

" ÍNDICE DE REFRAÇÃO E GUIA DE ONDAS EM LASERS
DE GaAs "

Autor: JULIO GREGORIO MENDOZA ALVAREZ

Orientador: FREDERICO DIAS NUNES

Tese Apresentada ao Instituto
de Física "Gleb Wataghin" para
a obtenção do Título de Doutor
em Ciências.

Outubro de 1979.

A G R A D E C I M E N T O S

Ao Prof. Frederico Dias Nunes pela orientação e ajuda ao longo deste trabalho, e principalmente pela amizade que me professa.

Ao Prof. Navin B. Patel pelos conselhos e valiosas discussões, por sua efetiva participação nesta Tese, e pela sua amizade.

À Marcia e Maria Herminia pelo trabalho de datilografia e pelos desenhos desta Tese.

Ao CONACyT e CIEA/IPN do Mexico, e à CAPES e CNPq do Brasil pelo suporte financeiro recebido ao longo desta Tese.

Enfim, a todos que de alguma maneira me auxiliaram neste trabalho.

As minhas queridas LIGIA ISABEL e ANA PAOLA
CAROLINA , pelo seu amor, apoio e compreensão.

Aos meus pais JULIO e MARGARITA , com carinho
e gratidão.

Aos meus irmãos PATRICIA, LAURA, MARIA EUGENIA,
JESUS e CARLOS.

R E S U M O .

Neste trabalho calculamos a variação das partes real e imaginária do índice de refração complexo, devida à injeção de portadores. Nossos cálculos foram feitos para GaAs tipo p, com uma densidade de impurezas de: $N_A = 1.5 \cdot 10^{18}$ e $N_D = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

A parte real do índice de refração foi calculada através da absorção e das relações de dispersão de Kramers-Kronig modificadas. No cálculo da absorção foram levados em conta: i) redução na energia da banda proibida produzida pelos portadores nas bandas; ii) presença de caudas nas bandas de condução e valência como consequência da elevada concentração de impurezas; iii) influência dos portadores injetados, nas caudas das bandas e no elemento de matriz das transições.

Para injeções acima de $n_0 = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, nós obtivemos que a variação do índice de refração com a injeção n tinha a forma: $\Delta n \approx -An + B(h\nu)$, sendo que a constante B depende da energia do fóton e é da mesma ordem do que o termo $-An$ para as injeções normalmente usadas nos lasers. Para injeções menores do que n_0 , Δn se aparta da relação de linearidade com n ; e ainda para injeções menores do que $n' \approx 7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, a variação se torna positiva.

A partir dum perfil na densidade de portadores injetados, aplicando nossos resultados acima citados, obtivemos um perfil do índice de refração complexo ao longo da junção. Se discute a influência deste perfil no guiamento na direção paralela à junção dum laser.

Um perfil do índice de refração real na direção paralela à junção do tipo $\text{sech}^2(y/y')$ foi usado para se resolver a equação de onda e obter os modos permitidos pela cavidade; com este perfil conseguimos explicar os dados experimentais da variação na separação em comprimento de onda entre os modos adjacentes transversais paralelos à junção. São

discutidos os campos próximo e distante resultantes deste perfil. O caso de lasers de heteroestrutura dupla é discutido, e se obtêm uma variação efetiva no índice de refração a qual depende da injeção, da variação de temperatura e do fator de confinamento.

Finalmente, algumas aplicações dos nossos cálculos foram feitas, obtendo-se expressões, para a variação com a temperatura dos parâmetros η_c e η_v que medem a profundidade das caudas, e para o ganho em função da injeção e da energia (válida para energias em torno daquela correspondente a g_{max}).

A B S T R A C T .

In this work, we calculated the variation of the real and imaginary parts of the complex refractive index, due to carrier injection. Our calculations were made for p-type GaAs with density of impurities: $N_A = 1.5 \cdot 10^{18}$, $N_D = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

The real part of the refractive index was calculated through the absorption coefficient and modified Kramers-Kronig dispersion relations. In calculating the absorption we taken into account: i) bandgap shrinkage due to carrier exchange interaction; ii) tails in the conduction and valence bands arising from the high impurity density; iii) injected carrier influence on the bandtails and on the transition matrix element.

We obtained that for injection greater than $n_0 = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, the refractive index variation with injection is: $\Delta n \approx -\Delta n + B(h\nu)$, where B is a constant depending on the photon energy and of the same order that the term $-\Delta n$ for the normal injection used in lasers. For carrier injection less than n_0 , Δn apparts from the linearity with n ; and if n is less than $n' \approx 7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, Δn will be positive.

By using an injected carrier density profile, we applied our results cited above, and obtained a complex refractive index profile along the junction. The influence of this profile on guiding along the junction was discussed.

We used a real refractive index profile along the junction plane of the form $\text{sech}^2(y/y')$ into the wave equation to obtain the permitted cavity modes; using this profile, we explained experimental data on the wavelength separation variation between adjacent modes transverse parallel to the junction plane. We discussed the near- and far-field radiation patterns resulting from this profile. The double-heterostructure laser case is discussed, obtaining an effective refractive index variation depending on carrier injection, temperature variation and confinement factor.

Finally, some applications of our calculations were made, resulting in expressions: for the temperature variation of the bandtail parameters n_c and n_v , and for the gain as a function of carrier injection and photon energy (valid for energies around of that corresponding to g_{max}).

ÍNDICE

1. <u>INTRODUÇÃO</u>	1
2. <u>INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATERIA</u>	3
3. <u>DENSIDADE DE ESTADOS</u>	13
3.1 Modelo de Kane.	14
3.2 Modelo de Halperin e Lax.	21
3.3 Comprimento de Blindagem.	25
4. <u>BANDAS PARABÓLICAS</u>	27
4.1 Transição Banda-Banda.	29
4.2 Transição Banda de Condução-Aceitador.	32
4.3 Transição Doador-Banda de Valência.	33
4.4 Transição Doador-Aceitador.	34
5. <u>APROXIMAÇÃO PARA A DENSIDADE DE ESTADOS DE BANDAS DE IMPUREZAS</u>	36
6. <u>APROXIMAÇÃO AO ELEMENTO DE MATRIZ</u>	40
7. <u>ÍNDICE DE REFRAÇÃO</u>	47
7.1 Cálculo do Índice de Refração.	47
7.2 Vibrações da Rede.	52
7.3 Absorção Interbanda.	53
7.4 Absorção Intrabanda.	54
8. <u>DESCRIÇÃO DOS CÁLCULOS COMPUTACIONAIS PARA OS MODELOS DE BANDAS PARABÓLICAS E BANDAS COM CAUDAS</u>	57
8.1 Descrição do cálculo computacional para o modelo de bandas parabólicas.	57
8.2 Cálculo do coeficiente de absorção no modelo de Bandas com Caudas.	62

9. <u>RESULTADOS</u>	74
9.1 Densidades de Estados.	75
9.2 Comprimento de Blindagem.	78
9.3 Quasi-níveis de Fermi.	80
9.4 Elemento de Matriz.	84
9.5 Emissões Espontânea e Estimulada.	84
9.6 Coeficiente de Absorção.	92
9.7 Índice de Refração.	109
9.8 Variação no Índice de Refração.	119
10. <u>PERFIL DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO E MODOS RESSONANTES PARA LASERS DE GaAs</u>	128
10.1 Perfil de Índice de Refração.	133
10.2 Perfil do Índice de Refração no caso de DH lasers.	143
11. <u>APLICAÇÕES</u>	152
11.1 Comportamento das Bandas em função da temperatura.	152
11.2 Uma Expressão para $g(E,n)$.	155
11.3 Perfil do Índice de Refração Complexo.	159
12.1 <u>CONCLUSÕES</u>	165
12.2 <u>DISCUSSÃO SOBRE CÁLCULOS FUTUROS</u>	168
Apêndice A	170
Apêndice B	180
Apêndice C	186
Apêndice D	199
Apêndice E	210
Referências	217

C A P I T U L O 1

INTRODUÇÃO

A influência dos portadores livres no índice de refração do GaAs tem sido usada para explicar certos fenômenos observados nos lasers de GaAs⁽¹⁻⁴⁾. Um fenômeno importante, para as aplicações práticas, e até agora não completamente resolvido, é o da formação de um guia de ondas^(3,4) na direção transversal paralela ao plano da junção no laser de GaAs. Neste caso, um dos fatores importantes é a perturbação, causada pelos portadores injetados, no índice de refração.

Até agora, a variação do índice de refração com os portadores: $\Delta N(n)$ foi considerada como sendo diretamente proporcional à densidade de portadores injetados n . Esta relação foi obtida por Thompson⁽⁵⁾, usando um cálculo aproximado.

O nosso objetivo, então, foi o de se fazer um cálculo o mais completo possível da variação do índice de refração ΔN com a injeção de portadores n levando em conta os seguintes fatores:

- i) Diminuição na energia da banda proibida devido aos portadores injetados.
- ii) Influência da injeção nas caudas das densidades de estados das bandas de condução e valência.
- iii) Variação do elemento de matriz para as transições entre as bandas com caudas, com a injeção dos portadores.
- iv) Cálculo autoconsistente das densidades de estados para bandas com caudas, assim como para os quasi-níveis de Fermi para elétrons e buracos.

Depois, conhecendo-se $\Delta N(n)$, ver as suas consequências no guiamento ao longo da junção.

Para o cálculo de $\Delta N(n)$, foram feitas uma série de aproximações para se poder calcular as densidades de estados autoconsistentes, assim como o elemento de matriz. No capítulo 2, nós damos um breve resumo do tratamento da interação da radiação com a matéria, para obter expressões para o cálculo das emissões espontânea e estimulada, assim como da absorção, e relações entre estas quantidades. No capítulo 3 são discutidas as duas teorias mais usadas para se descrever as caudas na densidade de estados, no limite de altas concentrações de impurezas. No capítulo 4 são dadas expressões explícitas para o cálculo da emissão espontânea quando se usa densidade de estados de banda parabólica e um elemento de matriz correspondente a algumas das possíveis transições entre bandas e níveis de impureza. A aproximação à densidade de estados de bandas com caudas a ser usada é apresentada no capítulo 5. No capítulo 6 se discute o elemento de matriz a ser usado para as transições entre estados pertencentes a bandas com caudas. O método para se calcular o índice de refração a partir das relações de dispersão de Kramers-Kronig é apresentado no capítulo 7. No capítulo 8 nós damos uma descrição do cálculo computacional, com as aproximações usadas, feito para se calcular o coeficiente de absorção. Os resultados dos nossos cálculos para as emissões espontânea e estimulada, absorção, índice de refração e variação do índice de refração, são apresentados no capítulo 9. No capítulo 10 nós mostramos a solução para um guia de ondas usando um perfil para N ao longo da junção, mostrando a concordância com dados experimentais, e discutimos o caso de lasers de heteroestrutura dupla. No capítulo 11 mostramos algumas aplicações dos nossos cálculos às bandas, ao ganho e ao perfil no índice de refração complexo ao longo da junção. Finalmente, no capítulo 12 damos as conclusões do nosso trabalho, e a sugestão para futuros trabalhos a ser realizados, seja como aplicações dos nossos cálculos, ou seja para melhorá-los.

C A P Í T U L O 2

INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA

Consideremos um sistema (átomo, molécula), o qual possui um conjunto de níveis discretos de energia, e suporemos que o sistema está imerso num campo de radiação eletromagnética; neste caso, a interação da radiação com o sistema vai se dar da seguinte forma: se a energia dos fótons do campo eletromagnético for igual à energia de separação entre 2 dos níveis de energia do sistema, e a transição não for proibida, por alguma regra de seleção; então, se o estado de menor energia está ocupado por um elétron e o nível de maior energia está vazio, o sistema pode absorver um fóton do campo de radiação, levando o elétron do estado de menor para o de maior energia; ou, se o estado de maior energia estiver ocupado por um elétron e o de menor energia vazio, o fóton pode estimular o elétron a decair para o estado de menor energia emitindo um fóton da mesma energia e momento de aquele que estimulou a transição.

Físicamente, podemos descrever este processo de emissão ou de absorção imaginando um átomo no k -ésimo estado de energia. Assim, o átomo pode mudar para um estado de menor energia emitindo um fóton, ou mudar para um estado de maior energia absorvendo um fóton. Se a emissão ocorre sem a intervenção do campo externo de radiação, estaremos no caso da emissão espontânea. Por outro lado, quando a emissão foi provocada pelo campo de radiação externa aplicado, diremos que a emissão é estimulada ou induzida.

É claro que não pode existir a absorção espontânea, já que não pode haver transições de um estado de menor para outro de maior energia sem que um fóton seja tirado de um campo de radiação eletromagnética.

No caso de um laser em regime de emissão estimulada, a potência total produzida pelos processos de emissão estimulada de todos os átomos é maior que todas as absorções juntas. Essa potência emitida vai depender da probabilidade de ocorrência das ditas transições estimuladas. É por isso que o estudo da probabilidade das transições é extremamente importante na eletrônica quântica.

Numa transição, um átomo está em estado perturbado, e na mecânica quântica, podemos descrever cada átomo assim, pela sua função de onda $|Q\rangle$, onde $|Q\rangle$ pode ser expandida em termos do conjunto completo de auto estados não perturbados $|E_j\rangle$, onde E_j caracteriza a energia de cada estado não perturbado. Assim temos: $|Q\rangle = \sum_j a_j |E_j\rangle$ onde a probabilidade de que o átomo Q se encontre no auto estado de energia $|E_j\rangle$, é justamente $|a_j|^2$. Portanto, o cálculo das probabilidades de transição é justo o cálculo de $|a_j|^2$ em função do tempo na presença do campo de radiação eletromagnética.

A fim de calcular as mencionadas probabilidades de transição, existem dois métodos para tratar-nos o problema:

i) Semiclássico

Este método consiste em usar a teoria mecânico-quântica de perturbação para estudar as transições eletrônicas associadas com a emissão ou absorção de radiação. Porém, usa-se uma descrição clássica do campo de radiação, o qual entra na Hamiltoniana através do vetor de potencial eletromagnético $\vec{A}$ na forma:

$$H_{s.c.} = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 + e\phi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \dots \quad (2.1)$$

ou

$$H_{s.c.} = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{e}{2mc} (\vec{A} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{A}) + e\phi + U \dots \quad (2.2)$$

onde na ultima equação foi desprezado o termo em A^2/c^2 . Na eq.(2.2) $\vec{p}$ é o operador momento, m a massa do elétron, ϕ o potencial

escalar eletrostático e U é a energia potencial do elétron.

Nesta teoria, obtemos a forma correta das probabilidades de absorção e emissão estimulada, porém, não se consegue explicar a ocorrência da emissão espontânea. Não aprofundaremos mais nos resultados deste tratamento semiclássico, já que o nosso principal interesse é o tratamento quântico que vai nos dar todos os efeitos observados experimentalmente.

ii) Quântico

Neste tratamento correto, devemos tratar tanto o campo de radiação como o sistema atômico por meio de uma análise mecânico-quântica. Portanto, neste caso se tem que quantizar o campo de radiação, para depois discutir a interação deste campo quantizado com o átomo e então calcular as probabilidades de transição espontânea e estimulada baseados no campo quantizado.

A quantização do campo nos possibilita a sua descrição como uma superposição de modos normais, ou osciladores equivalentes. Já que na mecânica quântica um oscilador pode emitir radiação na ausência de um campo externo, obtemos que nesta teoria a emissão espontânea ocorre no mesmo pé de igualdade que a absorção ou a emissão estimulada.

