[-2 + \frac{\delta_{UP}}{2(R-E)} \right] - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{2+} + \frac{2}{3\sqrt{2}} \beta_{2+}$
$R = B k^2$	$S = -\frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} (1-i), \quad T = i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}}, \quad E = (B^2 k^4 + \frac{1}{4} \delta_{UP}^2)^{1/2}$
$\alpha_{1+} (2+)$	$\frac{b_0}{\Delta_0} (a_0) \left[-\frac{ S ^2}{\sqrt{2} (R+E)} - \sqrt{2} R + \sqrt{2} \frac{ T ^2}{R+E} \right]$
$\beta_{1+} (2+)$	$\frac{b_0}{\Delta_0} (a_0) \left[-\frac{3 ST^*}{\sqrt{2} (R+E)} + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* \right]$

TABELA 9 - ELEMENTOS DE MATRIZ PARA $\vec{K}(CO1)$ e P(111)

$M_{C\uparrow, \phi_{V1+}}^{TM}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{E+R}{E} \right)^{1/2} \left[\frac{\delta_{UP}}{R+E} + 2 \right] - \frac{\alpha_{1+}}{\sqrt{3}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{1+} \right\}$
$M_{C\downarrow, \phi_{V1+}}^{TM}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{E+R}{E} \right)^{1/2} \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{6}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \left(\frac{-\sqrt{3}}{2} Bk^2 + i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3} R+E} \right) \right] - \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{1+} + \frac{\beta_{1+}}{\sqrt{3}} \right\}$
$M_{C\uparrow, \phi_{V2+}}^{TM}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{E-R}{E} \right)^{1/2} \left[\frac{\delta_{UP}}{R-E} + 2 \right] - \frac{\alpha_{2+}}{\sqrt{3}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{2+} \right\}$
$M_{C\downarrow, \phi_{V2+}}^{TM}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{E-R}{E} \right)^{1/2} \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{6}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \left(\frac{-\sqrt{3}}{2} Bk^2 + i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \right) \right] - \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{2+} + \frac{\beta_{2+}}{\sqrt{3}} \right\}$
$M_{C\uparrow, \phi_{V1+}}^{TE}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{E+R}{E} \right)^{1/2} \left\{ \frac{\delta_{UP}}{6(R+E)} - \frac{2}{3} \right\} + \frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{1+} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{1+}$
$M_{C\downarrow, \phi_{V1+}}^{TE}$	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{E+R}{E} \right)^{1/2} \left\{ -\frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \frac{R+E}{2} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \left(\frac{-\sqrt{3}}{2} Bk^2 + i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \right) \right\} - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{1+} + \frac{2\beta_{1+}}{3\sqrt{2}}$
$M_{C\uparrow, \phi_{V2+}}^{TE}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{E-R}{E} \right)^{1/2} \left\{ \frac{\delta_{UP}}{6(R-E)} - \frac{2}{3} \right\} + \frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{2+} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{2+}$
$M_{C\downarrow, \phi_{V2+}}^{TE}$	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{E-R}{E} \right)^{1/2} \left\{ -\frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \frac{R-E}{2} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \left(\frac{-\sqrt{3}}{2} Bk^2 + i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \right) \right\} - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{2+} + \frac{2\beta_{2+}}{3\sqrt{2}}$
$R = \frac{B}{2} k^2$	$S = -\frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} (1-i) \quad T = -\frac{\sqrt{3}}{2} Bk^2 + i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \quad E = \frac{1}{2} \sqrt{(5B^2 k^4 + \delta_{UP}^2 p^2)}$
$\alpha_{1+}^{(2+)}$	$= \frac{b_0}{\Delta_0} (a_0) \left\{ -\frac{ S }{\sqrt{2}(R+E)} - \sqrt{2} R - \sqrt{2} \frac{ T ^2}{R+E} \right\}$
$\beta_{1+}^{(2+)}$	$= \frac{b_0}{\Delta_0} (a_0) \left\{ -\frac{3 S T^*}{\sqrt{2}(R+E)} + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* \right\}$

TABELA 10 - ELEMENTOS DE MATRIZ PARA $\bar{k}(100)$ e P(111)

M_{CT}^{TM} ϕ_{V1+}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ -\frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{(E+R)}{E} \frac{1}{2} \left[\frac{\delta_{UP}}{R+E} + 2 \right] - \frac{\alpha_{1+}}{\sqrt{3}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{1+} \right\}$
M_{CT}^{TM} ϕ_{V1+}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(E+R)}{E} \frac{1}{2} \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{6}} + \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} BK^2 - i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3} R+E} \right) \frac{1}{2} \right] - \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{1+} + \frac{\beta_{1+}}{\sqrt{3}} \right\}$
M_{CT}^{TM} ϕ_{V2+}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ -\frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{(E-R)}{E} \frac{1}{2} \left[\frac{\delta_{UP}}{R-E} + 2 \right] - \frac{\alpha_{2+}}{\sqrt{3}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{2+} \right\}$
M_{CT}^{TM} ϕ_{V2+}	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(E-R)}{E} \frac{1}{2} \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{6}} + \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} BK^2 - i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3} R-E} \right) \frac{1}{2} \right] - \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{2+} + \frac{\beta_{2+}}{3} \right\}$
M_{CT}^{TE} ϕ_{V1+}	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{(E+R)}{E} \frac{1}{2} \left[\frac{\delta_{UP}}{6(R+E)} - \frac{2}{3} \right] + \frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{1+} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{1+} \right\}$
M_{CT}^{TE} ϕ_{V1+}	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left\{ \frac{(E+R)}{E} \frac{1}{2} \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \frac{R+E}{R+E} + \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} BK^2 - i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \right) \right] - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{1+} + \frac{2\beta_{1+}}{3\sqrt{2}} \right\}$
M_{CT}^{TE} ϕ_{V2+}	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{(E-R)}{E} \frac{1}{2} \left[\frac{\delta_{UP}}{6(R-E)} - \frac{2}{3} \right] + \frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{2+} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{2+} \right\}$
M_{CT}^{TE} ϕ_{V2+}	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left\{ \frac{(E-R)}{E} \frac{1}{2} \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \frac{R-E}{R-E} + \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} BK^2 - i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \right) \right] - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{2+} + \frac{2\beta_{2+}}{3\sqrt{2}} \right\}$
$R = -\frac{S}{2} k^2$	$S = -\frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} (1-i) \quad T = \frac{\sqrt{3}}{2} BK^2 + i \frac{\delta_{UP}}{2\sqrt{3}} \quad E = \frac{1}{2} \sqrt{(5B^2 k^4 + \delta_{UP}^2 P^2)}$
$\alpha_{1+}^{(2+)} = \frac{b_0}{\Delta_0}$	$\left[-\frac{ S }{2(R \pm E)} - \sqrt{2} R + \sqrt{2} \frac{ T }{R \pm E} \right]$
$\beta_{1+}^{(2+)} = \frac{b_0}{\Delta_0}$	$\left[-\frac{3 S T^*}{2(R \pm E)} + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* \right]$

TABELA 11 - ELEMENTOS DE MATRIZ PARA $\vec{k}(010)$ e $P(111)$

V-1. EMISSÃO ESPONTÂNEA

Consideremos as transições para as bandas de valência v_1 e v_2 . Os estados em v_3 já estão ocupados e não contribuem para recombinação.

Para $\vec{k} = 0$ e pressão (111) já vimos, pela equação (48), que o multiplete $j_{3/2}$ quatro vezes degenerado se desdobra em dois duplamente degenerados com energias:

$$E_{v_1}^{(111)} = (-\delta_H + \frac{1}{2} \delta\mu_{111})P$$

$$E_{v_2}^{(111)} = (-\delta_H - \frac{1}{2} \delta\mu_{111})P$$

O potencial de deformação hidrostático δ_H já foi determinado experimentalmente por Pollak-Cardona [14] por medidas de piezo-eletrorrefletividade como sendo:

$$\delta_H = (4,0 \pm 0,5) \times 10^{-6} \text{ ev/atm} \quad (67)$$

Através das mesmas medidas, Pollak-Cardona [14] também determinaram $\delta\mu_{111}^*$ resultando:

$$\delta\mu_{111} = (6,0 \pm 0,5) \times 10^{-6} \text{ ev/atm} \quad (68)$$

* $\delta\mu_{111}$ também pode ser calculado através da relação (47)

$$\delta\mu_{111} = -\frac{d}{\sqrt{3}} S_{44}$$

Tomando o valor de d medido em [14] e S_{44} em [19] resulta:

$$\delta\mu_{111} = (5,9 \pm 0,5) \times 10^{-6} \text{ ev/atm}$$

Teremos então:

$$E_{V_1}^{(111)} = - 1,1 \times 10^{-6} P \quad (69)$$

$$E_{V_2}^{(111)} = - 6,9 \times 10^{-6} P \quad (70)$$

Considerando transições da banda de condução para a banda $\phi_{V_{1\pm}}$, a variação da energia (ou frequência) da emissão espontânea com a pressão, em $\vec{k} = 0$ deveria ser dada por:

$$\Delta_1 = \frac{dE_1}{dP} = h \left(\frac{d\nu}{dP} \right)_{\phi_{V_{1\pm}}} = 1,1 \times 10^{-6} \text{ ev/atm} \quad (71)$$

Por outro lado, transições da banda de condução para $\phi_{V_{2\pm}}$ resultariam numa variação da energia (ou frequência) da emissão com a pressão dada por:

$$\Delta_2 = \frac{dE_2}{dP} = h \left(\frac{d\nu}{dP} \right)_{\phi_{V_{2\pm}}} = 6,9 \times 10^{-6} \text{ ev/atm} \quad (72)$$

Pelos resultados (65) da seção anterior e na Tabela 8, vimos que em $\vec{k} = 0$ e \vec{k} paralelo a P (111) as transições TE se dão preferencialmente para a banda v_2 e as TM apenas para a banda v_1 .

Desse modo, deveríamos ter, para transições em $\vec{k} = 0$,

$$h \left(\frac{d\nu}{dP} \right)_{TM} = \Delta_1 \quad (73)$$

$$h \left(\frac{d\nu}{dP} \right)_{TE} = \Delta_2$$

Podemos observar ainda pelas Tabelas 9, 10 e 11 que para $\vec{k} \neq 0$ e não paralelo a P, os elementos de matriz e consequentemente as probabilidades de transição se modificam, dando-nos a possibilidade de termos transições TM para a banda $\phi_{v_{2\pm}}$, o que não ocorre para $\vec{k} = 0$ ou \vec{k} paralelo a P. Daí esperaríamos:

$$h \left(\frac{d\nu}{dP} \right)_{TM} > \Delta_1$$

Uma estimativa melhor para a variação da frequência de emissão espontânea com a pressão, para polarizações TE e TM poderia ser feita, calculando-se o ganho para cada polarização, onde substituiríamos os elementos de matriz $M_{c, \phi_{v_{1\pm}}}^{TE, TM}$ e $M_{c, \phi_{v_{2\pm}}}^{TE, TM}$ para pressão pequena na direção (111) e \vec{k} pequeno numa direção qualquer, nas expressões (3) e (7) da seção I-2. Estimariamos o valor da energia $E_m(P)$ que nos daria o máximo de $g^{TE}(E)$ e $g^{TM}(E)$ para diversas pressões e obteríamos uma melhor aproximação na determinação de:

$$\left(\frac{dE_m}{dP} \right)_{TM} \quad e \quad \left(\frac{dE_m}{dP} \right)_{TE}$$

Além disso, como trabalhamos com semicondutores com dopagem relativamente alta, deveria ser considerada a influência dos níveis aceitadores perto da banda de valência nas transições TE e TM.

Entretanto, como os níveis aceitadores podem ser representados por combinações lineares das funções $\phi_{v_{1\pm}}$ e $\phi_{v_{2\pm}}$, os resultados obtidos até aqui, apesar de serem uma aproximação um tanto grosseira, serão úteis em cálculos posteriores.

V-2. EMISSÃO ESTIMULADA

Os modos longitudinais selecionados por uma cavidade de comprimento L (Figura 9-a) e índice de refração η , serão aqueles de comprimento de onda λ satisfazendo a seguinte condição:

$$L = m \frac{\lambda}{2\eta} \quad (76)$$

onde m é um número inteiro, ou seja, a cavidade suporta um número inteiro de meios comprimentos de onda.

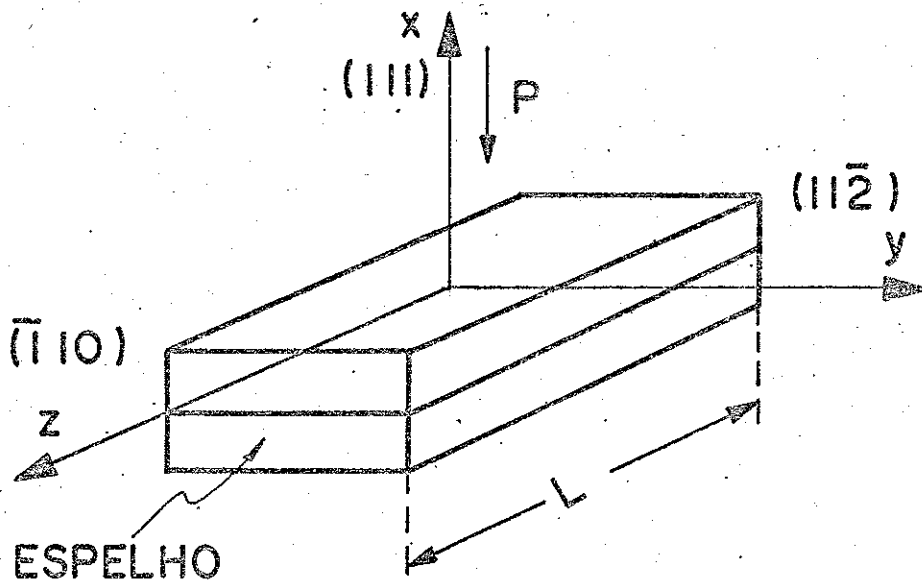


Fig.9-a

Substituindo λ por c/ν , onde c é a velocidade da luz, podemos escrever (76) em termos da frequência ν como:

$$\nu = \frac{m c}{2 L \eta} \quad (77)$$

ou, em termos da energia

$$E \equiv h\nu = \frac{h m c}{2 L \eta} \quad (78)$$

Estamos interessados na variação da frequência (ou energia) desses modos com a pressão uniaxial.

Derivando (78) com respeito a pressão (P) obtemos:

$$\frac{1}{hv} \frac{d(hv)}{dP} = - \frac{(\partial\eta/\partial P)_{hv}}{\eta + hv[\partial\eta/\partial(hv)]_P} - \frac{\eta}{L} \frac{dL/dP}{\eta + hv[\partial\eta/\partial(hv)]_P} \quad (79)$$

Vamos tomar para a compressibilidade linear o valor já conhecido para o GaAs [21]:

$$\frac{1}{L} \frac{dL}{dP} = - 3,65 \times 10^{-7} \text{ (atm)}^{-1} \quad (80)$$

Para a variação do índice de refração com a energia, a pressão constante, vamos tornar o valor calculado por I.N. Bandeira [18] a partir da expressão empírica [22]:

$$\eta^2 = 21,953 + \frac{73,811}{- 8,080 + E_G^2 - (hv)^2} \quad (81)$$

onde E_G é a energia do gap, obtendo-se:

$$\left[\frac{\partial\eta}{\partial(hv)} \right]_P = 0,5 \text{ (ev)}^{-1} \quad (82)$$

Para a variação do índice de refração com a pressão, vamos partir da variação da constante dielétrica com a pressão, desde que $\eta = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}$, dada por [23]:

$$\Delta(\epsilon_{ij}) = \frac{\epsilon_i \epsilon_j}{\epsilon_0} \pi_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (83)$$

onde π_{ijkl} é a componente $(ijkl)$ do tensor piezo-ótico de quarta ordem e σ_{kl} é a componente (kl) da tensão.

Vamos considerar a pressão na direção $(1\ 1\ 1)$ e fixar os eixos cartesianos no laser como mostramos na Figura 9. Desse modo, o eixo x coincide com a pressão, o eixo y está no plano da junção e é paralelo aos espelhos, correspondendo a direção $(1\ 1\ \bar{2})$ do cristal e o eixo z , correspondendo a direção $(\bar{1}\ 1\ 0)$ do cristal, é a direção de propagação da luz.

Nesse caso, considerando que a única componente da tensão é $\sigma_{xx} = -P$, o tensor ϵ será dado por: [23]

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} + \Delta\epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} + \Delta\epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} + \Delta\epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (84)$$

onde

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \epsilon$$

$$\Delta\epsilon_{xx} \equiv \Delta\epsilon_{//} = \frac{\epsilon^2}{3\epsilon_0} (\pi_{1111} + 4\pi_{3232} + 2\pi_{1122})P \quad (85)$$

$$\Delta\epsilon_{yy} = \Delta\epsilon_{zz} \equiv \Delta\epsilon_{\perp} = \frac{\epsilon^2}{3\epsilon_0} (\pi_{1111} - 2\pi_{3232} + 2\pi_{1122})P \quad (86)$$

A notação $\Delta\epsilon_{//}$ indica a constante dielétrica na direção paralela a pressão e $\Delta\epsilon_{\perp}$ perpendicular a pressão.

O tensor π_{ijkl} [23] é dado em termos dos eixos x' (100) , y' (010) e z' (001) do cristal por:

$$\pi_{1111} = -0,091753 \times 10^{-6} \text{ (atm)}^{-1}$$

$$\pi_{1122} = - 0,053232 \times 10^{-6} \text{ (atm)}^{-1} \quad (87)$$

$$\pi_{3232} = - 0,060606 \times 10^{-6} \text{ (atm)}^{-1}$$

Temos então:

$$\Delta\epsilon_{//} = - 0,147 \times 10^{-6} \frac{\epsilon^2}{\epsilon_0} P \quad (87)$$

$$\Delta\epsilon_{\perp} = - 0,026 \times 10^{-6} \frac{\epsilon^2}{\epsilon_0} P \quad (88)$$

Como $\eta = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}$, escrevendo (87) e (88) em termos do índice de refração vem:

$$\Delta\eta_{//} = \frac{1}{2 \eta \epsilon_0} \Delta\epsilon_{//} = - 3,3 \times 10^{-6} P \quad (89)$$

$$\Delta\eta_{\perp} = \frac{1}{2 \eta \epsilon_0} \Delta\epsilon_{\perp} = - 0,6 \times 10^{-6} P \quad (90)$$

onde usamos $\eta = 3,56$ correspondente a energia de 1,468 eV [22] ou a um comprimento de onda de 8460 Å, aproximadamente. P é dada em atmosferas.