Não é a nossa intenção desenvolver aqui essa teoria, a qual pode ser encontrada em vários livros⁽⁶⁻⁷⁾. Nós nos restringiremos a dar os principais resultados deste tratamento quântico. A Hamiltoniana do campo de radiação que tem a forma original:

$$H_r = \frac{1}{8\pi} \int \left[\vec{E}^2 + \vec{H}^2 \right] d\tau = \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \left[\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right]^2 + (\nabla \times \vec{A})^2 \right\} d\tau \quad (2.3)$$

uma vez quantizada adquire a forma:

$$H_r = \sum_{k\alpha} \hbar \omega_k a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha}^- \quad (2.4)$$

onde $a_{k\alpha}^+$ e $a_{k\alpha}^-$ são os operadores de criação e destruição dos fótons no campo de radiação e ω_k é a frequência correspondente ao modo normal k .

Usando a teoria de perturbação para tratar a interação do campo de radiação quantizado com os átomos, obtém-se que a probabilidade de transição por unidade de tempo entre os estados I e J, que chamaremos T_{IJ} é dada pela expressão:

$$T_{IJ} = \frac{4E e^2 N}{C^3 \hbar^2 m^2} \left| M_{IJ} \right|_{av}^2 \cdot \begin{cases} (N_V + 1) & \text{(emissão)} \\ N_V & \text{(absorção)} \end{cases} \quad (2.5)$$

Na equação (2.5) se tem:

N índice de refração do meio.

N_V nº de fótons com energia $h\nu = E_I^0 - E_J^0$

e:

$$\left| M_{IJ} \right|_{av}^2 = \sum_{\lambda=1,2} \int \left(M_{IJ}^{\pm} \right)^2 \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (2.6)$$

ou

$$\left| M_{IJ} \right|_{av}^2 = \sum_{\lambda=1,2} \int \left| \langle J | e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{\lambda} \cdot \vec{p} | I \rangle \right|^2 \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (2.7)$$

onde $\vec{k}$ é o vetor de onda do fóton e λ representa as duas diferentes polarizações possíveis do fóton.

$|I\rangle, |J\rangle$ - funções de onda dos estados inicial e final com energias E_I^0 e E_J^0 respectivamente.

$\vec{\epsilon}_{\lambda}$ - vetor unitário na direção de polarização do fóton.

$\vec{p}$ - vetor momento do elétron.

Estatística de Recombinação

Vamos supor dois conjuntos de estados que denotaremos por $\{i\}$ e $\{j\}$, dos quais consideraremos dois estados I e i e J e j. O conjunto $\{i\}$ é de maior energia que o conjunto $\{j\}$.

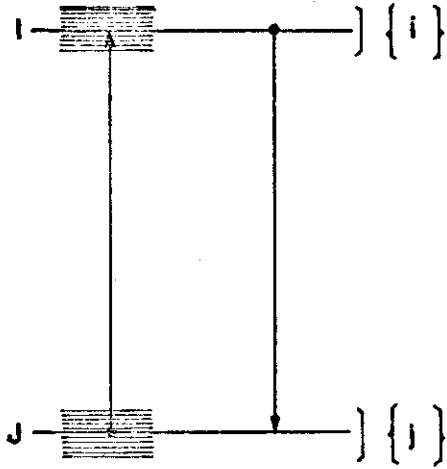


Fig. 2.1 . Transições entre os estados I e J, pertencentes aos conjuntos de estados $\{i\}$ e $\{j\}$.

Suporemos que todos os estados do grupo i estão em equilíbrio térmico entre si tendo assim um quasi-nível de Fermi F_i , o mesmo acontecendo com os estados do grupo j com o quasi-nível F_j . Definamos:

$P_{I/J}$ $\equiv$ probabilidade de que o estado I/J esteja ocupado por um elétron.

$q_{I/J}$ $\equiv$ probabilidade de que o estado I/J não esteja ocupado por um elétron.

então:

$$P_I = \left[1 + \exp \left(\frac{E_I - F_i}{KT} \right) \right] \quad (2.8)$$

$$P_J = \left[1 + \exp \left(\frac{E_J - F_j}{KT} \right) \right] \quad (2.9)$$

$$q_I = 1 - P_I \quad (2.10)$$

$$q_J = 1 - P_J \quad (2.11)$$

Consideremos agora transições entre os estados I e J. As razões de emissão estimulada e espontânea e a razão de absorção, podem ser escritas respectivamente como:

$$U_{IJ}^{st} = B_{IJ} N_v P_I q_J \quad (2.12)$$

$$U_{IJ}^{abs} = B_{IJ} N_v P_J q_I \quad (2.13)$$

$$U_{IJ}^{sp} = C_{IJ} P_I q_J \quad (2.14)$$

Da eq.(2.5) obtemos que:

$$B_{IJ} = C_{IJ} = \frac{4e^2 N}{m^2 c^3 \hbar^2} E \left| M_{IJ} \right|_{av}^2 \quad (2.15)$$

Assim, substituindo-se as expressões para as razões de emissão e absorção e para as probabilidades P_I , P_J , q_I e q_J , chega-se facilmente à expressão para a razão entre a emissão estimulada total e a emissão espontânea por número de fótons, que é:

$$\frac{1}{N_v} \frac{U_{IJ}^{st} - U_{IJ}^{abs}}{U_{IJ}^{sp}} = 1 - \exp \left[\frac{F_J - F_I + h\nu}{kT} \right] \quad (2.16)$$

onde $h\nu = E_I - E_J$

Já que estas transições ocorrem entre os grupos de estados $\{i\}$ e $\{j\}$, então, para achar a razão total de recombinação, devemos somar sobre todos os estados $I \in i$ e $J \in j$. Para fazer isto, consideraremos a energia E do fóton absorvido ou emitido como uma variável e multiplicaremos as eqs. (2.12), (2.13), e (2.14) pelo número de estados $g_{IJ}(E) dE$ que podem contribuir para a emissão de um fóton no intervalo de energia $(E, E + dE)$. Referiremos a absorção e emissão de radiação ao elemento de ângulo sólido $d\Omega$. Então, escreveremos as razões totais de recombinação por unidade de volume como:

$$r_{ij}^{st} N_V dE \equiv \left\{ \sum_{IJ} r_{IJ}^{st} \right\} N_V dE \equiv \frac{1}{V} \left\{ \sum_{IJ} (U_{IJ}^{st} - U_{IJ}^{abs}) g_{IJ}(E) \delta_{E_I-E_J, E} \right\} dE \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (2.17)$$

$$e \quad R_{ij}^{SP} \equiv \int r_{ij}^{SP} dE \equiv \int \left\{ \sum_{IJ} r_{IJ}^{SP} \right\} dE \\ \equiv \frac{1}{V} \int \left\{ \sum_{IJ} U_{IJ}^{SP} g_{IJ}(E) \delta_{E_I-E_J, E} \right\} dE \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (2.18)$$

Agora usando as eqs. (2.14) e (2.15) na eq. (2.18), a expressão para a razão de recombinação espontânea r_{ij}^{sp} fica:

$$r_{ij}^{SP} = \sum_{I,J} \frac{4Ne^2 E |M_{IJ}(E)|_{av}^2}{Vm^2 \hbar^2 c^3} g_{IJ}(E) P_I q_J \delta_{E_I-E_J, E} \quad (2.19)$$

Do mesmo modo, substituindo-se as eqs. (2.12), (2.13) e (2.15) na eq. (2.17), a razão de recombinação estimulada r_{ij}^{st} será:

$$r_{ij}^{st} = \sum_{I,J} \frac{4Ne^2 |M_{IJ}(E)|_{av}^2}{Vm^2 \hbar^2 c^3} g_{IJ}(E) [P_I q_J - P_J q_I] \delta_{E_I-E_J, E} \quad (2.20)$$

Usando as eqs. (2.8), (2.9), (2.10) e (2.11) para as probabilidades P_I , P_J , q_I e q_J , obtemos que:

$$\frac{P_J q_I}{P_I q_J} = \exp \left[\frac{F_J - F_I + E_I - E_J}{kT} \right] \quad (2.21)$$

Levando em conta que $E_I - E_J = E$, substituindo a eq. (2.21) na eq. (2.20) e comparando o resultado com a eq. (2.19) obtemos uma relação entre as razões de recombinação estimulada e espontânea, que é dada por:

$$r_{ij}^{st} = \left[1 - \exp \left(\frac{F_J - F_I + E}{kT} \right) \right] r_{ij}^{sp} \quad (2.22)$$

No sistema C.G.S., estas quantidades têm unidades de $\text{erg}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{seg}^{-1}$ ou $\text{meV}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{seg}^{-1}$.

A fim de encontrar uma relação entre a emissão espontânea e o coeficiente de absorção, vamos proceder como segue:

A razão total de fótons absorvidos por unidade de volume é, de acordo com a definição de r_{ij}^{st} :

$$- \int r_{ij}^{\text{st}} dE \quad (2.23)$$

O fluxo incidente de fótons (número de fótons por unidade de área e por unidade de tempo) será:

$$\frac{2}{v} \cdot \int \frac{c}{N} \mathcal{N}(E) dE \left(\frac{d\Omega_k}{4\pi} \right) \quad (2.24)$$

onde $\mathcal{N}(E)$ é o número de fótons de uma dada polarização por unidade de energia, e que é da forma:

$$\mathcal{N}(E) = \frac{VN^3 E^2}{2\pi^2 \hbar^3 C^3} \quad (2.25)$$

substituindo-se a eq.(2.25) na eq.(2.24) teremos que o fluxo incidente de fótons é:

$$\frac{N^2}{\pi^2 \hbar^3 C^2} \int E^2 dE \quad (2.26)$$

O coeficiente de absorção se define como a razão entre o número de fótons absorvidos, dado na eq. (2.23), e o fluxo total incidente dado pela eq. (2.26), para qualquer incremento diferencial de energia E. Portanto, usando as eqs. (2.23) e (2.26) obtemos que o coeficiente de absorção α_{ji} para uma energia E está relacionado à razão de emissão estimulada r_{ij}^{st} pela expressão:

$$\alpha_{ji}(E) = - \frac{\pi^2 \hbar^3 c^2}{N^2 E^2} r_{ij}^{st}(E) \quad (2.27)$$

A absorção é definida como a perda fraccional na intensidade da radiação por unidade de comprimento dentro do cristal, ou seja:

$$\frac{1}{I} \frac{dI}{dx} = -\alpha \quad (2.28)$$

que é uma equação diferencial que têm como solução:

$$I = I_0 \exp(-\alpha x) \quad (2.29)$$

onde α é o coeficiente de absorção, e I_0 é a intensidade inicial da radiação (para $x=0$) que incide no cristal. Da eq. (2.29) vemos então que se: $\alpha > 0$, então, $I < I_0$, sendo então que a intensidade da radiação diminui conforme ela penetra mais no cristal. Por outro lado, se $\alpha < 0$ então, $I > I_0$, então neste caso, o meio no qual a radiação está, se comporta como um amplificador da radiação, já que a intensidade de radiação vai aumentando à medida que ela penetra no cristal.

Condição para Absorção Negativa

Da definição da razão de recombinação estimulada r_{ij}^{st} dada na eq. (2.17), e de sua relação com a absorção α_{ji} dada na eq. (2.27), podemos facilmente obter que, se ocorre:

$$U_{IJ}^{st} > U_{IJ}^{abs} \quad \forall \quad I \in i \quad J \in j \quad (2.28)$$

então, r_{ij}^{st} será positiva e portanto da eq. (2.27) a absorção α_{ji} será negativa, o qual equivale a dizer que o meio no qual a radiação se propaga, passa de absorvedor para amplificador da radiação, ou seja, que vamos mudar de situação de perda de radiação ($\alpha_{ji} > 0$) para uma outra de ganho ($\alpha_{ji} < 0$).

Das expressões para U_{IJ}^{st} e U_{IJ}^{abs} dadas nas eqs. (2.12) e (2.13), obtemos que a condição expressa na eq. (2.28) implica que

$$p_I q_J > p_J q_I \quad (2.29)$$

Substituindo-se p_I , p_J , q_I e q_J das eqs. (2.8) até (2.11), a condição fica:

$$\exp\left[\frac{F_i - E_I}{kT}\right] > \exp\left[\frac{F_j - E_J}{kT}\right] \quad (2.30)$$

Finalmente, a condição a que se chega para a existência de absorção negativa ou ganho é de que a diferença entre os quasi-níveis de Fermi deve cumprir:

$$F_i - F_j > E_I - E_J = E = h\nu \quad (2.31)$$

Razões de Emissão

Nas eqs. (2.19) e (2.20) obtivemos as razões de recombinação espontânea e estimulada, as quais, como pode-se observar dependem: do elemento de matriz que governa as transições, das densidades de estados inicial e final, dos quasi-níveis de Fermi.

Portanto, a fim de podermos usar as eqs. (2.19) e (2.20) para achar as razões de emissão espontânea e estimulada, precisaremos fazer o seguinte:

- i) identificarmos as transições eletrônicas que são as responsáveis pelas emissões radiativas.
- ii) Achar e calcular as densidades de estados correspondentes aos grupos de níveis envolvidos nas transições radiativas.
- iii) Calcular um elemento de matriz adequado às transições eletrônicas envolvidas.

C A P Í T U L O 3

DENSIDADES DE ESTADOS

Um grande número de experimentos sobre tunelamento^(8,9), absorção ótica⁽¹⁰⁻¹³⁾ e luminescência⁽¹⁴⁻¹⁷⁾ levaram à evidência experimental da existência de um contínuo de estados que se estendia, a partir das bandas parabólicas, dentro da banda proibida formando o que se chamou de caudas nas densidades de estados, associadas com impurezas nos semicondutores degenerados em particular no GaAs, que na região ativa dos lasers semicondutores, é usado com uma alta densidade de impurezas.

A alta dopagem, faz com que a banda de impurezas se intercepte com a banda do semicondutor à qual se associa a impureza.

Isto produz extensões das bandas dentro da banda proibida conhecidas como caudas nas densidades de estados destas bandas.

Vários têm sido os trabalhos feitos a fim de descrever quantitativamente, e dar expressões analíticas, para a densidade de estados nas bandas com caudas. Num estudo usando a teoria de muitos corpos, Wolff⁽¹⁸⁾ mostrou que o sistema dos elétrons na banda de condução poderia ser aproximado por elétrons quasi-livres movendo-se no campo dos potenciais blindados das impurezas. Esta aproximação seria válida no limite de altas concentrações de impurezas. Neste limite a correlação elétron-elétron vai deslocar a banda de condução para baixo de uma quantidade igual à energia de intercâmbio E_C^e dada por⁽¹⁹⁾.

$$E_C^e = \frac{2e^2}{\pi\epsilon} (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (3.1)$$

Um tratamento semelhante ao de Wolff foi dado independentemente por Bonch-Bruевич⁽²⁰⁾.

Os dois modelos mais usados para descrever as caudas nas bandas são: o modelo das flutuações da energia potencial de Kane⁽²¹⁾ e o modelo

de Halperin e Lax⁽²²⁾. Vamos agora examinar mais detalhadamente estes dois modelos.

3.1 Modelo de Kane (21)

Este tratamento é baseado na importância das flutuações em energia em torno do valor médio do potencial local, as quais perturbam as energias dos estados nas bandas de semicondutores dopados. Estas mesmas flutuações são as responsáveis pela mudança das energias bem definidas dos centros profundos, em bandas largas de estados.

Para tratar-nos estas flutuações do potencial local, é feita a hipótese de que a variação do potencial é suficientemente lenta que permite definir uma densidade de estados "local" usando a fórmula apropriada para um volume grande, isto é:

$$\Delta\rho(E) = \sqrt{2} \pi^{*3/2} \Delta V (E-u)^{1/2} / \pi^2 \hbar^3 \quad (3.2)$$

Define-se agora a função de densidade de probabilidade $P(u)$ por:

$$\Delta p = P(u) \Delta u \quad (3.3)$$

onde Δp é a probabilidade de achar o potencial entre u e $u + \Delta u$. Com isto, a densidade de estados total será:

$$\rho'(E) = \frac{\sqrt{2} \pi^{*3/2} V}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^E (E - u)^{1/2} P(u) du \quad (3.4)$$

Agora, a fim de poder conhecer o potencial, temos que achar a forma analítica da função de densidade de probabilidade $P(u)$. Para isto, vamos nos referir ao trabalho de Morgan⁽²³⁾.

Num cristal impuro, o potencial eletrostático num ponto, difere daquele correspondente ao cristal puro pelo potencial coulombiano total produzido nesse ponto por todos os íons no cristal.

Portanto, o potencial local vai depender da configuração dos íons em torno daquele ponto e flutua através do cristal em torno do seu valor médio.

Vamos chamar de $P(E)dE$ a probabilidade de encontrar

a energia potencial eletrônica local entre $E-dE$ e $E+dE$. Ela será a soma das probabilidades de todas as configurações iônicas as quais geram a energia potencial nessa faixa de energia.

A fim de obter expressões explícitas para estas probabilidades, faremos as seguintes suposições:

a) íons de um só tipo estão distribuídos aleatoriamente no cristal com densidade média N .

b) Se N_s é a densidade de possíveis sítios para as impurezas no cristal, então a probabilidade média de se encontrar uma impureza num destes sítios será: $p = N/N_s$.

Assim, numa região i , contendo g_i lugares iônicos, a probabilidade de se encontrar exatamente n_i íons é a distribuição binomial:

$$P_i(n_i) = \binom{g_i}{n_i} p^{n_i} (1-p)^{g_i-n_i} \quad (3.5)$$

A função geratriz desta distribuição binomial é:

$$F_i(s) = (ps+q)^{g_i} = \sum_{n_i} P_i(n_i) s^{n_i} \quad (3.6)$$

onde $q=1-p$.

Embora a função geratriz possa não fornecer uma forma explícita para a função probabilidade, ela permite um fácil acesso aos seus momentos. As expressões para os momentos serão:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &\equiv \bar{n} = \frac{dF(s)}{ds} \quad , \quad s=1 \\ \langle n^2 \rangle &= \frac{d}{ds} \left(s \frac{dF(s)}{ds} \right) \quad , \quad s = 1 \\ \langle n^m \rangle &= \left[s \frac{d}{ds} \right]^m F(s) \quad , \quad s = 1 \end{aligned} \quad (3.7)$$

Suponhamos que cada íon (positivo) na região i , contribui para a energia potencial de um elétron numa posição $\vec{x}$ desta região com uma energia igual a $-v_i$ (independente da posição dos outros íons); a energia total devida aos n_i íons que estão na região i será: $E_i = -n_i v_i$ e portanto a função geratriz se obtém de (3,6) por:

$$G_i(E) = \sum_E P(E) S^E = \sum_{n_i} P_i(n_i) S^{-n_i v_i} = (pS^{-v_i} + q)^{g_i} \quad (3.8)$$

A soma sobre as energias E , envolve apenas aquelas energias que podem ser resultado de um ou mais dos arranjos de íons que podem haver nos sitios possíveis. Vamos tomar o ponto considerado no cristal como sendo a nossa origem.

Escolhendo regiões pequenas de modo que v_i possa ser considerada constante em cada uma delas, então cada configuração de íons contribui com uma energia $E = -\sum_i n_i v_i$, e a função geratriz total será:

$$G(S) = \prod_i (ps^{-v_i} + q)^{g_i} = \exp \left[\sum_i g_i \ln(ps^{-v_i} + q) \right] \quad (3.9)$$

a soma em i é para tudo o cristal.

Já que a energia potencial v_i na origem é uma função somente de r , ou seja da distância do íon à origem, podemos assim escolher regiões que sejam cascas esféricas de largura dr . Então, teremos $v_i = v(r)$ e $g_i = 4\pi N_S r^2 dr$; substituindo-se a soma por uma integral teremos:

$$G(S) = \exp \left[4\pi N_S \int r^2 (\ln(ps^{-v(r)} + 1 - p)) dr \right] \quad (3.10)$$

Consideremos a aproximação de que p é pequeno comparado com 1, então:

$$\ln(ps^{-v} + 1 - p) = \ln(1 + p(s^{-v} - 1)) \approx p(s^{-v} - 1) \quad (3.11)$$

Na integral que aparece na eq. (3.10), devemos limitar o intervalo de integração de modo a excluir uma pequena esfera perto de $r=0$ onde não se tem sítios localizados. Para isto, faremos r variar entre r_0 e ∞ , sendo que, escolhendo para r_0 um valor que seja menor do que a metade da constante da rede a_0 , tomamos conta corretamente de todos os sítios das impurezas, sem excluir nenhum, e ao mesmo tempo eliminamos a divergência em $\vec{r}=0$ da integral na eq. (3.10). Substituindo-se a eq. (3.11) na eq. (3.10) e levando em conta que $p=N/N_s$ obteremos:

$$G(S) \approx \exp \left[4\pi N \int_{r_0}^{\infty} (s^{-v(r)} - 1) r^2 dr \right] = \int P(E) S^E dE \quad (3.12)$$

Na eq. (3.12) notamos que $G(S)$ é uma transformada de $P(E)$. Tomando $S \equiv e^{-t}$:

$$G(t) = \int_0^{\infty} P(E) e^{-Et} dE \equiv \vartheta(t) \quad (3.13)$$

deste modo temos que $G(t) \equiv \vartheta(t)$ é uma transformada de Laplace de $P(E)$.

Tomando a transformada inversa temos:

$$P(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u-i\infty}^{u+i\infty} \vartheta(t) e^{Et} dt$$

ou

$$P(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u-i\infty}^{u+i\infty} \left\{ \exp \left[4\pi N \int_{r_0}^{\infty} (e^{+vt} - 1) r^2 dr + Et \right] \right\} dt \quad (3.14)$$

O valor desta integral é independente do parâmetro u .

Nas aplicações, vai ser conveniente medir a energia E em relação ao seu valor médio $\bar{E}$. Da eq. (3.13) vemos que para deslocar a origem no espaço da energia por um valor de $\bar{E}$, deveremos então multiplicar $\vartheta(t)$ por $\exp(\bar{E}t)$.

Da eq. (3.12) podemos tirar a seguinte expressão para $\bar{E}$:

$$\bar{E} = G'(1) = -4\pi N \int_{r_0}^{\infty} r^2 v(r) dr \quad (3.15)$$

Portanto, multiplicando o lado direito da eq. (3.14) por $\exp(\bar{E}t)$ com $\bar{E}$ dado pela eq.(3.15) obteremos:

$$P(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u-i\infty}^{u+i\infty} \left\{ \exp \left[4\pi N \int_{r_0}^{\infty} r^2 (e^{vt} - 1 - vt) dr + Et \right] \right\} dt \quad (3.16)$$

Expandindo a exponencial e^{vt} e ficando sô com os termos de ordem quadrática:

$$\int_{r_0}^{\infty} r^2 (e^{vt} - 1 - vt) dr \approx \int_{r_0}^{\infty} \frac{r^2}{2} v^2 t^2 dr \quad (3.17)$$

Vamos agora tomar um potencial coulombiano blindado, com comprimento de blindagem L e com uma constante dielétrica ϵ , então:

$$v(r) = \frac{e^2}{\epsilon r} e^{-r/L} \quad (3.18)$$

Substituindo-se o potencial dado na eq.(3.18) na eq.(3.17) teremos:

$$\int_{r_0}^{\infty} r^2 (e^{vt} - 1 - vt) dr \approx t^2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{r^2}{2} \cdot \frac{e^4}{\epsilon^2 r^2} e^{-2r/L} dr \quad (3.19)$$

Resolvendo a integral chega-se a:

$$\int_{r_0}^{\infty} r^2 (e^{vt} - 1 - vt) dr \approx \frac{L e^4 t^2}{4 \epsilon^2} e^{-2r_0/L} \approx \frac{L e^4 t^2}{4 \epsilon^2} \quad (3.20)$$

Já que $\frac{r_0}{L} \ll 1$, e então $e^{-r_0/L} \approx 1$.

Substituindo-se a eq.(3.20) na eq.(3.16):

$$P(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u-i\infty}^{u+i\infty} \left\{ \exp \left[\frac{\pi N L e^4 t^2}{\epsilon^2} e^{-2r_0/L} + Et \right] \right\} dt \quad (3.21)$$

Agora, escreveremos a variável de integração como $t=u+i\tau$,

obtendo-se:

$$P(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{u-i\infty}^{u+i\infty} \left\{ \exp \left[\frac{\pi N L e^4}{\epsilon^2} (u^2 - \tau^2) + Eu + i \left(\frac{2\pi N L e^4 u}{\epsilon^2} + E \right) \tau \right] \right\} i d\tau \quad (3.22)$$

Já que o valor da integral é independente do parâmetro u , então, a fim de cancelar o termo imaginário, vamos escolher:

$$u = - \frac{\epsilon^2}{2\pi N L e^4} E, \text{ com isto a eq. (3.22) ficará:}$$

$$P(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{\pi N L e^4}{\epsilon^2} \left(\frac{\epsilon^4 E^2}{4\pi^2 N^2 L^2 e^8} - \tau^2 \right) - \frac{\epsilon^2 E^2}{2\pi N L e^4} \right] d\tau$$

ou

$$P(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- \frac{\epsilon^2}{4\pi N L e^4} E^2 - \frac{\pi N L e^4}{\epsilon^2} \tau^2 \right] d\tau \quad (3.23)$$

Fazendo-se a integral, notando que $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Ax^2} dx = \sqrt{\pi/A}$, teremos:

$$P(E) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon^2}{N L e^4}} \exp \left[- \frac{\epsilon^2}{4\pi N L e^4} E^2 \right] \quad (3.24)$$

Obtendo-se assim uma distribuição gaussiana para a função densidade de probabilidade $P(E)$.

Tendo conhecida a função de probabilidade, vamos substituí-la na eq.(3.4) para encontrar a densidade de estados. Fazendo-se isto, obteremos da eq.(3.4) o seguinte:

$$\rho'(E) = \frac{\sqrt{2} \pi^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} V \int_{-\infty}^E (E-u)^{1/2} \cdot \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon^2}{N L e^4}} \exp \left[- \frac{\epsilon^2}{4\pi N L e^4} u^2 \right] du \quad (3.25)$$

seja:

$$\xi^2 = \frac{\epsilon^2 u^2}{4\pi N L e^4} \quad \text{e} \quad \eta = \frac{\sqrt{4\pi N L e^4}}{\epsilon}, \text{ então}$$

a eq.(3.25) fica:

$$\rho'(E) = \frac{m^{*3/2} V}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\frac{2\eta}{\pi}} \int_{-\infty}^{E/\eta} \left(\frac{E}{\eta} - \xi \right)^{1/2} \exp(-\xi^2) d\xi \quad (3.26)$$

Dividindo-se por V teremos a densidade de estados por unidade de volume:

$$\rho^k(E) = \frac{m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2\eta} \quad y(E/\eta) \quad \text{onde:} \quad (3.27)$$

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x (x-\xi)^{1/2} e^{-\xi^2} d\xi \quad (3.28)$$

$y(x)$ é a chamada função de Kane. Note-se que o parâmetro η depende do comprimento de blindagem L através da relação:

$$\eta = \sqrt{\frac{4\pi N L e^4}{\epsilon}} \quad (3.29)$$

Na figura 3.1 mostra-se o comportamento da função de Kane $y(x)$ dada na eq.(3.28). Podemos ver do comportamento desta função, que para altas energias $\rho \sim E^{1/2}$, ou seja o correspondente à banda parabólica. Para baixas energias $\rho \sim \exp(-E^2/\eta^2)$ dando assim uma cauda gaussiana, a qual é a consequência de se ter flutuações da energia potencial gaussianas.

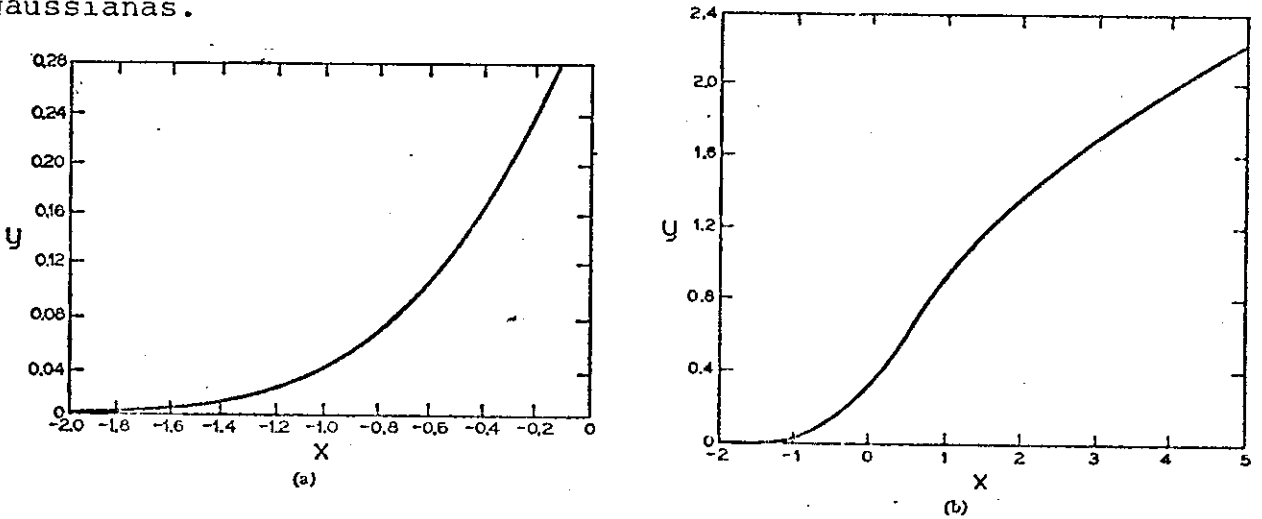


Fig. 3.1 . Variação da função de Kane $y(x)$, como função do parâmetro x . a) no intervalo $-2 < x < 0$; b) no intervalo $-2 < x < 5$.⁽²¹⁾

Este modelo de Kane baseado no tratamento de Thomas-Fermi não leva em conta a energia cinética de localização. Como foi mostrado por Hwang⁽¹⁹⁾, isto dá lugar a que a teoria de Kane prediga uma densidade de estados na cauda bem maior do que a real. Na fig.(3.2) mos-

mostramos a densidade de estados em função da energia da banda de condução, calculada usando o modelo de Kane.

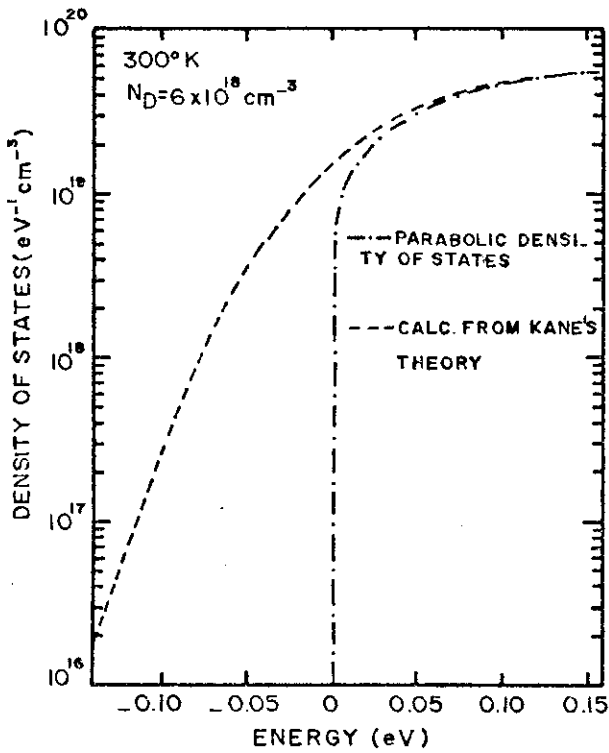


Fig. 3.2 . Densidades de estados na banda de condução calculadas, usando a teoria de Kane, e a correspondente às bandas parabólicas, para uma concentração de doadores de $N_D = 6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, à temperatura $T = 300 \text{ }^\circ\text{K}$.⁽¹⁹⁾

3.2 Modêlo de Halperin-Lax⁽²²⁾

Em 1966, Halperin e Lax desenvolveram uma teoria na qual, usando um cálculo variacional e levando em conta a energia cinética de localização, calculava-se a forma analítica da densidade de estados para a parte de baixas energias numa banda de impurezas de alta densidade.