Obtemos portanto:

$$\frac{\partial \eta_{//}}{\partial P} = - 3,3 \times 10^{-6} \text{ (atm)}^{-1} \quad (91)$$

$$\frac{\partial \eta_{\perp}}{\partial P} = - 0,6 \times 10^{-6} \text{ (atm)}^{-1} \quad (92)$$

A maioria dos nossos lasers tem a luz polarizada no modo TM em $P = 0$ numa temperatura próxima de 80°K ou, quando isso

não ocorre, verificamos experimentalmente que uma pressão de algumas atmosferas é suficiente para fazer com que o laser passe do modo TE para TM, desde que o ganho TM aumenta com a pressão enquanto que o TE diminui [25]. Isto significa que as nossas medidas foram obtidas com o campo elétrico polarizada na direção da pressão* ($\vec{E} = E \vec{e}_x = E \vec{e}_{//}$), de modo que a componente do índice de refração que determina o comprimento de onda dentro do guia seja $\eta_{//}$. Portanto, devemos substituir na expressão (79) para $\frac{d(h\nu)}{dP}$, o valor de

$(\frac{\partial \eta}{\partial P})_{h\nu}$ dado por:

$$(\frac{\partial \eta}{\partial P})_{h\nu} = \frac{\partial \eta_{//}}{\partial P} = -3,3 \times 10^{-6} (\text{atm})^{-1} \quad (93)$$

Substituindo (93), (80) e (82) (Tabela 12) em (79) e usando $h\nu = 1,468 \text{ eV}$, resulta:

$$\frac{d(h\nu)}{dP} = 1,6 \times 10^{-6} \text{ eV/atm} \quad (94)$$

η	$\frac{\partial \eta}{\partial \nu} (\text{eV})^{-1}$	$\frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial P} (\text{atm})^{-1}$	$\frac{\partial \eta}{\partial P} (\text{atm})^{-1}$	$\frac{d(h\nu)}{dP} (\text{eV/atm})$
3,56	0,5	$-3,65 \times 10^{-7}$	$-3,3 \times 10^{-6}$	$1,6 \times 10^{-6}$

TABELA 12 - PARÂMETROS ENVOLVIDOS NA DETERMINAÇÃO DE $(\frac{d(h\nu)}{dP})_{\text{EST}}$

PARA O GaAs A 77°K

* Na realidade, o modo TM tem uma pequena componente do campo elétrico na direção z do guia que nós desprezamos.

Cabem aqui algumas considerações sobre as aproximações envolvidas no cálculo de (94)..

1º) No cálculo de $(-\frac{\partial \eta}{\partial P})_{h\nu}$ não consideramos o índice de refração como função da concentração de portadores na região ativa. Sabemos que essa concentração é proporcional a corrente limiar. Na Figura 9-b mostramos um comportamento típico da corrente limiar em relação a pressão uniaxial na direção (111) obtido nas nossas medidas experimentais. Vemos que essa corrente decresce com a pressão. Isso ocorre para a maioria dos lasers de homoestrutura a 80°K, desde que eles são polarizados no modo TM [18-25]. Portanto, a concentração de portadores na região ativa também deve diminuir com a pressão, acarretando um aumento no índice de refração. Assim, o índice de refração variaria com a pressão através da variação da concentração de portadores. Essa variação, que é no sentido contrário a $\frac{\partial \eta}{\partial P}$ dada por (93), deveria ser acrescentada a (93). Entretanto, temos $\frac{d I_{th}}{dP}$ aproximadamente igual a -0,17 mA/atm. Essa variação daria a $\frac{\partial \eta}{\partial P}$ uma contribuição que varia entre $1 \times 10^{-7} \text{ (atm)}^{-1}$ e $9 \times 10^{-7} \text{ (atm)}^{-1}$ [18].

2º) Um modo que é TM puro antes da pressão ser aplicada, pode ter sua polarização mudada pela pressão uniaxial. Isso pode ocorrer, se a pressão aplicada não estiver exatamente na direção (111), mas fazendo um pequeno ângulo com essa direção. Isso provoca o aparecimento de componentes diferentes de zero fora da diagonal do tensor da constante dielétrica e, conseqüentemente, do índice de refração, o que causa uma perturbação nos autômodos do laser [23], modificando-os. Esses novos autômodos são elípticos, tendo componentes TE e TM e tendo uma constante de propagação dife

rente daquela do modo inicial, que supomos ser TM, antes da pressão ser aplicada. Isto significa que teremos uma variação adicional no comprimento de onda, ou seja, na frequência dos modos do laser, com a pressão, provocada pela mudança na polarização.

Essa mudança de polarização foi verificada experimentalmente em nossos laboratórios e encontra-se explicada em detalhes na tese de mestrado [23] a ser publicada. A sua influência pode ser tanto no sentido de aumentar $\frac{d(h\nu)}{dP}$ como no de reduzir.

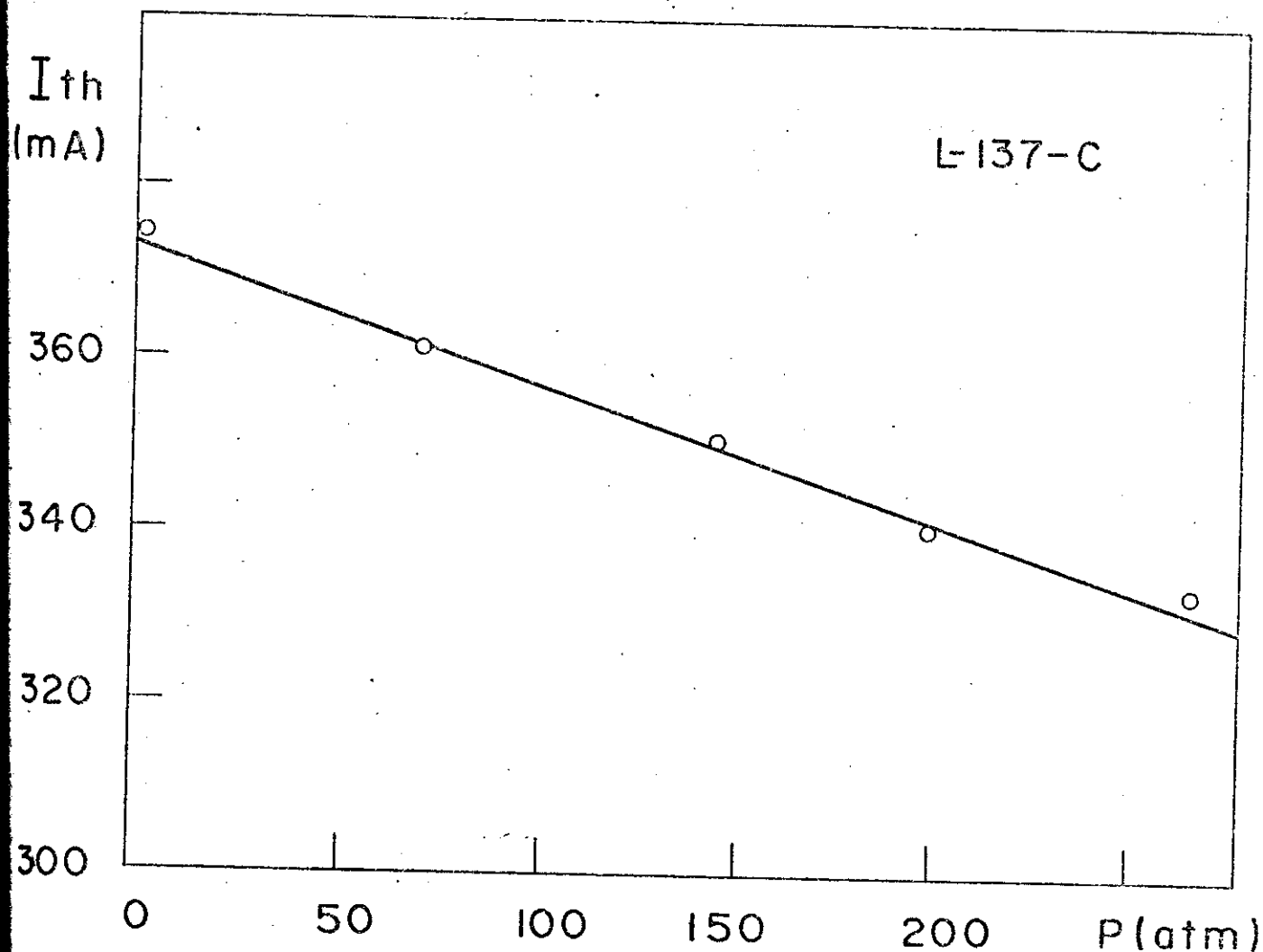


Fig. 9-b - CORRENTE LIMIAR EM FUNÇÃO DA PRESSÃO UNIAXIAL

VI-1. MONTAGEM EXPERIMENTAL

Na Figura 10 mostramos o sistema utilizado para aplicar pressão uniaxial em lasers de homoeestrutura. O dewar inferior contém nitrogênio líquido e o dewar invertido é colocado para manter uma atmosfera de nitrogênio envolvendo o laser. Dessa maneira conseguimos chegar a uma temperatura de 80^oK aproximadamente que é medida por um termopar de ferro-constantan e mantida constante através de um controlador de temperatura. O controle da temperatura é muito importante, desde que a variação de 1^oK na temperatura corresponde a uma variação na pressão de dezenas de atmosferas.

O laser é colocado entre dois diamantes metalizados de faces paralelas para obter pressão uniaxial perpendicular a junção como mostramos na Figura 11, sendo o inferior colado sobre um microposicionador x - y e o superior comprimido sobre o laser por uma sanfona na qual se introduz Hélio gasoso.

Conhecemos a pressão p do Hélio medindo-a através de um manômetro. Essa pressão atua sobre a área A da sanfona, transmitindo para a ponta que comprime o diamante uma força de

$$F = p \times A$$

Essa força é aplicada uniformemente sobre a área a do laser e a pressão que atua sobre o laser será:

$$p = \frac{F}{a} = \frac{p \times A}{a}$$



Fig. 10a



Fig. 10-b

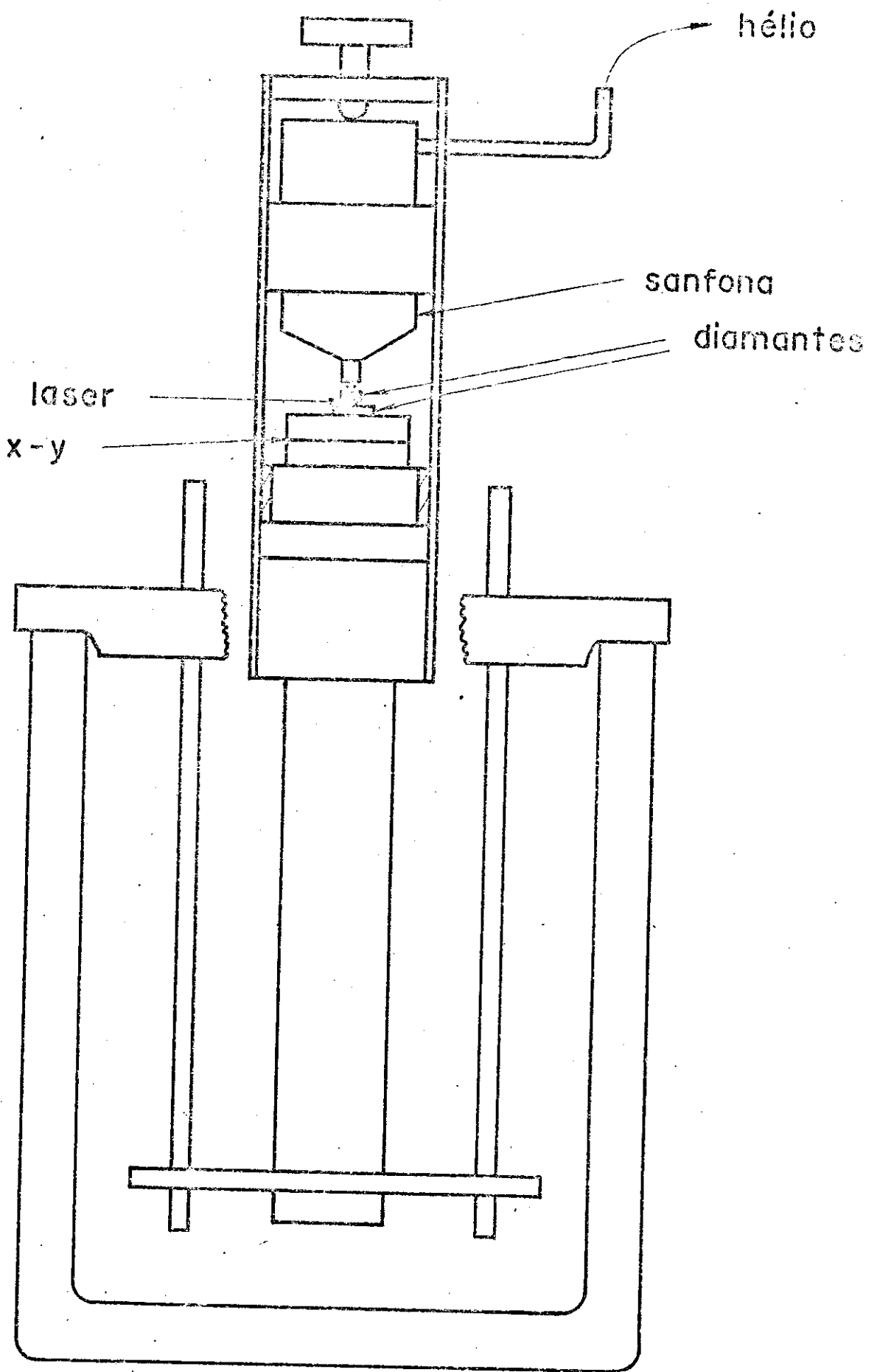


Fig. II- SISTEMA DE PRESSÃO

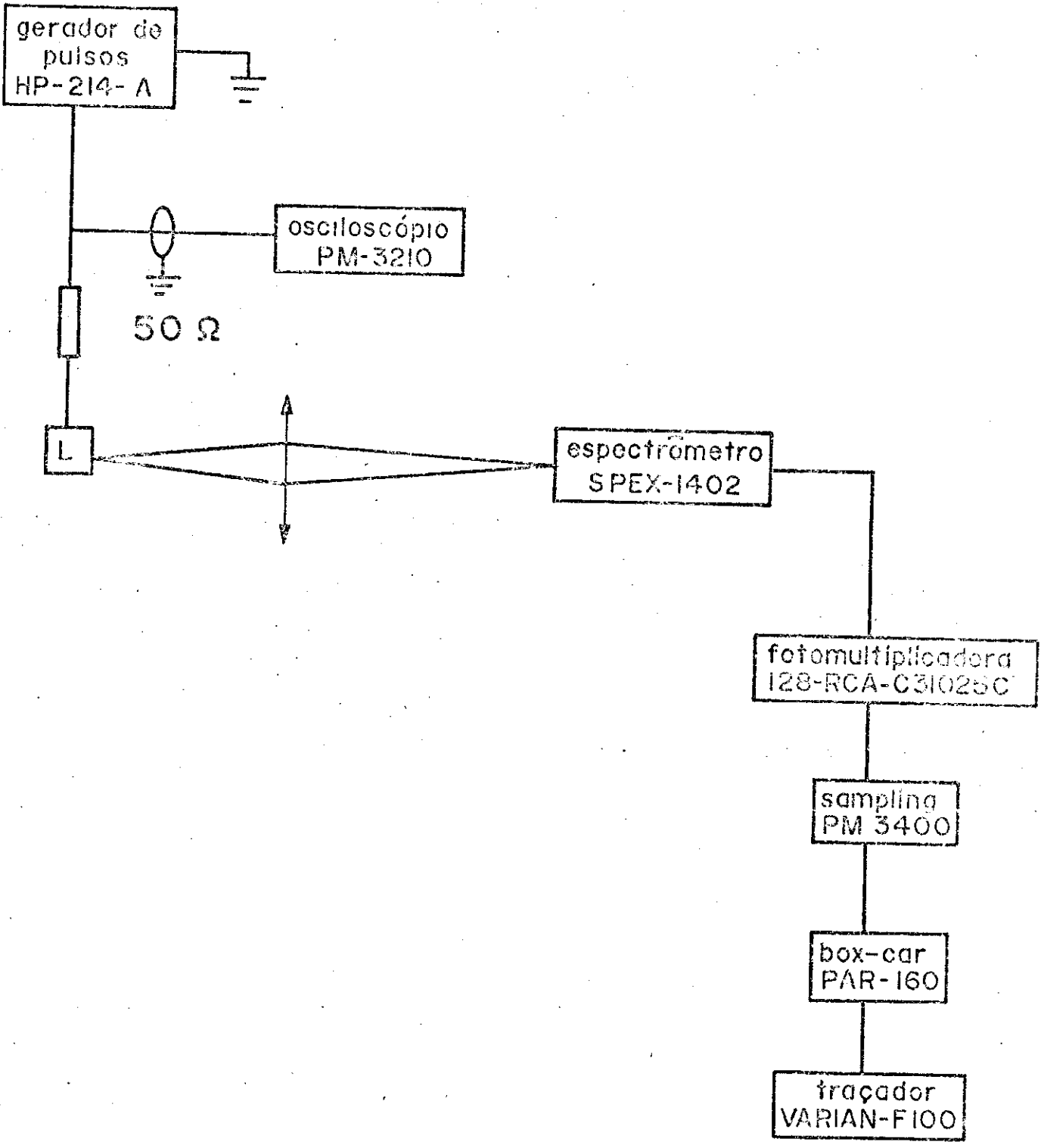


Fig.12 - ESQUEMA DE MONTAGEM

A área da sanfona utilizada é de $2,42 \text{ cm}^2$ e as dimensões do laser são de $380 \text{ }\mu\text{m}$ por $230 \text{ }\mu\text{m}$, dando uma área de $2,4 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$, sendo que foram medidas exatamente para cada laser através de um microscópio.

Tiramos algumas medidas de emissão espontânea com lasers de heteroestrutura dupla, que tem uma área de $1,0 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$ aproximadamente. Nesse caso trabalhamos a temperatura ambiente, eliminando os dewars.

Para obter os espectros, tanto de emissão espontânea como estimulada, utilizamos a montagem esquematizada na Figura 12. Excitamos o laser com pulsos de 100 ns de largura e 1 khertz de frequência de repetição com um gerador de pulsos Hewlett Packard. A luz do laser é focalizada na fenda do espectrômetro por uma lente e detetada por uma fotomultiplicadora. O sinal da fotomultiplicadora é analisado num osciloscópio de amostras, amplificado e integrado no Box-car e seu comportamento é registrado pelo traçador.