A expressão obtida por Halperin e Lax para a densidade de estados, válida para a parte de baixa energia nas caudas é a seguinte:

$$\rho^{\text{HL}}(E) = \left(\frac{E_Q^3}{\xi^2} Q^3 \right) a(v) \exp \left[- \left(E_Q^2 / 2\xi \right) b(v) \right] \quad (3.30)$$

Nesta equação, $a(v)$ e $b(v)$ são funções tabeladas no artigo de Halperin e Lax⁽²²⁾; na fig. (3.3) mostram-se os gráficos destas funções.

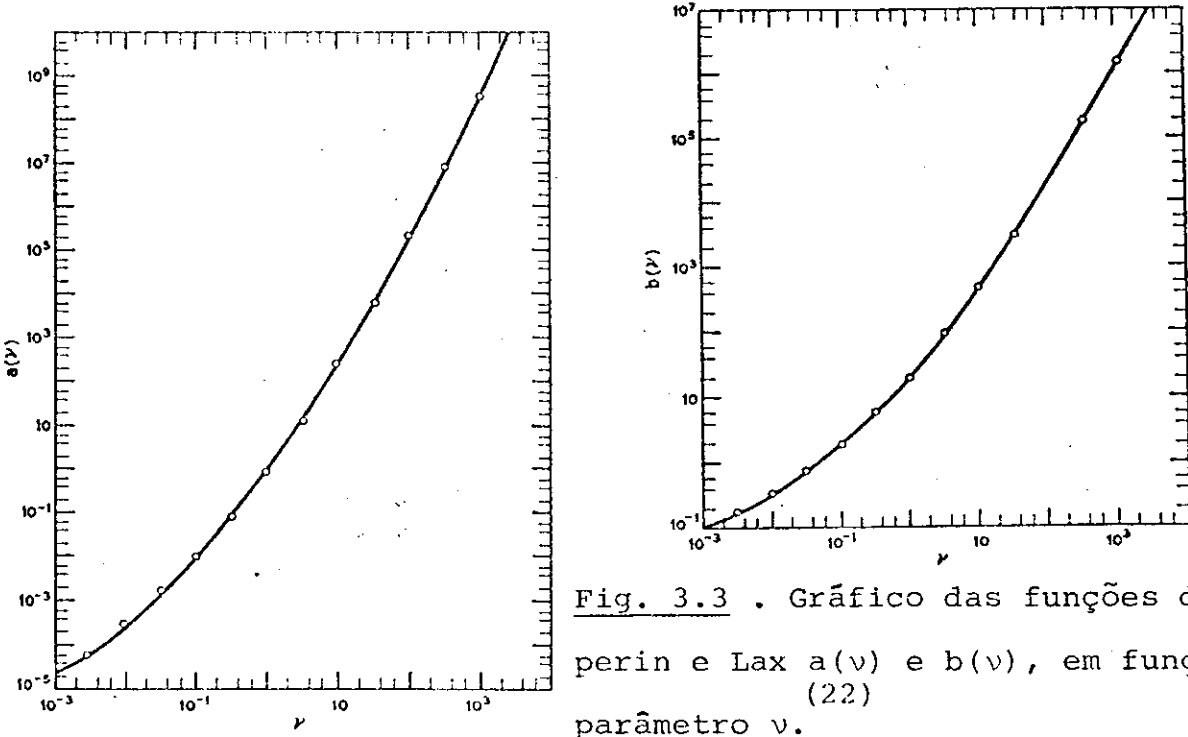


Fig. 3.3 . Gráfico das funções de Halperin e Lax $a(v)$ e $b(v)$, em função do parâmetro v .

Na eq.(3.30) Q é o inverso do comprimento de blindagem L , ou seja: $Q=L^{-1}$. E_Q é a energia que corresponderia a um momento igual a Q , isto é:

$$E_Q = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m^*} \quad (3.31)$$

O parâmetro ξ dá a variação quadrática média do potencial (suposto coulombiano blindado), e é dado por:

$$\xi = \frac{2\pi e^4}{Q \epsilon^2} (N_A + N_D) \quad (3.32)$$

A variável v que aparece nas funções $a(v)$ e $b(v)$ é a energia adimensional:

$$v = \frac{E_0 - E}{E_Q} \quad (3.33)$$

a qual adota as formas:

$$v_c = \frac{E_c + \bar{V} - E}{E_Q} \quad v_v = \frac{E - (E_v + \bar{V})}{E_Q} \quad (3.34)$$

segundo se trate da cauda na banda de condução ou na banda de valência respectivamente. Nos dois casos $\bar{V}$ é o valor médio do potencial, que tem a expressão:

$$\bar{V} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon Q^2} (N_A - N_D) \quad (3.35)$$

Nas equações (3.34) e (3.35), N_A é a concentração de impurezas aceitadoras e N_D é a concentração de impurezas doadoras no cristal. Na eq.(3.31) usaremos a massa efetiva dos buracos ou a dos elétrons segundo estejamos considerando a banda de valência ou de condução, respectivamente.

Como pode ser notado examinando a eq. (3.30) junto com a figura 3.3, a densidade de estados obtida é da forma: $\rho(E) \sim \exp[-\beta(E)]$, onde $\beta(E)$ varia desde $|E|^{1/2}$ até E^2 .

De acordo com Halperim e Lax⁽²²⁾, a expressão para a densidade de estados dada na eq.(3.30) só é válida a partir de uma certa energia E' na parte de baixa energia da cauda, sendo esta energia aquela para a qual:

$$b(v)|_{E=E'} = 6 \frac{\xi}{E_Q^2} \quad (3.36)$$

de modo que só para energias $E \ll E'$ podemos usar a expressão dada na eq. (3.30).

Esta limitação nos deixa na situação de ter uma região de energias $E' \leq E \leq E_c$ (no caso da banda de condução) para a qual não temos uma expressão para a densidade de estados. Na fig. 3.4 mostramos isto graficamente.

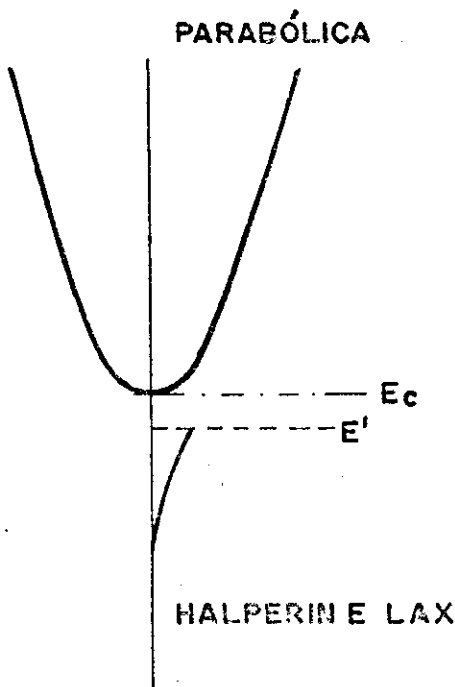


Fig. 3.4 . Mostra-se a cauda de baixa energia, para a qual é válida a eq.(3.30). Na faixa de energias entre E' e E_c , não se conhece a forma da densidade de estados.

No desenvolvimento de seu modelo, Halperin e Lax fazem duas suposições básicas:

- i) A blindagem é linear no que diz respeito aos potenciais individuais de cada impureza.
- ii) A distribuição aleatória das impurezas segue a estatística gaussiana.

No item i), entende-se por blindagem linear, o fato de que as flutuações do potencial $V(\vec{x})$ no cristal possam ser expressadas como uma superposição de todos os potenciais blindados de cada impureza.

O critério⁽²²⁾ para saber quando a aproximação de blindagem linear, é válida, é o de que a raiz quadrática média das flutuações do potencial $V(\vec{x})$ seja pequena comparada com os quasi-níveis de Fermi dos elétrons ou buracos; portanto a aproximação de blindagem linear será válida quando:

$$\xi^{1/2} < E_{f_e} - E_c \quad (3.37)$$

$$\text{ou: } \xi^{1/2} < - (E_{f_h} - E_v)$$

A fim de que a estatística gaussiana seja aplicável às impurezas, o número desses centros de impureza num raio igual ao comprimento de blindagem L , deve ser grande comparado com 1⁽²²⁾.

Halperin e Lax⁽²²⁾ dão uma expressão para as energias mínimas dos elétrons e buracos, abaixo das quais, a densidade de estados na cauda, calculada usando a estatística gaussiana para a distribuição de impurezas, não é mais válida; a expressão no caso dos elétrons é:

$$- (E - E_c) < E_{Qc} \frac{\left[(N_A + N_D) Q^{-3} \right]^{2/3}}{\left\{ 1 - \left[(N_A + N_D) Q^{-3} \right]^{1/3} \right\}} \quad (3.38)$$

e para os buracos:

$$E - E_V < E_{Q_V} \frac{\left[(N_A + N_D) Q^{-3} \right]^{2/3}}{\left\{ 1 - \left[(N_A + N_D) Q^{-3} \right]^{1/3} \right\}} \quad (3.39)$$

As eqs.(3.37), (3.38) e (3.39) nos fornecem, assim, as condições nas quais podemos usar o modelo de Halperin e Lax para descrever as caudas nas bandas de semicondutores muito dopados. Então, dependendo da dopagem, da injeção e da temperatura para uma dada amostra, conhecer-se-á o comprimento da blindagem Q^{-1} , assim como E_Q , podendo então saber se é aplicável a teoria de Halperin e Lax nestas condições.

3.3 Comprimento de Blindagem

Como podemos notar das eqs.(3.27), (3.29) e (3.30), no cálculo da densidade de estados, seja pelo método de Kane ou pelo método de Halperin e Lax, é importante a determinação do comprimento de blindagem $L=Q^{-1}$. Deve-se lembrar que a blindagem é originada igualmente pelos portadores na banda de condução e pelos portadores na banda de valência. No caso quando se tem portadores em várias bandas, podemos escrever:

$$Q^2 = \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2 \quad (3.40)$$

onde Q_{α}^2 é a contribuição da banda α .

Trabalhando na aproximação de Fermi-Thomas⁽²⁴⁾ para estimar a carga blindada, encontra-se que a contribuição da banda de condução ao comprimento de blindagem é dada pela expressão:

$$Q_c^2 = \frac{4 \pi e^2}{\epsilon} \int \rho_c(E) dE \left[- \frac{\partial f_c(E)}{\partial E} \right] \quad (3.41)$$

onde $\rho_c(E)$ é a densidade de estados na banda de condução (incluindo a cauda da banda) e $f_c(E)$ é o fator de ocupação de Fermi, que dá a probabilidade de ocupação do estado de energia E . Expressões semelhantes se tem para as bandas de valência com seus respectivos parâmetros.

Para altas temperaturas, quando é aplicável a estatística de Maxwell-Boltzmann, a eq.(3.41) toma a forma:

$$Q^2 = \frac{4\pi e^2 n}{\epsilon kT} \quad (3.42)$$

onde n é a concentração de elétrons livres.

Na eq.(3.41), nota-se que o comprimento de blindagem depende da densidade de estados $\rho_c(E)$. Porém, como já foi dito, $\rho_c(E)$ depende do comprimento de blindagem Q^{-1} . Portanto, o processo de determinação da densidade de estados $\rho(E)$ será um processo auto-consistente com Q^{-1} , como mostraremos no capítulo oito.

C A P Í T U L O 4

BANDAS PARABÓLICAS

Para os lasers de semicondutor, nos quais o semicondutor do qual é feita a região ativa do dispositivo, é dopado e, em geral, compensado, se tem a existência de níveis doadores e aceitadores na banda proibida do semicondutor.

Numa primeira aproximação, vamos considerar que as bandas no semicondutor sejam parabólicas, e também a presença de níveis discretos de impurezas, tanto doadoras como aceitadoras. Como podemos identificar facilmente da figura 4.1, teremos 4 possíveis transições radiativas, as quais podem originar as emissões encontradas nos lasers de semicondutor.

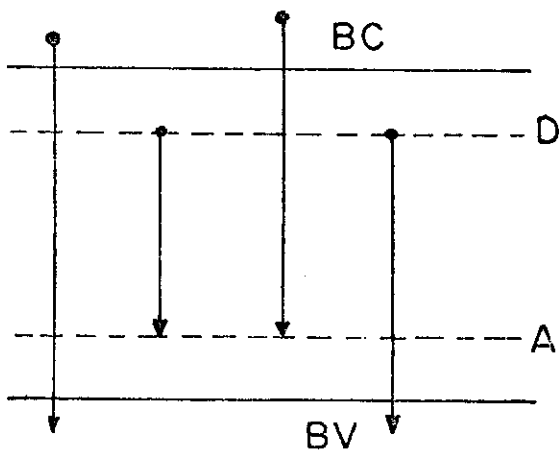


Fig. 4.1 . Transições radiativas possíveis na presença de níveis discretos de impurezas.

As transições radiativas possíveis serão:

- 1) transição banda-banda.
- 2) transição banda de condução-doador.
- 3) transição doador - banda de valência.
- 4) transição doador - aceitador.

Para estes tipos de transições, apenas para a transição banda-banda é fisicamente correto o uso de uma densidade de estados do tipo banda parabólica. Nos outros 3 casos que envolvem a presença de impurezas, o tratamento correto seria o de usar, para a banda, uma densidade de estados do tipo banda parabólica e para a impureza (doadora ou aceitadora), uma densidade de estados do tipo função delta, se só se tem um nível de impurezas; ou uma função para a densidade de estados do tipo gaussiano, se os níveis de impurezas formam uma "banda mais larga". Porém, na nossa aproximação, nós vamos fazer uso da densidade de estados de banda parabólica para tratar as quatro possíveis transições radiativas, e o efeito da presença das impurezas vai entrar ao se calcular o elemento de matriz das transições; já que para os níveis de impurezas serão usadas funções de onda localizadas do tipo hidrogenóide, e para as bandas, funções de onda do tipo onda plana. Ainda que este não seja o tratamento correto, é uma aproximação razoável ao problema de calcular as emissões espontânea e estimulada, assim como a absorção para materiais como o GaAs. Este tipo de aproximação foi usado por Lasher e Stern⁽²⁵⁾ para o cálculo teórico da dependência com a temperatura da corrente limiar nos lasers de GaAs; tendo eles obtido uma concordância satisfatória entre os resultados teóricos e experimentais tanto para a corrente limiar, assim como também para a largura de linha da emissão espontânea e para a posição do pico de energia da emissão estimulada, em relação ao pico da emissão espontânea. Em nossos cálculos, como veremos mais na frente na seção de resultados, a absorção obtida para transições do tipo doador-banda de valência coincide bastante bem com a curva experimental para energias maiores à energia da banda proibida.

Continuando com o nosso cálculo, nesta primeira aproximação, a fim de calcular o coeficiente de absorção $\alpha(E)$ e as razões de recombinação espontânea e estimulada usaremos, no caso das bandas parabólicas, densidades de estados dadas por:

$$\rho_C^{\text{PAR}}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2 m_C}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad (4.1)$$

$$\rho_V^{\text{PAR}}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2 m_V}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_V - E)^{1/2} \quad (4.2)$$

onde m_C e m_V são as massas efetivas no fundo e no topo das bandas de condução e valência respectivamente.

4.1 Transição Banda-Banda

No caso do semiconductor puro, ou seja, quando as densidades de impurezas tanto doadoras (N_D), assim como aceitadoras (N_A) são muito pequenas ($\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), as transições radiativas vão corresponder a transições entre as bandas de condução e valência.