Para emissão estimulada utilizamos a fenda do espectrômetro com $20 \text{ }\mu\text{m}$ e para emissão espontânea com $400 \text{ }\mu\text{m}$.

VI-2. RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Na Figura 13 mostramos alguns espectros de emissão estimulada para várias pressões. Deve ser notado que variamos a pressão lentamente, de modo que o deslocamento de cada modo provocado pela pressão fosse menor que a separação entre os modos. Isso nos garantia estarmos acompanhando sempre o mesmo modo.

Na Figura 14 apresentamos espectros obtidos com correntes diferentes e mesma pressão. Como pode ser notado, as frequências dos modos variam com a corrente mesmo que a pressão seja mantida fixa. Portanto é muito importante fixar-se a corrente para se calcular as variações das frequências com a pressão.

Na Figura 15 apresentamos a variação das frequências dos máximos da emissão espontânea da luz polarizada TE e TM com a pressão.

Nas Figuras de 16 a 29 estão os gráficos do comprimento de onda* dos modos de emissão estimulada versus pressão e nas Tabelas de 13 a 21, as inclinações das retas $h\nu \times P$, $\frac{d(h\nu)}{dP}$, calculadas pelo método dos mínimos quadrados. O cálculo dessas inclinações foi feito por um programa computacional que converte diretamente centímetros de papel, onde é registrado o espectro, em comprimento de onda e em energia e calcula a inclinação $\frac{d(h\nu)}{dP}$ pelo método dos mínimos quadrados em eletrons-volts por atmosfera. Para alguns lasers verificamos também como se comportam essas inclinações em função da corrente. A média entre os modos pa

* Na realidade, deveríamos obter uma reta graficando $\nu \times P$. Mas, como $\nu = \frac{c}{\lambda}$, $\frac{d\nu}{dP} = -\frac{c}{\lambda^2} \frac{d\lambda}{dP}$, podemos considerar $\frac{d\nu}{dP}$ proporcional a $\frac{d\lambda}{dP}$, com $\frac{c}{\lambda^2}$ constante, desde que a variação em λ é da ordem de alguns angstroms numa região de comprimento de onda em torno de 8500 Å.

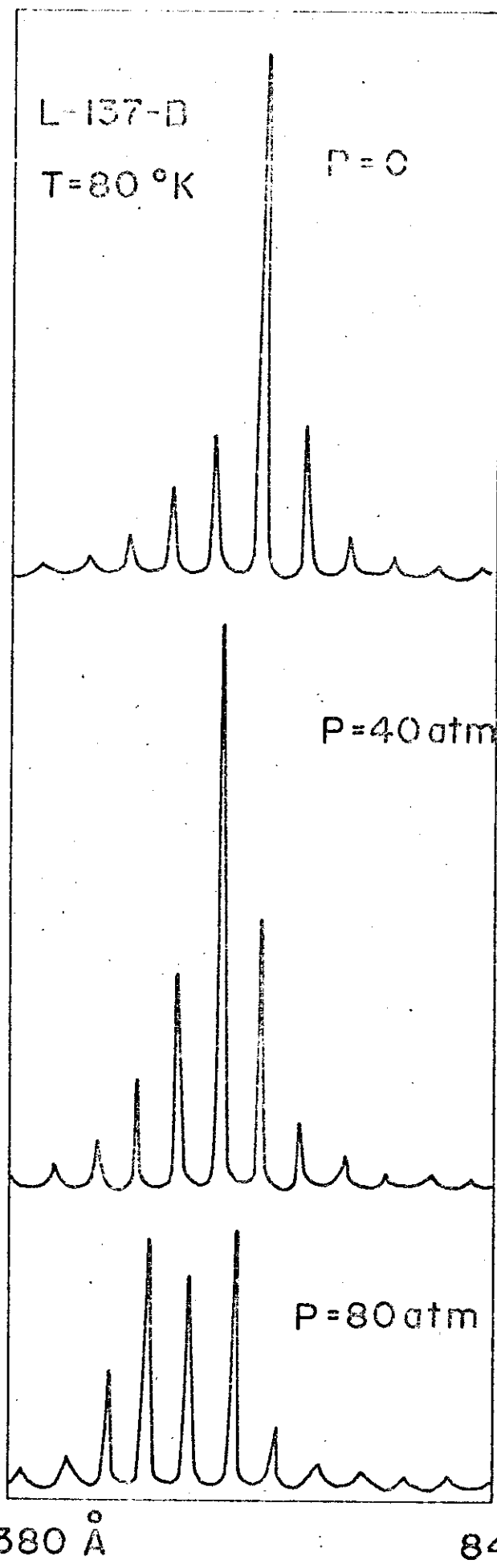


Fig.13- ESPECTROS DE UM MESMO LASER A DIFERENTES PRESSÕES COM CORRENTE CONSTANTE

T M

T E

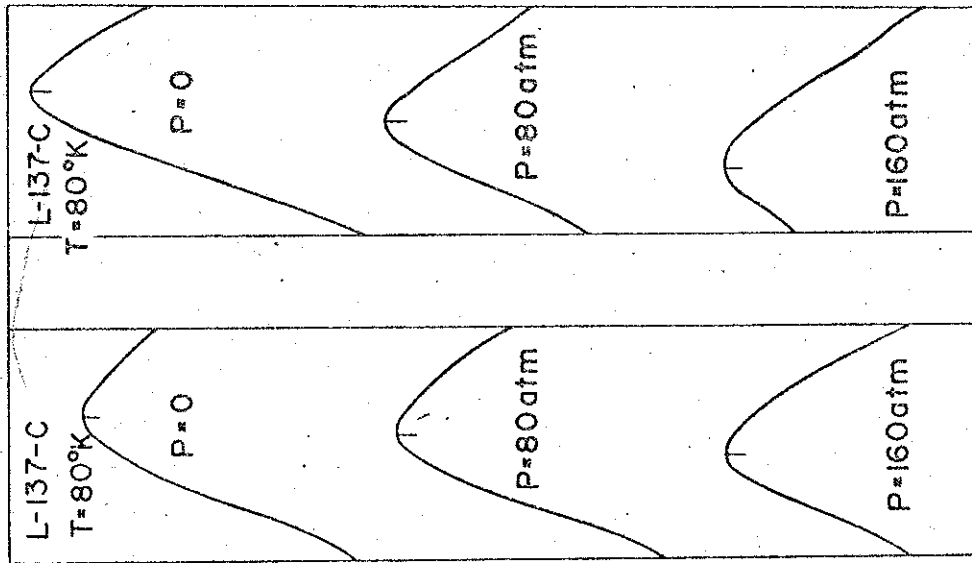


Fig.15 - ESPECTROS DE EMISSÃO ESPONTÂNEA
A DIFERENTES PRESSÕES APLICADAS

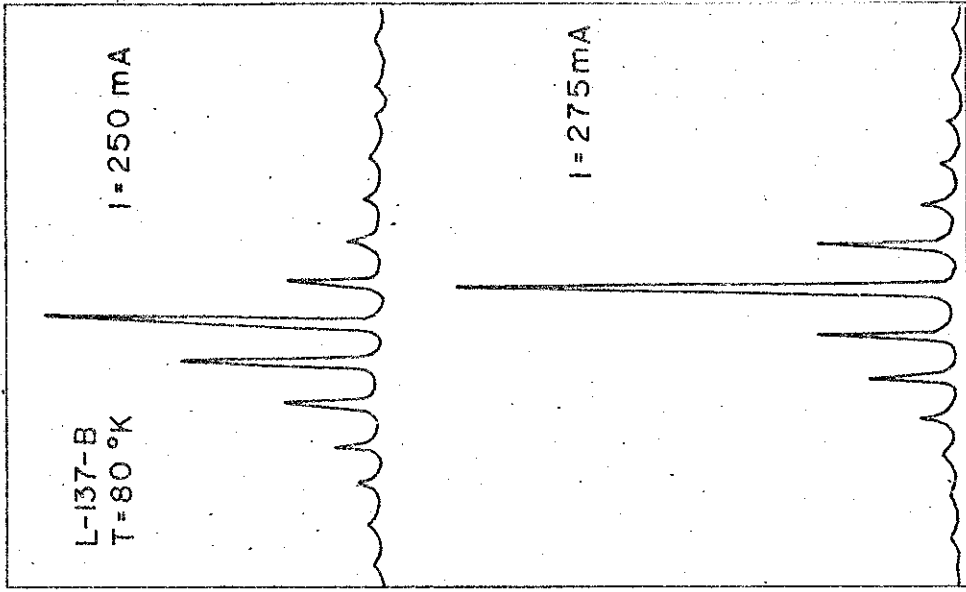


Fig.14 - ESPECTROS DE UM MESMO LASER
A DIFERENTES CORRENTES SEM
PRESSÃO APLICADA

ra cada laser está na Tabela 24.

Podemos observar que:

- 1) Há uma relação linear entre $h\nu$ e P .
- 2) As diferenças entre $\frac{d(h\nu)}{dP}$ de um modo para outro, quando existem, estão dentro dos erros experimentais.
- 3) $\frac{d(h\nu)}{dP}$ é praticamente independente da corrente.
- 4) Há uma dispersão relativamente grande entre os vários lasers, inclusive para lasers de mesmo grupo de fabricação.

Nas Figuras de 30 a 32 estão os gráficos mostrando a variação do comprimento de onda correspondente ao máximo da emissão espontânea versus pressão para modos TE e TM e na Tabela 22 as inclinações $\frac{dE}{dP}$ calculadas para lasers de homoestrutura em ev/atm .

Nas Figuras de 33 a 36 temos os gráficos do comprimento de onda do máximo da emissão espontânea TE e TM versus pressão para lasers de heteroestrutura dupla, com as respectivas inclinações em ev/atm na Tabela 23.

Tanto para lasers de homoestrutura como para heteroestrutura podemos verificar que $\left(\frac{dE}{dP}\right)_{\text{TE}}^{\text{esp}} > \left(\frac{dE}{dP}\right)_{\text{TM}}^{\text{esp}}$.

Em todos os gráficos de emissão espontânea (Figuras de 30 a 36), podemos notar que em $P = 0$ a frequência do modo TE não coincide com a do modo TM, o que não era esperado, desde que as bandas v_1 e v_2 são degeneradas em $\vec{k} = 0$ e $P = 0$. Isso indica a existência de uma tensão interna nos lasers, mesmo nos de homoestrutura, ainda que sem pressão aplicada. Como para a maioria deles a frequência TE é menor que a TM (comprimento de onda TE maior que o TM nas Figuras de 30 a 36) a tensão interna é, em geral, no sentido contrário da pressão aplicada, ou seja, corresponde a uma descompressão.

Fig. 16

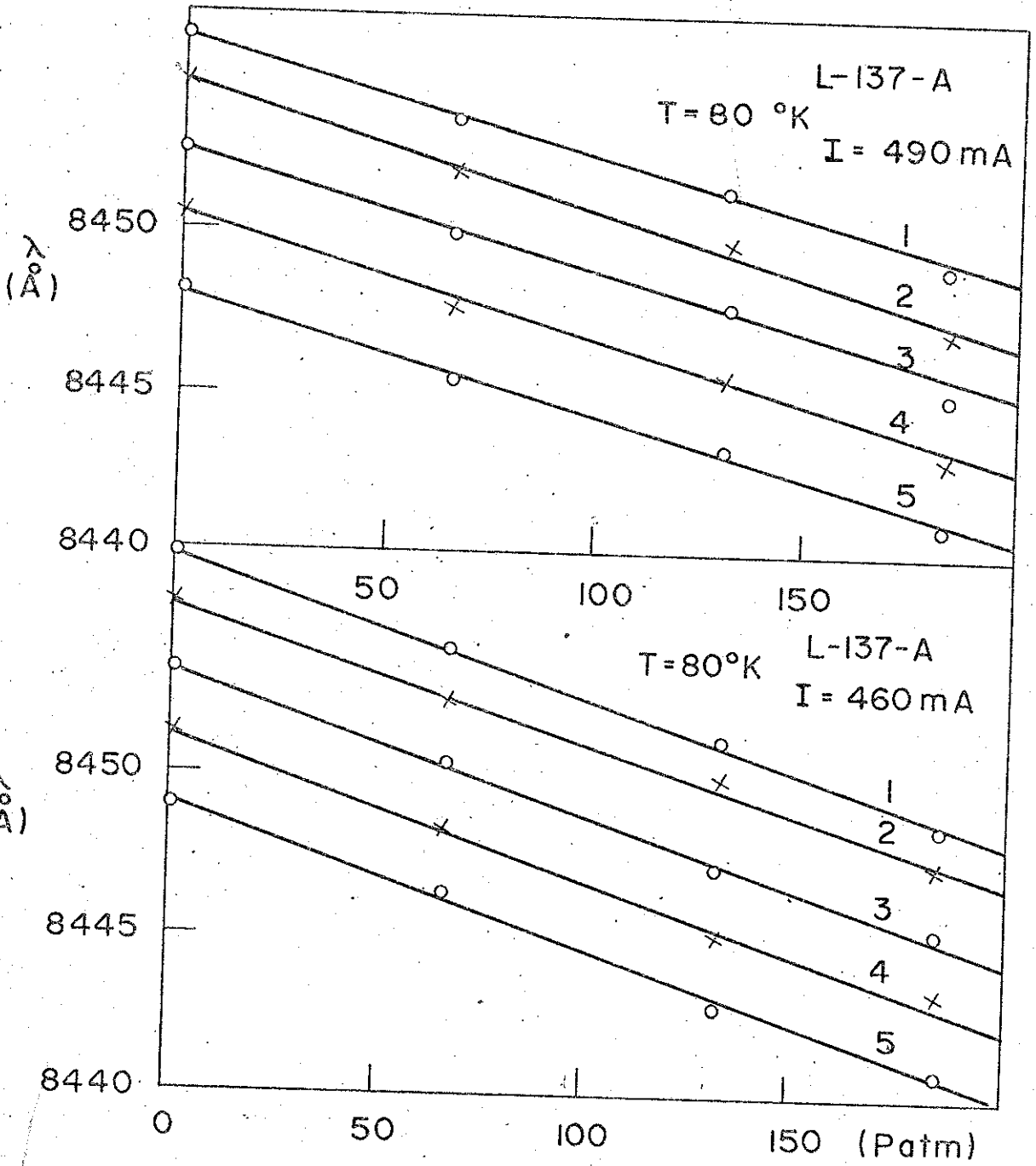


Fig. 17

EMISSÃO ESTIMULADA

Fig. 18

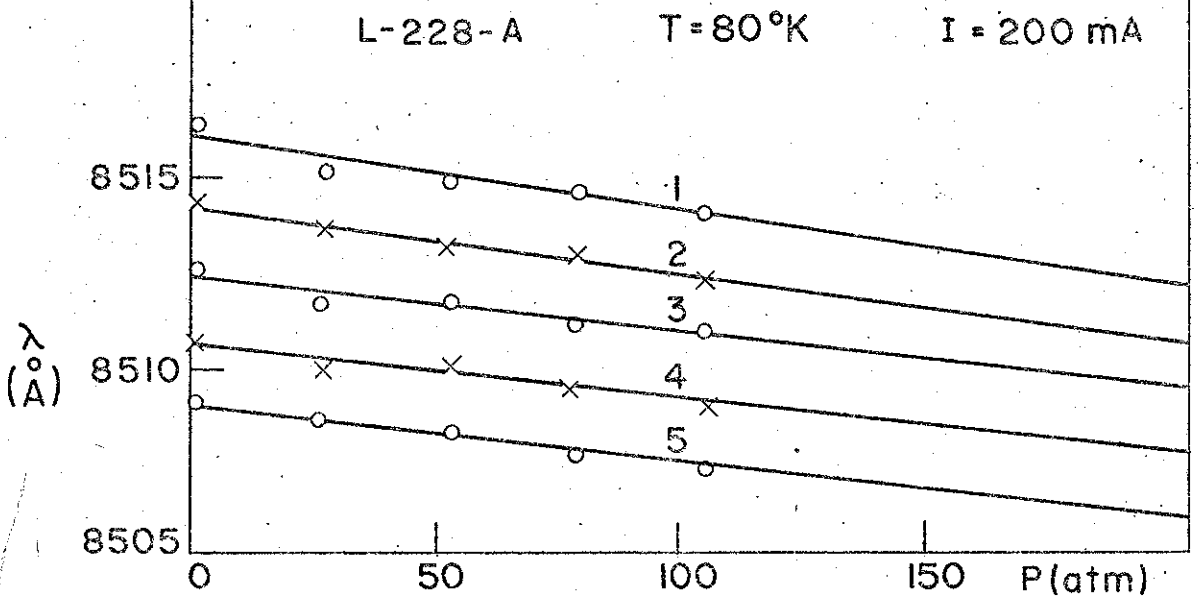
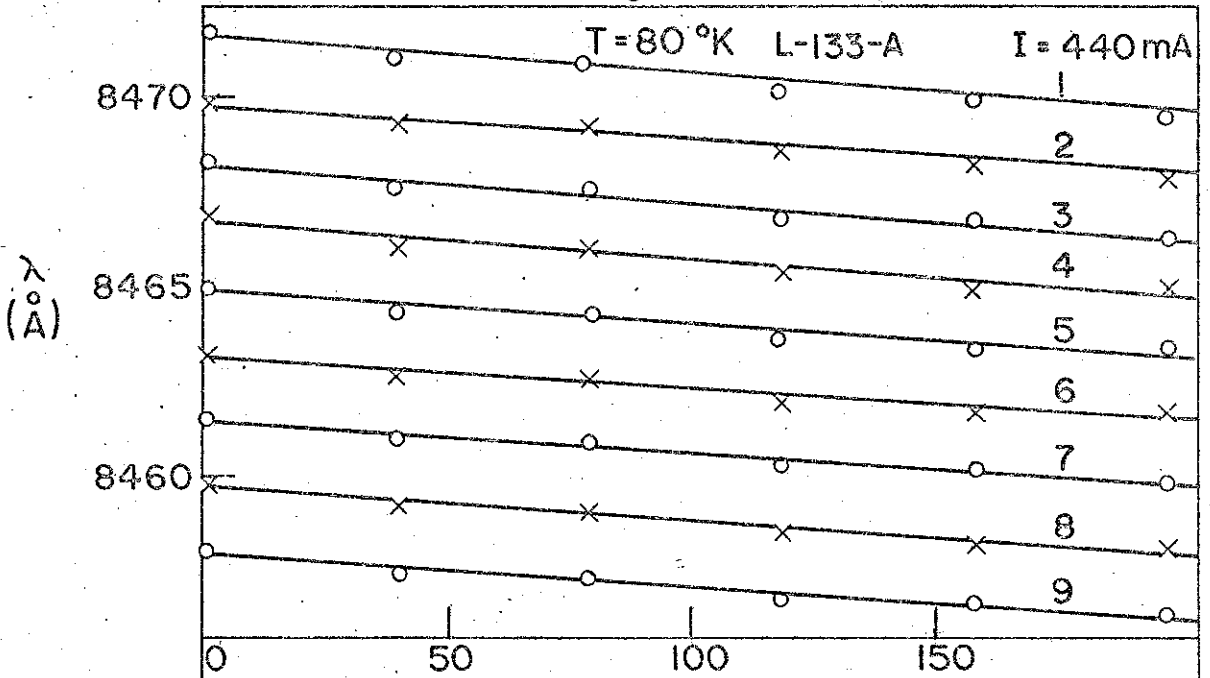