Neste caso, para calcular o elemento de matriz $|M_{IJ}|_{av}^2$ para esta transição, as funções de onda $|I\rangle$ e $|J\rangle$ para as bandas, serão funções de onda de Bloch da forma:

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} U_{C,k_C}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_C \cdot \vec{r}} \quad (4.3)$$

$$|J\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} U_{V,k_V}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_V \cdot \vec{r}} \quad (4.4)$$

A expressão para $|M_{IJ}|_{av}^2$ foi dada na eq.(2.7) e tem a forma:

$$|M_{IJ}|_{av}^2 = \sum_{\lambda=1,2} \int |\langle J | e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{e}_{\lambda} \cdot \vec{p} | I \rangle|^2 \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (4.5)$$

Assim, substitutindo-se as funções de onda $|I\rangle$ e $|J\rangle$ dadas nas eqs.(4.3) e (4.4) na eq.(4.5), pode-se calcular $|M_{IJ}|_{av}^2$. Não vamos fazer aqui este cálculo, o qual é feito em detalhe nos apêndices A e C. O resultado obtido para o valor médio do elemento de matriz, sobre as direções do vetor de onda do fóton $\vec{k}$ e sobre

suas possíveis polarizações, é o seguinte:

$$|M_{IJ}|_{av}^2 \equiv |M_{cv}|_{av}^2 = \frac{m E_g}{12} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left[\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right] \delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v} \quad (4.6)$$

onde m é a massa de elétron, m_c é a massa efetiva dos elétrons na banda de condução, E_g é a energia da banda proibida e Δ é a energia de separação entre a banda de valência $j=3/2$ e a banda de valência $j=1/2$, provocada pela interação spin-órbita.

Note-se que na eq.(4.6) aparece a função delta de Kronecker $\delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v}$, o que implica na conservação do vetor de onda do elétron (ou do buraco) na transição. Portanto, as transições banda-banda são transições "verticais", ou transições nas quais se cumpre a regra de seleção no vetor de onda do elétron (ou do buraco).

Uma vez conhecido o valor médio do elemento de matriz, sobre as direções do vetor de onda do fóton $\vec{k}$ e sobre suas polarizações, para as transições banda-banda, e, já que conhecemos também a forma da densidade de estados dada nas eqs.(4.1) e (4.2), temos todos os elementos para calcular as razões de recombinação espontânea e estimulada. No apêndice A é feito o cálculo detalhado destas emissões, obtendo-se lá que a expressão para a razão de recombinação espontânea para transições banda-banda, também chamadas de transições "com regra de seleção", é da forma:

$$\begin{aligned} r_{sp}^{CR}(E) &= \frac{N e^2 E E_g}{3 m \pi^2 \hbar^5 c^3} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left[\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right] (2m^*)^{3/2} \times \\ &\times (E - E_g)^{1/2} \left\{ 1 + \exp \left[- \frac{m_v}{m_c + m_v} \left(\frac{E - E_g}{kT} \right) - \frac{F_c}{kT} \right] \right\}^{-1} \\ &\times \left\{ 1 + \exp \left[\frac{m_c}{m_c + m_v} \left(\frac{E - E_g}{kT} \right) - \frac{F_v}{kT} \right] \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde F_c é o quasi-nível de Fermi para os elétrons, medido a partir do fundo da banda de condução; F_v é o quasi-nível para os buracos medido a partir do topo da banda de valência; m^* é a massa reduzida que é definida como:

$$m^* = \frac{m_c m_v}{m_c + m_v} \quad (4.8)$$

sendo m_c e m_v as massas efetivas dos elétrons e buracos nas bandas de condução e valência respectivamente. Repare-se que a eq.(4.7) dá uma expressão analítica para a razão de recombinação espontânea com regra de seleção.

A razão de recombinação estimulada, pode ser facilmente encontrada fazendo-se uso da sua relação com a emissão espontânea, que já foi dada no capítulo 2, e que é da forma:

$$r_{st}^{CR}(E) = \left[1 - \exp\left(\frac{E - E_g - F_c - F_v}{kT}\right) \right] r_{sp}^{CR}(E) \quad (4.9) \checkmark$$

Para se calcular o coeficiente de absorção, faremos uso da fórmula:

$$\alpha^{CR}(E) = - \frac{\pi^2 \hbar^3 c^2}{N^2 E^2} r_{st}^{CR}(E) \quad (4.10)$$

Quando se tem mais de uma banda de valência, como acontece com o GaAs, a razão de recombinação espontânea total será uma soma de termos como o da eq.(4.7), um para cada banda de valência.

4.2 Transição Banda de Condução-Aceitador

Neste caso, as funções de onda dos estados que entram na transição serão: uma função de onda de Bloch para a banda de condução, que tem a forma:

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} U_{c,k_c}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_c \cdot \vec{r}} \quad (4.11)$$

e uma função de onda localizada do tipo hidrogenóide para a impureza aceitadora:

$$|J\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_v^3}} e^{-r/a_v} U_{v,\vec{k}_v}(\vec{r}) \quad (4.12)$$

onde a_v é o raio de Bohr da impureza aceitadora, onde:

$$a_v = \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 m_v} \quad (4.13)$$

sendo ϵ a constante dielétrica do material. Conhecidas as funções de onda $|I\rangle$ e $|J\rangle$ dadas nas eqs. (4.11) e (4.12), podemos substituí-las na eq. (4.5) para encontrar a média do elemento de matriz sobre as direções do vetor de onda da radiação $\vec{k}$ e sobre as suas polarizações. O cálculo detalhado é feito no apêndice C, e o resultado a que se chega é:

$$|M_{CA}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} (1 + a_v^2 k_c^2)^{-4} \left\{ \frac{mE_g}{12} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right) \right\} \quad (4.14)$$

que é a média do elemento de matriz para as transições do tipo banda de condução-aceitador. Observe-se que agora na eq. (4.14) não aparece mais a delta de Kronecker que nos dava a regra de seleção no vetor de onda do elétron na eq. (4.6). É por isto que se denomina às transições banda-impureza e impureza-impureza de "transições sem regra de seleção".

Agora, podemos usar a expressão para $|M_{CA}|_{av}^2$ dada na

eq. (4.14) junto com a densidade de estados dada nas eqs. (4.1) e (4.2) para achar a razão de recombinação espontânea para transições banda de condução-aceitador. O cálculo é feito no apêndice B, e a expressão encontrada é:

$$r_{sp}^{CA}(E) = \frac{128N}{3\hbar^2 c^3 \pi^3} \frac{m_C^{1/2} \epsilon^3}{e^4 m_V^{3/2}} \left(1 - \frac{m_C}{m}\right) E - E_g \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta}\right) \cdot \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \cdot \left[1 + \frac{2\epsilon^2 \hbar^2 m_C}{e^4 m_V^2} x\right]^{-4} \cdot \left\{1 + \exp\left(\frac{x - F_C}{kT}\right)\right\}^{-1} \cdot \left\{1 + \exp\left(\frac{x + E_g - E + F_V}{kT}\right)\right\} dx \quad (4.15)$$

Na eq. (4.15), a expressão para a razão de recombinação $r_{sp}^{CA}(E)$ não é mais direta, senão que fica uma integral a qual tem que ser calculada numericamente.

4.3 Transição Doador - Banda de Valência

Este caso é praticamente igual ao anterior, só que agora, a função de onda de Bloch é para a banda de valência:

$$|J\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} U_{v,k_v}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_v \cdot \vec{r}} \quad (4.16)$$

e a função de onda localizada do tipo-hidrogenóide vai ser para as impurezas doadoras:

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_c^3}} e^{-r/a_c} U_{c,k_c}(\vec{r}) \quad (4.17)$$

onde a_c é neste caso o raio de Bohr dos doadores, e tem a forma:

$$a_c = \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 m_C} \quad (4.18)$$

Com estas funções de onda, o cálculo do elemento de matriz é igual do que no caso anterior; os detalhes estão no apêndice C, obtendo-se como resultado:

$$|M_{DV}|_{av}^2 = \frac{64 \pi a_c^3}{V} \left(1 + a_c^2 k_v^2\right)^{-4} \left\{ \frac{m E_g}{12} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right) \right\} \quad (4.19)$$

Seguindo o procedimento, pode-se já fazer o cálculo da razão de emissão espontânea para transições doador-banda de valência $r_{sp}^{DV}(E)$; os detalhes do cálculo estão no apêndice B, sendo que a expressão a que se chega para $r_{sp}^{DV}(E)$ é:

$$r_{sp}^{DV}(E) = \frac{128 N m_v^{3/2} \epsilon^3}{3 \hbar^2 c^3 \pi^3 e^4 m_c^{5/2}} \left(1 - \frac{m_c}{m}\right) E E_g \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{3}{2}\Delta} \right) \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{2\epsilon^2 \hbar^2 m_v}{e^4 m_c^2} (E-E_g-x) \right\}^{-4} dx \quad (4.20)$$

$$\cdot \left\{ 1 + \exp \left(\frac{x - F_c}{kT} \right) \right\}^{-1} \cdot \left\{ 1 + \exp \left(\frac{x + E_g - E + F_v}{kT} \right) \right\}^{-1} dx$$

4.4 Transição Doador-Aceitador

Para tratar as transições do tipo impureza-impureza, vamos considerar as funções de onda $|I\rangle$ e $|J\rangle$ como funções de onda localizadas do tipo hidrogenóide, isto é:

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_c^3}} e^{-r/a_c} U_{c,k_c}(\vec{r}) \quad (4.21)$$

$$|J\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_v^3}} e^{-r/a_v} U_{v,k_v}(\vec{r}) \quad (4.22)$$

Tendo estas funções de onda, podemos fazer o cálculo do valor médio do elemento de matriz sobre as direções do vetor de onda do fóton $\vec{k}$ e sobre suas polarizações, os detalhes do cálculo estão no apêndice C, o resultado obtido é:

$$|M_{DA}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} \cdot \frac{(1+7\alpha+17\alpha^2+7\alpha^3+\alpha^4)}{(1+\alpha)^7} \cdot \left\{ \frac{mE_g}{12} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left(\frac{E_g+\Delta}{E_g+\frac{2}{3}\Delta} \right) \right\} \quad (4.23)$$

onde $\alpha = \frac{a_c}{a_v}$ é a razão entre os raios de Bohr para elétrons e buracos respectivamente. Devemos ressaltar o fato de que para este tipo de transições, o elemento de matriz é constante e não depende da energia da transição.

Conhecendo $|M_{DA}|_{av}^2$, estamos em possibilidade de calcular a razão de emissão espontânea para transições do tipo doador-aceitador $r_{sp}^{DA}(E)$. No apêndice B se dão os detalhes do cálculo, o resultado obtido têm a forma:

$$r_{sp}^{DA}(E) = \frac{128N m_c^{1/2} \epsilon^3}{3\hbar^2 C^3 \pi^3 e^4 m_v^{3/2}} \left(1 - \frac{m_c}{m} \right) E E_g \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right) \cdot \frac{(1+7\alpha+17\alpha^2+7\alpha^3+\alpha^4)}{(1+\alpha)^7} \cdot \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \cdot \left\{ 1 + \exp\left(\frac{x - E_c}{kT}\right) \right\}^{-1} \cdot \left\{ 1 + \exp\left(\frac{x+E_g-E+F_v}{kT}\right) \right\}^{-1} dx \quad (4.24)$$

As respectivas razões de recombinação estimulada e os respectivos espectros do coeficiente de absorção α para cada caso tratado serão calculados usando as eqs.(4.9) e (4.10) tal como foi feito no caso das transições com regra de seleção.

C A P Í T U L O 5

APROXIMAÇÃO PARA A DENSIDADE DE ESTADOS DE BANDAS DE IMPUREZAS

No capítulo 3 nós falamos sobre os dois modelos mais usados para a obtenção de uma descrição quantitativa das densidades de estados nas bandas de semicondutores com uma alta concentração de impurezas. Como foi notado já no capítulo 3, o modelo das flutuações do potencial de Kane não leva em conta a energia cinética de localização, o qual resulta numa sobrestimação na extensão das caudas das bandas de condução e valência. Este fato foi demonstrado por Hwang⁽¹⁹⁾ ao comparar a densidade de estados resultante dos cálculos de Halperin e Lax, os quais incluem apropriadamente a energia cinética de localização, com a da teoria de Kane, como se mostra na fig. 5.1.

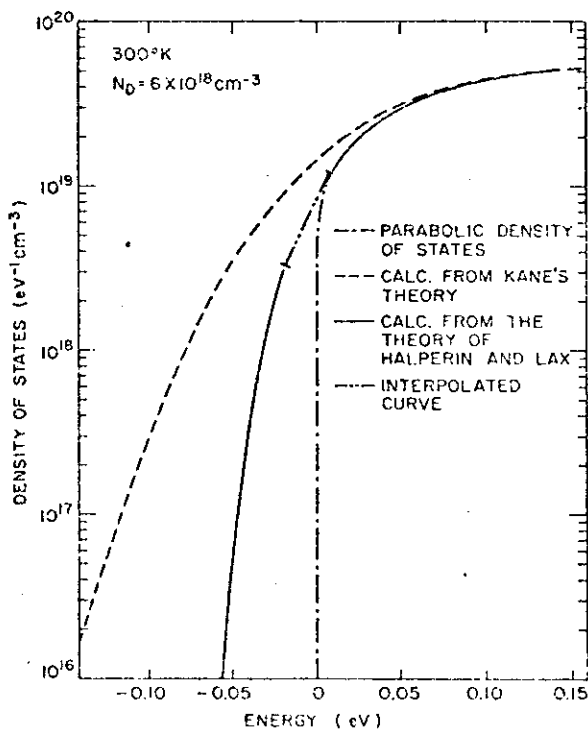


Fig. 5.1 . Densidades de estados para a banda de condução, calculadas para os modelos: parabólico, da Teoria de Kane, e do cálculo de Halperin e Lax, usando uma concentração de doadores: $N_D = 6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. ⁽¹⁹⁾

Portanto, para nós termos uma boa descrição quantitativa da densidade de estados na cauda de uma banda, teremos que usar os resultados de Halperin e Lax. Mas a teoria desenvolvida por eles só é válida numa determinada faixa de energias, a qual corresponde ao que é chamado de "região de baixa energia das caudas" a qual começa para energias menores à energias para a qual se cumpre:

$$b(v) = 6 \frac{\xi}{E_Q^2} \quad (5.1)$$

na notação de Halperin e Lax já dada no capítulo 3.

Uma medida típica na cauda de baixa energia corresponde à energia que satisfaz:

$$b(v) = 10 \frac{\xi}{E_Q^2} \quad (5.2)$$

Com estes resultados, nós nos encontramos com o seguinte quadro: conhecemos a densidade de estados (Halperin e Lax) para energias menores àquela que cumpre $b(v)=6\xi/E_Q^2$, assim como também a densidade de estados (parabólicas) para a parte não perturbada da banda, o qual corresponde no caso da banda de condução, a energias maiores do que E_c , que é a energia do fundo da banda de condução não perturbada pelas impurezas (veja a fig. 3.4).

A fim de obter uma descrição completa da densidade de estados nas bandas que inclua a região de baixa energia das caudas, a região de transição entre cauda e parte parabólica e a região não perturbada da banda, precisaremos fazer algum tipo de aproximação que nos permita usar uma só função para estas três regiões.

Para isto, faremos uso da aproximação à densidade de estados originalmente feita por Stern⁽²⁶⁾ no cálculo de absorção ótica do silício amorfo. Do capítulo 3, sabemos que a teoria de Kane dá como resultado uma função de densidade de estados do tipo:

$$\rho_c^k(E) = \frac{m_c^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2\eta} \quad y(E-E_c/\eta_c) \quad (5.3)$$

no caso da banda de condução. Onde y é uma função da forma:

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x (x - \xi)^{1/2} e^{-\xi^2} d\xi \quad (5.4)$$

e η_c é um parâmetro relacionado à raiz quadrática média das flutuações do potencial V_{rms} por:

$$\eta = \sqrt{2} V_{rms} \quad (5.5)$$

$$\text{com: } V_{rms} = e^2 \sqrt{2\pi (N_D + N_A) L} \quad (5.6)$$

sendo L o comprimento de blindagem.