Fig. 19

EMISSÃO ESTIMULADA

Fig. 20

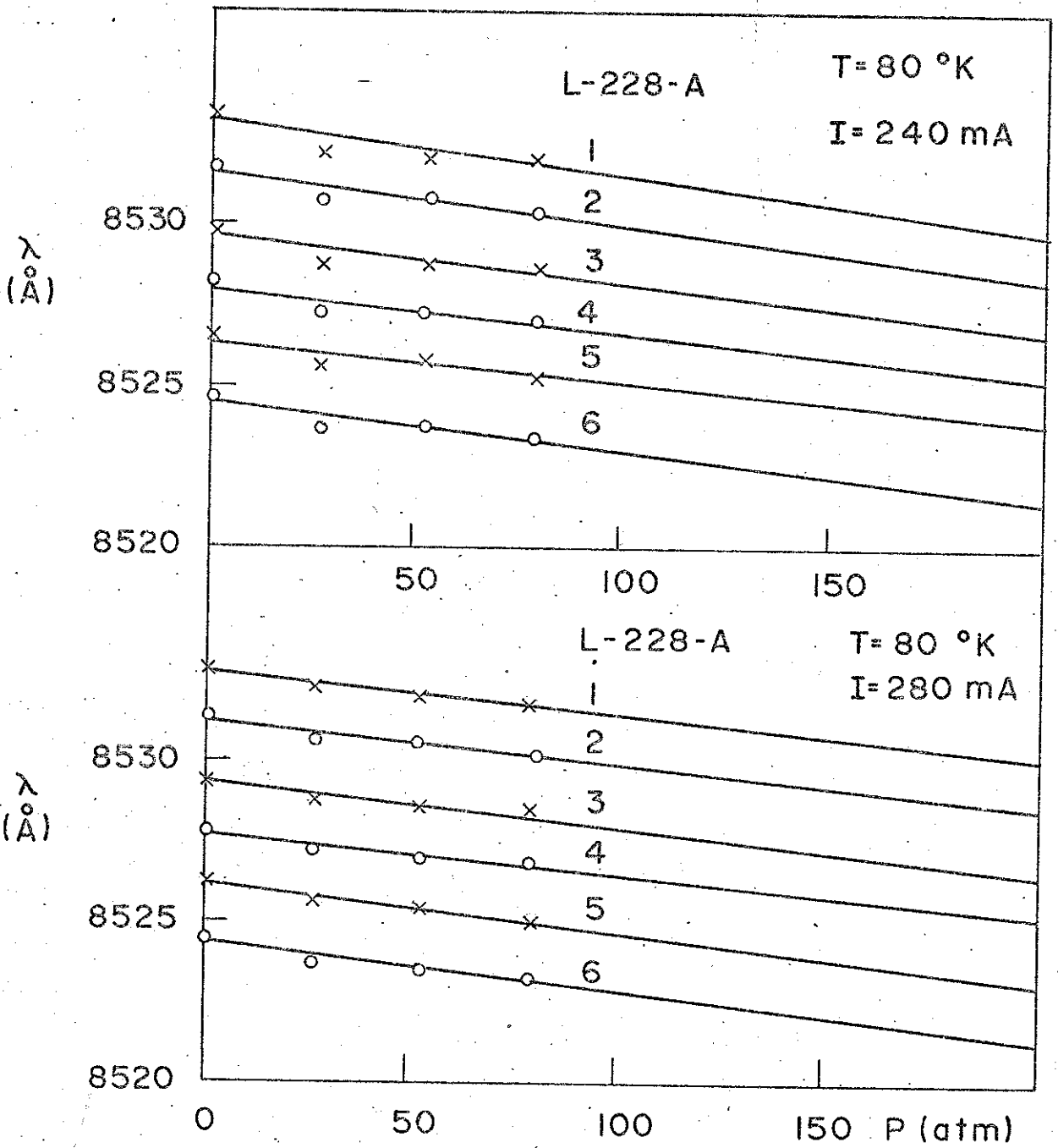


Fig. 21

EMISSÃO ESTIMULADA

Fig. 22

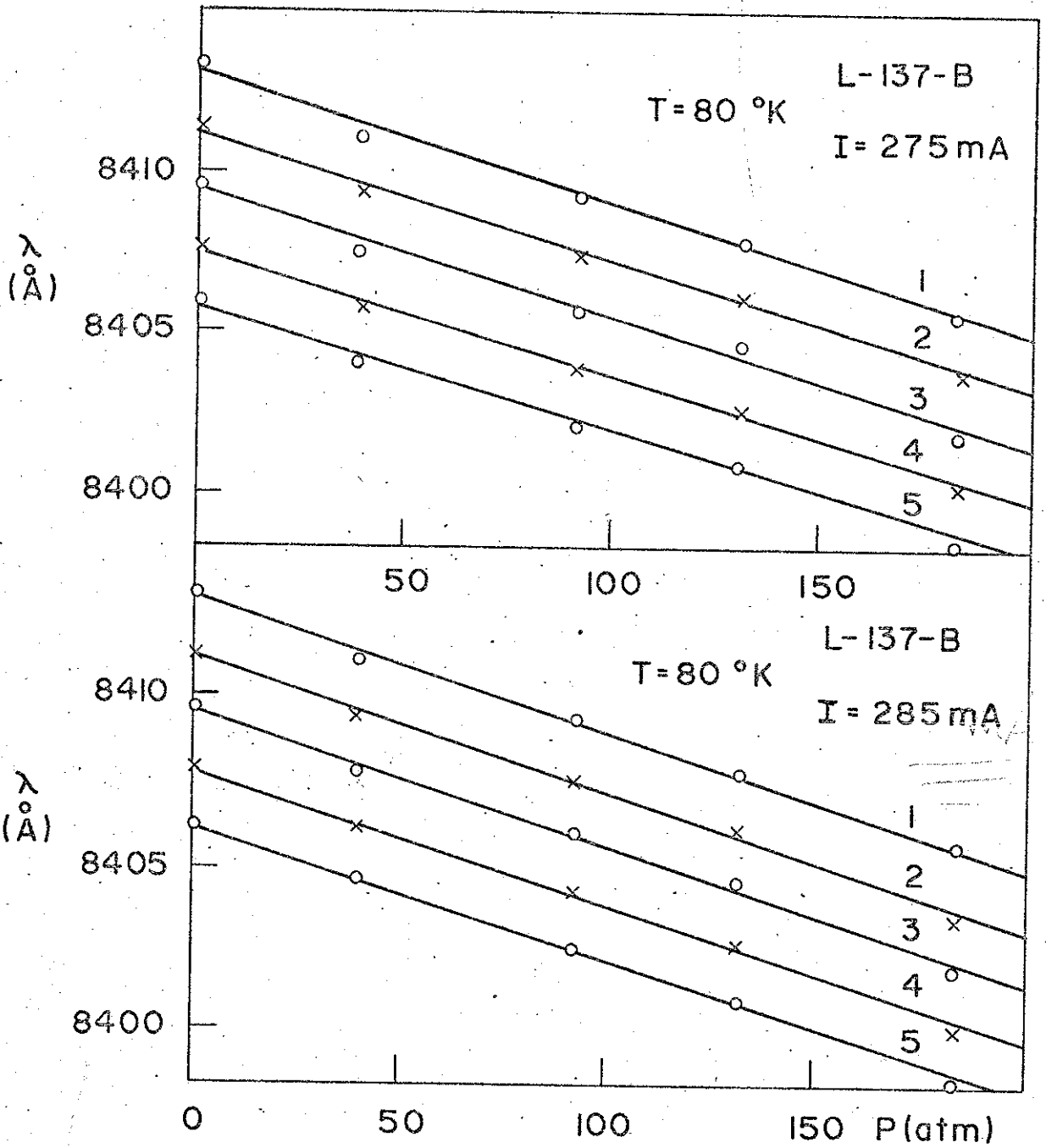


Fig. 23

EMISSION ESTIMULADA

Fig. 24

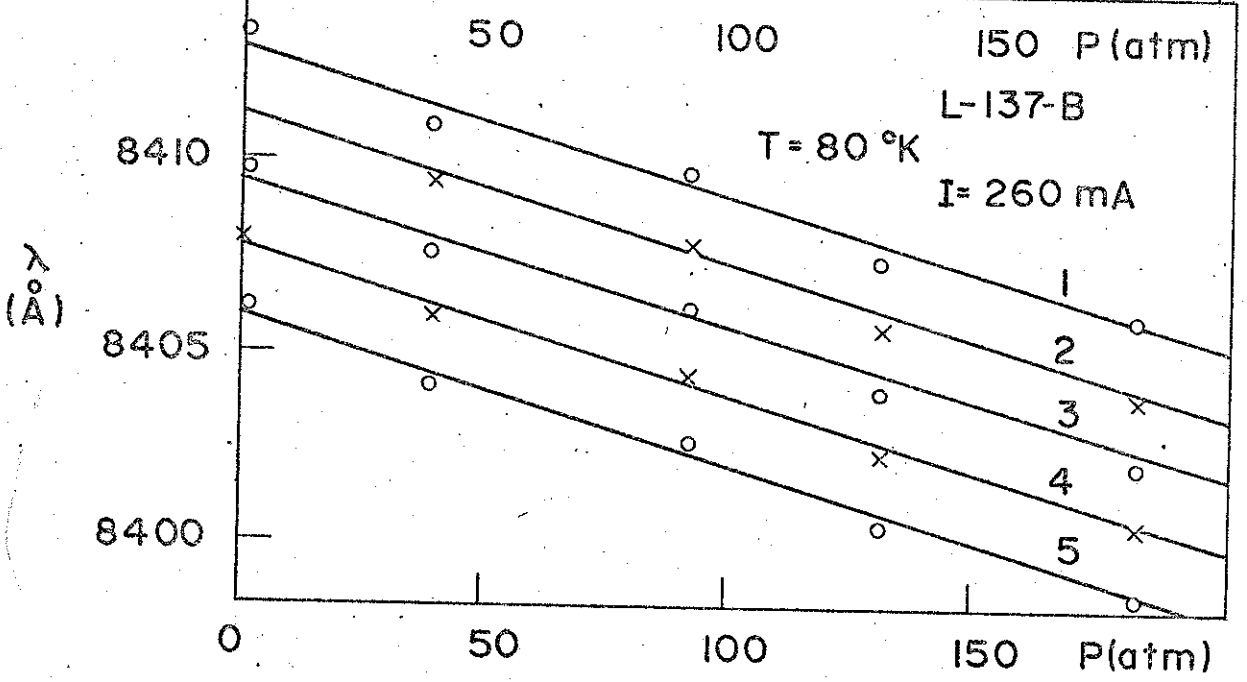
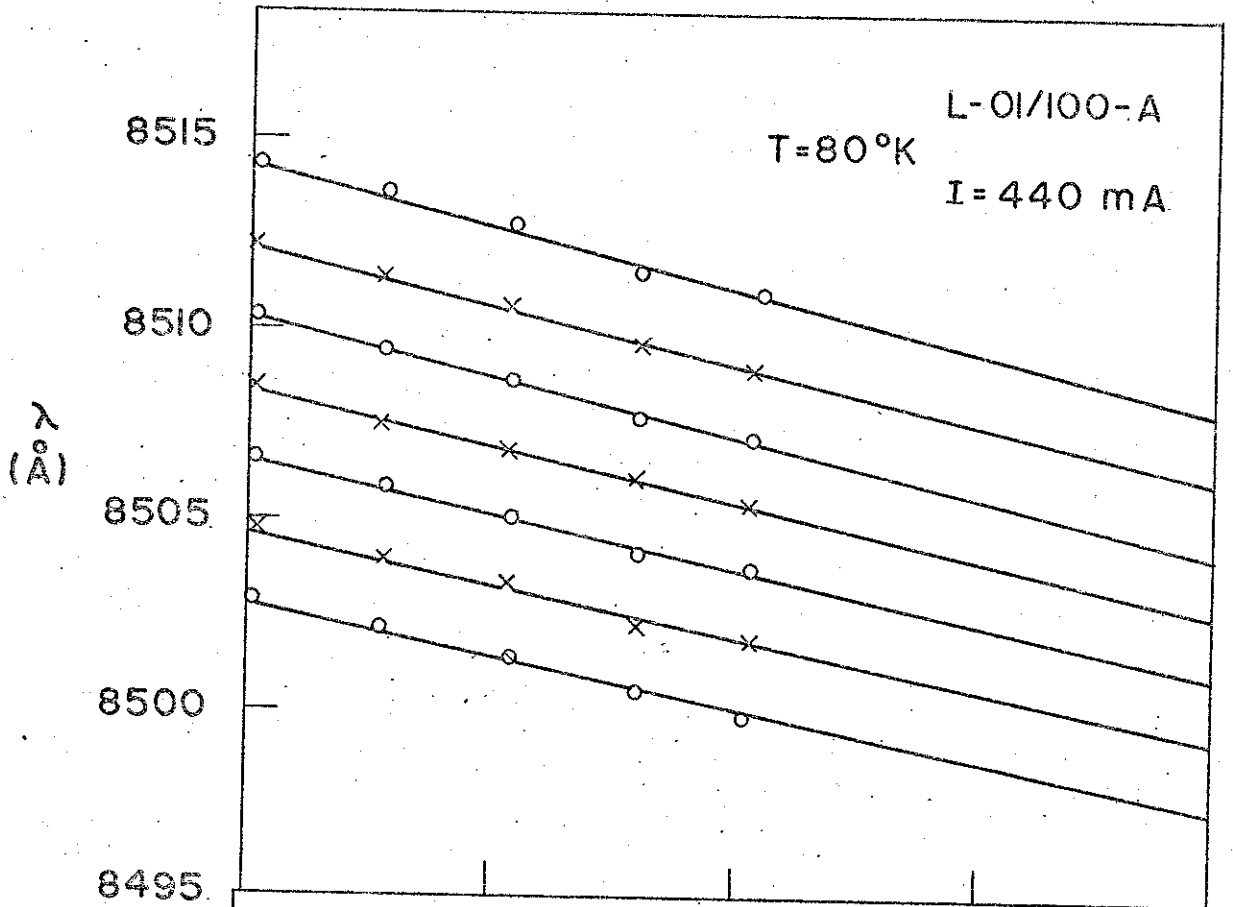