Mas, já que esta densidade dá valores nas caudas bem maiores que os obtidos com Halperin e Lax; Stern sujeita os resultados obtidos por Kane aos resultados de Halperin e Lax na cauda de baixa energia, ajustando o parâmetro η_c que aparece na eq.(5.3), de modo que a densidade de estados obtida usando a teoria de Kane seja igual à densidade de estados calculada com o modelo de Halperin e Lax para um valor particular da energia.

Para fazer o ajuste é escolhida a energia correspondente a um ponto típico na cauda de baixa energia onde os resultados de Halperin e Lax são válidos. Esta energia (E_1^c) é aquela que satisfaz:

$$b \left(\frac{E_c + \bar{V} - E_1^c}{E_Q} \right) = 10 \frac{\xi}{E_Q^2} \quad (5.7)$$

na notação de Halperin e Lax do capítulo 3. Este ajuste dá como resultado uma diminuição na cauda original predita pela função de Kane da eq.(5.3).

Uma vez encontrado o valor de η_c , a densidade de estados

resultante do uso deste valor na eq.(5.3), nos proporciona uma boa aproximação à densidade de estados de Halperin e Lax para baixas energias na cauda da banda, e à densidade parabólica para altas energias já dentro da parte não perturbada da banda. Na figura 5.2 mostramos as densidades de estados por este método calculadas junto com as obtidas usando: Halperin e Lax e densidade parabólica. Esta aproximação à densidade de estados aqui discutida foi usada para as bandas de condução e valência.

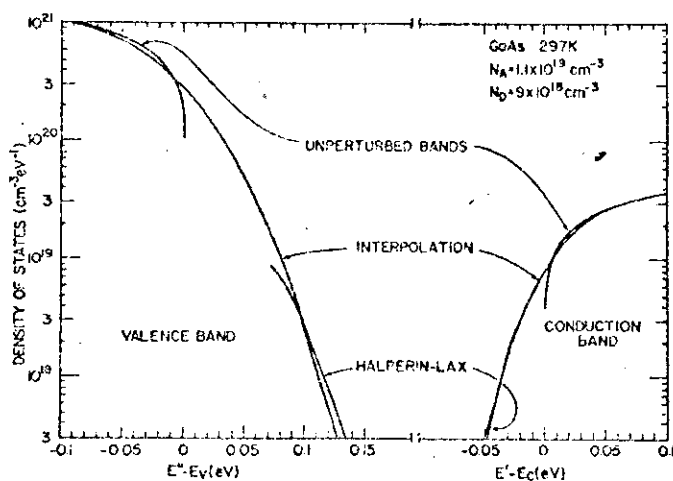


Fig.5.2 . Densidades de estados nas bandas de condução e valência para o GaAs tipo p, para uma concentração de buracos de $N_A - N_D = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. As curvas superiores mostram as densidades de estados nas bandas não perturbadas, as curvas inferiores mostram as densidades de estados nas caudas das bandas calculadas da teoria de Halperin e Lax; e as curvas que as unem são as funções de Kane aproximadas (Casey). (27)

C A P Í T U L O 6

APROXIMAÇÃO AO ELEMENTO DE MATRIZ

Para o cálculo da absorção ou das razões de emissão espontânea ou estimulada é fundamental o conhecimento do elemento de matriz que vai nos proporcionar a probabilidade de ocorrência do tipo de transição considerada.

Na aproximação das bandas parabólicas, foram usadas funções de onda que descreviam, ou um estado de banda caracterizado por funções de onda do tipo de ondas planas, ou um estado localizado descrito por uma função de onda do tipo hidrogenóide.

Já quando usamos, para descrever as densidades de estados, o modelo de bandas com caudas, nós vamos ter os dois extremos opostos de transições entre estados descritos só por ondas planas e transições entre estados localizados descritos só por funções hidrogenóides. Para transições de alta energia, os estados entre os quais se efetuam as ditas transições serão estados dentro da parte parabólica das bandas, onde o efeito das flutuações do potencial será pequeno e portanto, os estados poderão ser representados por funções de onda do tipo onda plana. No limite oposto, para transições de baixa energia, os estados entre os quais ocorrem estas transições vão corresponder a estados situados dentro das caudas das bandas, ficando numa situação semelhante a quando se tinham níveis discretos de impurezas, ou seja os estados serão representados por funções de onda do tipo hidrogenóide.

No que diz respeito à regra de seleção no vetor de onda do elétron $\vec{k}$, no caso do modelo de bandas com caudas apresentam-se os dois extremos: para transições de alta energia entre estados descritos por funções de onda do tipo onda plana, se cumpre a

regra de seleção no vetor de onda $\vec{k}$; por outro lado, para transições de baixa energia entre os estados localizados nas caudas das bandas, a regra de seleção no vetor de onda $\vec{k}$ não poderá ser aplicada porque as flutuações do potencial para as energias nas caudas destroem a simetria translacional do cristal, dando origem a uma deformação nas autofunções dos estados correspondentes àquelas energias das caudas, de modo que estas autofunções não serão mais ondas planas.

Assim então, a fim de ter uma melhor aproximação para descrever este tipo de comportamentos, vamos fazer uso da aproximação de Stern⁽²⁶⁾ para obter a forma das funções de onda que serão usadas no cálculo do elemento de matriz. A função de onda aproximada que usamos é o produto de uma função de onda envolvente na aproximação da massa efetiva, vezes a função de onda no fundo da banda. Então, nossas funções de onda terão a forma⁽²⁶⁾:

$$\psi_c(\vec{r}) = \left[\frac{\beta_c^3}{\pi} \right]^{1/2} \exp \left[i \vec{k}_c \cdot \vec{r} - \beta_c \left| \vec{r} - \vec{r}_{c_i} \right| \right] U_{c, \vec{k}_c}(\vec{r}) \quad (6.1)$$

$$\psi_v(\vec{r}) = \left[\frac{\beta_v^3}{\pi} \right]^{1/2} \exp \left[i \vec{k}_v \cdot \vec{r} - \beta_v \left| \vec{r} - \vec{r}_{v_i} \right| \right] U_{v, \vec{k}_v}(\vec{r}) \quad (6.2)$$

onde β_c e β_v caracterizam a localização do estado na banda de condução ou valência respectivamente, $\vec{k}_c$ e $\vec{k}_v$ são os vetores de onda associados às extremidades das bandas e $\vec{r}_{c_i}$ e $\vec{r}_{v_i}$ são os pontos onde os estados estão centrados. $U_{c, \vec{k}_c}$ e $U_{v, \vec{k}_v}$ são as funções de Bloch periódicas correspondentes.

Para calcular os parâmetros $\vec{k}_c$ e β_c na função de onda dada na eq.(6.1) para um estado de energia E' na banda de condução perturbada, definimos uma energia E_c^* de modo que o número de estados com energias menores que E_c^* na parte não perturbada (parabólica) da densidade de estados ($\rho_c^{PAR}(E)$) seja igual ao número de estados com energias menores que E' na densidade de estados real (com caudas, $\rho_c^k(E)$). Ou seja, a energia E_c^* deve satisfazer a equação:

$$\int_{-\infty}^{E'} \rho_C^k(E) dE = \int_{E_C}^{E_C^*} \rho_C^{\text{PAR}}(E) dE \quad (6.3)$$

Para os parâmetros $\vec{k}_V$ e β_V da banda de valência, fazemos uma definição semelhante; para um estado de energia E'' na banda de valência perturbada, procuramos uma energia E_V^* tal que se cumpra a condição:

$$\int_{E''}^{\infty} \rho_V^k(E) dE = \int_{E_V^*}^{E_V} \rho_V^{\text{PAR}}(E) dE \quad (6.4)$$

Deve-se lembrar que nas eqs.(6.3) e (6.4), as densidades de estados reais ρ_C^k e ρ_V^k são as densidades de estados de Kane modificadas segundo o que já foi explicado no capítulo 5.

Na fig.6.1 são mostradas esquematicamente as energias E' , E'' , E_C^* e E_V^* segundo foram definidas.

Substituindo-se as expressões para as densidades de estados parabólica: $\rho_{C,V}^{\text{PAR}}$, e de Kane: $\rho_{C,V}^k$ nas eqs.(6.3) e (6.4), e fazendo-se a integral da densidade parabólica, que é direta, obtemos que as energias E_C^* e E_V^* serão dadas pelas equações:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\eta_C} \int_{-\infty}^{E' - E_C} y\left(\frac{u}{\eta_C}\right) du \right]^{2/3} \quad (6.5)$$

$$E_V - E_V^* = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\eta_V} \int_{-\infty}^{E_V - E''} y\left(\frac{v}{\eta_V}\right) dv \right]^{2/3} \quad (6.6)$$

onde $y(x)$ é a função de Kane já mencionada no capítulo 3 na eq.(3.27).

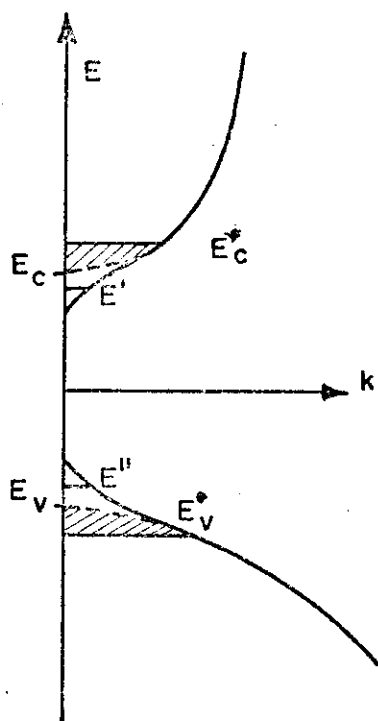


Fig. 6.1 . Densidade de estados esquematizada para mostrar as energias E' e E_C^* na banda de condução, e E'' , E_V^* na banda de valência.

Uma vez definidas as energias E_C^* e E_V^* , define-se:

$$\frac{\hbar^2 k_C^2}{2m_C} = E_C^* - E_C \quad (6.7a)$$

$$\frac{\hbar^2 \beta_C^2}{2m_C} = h_C (E_C^* - E') \quad (6.7b)$$

$$\frac{\hbar^2 k_V^2}{2m_V} = E_V - E_V^* \quad (6.8a)$$

$$\frac{\hbar^2 \beta_V^2}{2m_V} = h_V (E'' - E_V^*) \quad (6.8b)$$

onde E_C e E_V são as energias nominais do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência respectivamente, como se mostra na fig. 6.1. O fator h_C é escolhido de modo que $h_C (E_C^* - E')$ seja igual à energia cinética de localização ($K=T.E_Q$) de Halperin e Lax para o estado de energia E' onde fizemos o ajuste das densidades de estados de Kane e de Halperin e Lax (ver capítulo 5), ou seja, na energia onde: $b(v) = 10 \xi / E_Q^2$.

Uma vez que E_C^* e E_V^* são calculadas usando as eqs. (6.5) e (6.6), os parâmetros β_C, β_V, k_C e k_V que determinam as funções de onda dos estados nas bandas de condução e valência, podem ser calculados por meio das eqs. (6.7a), (6.7b), (6.8a) e (6.8b).

Para transições de altas energias, nas quais E' entra na parte parabólica da banda de condução, temos que $E_C^* \sim E'$. Isto é porque o número de estados na cauda é pequeno quando comparado ao número na parte parabólica da banda, e portanto, quanto mais E' entrar na banda, a diferença entre E' e E_C^* diminui. Então, da eq. (6.7b) obtemos como resultado que para altas energias β_C vai para zero, recuperando assim a função de onda plana característica de estados na banda parabólica.

No caso de transições de baixa energia, a energia E' estará na cauda da banda de condução, e assim o número de estados com energias menores que E' diminuirá rapidamente, fazendo com que, pela sua definição, a energia E_C^* seja só ligeiramente maior que E_C , ou em outras palavras, que o lado direito da eq. (6.5) seja muito pequeno, indo para zero a medida que E' entre mais e mais na cauda. Portanto, da eq. (6.7a) obtemos que para baixas energias $k_C \rightarrow 0$, chegando assim numa função de onda localizada do tipo hidrogenóide.

Agora, uma vez conhecidas as funções de onda dos estados de energias E' e E'' nas bandas de condução e valência respectivamente, podemos calcular o elemento de matriz do operador momento que descreve as transições óticas entre os estados dados, ou seja:

$$\langle \psi_C | \vec{P} | \psi_V \rangle$$

. Para calcular o elemento de matriz, e no espírito de aproximação da massa efetiva, faz-se a suposição de que a função envolvente varia mais lentamente que a função de Bloch u , de modo que a contribuição dominante ao elemento de matriz de operador momento vem da parte periódica da função de Bloch, e a integração restante pode ser feita sobre todo o espaço.

Portanto, nós temos:

$$\langle \psi_C | \vec{P} | \psi_V \rangle \sim \langle U_C | \vec{P} | U_V \rangle \cdot \int \frac{(\beta_C \beta_V)^{3/2}}{\pi} \exp \left[i(\vec{k}_C - \vec{k}_V) \cdot \vec{r} - \beta_C |\vec{r} - \vec{r}_{Ci}| - \beta_V |\vec{r} - \vec{r}_{Vi}| \right] d^3\vec{r} \quad (6.9)$$

O elemento de matriz usado, será o valor médio da eq.(6.9) sobre todas as direções dos vetores de onda dos elétrons e dos buracos e sobre as direções de polarização da radiação. O elemento de matriz $\langle U_C | \vec{P} | U_V \rangle$ corresponde ao elemento de matriz para transição entre as bandas parabólicas de condução e valência, e já foi calculado no apêndice C. Da eq.(c.1.15) obtivemos que:

$$|M_{cv}|_{av}^2 = \frac{mE_g}{12} \left[\frac{m}{m_C} - 1 \right] \left[\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right] \quad (6.10)$$

A outra parte do elemento de matriz, a envolvente $|M_{env}|^2$ é obtida, fazendo-se a integral na eq.(6.9) e fazendo a média sobre todas as direções dos vetores de onda $\vec{k}_C$ e $\vec{k}_V$ e sobre todas as posições dos sítios nos quais os estados estão localizados. Assim, encontramos que o valor médio do elemento de matriz do operador momento para transições entre os estados de energia E' e E'' nas bandas de condução e valência é da forma:

$$|M(E', E'')|_{av}^2 = \frac{mE_g}{12} \left[\frac{m}{m_C} - 1 \right] \left[\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right] \cdot \left(\frac{64\pi b}{3} \right) \cdot (t^4 - q^4)^{-5} \left\{ (b^4 - 5b^2B^2 + 5B^4) (3t^4 + q^4) (t^4 - q^4)^2 + \right. \\ \left. + 8b^2B^2t^2(3b^2 - 10B^2) (t^8 - q^8) + 16b^4B^4(5t^8 + 10t^4q^4 + q^8) \right\} \quad (6.11)$$

onde: $B^2 = \beta_C \beta_V$, $b = \beta_C + \beta_V$, $t^2 = b^2 + k_C^2 + k_V^2$ e $q^2 = 2k_C k_V$

Na fig.(6.2) mostra-se a estrutura da parte envolvente do elemento de matriz, graficado em função da energia do estado na banda de

valência E'' com respeito à energia E_v do topo nominal da banda de valência. O gráfico é feito para 3 diferentes energias do fóton. Notamos que para a energia mais baixa, $|M_{env}|^2$ é uma função aberta, longa, resultando em que a probabilidade de transição não mude muito para energias diferentes daquela onde $|M_{env}|^2$ tem seu máximo. Por outro lado, para a energia mais alta, $|M_{env}|^2$ muda para uma forma fechada, ocasionando que para energias fora daquela onde tem seu máximo, a probabilidade dessas transições diminui muito rapidamente. Assim, $|M_{env}|^2$ faz as vezes de uma regra de seleção dando maior probabilidade só a um intervalo pequeno de energias. Portanto, vemos que é a envolvente do elemento de matriz que vai fazer a transição, entre uma situação de regra de seleção para altas energias (onde se tem estados de onda plana) e outra de sem regra de seleção para baixas energias (quando se tem funções de onda localizadas). Na fig. (6.2) são mostrados 2 tipos de transições: banda de condução - banda de valência de buracos pesados (linha contínua) e banda de condução-banda de valência de buracos leves (linha tracejada).