Fig.25

EMISSÃO ESTIMULADA

Fig. 26

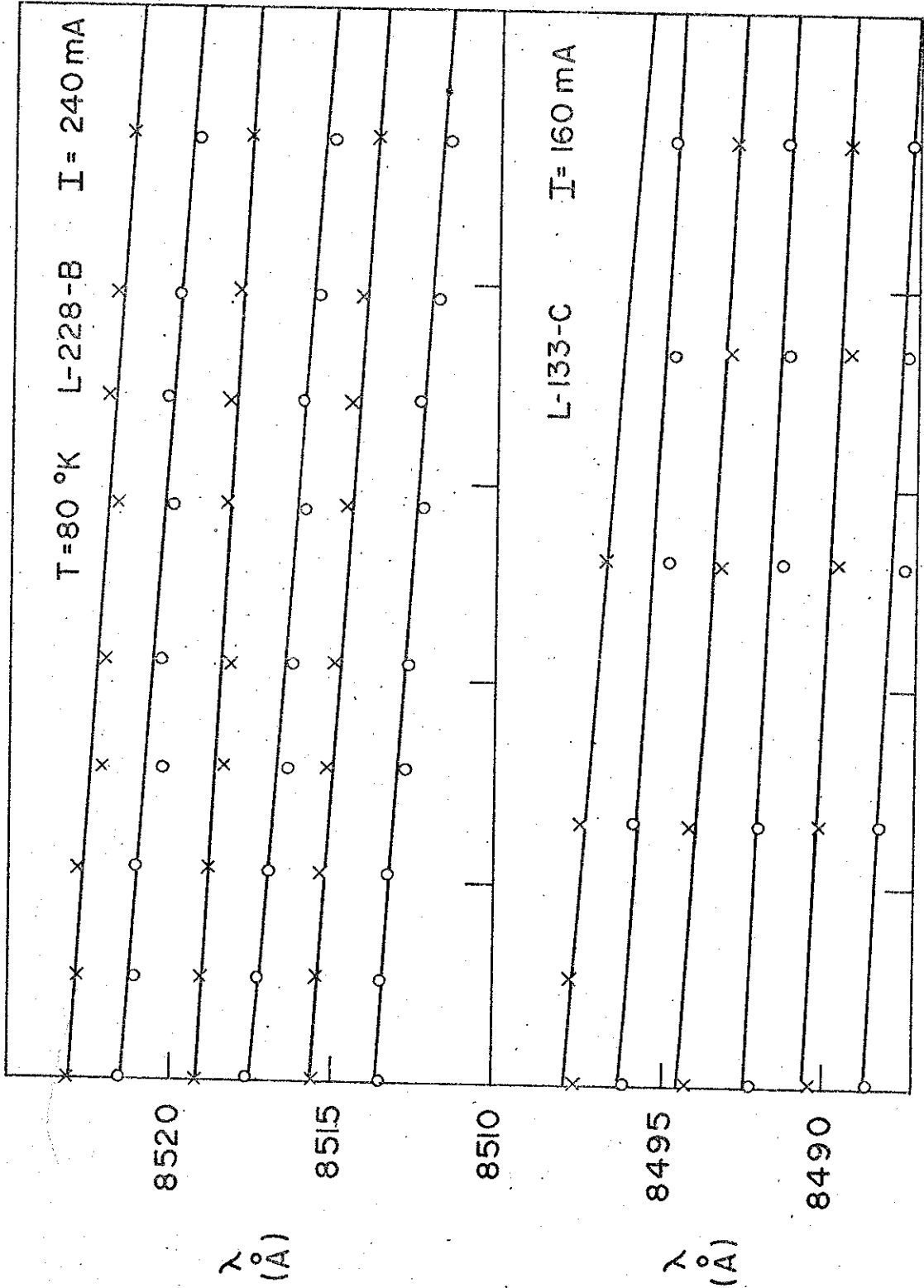


Fig. 27
EMIÇÃO ESTIMULADA

Fig. 28

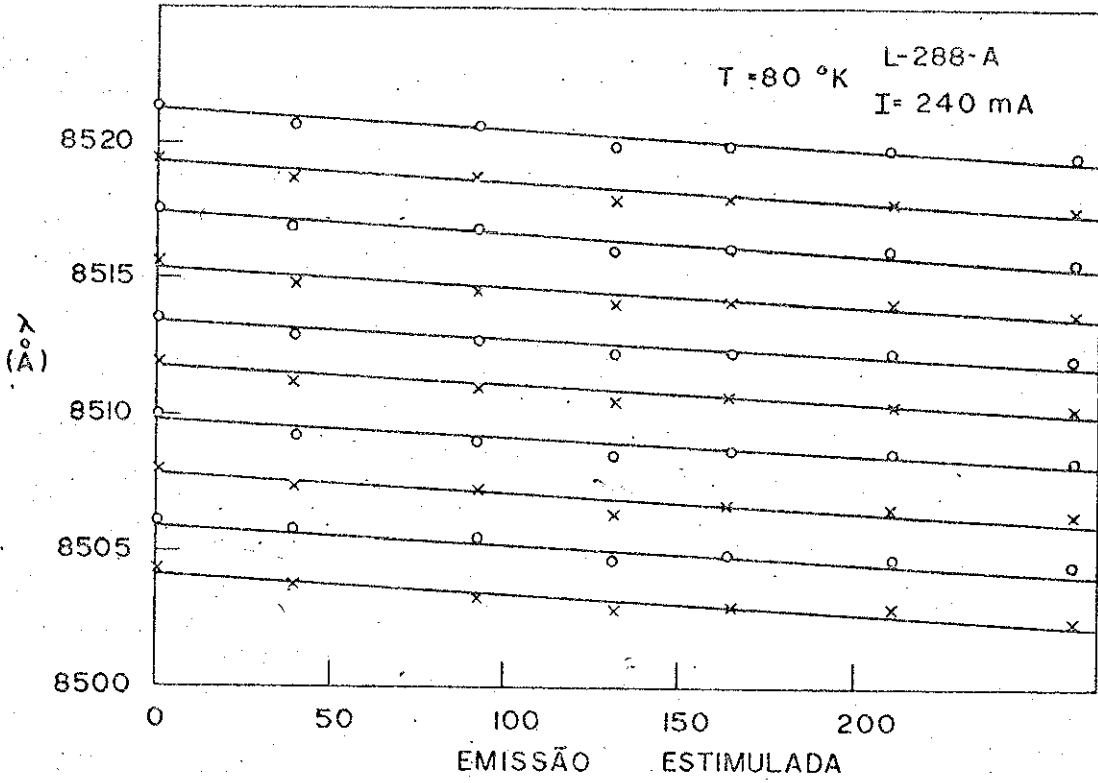


Fig. 29

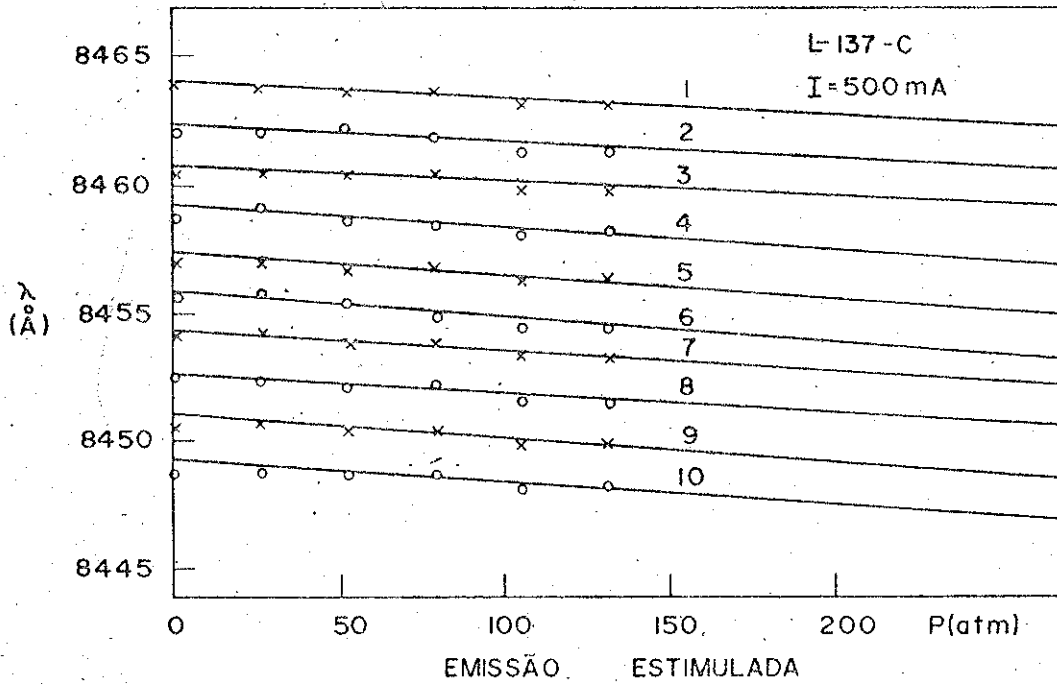


Fig. 30

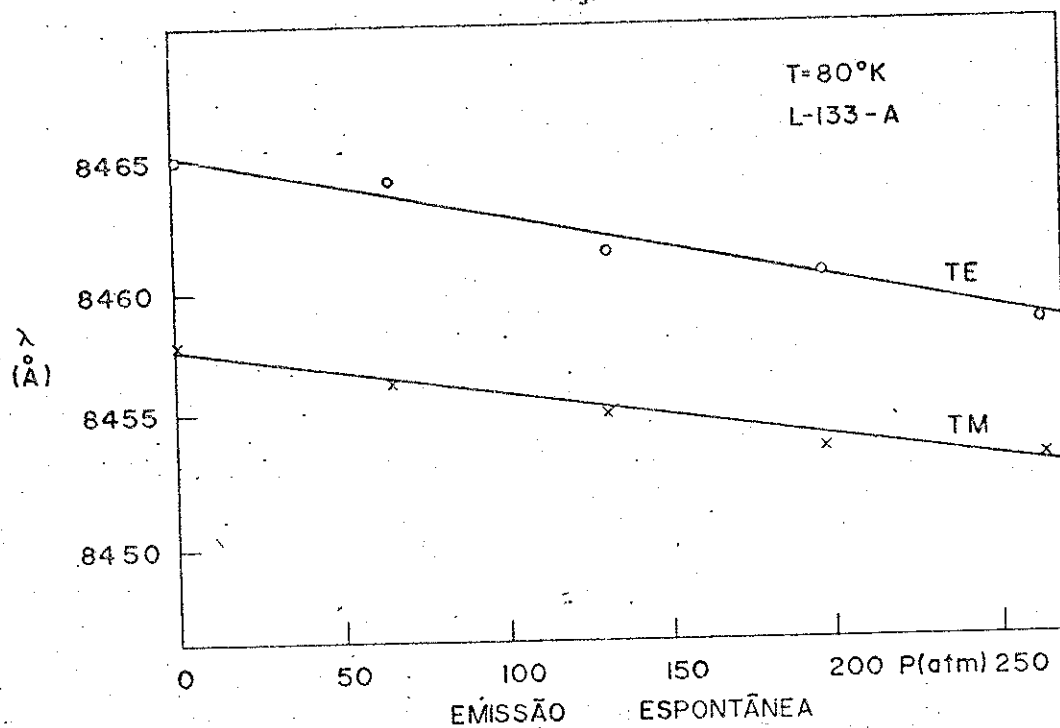


Fig. 31

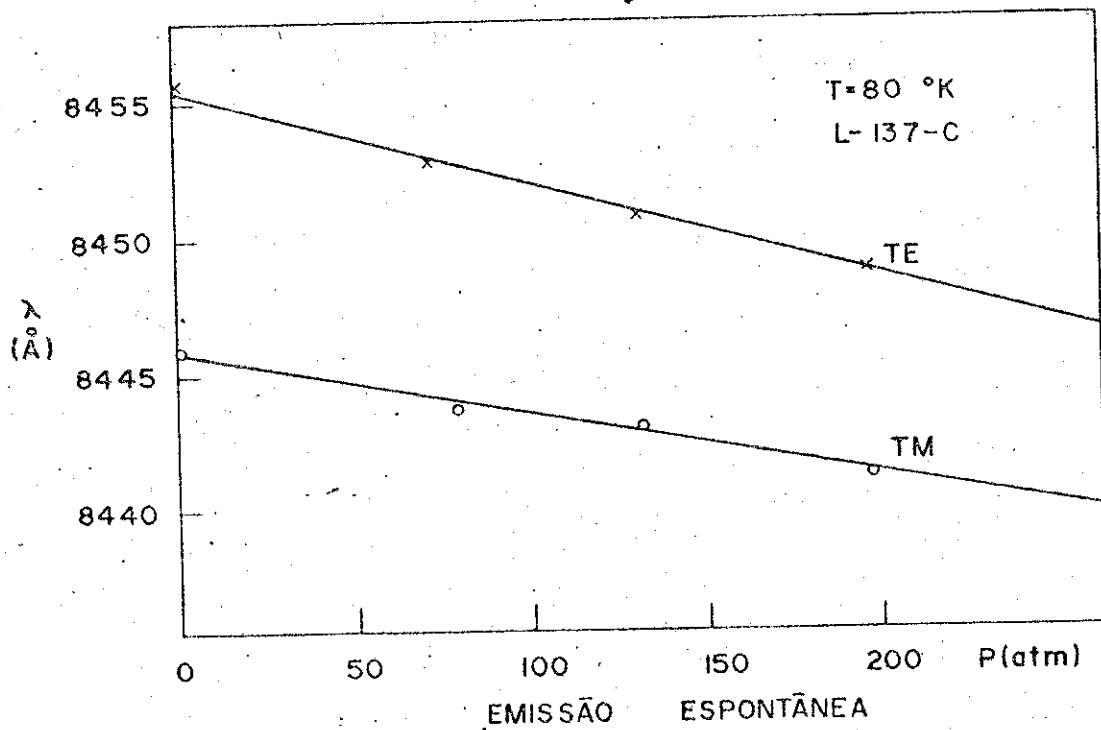


Fig. 32

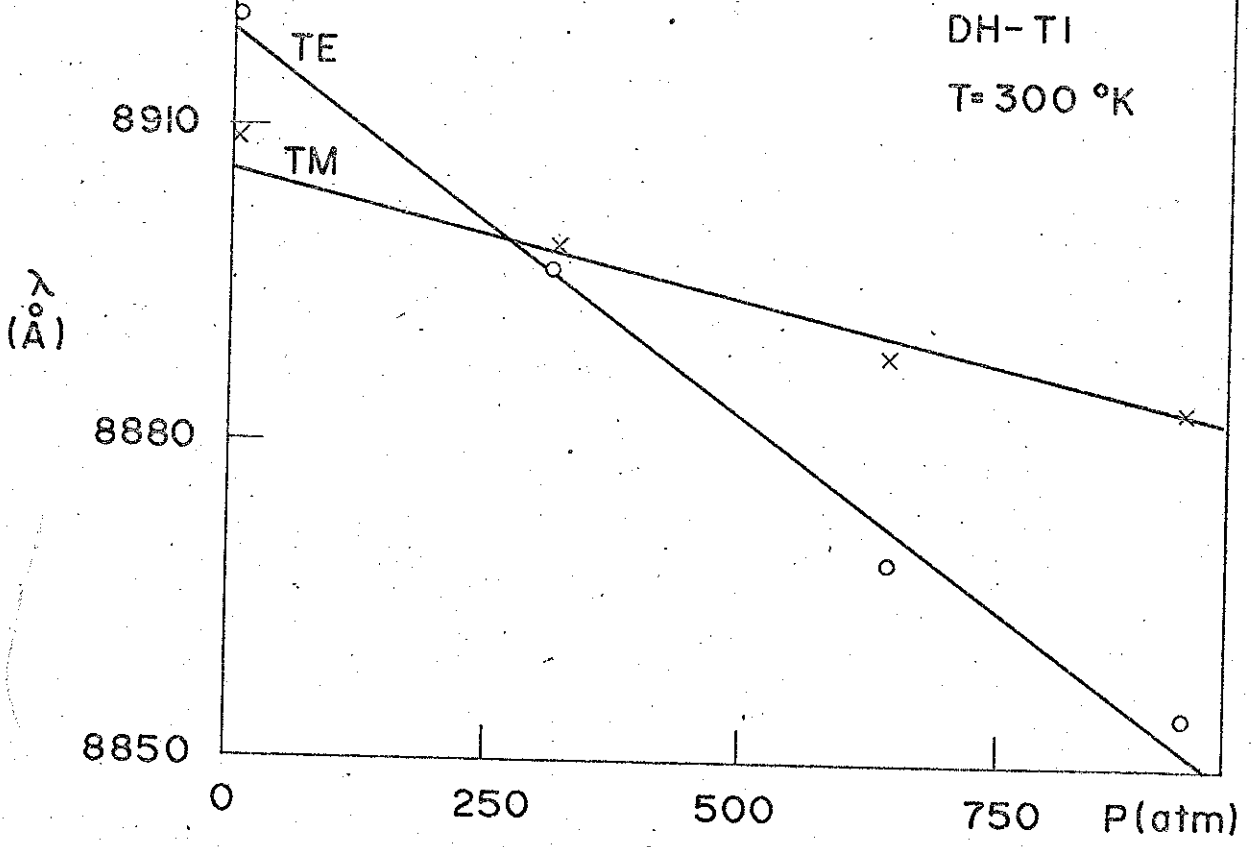
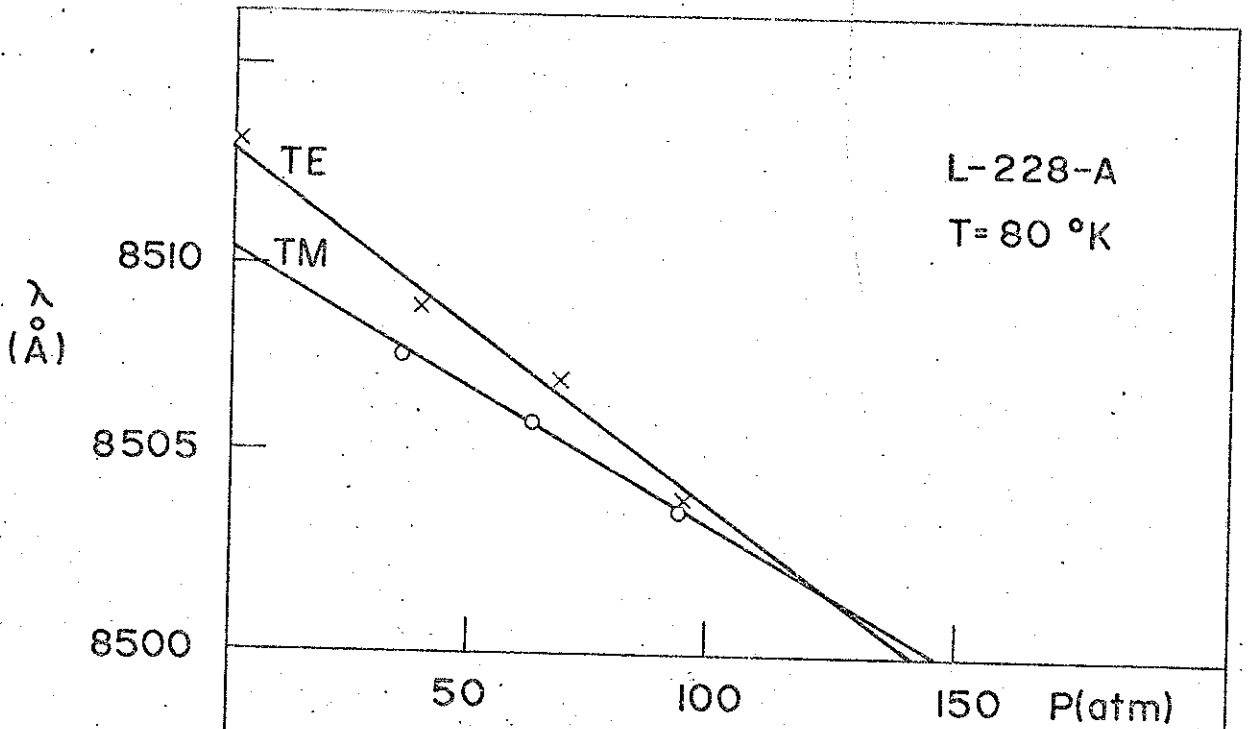