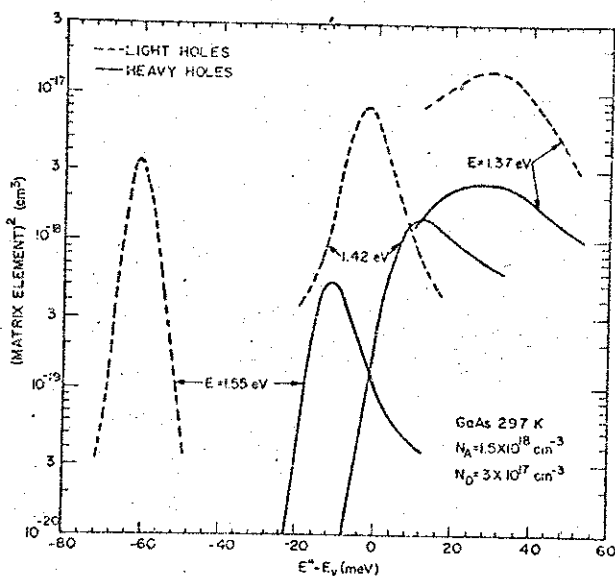


Fig. 6.2 . Envolvente do elemento de matriz, para transições óticas entre as bandas de condução e valência do GaAs, em função da energia do estado na banda de valência.⁽²⁷⁾

C A P Í T U L O 7

7.1 Cálculo do Índice de Refração

Muitas das propriedades óticas dos semicondutores, podem ser descritas em termos do índice de refração N e do coeficiente de extinção κ , ou também em termos da constante dielétrica complexa:

$$\epsilon_1 + i \epsilon_2 = (N + i\kappa)^2 \quad (7.1)$$

A refletividade está relacionada a N e κ por meio da equação:

$$R = \frac{(N-1)^2 + \kappa^2}{(N+1)^2 + \kappa^2} \quad (7.2)$$

O coeficiente de extinção está relacionado com o coeficiente de absorção α pela relação:

$$\kappa(E) = \frac{\alpha(E) \lambda}{4\pi} = \frac{\hbar c}{2E} \alpha(E) \quad (7.3)$$

Já que o índice de refração N e o coeficiente de extinção κ são respectivamente as partes real e imaginária do índice de refração complexo, podemos usar as relações de dispersão, também conhecidas como relações de Kramers-Kronig, a fim de determinar a parte real N do índice de refração complexo a partir da parte imaginária κ ou vice-versa. A relação é a seguinte:

$$N(E) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} E' \kappa(E') \left[\frac{E'^2 - E^2}{E'^2 + E^2} \right] dE' \quad (7.4)$$

Escrevendo a eq.(7.4) em função da absorção $\alpha(E)$:

$$N(E) - 1 = \frac{\hbar c}{\pi E} \int_0^{\infty} E' \alpha(E') [E'^2 - E^2]^{-1} dE' \quad (7.5)$$

A eq.(7.5) permite-nos transformar o problema de determinar o comportamento do índice de refração N , no problema de achar o comportamento do coeficiente de absorção. Porém, por causa da dificuldade de obtermos informações sobre as partes real ou imaginária do índice de refração no intervalo de energia $0 < E < \infty$, a aplicação direta da equação (7.5) fica difícil.

Para contornar este problema, foi desenvolvida uma modificação⁽²⁸⁾ na aplicação das relações de Kramers-Kronig, que verificou-se ser muito boa para o cálculo do índice de refração do GaAs usando os dados da absorção, em torno do valor de energia da banda proibida (que é onde se verifica um rápido crescimento na absorção), e mais os dados da refletividade, os quais mostram⁽²⁹⁾ picos na refletividade do GaAs para as energias de 3 e 5 eV. Para muitos semicondutores, nós podemos caracterizar a absorção para energias bem acima da energia da banda proibida, por um ou mais picos estreitos no espectro da parte imaginária da constante dielétrica ϵ_2 .

Stern⁽²⁸⁾ combinou as informações sobre o coeficiente de absorção em torno da energia da banda proibida (onde seu valor aumenta rapidamente), com informações da parte imaginária da constante dielétrica para altas energias do fóton, a fim de obter um modelo simples da dispersão do índice de refração em torno desse valor da energia da banda proibida. Isto é mais facilmente feito, usando a relação de dispersão para as partes real e imaginária da constante dielétrica:

$$\epsilon_1(E) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} E' \epsilon_2(E') [E'^2 - E^2]^{-1} dE' \quad (7.6)$$

Representando os picos de alta energia para ϵ_2 por meio de funções delta:

$$\epsilon_2(E) = \sum_j \left(\frac{\pi G_j}{2 E_j} \right) \delta(E - E_j) \quad (7.7)$$

onde, G_j é um parâmetro relacionado à intensidade do pico de ϵ_2 para a energia E_j . Substituindo-se a eq.(7.7) na eq. (7.6) teremos:

$$\epsilon_1(E) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{E_s} E' \epsilon_2(E') \left[E'^2 - E^2 \right]^{-1} dE' + \sum_j G_j \left(E_j^2 - E^2 \right)^{-1} \quad (7.8)$$

onde E_s é uma energia escolhida que separa as regiões de alta e baixa energia.

Na eq.(7.1) podemos obter as relações entre as partes real e imaginária da constante dielétrica com as partes real e imaginária do índice de refração. Estas relações são:

$$\epsilon_1 = N^2 - \kappa^2 \quad (7.9)$$

$$\epsilon_2 = 2 N \kappa$$

Usando estas relações dadas pelas eqs.(7.9) na eq. (7.8), chegamos a:

$$N^2(E) - \kappa^2(E) - 1 = \frac{4}{\pi} \int_0^{E_s} N(E') E' \kappa(E') (E'^2 - E^2)^{-1} dE' + \sum_j G_j (E_j^2 - E^2)^{-1} \quad (7.10)$$

Obtendo assim uma equação integral a qual, implicitamente, determina o índice de refração se nós conhecemos as constantes E_j e G_j e o coeficiente de extinção $\kappa(E')$ no intervalo $0 < E' < E_s$. A eq.(7.10) é resolvida numericamente usando o método de aproximações sucessivas. Numa primeira aproximação, desprezamos a integral na eq.(7.10) e teremos:

$$N_0(E) = \left\{ 1 + \kappa^2(E) + \sum_j G_j (E_j^2 - E^2)^{-1} \right\}^{1/2} \quad (7.11)$$

Depois, este resultado aproximado é substituído na integral da eq.(7.10) e achamos a segunda aproximação para $N(E)$, continuando assim até obter a convergência. Este processo é muito rápido, obtendo-se no cálculo numérico para o GaAs uma diferença menor que 10^{-4} no índice de refração, na terceira ou quarta iterações.

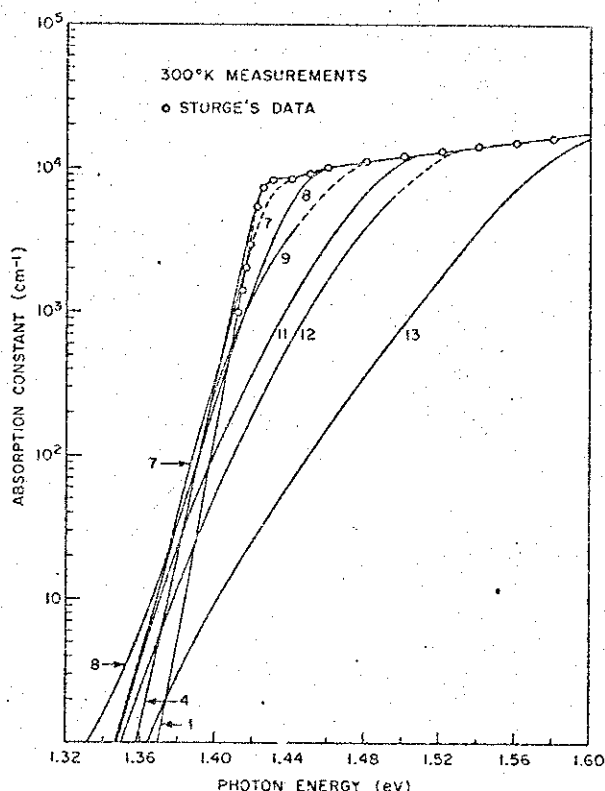


Fig. 7.1 . Coeficiente de absorção em função da energia, para GaAs tipo n à temperatura $T=300^{\circ}\text{K}$. O intervalo de concentrações vai de $2 \cdot 10^{16}$ (curva 1), até $6.5 \cdot 10^{18}$ (curva 13). (30)

Na eq. (7.10) podemos ver que precisamos conhecer o coeficiente de absorção $\alpha(E)$ no intervalo de energia $0 < E < E_s$. Por outro lado, para energias no intervalo no qual a absorção varia lentamente ou seja energias da ordem de 1.60 eV, como pode ser visto na fig. (7.1), temos que as transições são entre as partes parabólicas das bandas e essencialmente independentes da dopagem. Portanto seguindo Stern⁽²⁸⁾, vamos dividir o intervalo de energia $0 < E < E_s$ em duas partes:

i) $0 < E < E_0$, que é a região em torno da energia da banda proibida na qual está o rápido incremento da absorção até uma certa saturação. O coeficiente de absorção nesta região é calculado diretamente com a forma já indicada no capítulo 8.

ii) $E_0 \leq E \leq E_s$. Nesta região o coeficiente de absorção é aproximado pela forma ⁽²⁸⁾ :

$$\alpha(E) = A \left[1 + (E-E_c)/E_r - (E-E_c)^2/E_r E_3 \right] \quad (7.12)$$

onde E_c é a energia da banda proibida nominal, E_r é uma energia tal que a absorção calculada no ponto $E=E_c$ seja a mesma usando i) ou ii), e:

$$E_3 = (E_s - E_c)^2 / (E_s + E_r - E_c) \quad (7.13)$$

de modo que $\alpha(E_s) = 0$

Com isto, conhecemos $\alpha(E)$ no intervalo $0 < E < E_s$, podendo agora usar a equação integral (7.10) para achar sua solução com o método já indicado. Os parâmetros A , E_0 , E_c e E_s das eqs. (7.12) e (7.13) e os parâmetros E_1 , E_2 , G_1 , G_2 usados na eq. (7.10) são obtidos da referência 28 , e estão listados na tabela (7.1)

TABELA 7.1

Parâmetro	valor a 297°k
E_1 (ev)	3.0
E_2 (ev)	5.0
G_1 (ev ²)	34.7
G_2 (ev ²)	142.43
A (cm ⁻¹)	7900
E_0 (ev)	1.64
E_c (ev)	1.425
E_s (ev)	2.86

Vamos mencionar agora outros mecanismos os quais afetam o índice de refração, e que teremos de levar em conta para conhecer a variação de N com a energia do fóton $h\nu$, e com a densidade dos portadores injetados n .

7.2 Vibrações da Rêde

Nos semicondutores compostos com o GaAs, os enlaces entre os átomos das diferentes espécies formam um conjunto de dipolos elétricos os quais podem absorver energia do campo eletromagnético, adquirindo um acoplamento máximo à radiação quando a frequência da radiação é igual ao modo vibracional do dipolo. Isto ocorre na região do infravermelho longínquo do espectro. No GaAs a absorção devida às vibrações da rêde se dá para comprimentos de onda da ordem de 20μ (≈ 0.062 eV). Na fig. (7.2) mostramos uma porção do espectro de vibração da rêde de GaAs tipo n para diferentes temperaturas obtida por Cochran⁽³¹⁾. Esta absorção da rêde provoca uma variação no índice de refração a qual pode ser expressa por⁽²⁸⁾

$$\Delta N_{lv}(E) \approx - 9 \times 10^{-4} / NE^2 \quad (7.14)$$

A contribuição deste efeito é muito pequena, sendo da ordem de 10^{-4} enquanto o índice de refração é da ordem de 3.6.

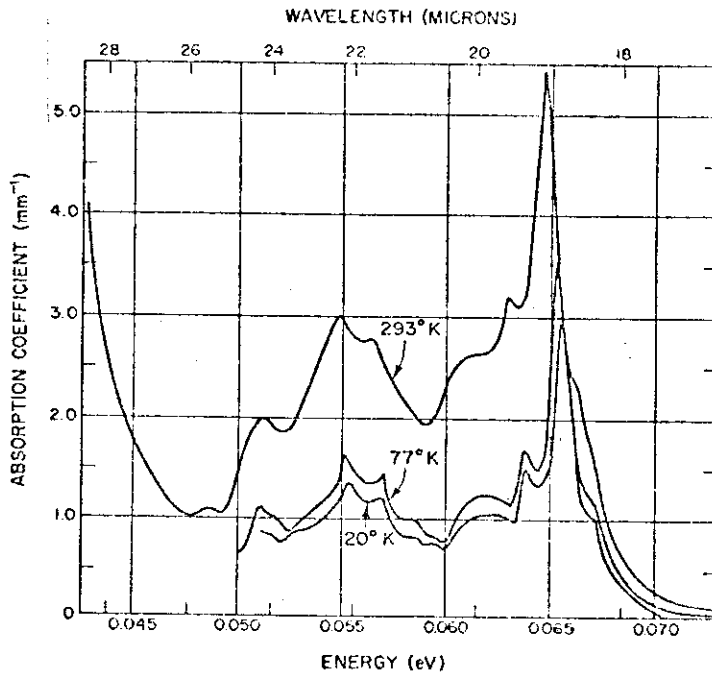


Fig. 7.2 . Coeficiente de absorção da rede para amostras de GaAs tipo n de alta resistividade, em função do comprimento de onda, de 18 a 28 microns, para temperaturas de 20, 77 e 293 $^{\circ}\text{K}$.⁽³¹⁾

7.3 Absorção Interbanda

Também é chamada de absorção de portador livre, ou seja um portador que é livre para se mover dentro de uma banda. A absorção de portador livre está caracterizada por um espectro monotônico, e normalmente sem estrutura, que cresce na forma λ^p , onde p está no intervalo de 1.5 a 3.5⁽³²⁾.

Para poder absorver o fóton, o elétron tem que fazer uma transição para um estado de energia maior dentro do mesmo vale como se mostra na fig.(7.3). Esta transição precisa de uma interação adicional para conservar o momento. A variação de momento pode ser proporcionada pela interação com a rede via fonons ou por espalhamento produzido por impurezas ionizadas.

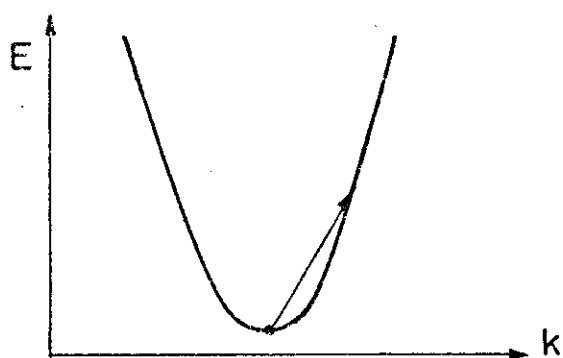


Fig. 7.3. Transição interbanda de um elétron livre na banda de condução.

No caso dos buracos, a absorção de portador livre no GaAs tipo p provoca uma variação no índice de refração dada por⁽²⁸⁾:

$$\Delta N_{\text{inter}(p)} \approx - 6.3 \times 10^{-22} p/E^2 \quad (7.15)$$

Esta variação dada na eq.(7.15) foi obtida por Stern para temperatura ambiente.

Para uma energia $E=1.36$ ev, e p no intervalo de 1.2×10^{18} a 5.2×10^{18} , a variação do índice de refração $\Delta N_{\text{inter}(p)}$ está na faixa 0.00041 a 0.00177.