Fig. 33

EMISSÃO ESPONTÂNEA

Fig. 34

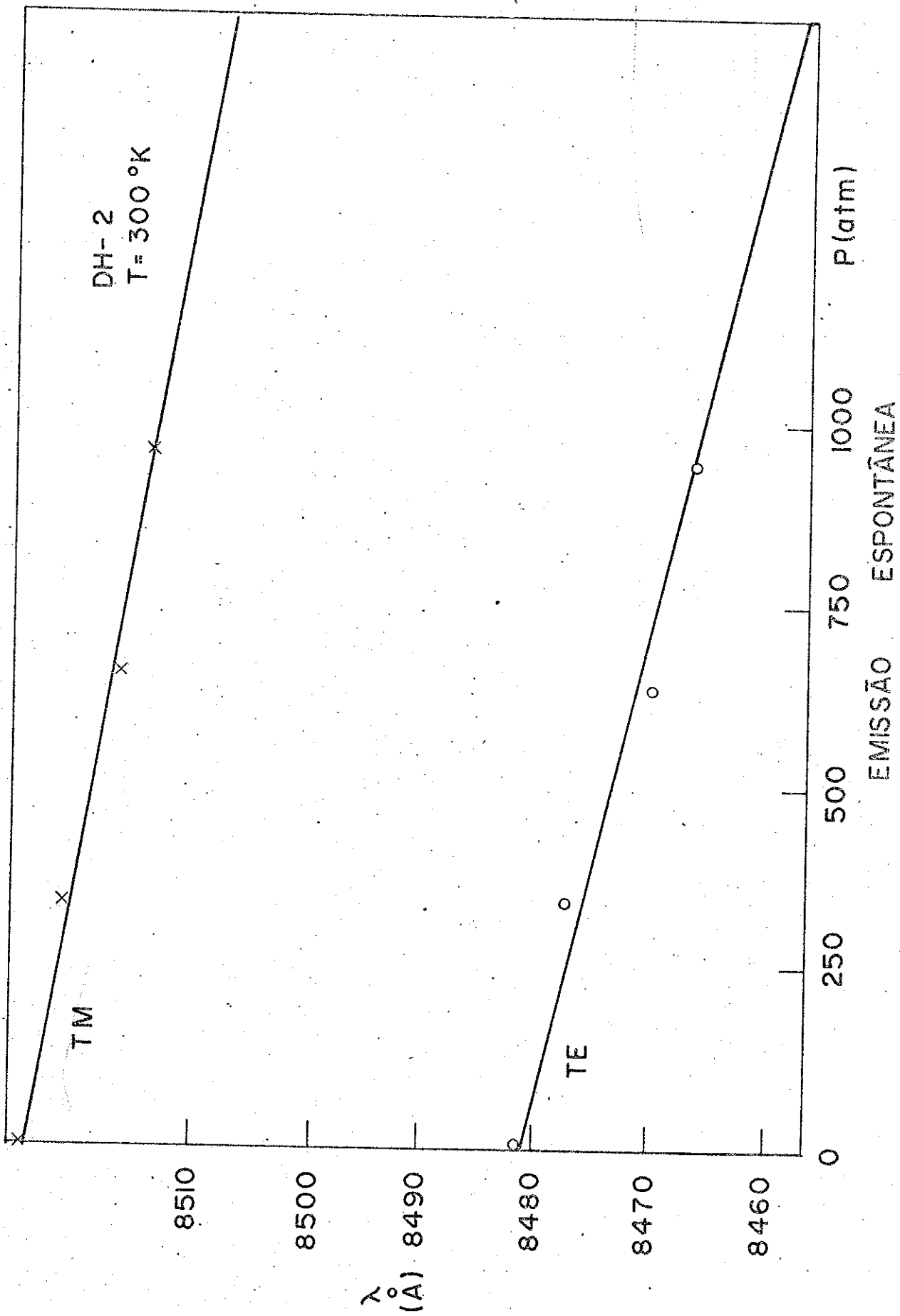


Fig. 35

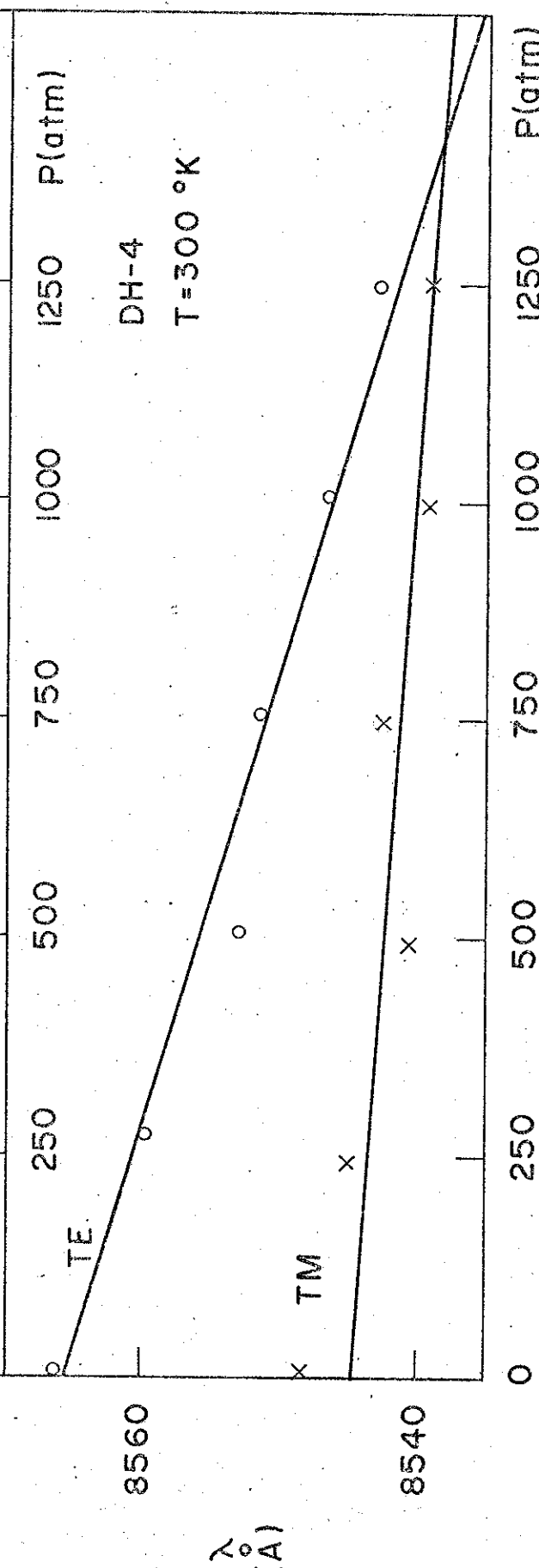
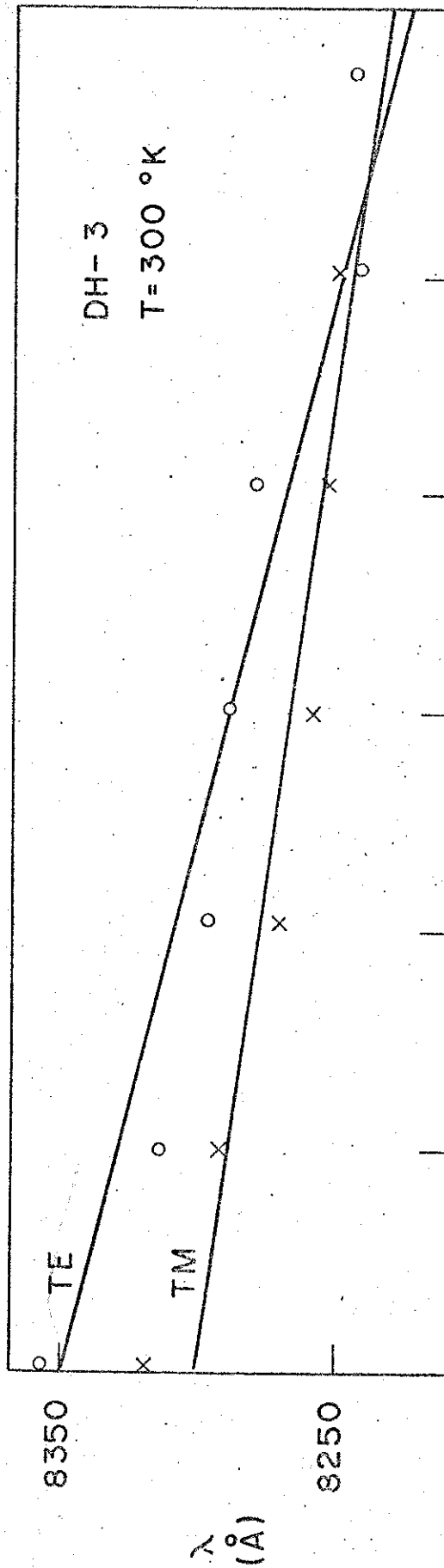


Fig. 36

EMISSÃO ESPONTÂNEA

L-137-A $I_{th} = 460 \text{ mA}$ $T = 80^{\circ}\text{K}$		
modo	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 460 \text{ mA}$	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 480 \text{ mA}$
1	6.5	6.6
2	6.2	7.2
3	7.9	7.2
4	7.7	7.2
5	8.1	6.7

TABELA 13
EMISSÃO ESTIMULADA

$T = 80^{\circ}\text{K}$	
L-133-A	$I_{th} = 440 \text{ mA}$
modo	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 440 \text{ mA}$
1	2.0
2	1.9
3	2.1
4	2.1
5	1.9
6	1.7
7	1.8
8	1.9
9	1.8

TABELA 14
EMISSÃO ESTIMULADA

L-228-A $T = 80^{\circ}\text{K}$		$I_{th} = 180 \text{ mA}$	
modo	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 200 \text{ mA}$	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 240 \text{ mA}$	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 280 \text{ mA}$
1	3.2	1.9	2.3
2	3.2	2.8	2.2
3	2.3	2.4	2.7
4	2.4	2.3	2.2
5	2.6	2.5	2.6
6	-	2.4	2.6

TABELA 15
EMISSÃO ESTIMULADA

L-137-B

 $I_{th} = 260 \text{ mA}$ $T = 80^{\circ}\text{K}$

modo	$\frac{dh\nu}{dP}$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 260 \text{ mA}$	$\frac{dh\nu}{dP}$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 275 \text{ mA}$	$\frac{dh\nu}{dP}$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 285 \text{ mA}$
1	6.8	6.7	7.1
2	7.2	6.9	7.3
3	7.2	6.8	7.4
4	7.0	6.8	7.4
5	7.1	7.0	7.4

TABELA 16

EMISSÃO ESTIMULADA

$T=80^{\circ}\text{K}$	$I_{th} = 380 \text{ mA}$
L-01/100-A	
modo	$\frac{dh\nu}{dP}$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 440 \text{ mA}$
1	5.6
2	5.3
3	4.8
4	5.3
5	5.0
6	4.7
7	4.9

TABELA 17

EMISSÃO ESTIMULADA

$T=80^{\circ}\text{K}$	$I_{th} = 220 \text{ mA}$
L-228-B	
modo	$\frac{dh\nu}{dP}$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 260 \text{ mA}$
1	1.0
2	1.2
3	0.8
4	1.4
5	1.1
6	1.2

TABELA 18

EMISSÃO ESTIMULADA

$T = 80^{\circ}\text{K}$	$I_{th} = 140 \text{ mA}$
L-133-C	
modo	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 160 \text{ mA}$
1	1.2
2	0.7
3	1.0
4	0.8
5	0.8
6	0.8

TABELA 19

$T = 80^{\circ}\text{K}$	$I_{th} = 232 \text{ mA}$
L-288-A	
modo	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 240 \text{ mA}$
1	0.9
2	0.9
3	0.9
4	0.8
5	0.7
6	0.8
7	0.7
8	0.8
9	0.8
10	0.9

TABELA 20
EMISSÃO ESTIMULADA

$T = 80^{\circ}\text{K}$	$I_{th} = 480 \text{ mA}$
L-137-C	
modo	$dh\nu/dP$ ($\times 10^{-6} \text{ ev/atm}$) $I = 500 \text{ mA}$
1	1.3
2	1.2
3	0.9
4	1.1
5	0.9
6	2.1
7	1.2
8	1.4
9	1.2
10	1.0

TABELA 21
EMISSÃO ESTIMULADA

$T = 80^{\circ}\text{K}$	$\left(\frac{dE}{dP}\right)_{\text{TE}}$	$\left(\frac{dE}{dP}\right)_{\text{TM}}$
LASER	$(\times 10^{-6} \text{ ev/atm})$	$(\times 10^{-6} \text{ ev/atm})$
L-228-A	16,3	13,0
L-133-A	5,2	3,5
L-137-C	5,8	4,0

TABELA 22
EMISSÃO ESPONTÂNEA - LASERS DE HOMOESTRUTURA

$T = 300^{\circ}\text{K}$	$\left(\frac{dE}{dP}\right)_{\text{TE}}$	$\left(\frac{dE}{dP}\right)_{\text{TM}}$
LASER	$(\times 10^{-6} \text{ ev/atm})$	$(\times 10^{-6} \text{ ev/atm})$
DH-T1	17,0	6,3
DH-2	2,2	1,0
DH-3	11,0	3,1
DH-4	3,2	0,3

TABELA 23
EMISSÃO ESPONTÂNEA - LASERS DE HETEROESTRUTURA

T = 80°K	$\left(\frac{d(h\nu)}{dP}\right)_{I_1}$ (x10 ⁻⁶ ev/atm)	$\left(\frac{d(h\nu)}{dP}\right)_{I_2}$ (x10 ⁻⁶ ev/atm)	$\left(\frac{d(h\nu)}{dP}\right)_{I_3}$ (x10 ⁻⁶ ev/atm)	$\left(\frac{d(h\nu)}{dP}\right)_m$ (x10 ⁻⁶ ev/atm)
LASER				
L-137-A	7,3	7,0	-	7,2
L-137-B	7,0	6,8	7,3	7,1
L-137-C	1,2	-	-	1,2
L-228-A	2,7	2,4	2,4	2,5
L-228-B	1,1	-	-	1,1
L-133-A	2,0	-	-	2,0
L-133-B	0,9	-	-	0,9
L-01/100-A	5,1	-	-	5,1
L-288-A	0,8	-	-	0,8

TABELA 24 - VARIAÇÃO DA FREQUÊNCIA DA EMISSÃO ESTIMULADA COM A PRESSÃO (MÉDIA SOBRE OS MODOS)

REFERÊNCIAS

- [1] - M.G.A. Bernard, G. Duraffourg - *Physica Status Solidi*, 1, 699 (1961).
- [2] - C.H. Gooch - *Gallium Arsenide Lasers* - John Willey, 1969.
- [3] - S.M. Sze - *Physics of Semiconductor Devices* - John Wiley, 1969.
- [4] - G.J. Lasher, F. Stern - *Phys. Rev.*, 133, A553 (1964).
- [5] - D.F. Nelson, M. Gershenzon, A. Ashkin, L.A. d'Asaro, J.C. Sarace - *Appl. Phys. Letters*, 2, 182 (1963).
- [6] - G.F. Koster, J.O. Dimmock, R.G. Wheeler, H. Statz - *Properties of the Thirty-Two Point Groups* - MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1963.
- [7] - G. Dresselhaus - *Phys. Rev.*, 100, 580 (1955).
- [8] - C. Kittel - *Introduction to Solid State Physics* - John Wiley, 4th ed., cap. IV.
- [9] - F. Cerdeira - PhD Thesis - Brown University (1972) - Não publicada.
- [10] - G.E. Pikus, G.L. Bir - *Soviet Phys. - Solid State*, 1, 1502 (1960).
- [11] - K. Suzuki, J.C. Hensel - *Bull. Am. Phys. Soc.*, 14, 113 (1969).
- [12] - L.D. Laude, F.H. Pollak, M. Cardona - *Phys. Rev.*, 3, B2623 (1971).
- [13] - W.H. Kleiner, L.M. Roth - *Phys. Rev. Lett.*, 2, 334 (1959).
- [14] - F.H. Pollak, M. Cardona - *Phys. Rev.*, 172, 816 (1968).
- [15] - G. Dresselhaus, A.F. Kip, C. Kittel - *Phys. Rev.*, 98, 368 (1955).
- [16] - C. Kittel - *Quantum Theory of Solids* - John Willey, 1964, cap. XIV.
- [17] - E.O. Kane - *Phys. Rev.* - 170, 1368 (1969).

- [18] - I.N. Bandeira - Tese de Mestrado apresentada no I.F.G.W. -
(1974).
- [19] - R.K. Willardson, A.C. Beer - Physics of III-V Compounds -
Academic Press (1966) Volume 2.
- [20] - R.K. Willardson, A.C. Beer - Physics of III-V Compounds -
Academic Press (1966) Volume 1.
- [21] - T. Kobayashi, K. Suguyama - Japanese Journal of Appl. Phys. ,
12, 1388 (1973).
- [22] - F.D. Nunes - Tese de Mestrado apresentada no I.F.G.W. (1974).
- [23] - M.B.Z. Morosini - Tese de Mestrado apresentada no I.F.G.W. -
(1975) - a ser publicada.
- [24] - J.F. Nye - Physical Properties of Crystals - Oxford University
Press, 1964.
- [25] - N.B. Patel, J.E. Ripper, P. Brosson - IEEE Journal of Quantum
Electronics, QE-9, 338 (1973).

I- EMISSÃO ESPONTÂNEA

Podemos notar nos nossos resultados para $\frac{dE}{dP}$ na emissão espontânea (Tabelas 22 e 23) que $(\frac{dE}{dP})_{TE} > (\frac{dE}{dP})_{TM}$ para todos os lasers apesar de seu valor variar de laser para laser. Isto era esperado teoricamente para transições da banda de condução para a banda de valência, desde que as transições TE ocorrem preferencialmente para a banda v_2 e as TM para a banda v_1 com $\frac{dE_2}{dP} = 6,9 \times 10^{-6} e$ e $\frac{dE_1}{dP} = 1,1 \times 10^{-6} \text{ ev/atm}$ como vimos na seção V-1.

Apesar das transições ocorridas nos nossos lasers envolverem níveis aceitadores localizados perto da banda de valência - esses aceitadores provavelmente seguem as bandas v_1 e v_2 .

II- EMISSÃO ESTIMULADA

Dentre os fatos observados nos resultados experimentais obtidos para emissão estimulada (Tabela 24) está a dispersão constantada entre os vários lasers. Dois fatores poderiam provocar essa dispersão:

O primeiro é que $\frac{d(h\nu)}{dP}$ poderia depender especificamente do laser que está sendo estudado, isto é, da concentração de impurezas, do tipo de dopantes, etc. Se essa dependência fosse a mais acentuada, deveríamos ter pouca dispersão entre lasers do mesmo grupo e dispersão grande apenas entre lasers de grupos diferentes, o que não ocorre. Basta observar na Tabela 24 os lasers L-137 A, B e C que pertencem ao mesmo grupo e apresentam resultados bastante diferentes. Esse fato nos faz crer que a dispersão seja cau-

sada principalmente por uma segunda hipótese, a da modificação da polarização dos modos com a pressão. Como comentamos na seção V-2, com um pequeno desvio da pressão da direção (1 1 1) um modo TM sem pressão tornar-se-ia elíptico depois da pressão ser aplicada. Esse desvio pode variar cada vez que um laser é montado no aparelho de pressão, o que pode explicar a dispersão entre lasers do mesmo grupo. Como a mudança na polarização pode contribuir tanto para aumentar como para diminuir $\frac{d(h\nu)}{dP}$ e os nossos resultados experimentais também variam nos dois sentidos em torno do valor teórico previsto que é $1,6 \times 10^{-6}$ ev/atm, essa parece ser a melhor justificativa.

Foram feitas anteriormente por I.N. Bandeira [18] medidas de $\frac{d(h\nu)}{dP}$ para o pico de emissão estimulada na corrente limiar. Seus resultados variam entre $3,4 \times 10^{-6}$ ev/atm e $7,9 \times 10^{-6}$ ev/atm e a dispersão entre lasers do mesmo grupo é grande como no nosso caso, confirmando nossa hipótese.

APÊNDICE A

MATRIZ DA HAMILTONIANA COM PRESSÃO

As funções X, Y e Z de (28) podem ser escritas em termo das harmônicas esféricas como:

$$Z = Y_{10}$$

$$\frac{X + i Y}{\sqrt{2}} = - Y_{11}$$

$$\frac{X - i Y}{\sqrt{2}} = Y_{1-1}$$

Escrevendo as funções (28) em termo das harmônicas esféricas temos:

$$|3/2, 3/2\rangle = Y_{11}^\dagger$$

$$|3/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\sqrt{2} Y_{10}^\dagger + Y_{11}^\dagger]$$

$$|1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [-Y_{10}^\dagger + \sqrt{2} Y_{11}^\dagger]$$

(A-1)

$$|3/2, -3/2\rangle = Y_{1-1}^\dagger$$

$$|3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\sqrt{2} Y_{10}^\dagger + Y_{1-1}^\dagger]$$

$$|1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [Y_{10}^\dagger - \sqrt{2} Y_{1-1}^\dagger]$$

Temos em (29)

$$H' = H - B_1 \text{tr}(v) = -3B_2 \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) v_{xx} + \text{p.c.} \right] + \\ - \frac{6 B_3}{\sqrt{3}} \left[\{L_x, L_y\} v_{xy} + \text{p.c.} \right]$$

Considerando que:

$$\{L_x, L_y\} = \frac{1}{2}(L_x L_y + L_y L_x) = \frac{1}{4i} [L_+^2 - L_-^2]$$

$$\{L_y, L_z\} = \frac{1}{2}(L_y L_z + L_z L_y) = \frac{1}{4i} [(L_+ + L_-) L_z + \\ + L_z (L_+ - L_-)]$$

$$\{L_z, L_x\} = \frac{1}{2}(L_z L_x + L_x L_z) = \frac{1}{4} [L_z (L_+ + L_-) + \\ + (L_+ + L_-) L_z]$$

$$L_+ = L_x + i L_y$$

$$L_- = L_x - i L_y$$

$$L_x^2 = -\frac{1}{4} L_+^2 + \frac{1}{4} L_-^2 + \frac{1}{2} (L^2 - L_z^2)$$

$$L_y^2 = -\frac{1}{4} L_+^2 - \frac{1}{4} L_-^2 + \frac{1}{2} (L^2 - L_z^2)$$

e sabendo-se que:

$$L_z Y_{\ell m} = m Y_{\ell m}$$

$$L^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$$

$$L_+ Y_{\ell m} = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} Y_{\ell, m+1}$$

$$L_- Y_{\ell m} = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} Y_{\ell, m-1}$$

Obtemos:

$$\begin{aligned} & - 3 B_2 \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) v_{xx} + \text{p.c.} \right] Y_{11} = \\ & = - 3 B_2 \left[\frac{1}{2} (v_{xx} - v_{yy}) Y_{1-1} + \frac{1}{6} (2 v_{zz} + \right. \\ & \left. - v_{xx} - v_{yy}) Y_{11} \right] \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

$$\begin{aligned} & - \frac{6 B_3}{\sqrt{3}} \left[\{L_x, L_y\} v_{xy} + \text{p.c.} \right] Y_{11} = \\ & = - \sqrt{3} B_3 \left[i Y_{1-1} v_{xy} + \frac{\sqrt{2}}{2} (v_{zx} + i v_{yz}) Y_{10} \right] \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

$$\begin{aligned} & - 3 B_2 \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) v_{xx} + \text{p.c.} \right] Y_{10} = \\ & = - B_2 (v_{xx} + v_{yy} - 2 v_{zz}) Y_{10} \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

$$\begin{aligned} & - 2 \sqrt{3} B_3 \left[\{L_x, L_y\} v_{xy} + \text{p.c.} \right] Y_{10} = \\ & = - \sqrt{3} B_3 \left[\frac{\sqrt{2}}{2} (v_{zx} - i v_{yz}) Y_{11} + \right. \\ & \left. - \frac{\sqrt{2}}{2} (v_{zx} + i v_{yz}) Y_{1-1} \right] \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

$$- 3 B_2 \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2 \right) v_{xx} + p.c. \right] Y_{1-1}$$

$$- 3 B_2 \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2 \right) + p.c. \right] Y_{1-1} =$$

$$= - 3 B_2 \left[\frac{1}{2} (v_{xx} - v_{yy}) Y_{11} + \frac{1}{6} (2v_{zz} - v_{xx} - v_{yy}) Y_{1-1} \right] \quad (A-6)$$

$$- 2 \sqrt{3} B_3 \left[\{L_x L_y\} v_{xy} + p.c. \right] Y_{1-1} =$$

$$= \sqrt{3} i B_3 v_{xy} Y_{11} + \frac{\sqrt{6}}{2} B_3 (v_{zx} - i v_{yz}) Y_{10} \quad (A-7)$$

Somando (A-2) com (A-3) e definindo:

$$R = \frac{B_2}{2} (2 v_{zz} - v_{xx} - v_{yy})$$

$$S = - B_3 (v_{xz} - i v_{yz}) \quad (A-8)$$

$$T = - \frac{\sqrt{3}}{2} B_2 (v_{xx} - v_{yy}) + i B_3 v_{xy}$$

obtemos:

$$H' Y_{11} = - R Y_{11} + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* Y_{10} + \sqrt{3} T^* Y_{1-1} \quad (A-9)$$

Somando (A-4) com (A-5)

$$H' Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{2}} S Y_{11} + 2R Y_{10} - \sqrt{\frac{3}{2}} S^* Y_{1-1} \quad (A-10)$$

e somando (A-6) com (A-7)

$$H' Y_{1-1} = \sqrt{3} T Y_{11} - \sqrt{\frac{3}{2}} S Y_{10} - R Y_{1-1} \quad (A-11)$$

Agora, tomando as funções $|j, m_j\rangle$ de (A-1) em função das harmônicas esféricas, obtemos:

$$\begin{aligned} \langle 3/2, 1/2 | H' | 3/2, 1/2 \rangle &= \frac{1}{3} \langle \sqrt{2} Y_{10}^\uparrow + Y_{11}^\downarrow | \sqrt{3} S Y_{11}^\uparrow + \\ &+ 2 \sqrt{2} R Y_{10}^\uparrow - \sqrt{3} S Y_{1-1}^\uparrow - R Y_{11}^\downarrow + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* Y_{10}^\downarrow + \\ &+ \sqrt{3} T^* Y_{1-1}^\downarrow \rangle = R \end{aligned}$$

Os outros elementos de matriz aparecem analogamente, resultando:

$$\begin{aligned} &|3/2, 3/2\rangle \quad |3/2, 1/2\rangle \quad |3/2, -1/2\rangle \quad |3/2, -3/2\rangle \quad |1/2, 1/2\rangle \quad |1/2, -1/2\rangle \\ [H'] &= \begin{pmatrix} -R & S & T & 0 & -S/\sqrt{2} & \sqrt{2} T \\ S^* & R & 0 & T & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S \\ T^* & 0 & R & -S & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R \\ 0 & T^* & -S^* & -R & \sqrt{2} T^* & -\sqrt{1/2} S^* \\ -S^*/\sqrt{2} & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S & \sqrt{2} T & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} T^* & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R & -\sqrt{1/2} S & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(A-12)

AUTOVALORES DA HAMILTONIANA PERTURBADA

Sem a perturbação $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e a pressão temos, na banda de valência, seis estados: quatro degenerados, correspondentes a $j = \frac{3}{2}$, com autovalor $E_{1,2,3,4}^{(0)} = 0$ e outros dois degenerados, com $j = \frac{1}{2}$, com autovalor $E_{5,6}^{(0)} = -\Delta_0$ (a nossa origem de energias está no extremo da banda de valência).

Sejam as quatro autofunções degeneradas:

$$|v_{2\pm}\rangle = |3/2, \pm 3/2\rangle$$

$$|v_{1\pm}\rangle = |3/2, \pm 1/2\rangle$$

com autovalor

$$E_{v_{1\pm}, v_{2\pm}}^{(0)} = 0 \quad (B-1)$$

e $|v_{3\pm}\rangle = |1/2, \pm 1/2\rangle$

com autovalor

$$E_{v_{3\pm}}^{(0)} = -\Delta_0 \quad (B-2)$$

A matriz da Hamiltoniana perturbada ($H' = H_{so} + H'$) será dada por (Apêndice A):

$$|H'| = \begin{matrix} & |v_{2+}\rangle & |v_{1+}\rangle & |v_{1-}\rangle & |v_{2-}\rangle & |v_{3+}\rangle & |v_{3-}\rangle \\ \begin{pmatrix} -R & S & T & 0 & -\sqrt{1/2} S & -\sqrt{2} T \\ S^* & R & 0 & T & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S \\ T^* & 0 & R & -S & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R \\ 0 & T^* & -S^* & -R & \sqrt{2} T^* & -\sqrt{1/2} S^* \\ -\sqrt{1/2} S^* & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S & \sqrt{2} T & -\Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2} T^* & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R & -\sqrt{1/2} S & 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (B-3)$$

Em aproximação de primeira ordem, considerando R, S e T pequenos com relação a Δ_0 , ou seja, \vec{k} e pressão pequenos, obtemos de imediato o autovalor perturbado correspondente a $|v_{3\pm}\rangle$.

$$E' = -\Delta_0 \quad (B-4)$$

Para obter os outros valores perturbados correspondentes as autofunções $|v_{2\pm}\rangle$ e $|v_{1\pm}\rangle$ vamos diagonalizar:

$$\begin{matrix} & |v_{2+}\rangle & |v_{1+}\rangle & |v_{1-}\rangle & |v_{2-}\rangle \\ \begin{pmatrix} -R & S & T & 0 \\ S^* & R & 0 & T \\ T^* & 0 & R & -S \\ 0 & T^* & -S^* & -R \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (B-5)$$

Devemos encontrar os λ'_s que sejam soluções de:

$$\begin{matrix} & & & & & \\ \begin{pmatrix} -R - \lambda & S & T & 0 \\ S^* & R - \lambda & 0 & T \\ T^* & 0 & R - \lambda & -S \\ 0 & T^* & -S & -R - \lambda \end{pmatrix} & = & 0 \end{matrix} \quad (B-6)$$

Donde:

$$(R - \lambda)^2 (R + \lambda)^2 + (TT^*)^2 - (SS^*)^2 + 2 (R^2 - \lambda^2)TT^* = 0$$

$$\lambda^2 = R^2 + TT^* + SS^*$$

$$\lambda = \pm (R^2 + |T|^2 + |S|^2)^{1/2} \quad (B-7)$$

AUTOFUNÇÕES DA HAMILTONIANA PERTURBADA

As autofunções de H' em aproximação de primeira ordem são dadas por:

$$\phi_n = \phi_n^{(0)} + \sum_{E_{n'}^{(0)} \neq E_n^{(0)}} \frac{C_{n'n}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \psi_{n'}^{(0)} \quad (C-1)$$

onde $\psi_n^{(0)}$ são autofunções da Hamiltoniana não perturbada não pertencentes ao nível degenerado $E_n^{(0)}$.

As funções $\phi_n^{(0)}$ são combinações lineares das autofunções degeneradas sem perturbação:

$$\phi_n^{(0)} = \sum a_i^n \psi_i^{(0)} \quad (C-2)$$

a_i^n sendo solução de:

$$(H'_{ij} - I E_n') a_i^n = 0 \quad (C-3)$$

e E_n' são os autovalores da matriz perturbada (Apêndice B), dados por:

$$\left. \begin{aligned} E_{V_{2\pm}} &= -E = - (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \\ E_{V_{1\pm}} &= E = + (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \end{aligned} \right\} \text{com } E_n^{(0)} = 0 \quad (C-4)$$

$$E_{V_{3\pm}} = 0, \quad \text{com } E_n^{(0)} = -\Delta_0 \quad (C-5)$$

Sejam:

$$a_1^n = a, \quad a_2^n = b, \quad a_3^n = c, \quad a_4^n = d$$

para $E_n^{(0)} = 0$.

Ficamos com o sistema:

$$-(R + E_n) a + S b + T c = 0 \quad (C-6)$$

$$S^* a + (R - E_n) b + T d = 0 \quad (C-7)$$

$$T^* a + (R - E_n) c - S d = 0 \quad (C-8)$$

$$T^* b - S^* c - (R + E_n) d = 0 \quad (C-9)$$

De (C-6) e (C-9) tiramos:

$$a = \frac{Sb + Tc}{R + E_n} \quad d = \frac{T^*b - S^*c}{R + E_n}$$

onde

$$E_n = \begin{cases} E_{V_{2\pm}} = -E \\ E_{V_{1\pm}} = E \end{cases}$$

Devemos obter quatro soluções ortogonais formadas por combinações lineares de $|v_{2+}\rangle$, $|v_{1+}\rangle$, $|v_{1-}\rangle$, $|v_{2-}\rangle$, cujos coeficientes são, nessa ordem:

$$\phi_{V_2+}^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{Sb_2 + Tc_2}{R + E_{V_2}} \\ \\ b_2 \\ \\ c_2 \\ \\ \frac{T^*b_2 - S^*c_2}{R + E_{V_2}} \end{bmatrix}$$

$$\phi_{V_2-}^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{Sb'_2 + Tc'_2}{R + E_{V_2}} \\ \\ b'_2 \\ \\ c'_2 \\ \\ \frac{T^*b'_2 - S^*c'_2}{R + E_{V_2}} \end{bmatrix}$$

$$\phi_{V_1+}^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{Sb_1 + Tc_1}{R + E_{V_1}} \\ \\ b_1 \\ \\ c_1 \\ \\ \frac{T^*b_1 - S^*c_1}{R + E_{V_1}} \end{bmatrix}$$

$$\phi_{V_1-}^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{Sb'_1 + Tc'_1}{R + E_{V_1}} \\ \\ b'_1 \\ \\ c'_1 \\ \\ \frac{T^*b'_1 - S^*c'_1}{R + E_{V_1}} \end{bmatrix}$$

(b_i, c_i) e (b'_i, c'_i) devem satisfazer a condição de ortogonalidade:

$$\langle \phi_{V_{i+}}^{(0)} | \phi_{V_{i-}}^{(0)} \rangle = 0$$

Donde obtemos, para $E_{V_i} \neq R$

$$\frac{c_i}{b_i} = - \frac{b'_i}{c'_i} = K, \text{ onde } K \text{ é uma constante arbitrária.}$$

Escolhendo $K = 0$ temos como solução:

$$\phi_{V_{2+}}^{(0)} = b_2$$

S	
$R + E_{V_2}$	
1	
0	
T*	
$R + E_{V_2}$	

$$\phi_{V_{2-}}^{(0)} = c_2'$$

T	
$R + E_{V_2}$	
0	
1	
- S*	
$R + E_{V_2}$	

Normalizando obtemos:

$$b_2 = c_2' = \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{R}{E_{V_2}} \right) \right]^{1/2} = a_0$$

$$\phi_{V_{1+}}^{(0)} = b_1'$$

S	
$R + E_{V_1}$	
1	
0	
T*	
$R + E_{V_1}$	

$$\phi_{V_{1-}}^{(0)} = c_1'$$

T	
$R + E_{V_1}$	
0	
1	
- S*	
$R + E_{V_1}$	

$$\text{com } b_1' = c_1' = \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{R}{E_{V_1}} \right) \right]^{1/2} = b_0$$

Substituindo em $\phi_{V_{2+}} E_{V_2} = -E$ e em $\phi_{V_{1-}} E_{V_1} = E$ teremos, para $E \neq \pm R$:

$$\phi_{V_{2+}}^{(0)} = a_0 \begin{pmatrix} \hline S \\ R-E \\ \\ 1 \\ \\ 0 \\ \\ \hline T^* \\ R-E \end{pmatrix}$$

$$\phi_{V_{2-}}^{(0)} = a_0 \begin{pmatrix} \hline T \\ R-E \\ \\ 0 \\ \\ 1 \\ \\ \hline -S^* \\ R-E \end{pmatrix}$$

$$\phi_{V_{1+}}^{(0)} = b_0 \begin{pmatrix} \hline S \\ R+E \\ \\ 1 \\ \\ 0 \\ \\ \hline T^* \\ R+E \end{pmatrix}$$

$$\phi_{V_{1-}}^{(0)} = b_0 \begin{pmatrix} \hline T \\ R+E \\ \\ 0 \\ \\ 1 \\ \\ \hline -S^* \\ R+E \end{pmatrix}$$

onde $E = + \{R^2 + |S|^2 + |T|^2\}^{1/2}$ (C-12)

Quando $E = \pm R$ podemos ver em (C-12) que $S = T = 0$, desde que R^2 , $|S|^2$ e $|T|^2$ são quantidades positivas.

Nesse caso, a matriz (B-5) será diagonal, tendo a forma:

$$\begin{matrix}
 |v_{2+}\rangle & |v_{1+}\rangle & |v_{1-}\rangle & |v_{2-}\rangle \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 -R & 0 & 0 & 0 \\
 0 & R & 0 & 0 \\
 0 & 0 & R & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -R
 \end{array} \right] & & &
 \end{matrix} \quad (C-13)$$

Obviamente, as autofunções de (C-13) serão

$$\phi_{v_{2+}}^{(0)} = |v_{2+}\rangle \qquad \phi_{v_{2-}}^{(0)} = |v_{2-}\rangle \quad (C-14)$$

$$\phi_{v_{1+}}^{(0)} = |v_{1+}\rangle \qquad \phi_{v_{1-}}^{(0)} = |v_{1-}\rangle$$

Para as bandas $|v_{3\pm}\rangle$ obtemos, para qualquer valor de E

$$\phi_{v_{3+}}^{(0)} = |v_{3+}\rangle \qquad \phi_{v_{3-}}^{(0)} = |v_{3-}\rangle \quad (C-15)$$

Para acrescentar a contribuição das bandas não degeneradas (ver equação (C-1)), escolhemos os coeficientes C_{nn} , numa aproximação em que desprezamos termos da ordem de $\frac{E^2}{\Delta_0}$, resultando:

$$\phi_{v_{2+}} = \phi_{v_{2+}}^{(0)} + \alpha_{2+} |v_{3+}\rangle + \beta_{2+} |v_{3-}\rangle$$

$$\phi_{v_{1+}} = \phi_{v_{1+}}^{(0)} + \alpha_{1+} |v_{3+}\rangle + \beta_{1+} |v_{3-}\rangle$$

$$\phi_{v_{1-}} = \phi_{v_{1-}}^{(0)} + \alpha_{1-} |v_{3+}\rangle + \beta_{1-} |v_{3-}\rangle$$

$$\phi_{v_{2-}} = \phi_{v_{2-}}^{(0)} + \alpha_{2-} |v_{3+}\rangle + \beta_{2-} |v_{3-}\rangle$$

$$\phi_{v_{3+}} = \phi_{v_{3+}}^{(0)} + \alpha_{3+} |v_{2+}\rangle + \beta_{3+} |v_{1+}\rangle + \gamma_{3+} |v_{1-}\rangle + \delta_{3+} |v_{2-}\rangle$$

$$\phi_{v_{3-}} = \phi_{v_{3-}}^{(0)} + \alpha_{3-} |v_{2+}\rangle + \beta_{3-} |v_{1+}\rangle + \gamma_{3-} |v_{1-}\rangle + \delta_{3-} |v_{2-}\rangle$$

onde:

$$\alpha_{2+} = \frac{a_0}{\Delta_0} \left[\frac{-|S|^2}{\sqrt{2}(R-E)} - \sqrt{2}R + \frac{\sqrt{2}|T|^2}{R-E} \right]$$

$$\beta_{2+} = \frac{a_0}{\Delta_0} \left[\frac{-3ST^*}{\sqrt{2}(R-E)} + \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \right]$$

$$\alpha_{1+} = \frac{b_0}{\Delta_0} \left[\frac{-|S|^2}{\sqrt{2}(R+E)} - \sqrt{2}R + \frac{\sqrt{2}|T|^2}{R+E} \right]$$

$$\beta_{1+} = \frac{b_0}{\Delta_0} \left[\frac{-3ST^*}{\sqrt{2}(R+E)} + \sqrt{\frac{3}{2}}S^* \right]$$

$$\alpha_{2-} = \beta_{2+}^*$$

$$\beta_{2-} = -\alpha_{2+}$$

$$\alpha_{1-} = \beta_{1+}^*$$

$$\beta_{1-} = -\alpha_{1+}$$

$$\alpha_{3+} = \frac{S}{\sqrt{2}\Delta_0}$$

$$\beta_{3+} = \frac{\sqrt{2}R}{\Delta_0}$$

$$\gamma_{3+} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{S^*}{\Delta_0}$$

$$\delta_{3+} = -\frac{\sqrt{2}T^*}{\Delta_0}$$

$$\alpha_{3-} = \frac{\sqrt{2}T}{\Delta_0}$$

$$\beta_{3-} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{S}{\Delta_0}$$

$$\gamma_{3-} = - \frac{\sqrt{2} R}{\Delta_0}$$

$$\delta_{3-} = \frac{S^*}{\sqrt{2} \Delta_0}$$

APÊNDICE D

TENSOR DE TENSÕES E CONSTANTES ELÁSTICAS

D-1. TENSOR DE TENSÕES

Sejam \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} três vetores ortogonais unitários fixos nas três arestas do cubo que constitui a rede do GaAs. Uma pequena deformação uniforme vai modificar $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ para $(\hat{x}', \hat{y}', \hat{z}')$ que podem ser escritos em termos de $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ como:

$$\begin{aligned}\hat{x}' &= (1 + e_{xx})\hat{x} + e_{xy}\hat{y} + e_{xz}\hat{z} \\ \hat{y}' &= e_{yx}\hat{x} + (1 + e_{yy})\hat{y} + e_{yz}\hat{z} \\ \hat{z}' &= e_{zx}\hat{x} + e_{zy}\hat{y} + (1 + e_{zz})\hat{z}\end{aligned}\tag{D-1}$$

onde $e_{\alpha\beta}$ são quantidades adimensionais que definem a deformação e \hat{x}' , \hat{y}' e \hat{z}' não tem necessariamente comprimento unitário.

Vamos supor um ponto na rede numa posição $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$ no cristal não deformado. Depois da deformação, sua posição será definida por $\vec{r}' = x\hat{x}' + y\hat{y}' + z\hat{z}'$.

Define-se [8] o deslocamento da deformação, \vec{R} , por:

$$\vec{R} \equiv \vec{r}' - \vec{r} = x(\hat{x}' - \hat{x}) + y(\hat{y}' - \hat{y}) + z(\hat{z}' - \hat{z})\tag{D-2}$$

Substituindo (D-1) em (D-2) vem:

$$\begin{aligned}\vec{R}(\vec{r}) &= (xe_{xx} + ye_{yx} + ze_{zx})\hat{x} + (xe_{xy} + ye_{yy} + ze_{zy})\hat{y} + \\ &+ (xe_{xz} + ye_{yz} + ze_{zz})\hat{z}\end{aligned}\tag{D-3}$$

Vamos escrever $\vec{R}(\vec{r})$ como:

$$\vec{R}(\vec{r}) = \mu(\vec{r})\hat{x} + v(\vec{r})\hat{y} + \omega(\vec{r})\hat{z} \quad (D-4)$$

Expandindo $\vec{R}(\vec{r})$ em série de Taylor até primeira ordem em torno de $\vec{r}_0 = 0$ e usando $\vec{R}(0) = 0$, temos:

$$\begin{aligned} \vec{R}(\vec{r}) &= x \left(\frac{\partial \mu(\vec{r})}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial v(\vec{r})}{\partial x} \hat{y} + \frac{\partial \omega(\vec{r})}{\partial x} \hat{z} \right) + \\ &+ y \left(\frac{\partial \mu(\vec{r})}{\partial y} \hat{x} + \frac{\partial v(\vec{r})}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial \omega(\vec{r})}{\partial y} \hat{z} \right) + \\ &+ z \left(\frac{\partial \mu(\vec{r})}{\partial z} \hat{x} + \frac{\partial v(\vec{r})}{\partial z} \hat{y} + \frac{\partial \omega(\vec{r})}{\partial z} \hat{z} \right) \\ \vec{R} &= \left(x \frac{\partial \mu}{\partial x} + y \frac{\partial \mu}{\partial y} + z \frac{\partial \mu}{\partial z} \right) \hat{x} + \left(x \frac{\partial v}{\partial x} + \right. \\ &+ y \frac{\partial v}{\partial y} + z \frac{\partial v}{\partial z} \left. \right) \hat{y} + \left(x \frac{\partial \omega}{\partial x} + y \frac{\partial \omega}{\partial y} + z \frac{\partial \omega}{\partial z} \right) \hat{z} \quad (D-5) \end{aligned}$$

Comparando (D-5) com (D-3) vem:

$$x \frac{\partial \mu}{\partial x} = x e_{xx} \quad y \frac{\partial \mu}{\partial y} = y e_{yy}$$

e analogamente os outros termos.

Define-se $|\mathcal{B}|$ o tensor de tensões $\epsilon_{\alpha\beta}$ como:

$$\epsilon_{ii} \equiv e_{ii}$$

$$\epsilon_{ij} \equiv \hat{x}'_i \cdot \hat{x}'_j \quad i \neq j$$

(D-6)

Desprezando os termos da ordem de ϵ^2 nos produtos

$\bar{x}'_i \cdot \bar{x}'_j$, temos o tensor de tensões dado por:

$$\epsilon_{xx} = e_{xx} = \frac{\partial \mu}{\partial x} \quad \epsilon_{yy} = e_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}$$

$$\epsilon_{zz} = e_{zz} = \frac{\partial \omega}{\partial z} \quad (D-7)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = e_{yx} + e_{xy} = \frac{\partial \mu}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} = e_{zy} + e_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial \omega}{\partial y} \quad (D-8)$$

$$\epsilon_{zx} = \epsilon_{xz} = e_{zx} + e_{xz} = \frac{\partial \mu}{\partial z} + \frac{\partial \omega}{\partial x}$$

Como podemos ver, o tensor de tensões é um tensor simétrico de segunda ordem, com seis componentes independentes.

D-2. CONSTANTES ELÁSTICAS

Pela Lei de Hooke, para pequenas deformações podemos escrever as componentes do tensor de tensões em termos das componentes da pressão $X_x, Y_y, Z_z, Y_z, Z_x, X_y$, como:

$$\epsilon_{xx} = S_{11} X_x + S_{12} Y_y + S_{13} Z_z + S_{14} Y_z + S_{15} Z_x + S_{16} X_y$$

$$\epsilon_{yy} = S_{21} X_x + S_{22} Y_y + S_{23} Z_z + S_{24} Y_z + S_{25} Z_x + S_{26} X_y$$

$$\epsilon_{zz} = S_{31} X_x + S_{32} Y_y + S_{33} Z_z + S_{34} Y_z + S_{35} Z_x + S_{36} X_y \quad (D-9)$$

$$\epsilon_{yz} = S_{41} X_x + S_{42} Y_y + S_{43} Z_z + S_{44} Y_z + S_{45} Z_x + S_{46} X_y$$

$$\epsilon_{zx} = S_{51} X_x + S_{52} Y_y + S_{53} Z_z + S_{54} Y_z + S_{55} Z_x + S_{56} X_y$$

$$\epsilon_{xy} = S_{61} X_x + S_{62} Y_y + S_{63} Z_z + S_{64} Y_z + S_{65} Z_x + S_{66} X_y$$

ou, escrevendo numa forma reduzida

$$\begin{matrix} \vec{\epsilon} = \\ \epsilon = \end{matrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \vec{X} = \\ X = \end{matrix} \begin{pmatrix} X_x \\ Y_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{pmatrix}$$

$$\vec{\epsilon} = S \vec{X}^*$$

(D-10)

onde as componentes do tensor S são chamadas constantes elásticas.

* Na notação usada para pressão, ou seja, força por unidade de área, a letra maiúscula corresponde a direção da força e a letra minúscula a direção normal ao plano que a força atua.

Invertendo (D-10) podemos escrever:

$$\tilde{X} = \tilde{C} \tilde{\epsilon} \quad (D-11)$$

As componentes de \tilde{C} são os módulos de elasticidade.

Para cristais cúbicos a matriz que representa o módulo de elasticidade é dada por $|8|$:

$$\begin{array}{l} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{array} \begin{array}{l} X_x \\ Y_y \\ Z_z \\ Y_z \\ Z_x \\ X_y \end{array} \left(\begin{array}{cccccc} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{array} \right) \quad (D-12)$$

As constantes elásticas são dadas por:

$$C_{44} = \frac{1}{S_{44}}$$

$$C_{11} - C_{12} = \frac{1}{S_{11} - S_{12}} \quad (D-13)$$

$$C_{11} + 2 C_{12} = \frac{1}{S_{11} + 2 S_{12}}$$

APÊNDICE E

ELEMENTOS DE MATRIZ

E-1. FUNÇÕES NÃO PERTURBADAS

Sabendo que os únicos elementos de matriz do momento entre S e X, Y, Z diferentes de zero vão ser:

$$\langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle = \langle S | p_z | Z \rangle = P'$$

vamos ter, para os elementos de matriz entre a banda de condução e as bandas $v_{i\pm}$ dadas por (28), os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} M_{c\uparrow\downarrow, v_1}^{e_y} &= \langle S\uparrow\downarrow | p_y | \frac{1}{\sqrt{6}} | 2 Z\uparrow - (X + iY)\downarrow \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} | \langle S\uparrow\downarrow | p_y | Z Z\uparrow \rangle + \langle S\uparrow\downarrow | p_y | - X\downarrow \rangle + \\ &+ \langle S\uparrow\downarrow | p_y | - i Y\downarrow \rangle \end{aligned}$$

Podemos ver que o único elemento de matriz diferente de zero vai ser:

$$\langle S\downarrow | p_y | - i Y\downarrow \rangle$$

Donde:

$$M_{c\uparrow, v_{1+}}^{e_y} = 0$$

$$M_{c\downarrow, v_{1+}}^{e_y} = - \frac{i P'}{\sqrt{6}}$$

Seguindo os mesmos passos vamos obter:

$$M_{c\uparrow, v_{1-}}^{e_y} = -\frac{1}{\sqrt{6}} P'$$

$$M_{c\uparrow, v_{1-}}^{e_y} = 0$$

Do mesmo modo podemos obter todos os outros elementos de matriz que estão na Tabela 6.

E-2. ELEMENTOS DE MATRIZ PARA $\vec{k} \neq 0$ E P NA DIREÇÃO (111).

A partir dos autovetores dados por (36) e (37) do capítulo III e da Tabela 6 do capítulo IV os elementos de matriz para P(111) e \vec{k} pequeno numa direção qualquer são dados, para o modo TM, ou seja, o campo elétrico na direção (111) (ver capítulo IV) - por:

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TM} = M_{c\uparrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TM(0)} - P' \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \alpha_{i\pm} + \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \beta_{i\pm} \right]$$

(i=1,2)

$$M_{c\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TM} = M_{c\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TM(0)} + P' \left[-\frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \alpha_{i\pm} + \frac{1}{\sqrt{3}} \beta_{i\pm} \right]$$

(i=1,2)

com

$$\alpha_{2+} = \frac{a_0 (b_0)}{\Delta_0} \left[-\frac{|S|^2}{\sqrt{2} (R(\bar{+})E)} - \sqrt{2} R + \sqrt{2} \frac{|T|^2}{R(\bar{+})E} \right]$$

(1+)

$$\beta_{2+} = \frac{a_0 (b_0)}{\Delta_0} \left[\frac{-3 S T^*}{\sqrt{2} (R(\bar{+})E)} + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* \right]$$

(1+)

$$\alpha_{2-} = \beta_{2+}^* \\ (1-) \quad (1+)$$

$$\beta_{2-} = \alpha_{2+} \\ (1-) \quad (1+)$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{3+}}}^{TM} = P' \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} \left[- \frac{(1+i)}{2} \frac{S}{\Delta_0} + \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{R}{\Delta_0} + \frac{(1-i)}{2} \frac{S^*}{\Delta_0} \right] + M_{c\uparrow, \phi_{v_{3+}}}^{TM} \right\}$$

$$M_{c\downarrow, \phi_{v_{3+}}}^{TM} = P' \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} \left[- \frac{(1+i)}{\sqrt{3}} \frac{R}{\Delta_0} - \frac{S^*}{\Delta_0} - (1-i) \frac{T^*}{\Delta_0} \right] + M_{c\downarrow, \phi_{v_{3+}}}^{TM} \right\}$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{3-}}}^{TM} = P' \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} \left[- (1+i) \frac{T}{\Delta_0} - \frac{S}{\Delta_0} - \frac{(1-i)}{\sqrt{3}} \frac{R}{\Delta_0} \right] + M_{c\uparrow, \phi_{v_{3-}}}^{TM} \right\}$$

$$M_{c\downarrow, \phi_{v_{3-}}}^{TM} = P' \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\frac{(1+i)}{2} \frac{S}{\Delta_0} - \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{R}{\Delta_0} + \frac{(1-i)}{2} \frac{S^*}{\Delta_0} \right] + M_{c\downarrow, \phi_{v_{3-}}}^{TM} \right\}$$

onde:

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{2+}}}^{TM} = \frac{P'}{\sqrt{3}} \{ a_0 (b_0) \left[- \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \frac{S}{R(+)\bar{E}} + \frac{2}{\sqrt{6}} \right] \}$$

$$M_{c\downarrow, \phi_{v_{2+}}}^{TM} = \frac{P'}{\sqrt{3}} \{ a_0 (b_0) \left[- \frac{(1+i)}{\sqrt{6}} + \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \frac{T^*}{R(+)\bar{E}} \right] \}$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{2-}}}^{TM} = \frac{P'}{\sqrt{3}} \{ a_0 (b_0) \left[- \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \frac{T}{R(+)\bar{E}} + \frac{(1-i)}{\sqrt{6}} \right] \}$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{2-}}}^{TM} (0) = \frac{P'}{\sqrt{3}} \{ a_0 (b_0) \left[\frac{2}{\sqrt{6}} - \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \frac{S^*}{R(+)\bar{E}} \right] \}$$

(1-)

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{3\pm}}}^{TM} = M_{c\uparrow, \phi_{v_{3\pm}}}^{+e_z}$$

Para o modo TE, ou seja, o campo elétrico na direção -

(1 1 2) temos:

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TE} = M_{c\uparrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TE} (0) + P' \left[\frac{2}{3\sqrt{2}} \alpha_{i\pm} - \frac{(1-i)}{3\sqrt{2}} \beta_{i\pm} \right]$$

(i=1,2)

$$M_{c\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TE} = M_{c\downarrow, \phi_{v_{i\pm}}}^{TE} (0) - P' \left[\frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \alpha_{i\pm} - \frac{2}{3\sqrt{2}} \beta_{i\pm} \right]$$

(i=1,2)

$$\alpha_{2+} = \frac{a_0 (b_0)}{\Delta_0} \left[\frac{-|S|^2}{\sqrt{2} (R(+)\bar{E})} - \sqrt{2} R + \sqrt{2} \frac{|T|^2}{R(+)\bar{E}} \right]$$

(1+)

$$\beta_{2+} = \frac{a_0 (b_0)}{\Delta_0} \left[\frac{-3 S T^*}{\sqrt{2} (R(+)\bar{E})} + \sqrt{\frac{3}{2}} S^* \right]$$

(1+)

$$\alpha_{2-} = \beta_{2+}^* \quad \beta_{2-} = -\alpha_{2+}$$

(1-) (1+) (1-) (1+)

$$M_{c\uparrow, \phi_{v_{3+}}}^{TE} = \left[-\frac{(1+i)}{2\sqrt{6}} \frac{S}{\Delta_0} - \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{R}{\Delta_0} - \frac{(1-i)}{2\sqrt{6}} \frac{S^*}{\Delta_0} + \frac{2}{3\sqrt{2}} \right] P'$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{V_{3+}}}^{TE} = \left[-\frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \frac{R}{\Delta_0} + \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{S^*}{\Delta_0} + \frac{(1-i)}{\sqrt{6}} \frac{T^*}{\Delta_0} - \frac{(1+i)}{3\sqrt{2}} \right] P,$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{V_{3-}}}^{TE} = (M_{c\uparrow, \phi_{V_{3+}}}^{TE})^*$$

$$M_{c\downarrow, \phi_{V_{3-}}}^{TE} = - (M_{c\uparrow, \phi_{V_{3+}}}^{TE})^*$$

onde

$$M_{c\uparrow, \phi_{V_{2+}}}^{TE} (1+) = a_0 (b_0) \left[-\frac{(1+i)}{2\sqrt{3}} \frac{S}{(R(+))E} - \frac{2}{3} \right] P,$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{V_{2+}}}^{TE} (1+) = a_0 (b_0) \left[-\frac{(1+i)}{6} + \frac{(1-i)}{2\sqrt{3}} \frac{T^*}{(R(+))E} \right]$$

$$M_{c\uparrow, \phi_{V_{2-}}}^{TE} (1-) = - (M_{c\uparrow, \phi_{V_{2+}}}^{TE} (1+))^*$$

$$M_{c\downarrow, \phi_{V_{2-}}}^{TE} (1-) = (M_{c\uparrow, \phi_{V_{2+}}}^{TE} (1+))^*$$