Existe também, a absorção interbanda dos elétrons na banda de condução⁽³³⁾, porém, se tem verificado que a sua máxima contribuição ao índice de refração é menor de 1% de 0.005, ou seja menor que 0.00005, sendo assim desprezível.

7.4 Absorção Intrabanda

A banda de valência do GaAs está composta de 3 sub-bandas como é mostrado na fig.(7.4).

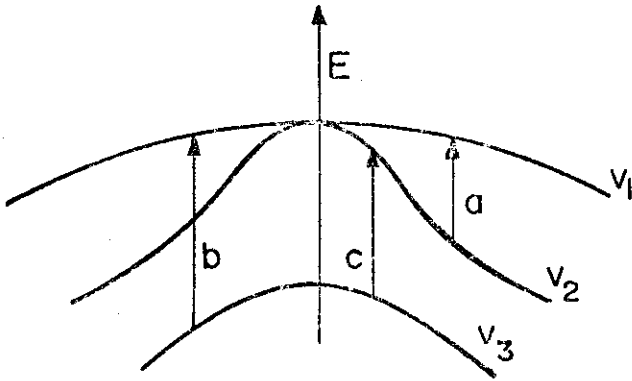


Fig. 7.4 . Estrutura da banda de valência do GaAs. V_1 é a banda de buracos pesados; V_2 é a de buracos leves; e V_3 é a banda deslocada pela interação spin-órbita.

Quando o topo da banda de valência tem uma população de buracos, é possível fazer 3 tipos de transições que absorvem fótons: a) da banda de buracos leves V_2 para a banda de buracos pesados V_1 ; b) da banda V_3 para V_1 ; e c) da banda V_3 para V_2 . Estas transições têm sido observadas em GaAs tipo p⁽³⁴⁾ conforme se mostra na fig.(7.5).

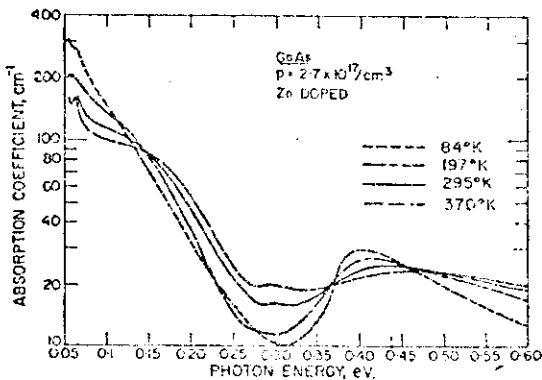


Fig. 7.5 . Absorção devida às transições intrabanda na banda de valência do Ga As tipo p, em função da temperatura.(34)

Transições indiretas entre mínimos em diferentes $\vec{k}$ da mesma sub-banda de condução tem tido evidência experimental, por exemplo no caso do GaAs tipo n⁽³³⁾, no qual tem sido observada a

transição de elétrons do mínimo na banda de condução em $\vec{k}=0$ para o mínimo na direção (111), ou seja uma transição intrabanda.

Estas absorções intrabanda, tanto no caso dos elétrons assim como para os buracos causam variações no índice de refração que são dadas pelas relações⁽²⁸⁾:

$$\Delta N_{\text{intra}(p)}(E) \approx -1.8 \times 10^{-21} p / NE^2 \quad (7.16)$$

$$\Delta N_{\text{intra}(n)}(E) \approx -9.6 \times 10^{-21} n / NE^2 \quad (7.17)$$

No cálculo feito do índice de refração incluímos todos estes efeitos dados nas eqs. (7.14), (7.15), (7.16) e (7.17) somando-os com a solução $N_0(E)$ da equação integral (7.10) para o índice de refração. Assim então, o índice de refração total que é calculado tem a expressão final:

$$N(E) = N_0(E) + \Delta N_{lv}(E) + \Delta N_{\text{inter}(p)}(E) + \Delta N_{\text{intra}(p)}(E) + \Delta N_{\text{intra}(n)}(E) \quad (7.18)$$

Das eqs. (7.15) e (7.16), nós observamos que no caso de GaAs tipo p, o índice de refração diminuirá, para uma energia fixa, quando aumentamos a dopagem de modo que $N_A - N_D$ aumente.

C A P Í T U L O 8

DESCRIÇÃO DOS CÁLCULOS COMPUTACIONAIS PARA OS MODELOS DE BANDAS PARABÓLICAS E BANDAS COM CAUDAS

8.1 Descrição do Cálculo Computacional para o Modelo de Bandas Parabólicas.

Para calcular o coeficiente de absorção α em função da energia do fóton E , fizemos primeiro o cálculo da razão de recombinação espontânea $r_{sp}(E)$, e depois, fazendo uso das eqs.(2.22) e (2.27) obtivemos a razão de recombinação estimulada $r_{st}(E)$ e mais o coeficiente de absorção $\alpha(E)$, respectivamente.

A emissão espontânea $r_{sp}(E)$ foi calculada para as quatro possíveis transições estudadas no capítulo 4, por meio das equações:

$$\begin{aligned}
 r_{sp}^{CR}(E) &= \frac{N_e^2 E E_g}{3m\pi^2 \hbar^5 c^3} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left[\frac{E_g + \frac{\Delta}{2}}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right] (2m^*)^{3/2} \cdot (E - E_g)^{1/2} \cdot \\
 &\cdot \left\{ 1 + \exp \left[\frac{m_v}{m_c + m_v} \left(\frac{E - E_g}{kT} \right) - \frac{F_c}{kT} \right] \right\}^{-1} \cdot \left\{ 1 + \exp \left[\frac{m_c}{m_c + m_v} \left(\frac{E - E_g}{kT} \right) - \frac{F_v}{kT} \right] \right\}^{-1} \\
 r_{sp}^{CA}(E) &= \frac{128 N m^{1/2} \epsilon^3}{3 \hbar^2 c^3 \pi^3 e^4 m_v^{3/2}} \left(1 - \frac{m_c}{m} \right) E E_g \left(\frac{E_g + \frac{\Delta}{2}}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right) \cdot \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \cdot \\
 &\cdot \left[1 + \frac{2\epsilon^2 \hbar^2 m_c}{e^4 m_v^2} \right]^4 \left\{ 1 + \exp \left[\frac{x - F_c}{kT} \right] \right\}^{-1} \cdot \left\{ 1 + \exp \left(\frac{x + E_g - E + F_v}{kT} \right) \right\}^{-1} dx
 \end{aligned} \tag{8.1.1}$$

(8.1.2)

$$r_{sp}^{DV}(E) = \frac{128Nm_V^{3/2} \epsilon^3}{3\hbar^2 c^3 \pi^3 e^4 m_C^{5/2}} \left(1 - \frac{m_C}{m}\right) E E_g \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta}\right) \cdot \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \cdot \left\{1 + \frac{2 \epsilon^2 \hbar^2 m_V}{e^4 m_C^2} (E-E_g-x)\right\}^{-4} \left\{1 + \exp\left(\frac{x-F_C}{kT}\right)\right\}^{-1} \left\{1 + \exp\left(\frac{x+E_g-E+F_V}{kT}\right)\right\}^{-1} dx \quad (8.I.3)$$

$$r_{sp}^{DA}(E) = \frac{128Nm_C^{1/2} \epsilon^3}{3\hbar^2 c^3 \pi^3 e^4 m_V^{3/2}} \left(1 - \frac{m_C}{m}\right) E E_g \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta}\right) \cdot \frac{(1+7\alpha+17\alpha^2+7\alpha^3+\alpha^4)}{(1+\alpha)^7} \cdot \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \left\{1 + \exp\left(\frac{x-F_C}{kT}\right)\right\}^{-1} \cdot \left\{1 + \exp\left(\frac{x+E_g-E+F_V}{kT}\right)\right\}^{-1} dx \quad (8.I.4)$$

Onde r_{sp}^{CR} corresponde à transição banda-banda; r_{sp}^{CA} à transição banda de condução-aceitador; r_{sp}^{DV} à transição doador-banda de valência e r_{sp}^{DA} à transição doador-aceitador.

Em todas estas equações, notamos que é preciso conhecer os quasi-níveis de Fermi F_C e F_V para as bandas de condução e valência respectivamente, a fim de se poder fazer os cálculos numéricos; além de conhecer também a energia da banda proibida E_g .

Para se encontrar os valores numéricos das diferentes quantidades de interesse, ou seja, $r_{sp}(E)$, $r_{st}(E)$, $\alpha(E)$ e $N(E)$, foi feito um programa computacional, cuja sequência é a seguinte:

i) Dados de entrada

N_A - densidade de aceitadores

N_D - densidade de doadores

n - densidade de portadores injetados

T - temperatura

ii) Da eq. de neutralidade de carga determina-se a densidade de buracos p (material tipo p):

$$p = n + (N_A - N_D) \quad (8.1.5)$$

iii) Usamos um processo numérico iterativo para achar os quasi-níveis de Fermi F_C e F_V correspondentes às densidades de elétrons n e de buracos p respectivamente.

Isto é feito variando F_C e F_V até cumprirem-se as equações:

$$n = \int_{E_C}^{E'_C} \rho_C(E) \left[1 + \exp\left(\frac{E - F_C}{kT}\right) \right]^{-1} dE \quad (8.1.6)$$

$$p = \int_{E_V}^{E'_V} \left(\rho_V^{hh}(E) + \rho_V^{lh}(E) \right) \left[1 + \exp\left(\frac{E - F_V}{kT}\right) \right]^{-1} dE \quad (8.1.7)$$

onde ρ_C , ρ_V^{hh} e ρ_V^{lh} são as densidades de estados correspondentes às bandas parabólicas de condução, de buracos pesados e de buracos leves respectivamente, que foram dadas nas eqs. (4.1) e (4.2).

iv) calcula-se a redução na energia da banda proibida E_{g_0} provocada pela temperatura e pelos portadores, tanto os elétrons assim como buracos.

No que diz respeito à dependência com a temperatura, faremos uso da fórmula obtida por Varshni⁽³⁵⁾, que tem sido verificada experimentalmente⁽³⁶⁾, na forma:

$$E_g(T) = 1.522 - \frac{5.8 \times 10^{-4} T^2}{T + 300} \quad (8.1.8)$$

Para calcular a redução na energia da banda proibida E_g , devido aos portadores nas bandas de condução e valência, usamos a expressão dada por Hwang⁽¹⁹⁾.

$$(\Delta E_g)_{n,p} = -\frac{2 e^2}{\pi \epsilon} (3\pi^2)^{1/3} \left[n^{1/3} + p^{1/3} \right] \quad (8.I.9)$$

onde ϵ é a constante dielétrica do material, e n e p são as concentrações de elétrons e buracos nas bandas de condução e valência respectivamente.

A fórmula (8.I.9) é válida se a razão entre o espaçamento médio dos elétrons: $(3/4 \pi n)^{1/3}$ de concentração n na banda de condução, e o raio efetivo do Bohr $a_0 = \hbar^2 \epsilon / (m_c e^2)$ para elétrons, é menor que 1, ou seja:

$$\gamma_{sc} = \frac{(3/4 \pi n)^{1/3}}{\hbar^2 \epsilon / (m_c e^2)} = \frac{m_c e^2}{\hbar^2 \epsilon} \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} < 1 \quad (8.I.10)$$

Com uma condição semelhante para os buracos de densidade p na banda de valência:

$$\gamma_{sv} = \frac{m_v e^2}{\hbar^2 \epsilon} \left(\frac{3}{4\pi p} \right)^{1/3} < 1 \quad (8.I.11)$$

Para nossos cálculos, a condição $\gamma_{sc} < 1$ é satisfeita para os elétrons, porém $\gamma_{sv} < 1$ não é em geral cumprida para os buracos; isto vai, inevitavelmente, causar uma certa incerteza no cálculo de E_g . Isto afetará principalmente as posições dos espectros de absorção e emissão espontânea. Porém, a divergência é mínima, como foi comprovado por Hwang⁽¹⁹⁾ através da comparação das posições dos picos do espectro de emissão espontânea teórico e experimental. Hwang⁽¹⁹⁾ também achou que a energia estimada da banda proibida concordava

com a experimental com menos de 1% de diferença.

Juntando os efeitos de temperatura e portadores, a energia efetiva da banda proibida a ser usada em nossos cálculos terá a forma:

$$E_g = 1.522 - \frac{5.8 \times 10^{-4} T^2}{T+300} - \frac{2e^2}{\pi\epsilon} (3\pi^2)^{1/3} [n^{1/3} + p^{1/3}] \quad (8.I.12)$$

v) Uma vez encontrados os valores dos quasi-níveis de Fermi F_c e F_v no item iii) e conhecida a energia efetiva da banda proibida E_g no item iv), passamos ao cálculo da razão de emissão espontânea para as 4 diferentes transições possíveis entre bandas e impurezas; para isto usamos as fórmulas dadas nas eqs. (8.I.1), (8.I.2), (8.I.3) e (8.I.4). No caso da eq. (8.I.1) que corresponde às transições com regra de seleção, a expressão é analítica e o cálculo é direto. Para as eqs. (8.I.2), (8.I.3) e (8.I.4) que correspondem às transições sem regra de seleção, temos integrais complicadas as quais calculamos numericamente, usando uma subrotina baseada na regra de Simpson de integração.

vi) O passo seguinte é o cálculo da emissão estimulada e do coeficiente de absorção, usando para isto as fórmulas dadas nas eqs. (2.22) e (2.27) do capítulo 2.

vii) Uma vez obtido o coeficiente de absorção $\alpha(E)$ como função da energia do fóton $h\nu$, usamos o processo descrito no capítulo 7 baseado nas relações de Kramers-Kronig para encontrar a variação do índice de refração com $h\nu$.

Neste programa levou-se em conta a presença das bandas de valência de buracos pesados e de buracos leves, na hora de calcular r_{sp} , r_{st} , α e N .

8.II Cálculo do Coeficiente de Absorção no Modelo de Bandas com Caudas.

Com os resultados até agora obtidos nos capítulos 5 e 6, isto é, a densidade de estados aproximada e o elemento de matriz das transições óticas, estamos já em condições de calcular os valores de grandezas tais como as emissões espontânea e estimulada assim como do coeficiente de absorção e do índice de refração. Começaremos primeiro pelo cálculo do coeficiente de absorção $\alpha(E)$ como função da energia do fóton E .

No capítulo 2 quando tratamos da interação da radiação com a matéria, obtivemos as expressões para as razões de emissão espontânea e estimulada. Então, usando a relação entre a absorção e a emissão estimulada dada na eq. (2.27), teremos uma expressão para calcular o coeficiente de absorção $\alpha(E)$.

Assim então, no modelo de um elétron, a absorção ótica entre um estado de energia E'' na banda de valência e um estado de energia E' na banda de condução pode ser escrita na forma:

$$\alpha(E) = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m^2 c N E} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_C(E') \rho_V(E'') |M(E', E'')|_{av}^2 [f_V(E'') - f_C(E')] dE' \quad (8.II.1)$$

onde E é a energia do fóton e $E = E' - E''$; N é o índice de refração, ρ_C e ρ_V são as densidades de estados por unidade de volume e de energia nas bandas de condução e valência respectivamente; neste caso usaremos as densidades de estados de Kane modificadas segundo o já dito no capítulo 5. $|M(E', E'')|_{av}^2$ é o valor médio do elemento de matriz de operador momento e que dá a probabilidade de ocorrência da transição considerada. Usaremos o elemento de matriz

desenvolvido por Stern ⁽²⁶⁾, e que foi tratado no capítulo 6. $f_c(E')$ é a função de Fermi que nos dá a probabilidade de ter um elétron com energia E' na banda de condução.

Em nosso caso, para o GaAs temos dois tipos de absorção para a banda de condução, da banda de buracos pesados e da banda de buracos leves. Portanto, a absorção total será a soma de termos como o da eq.(8.II.1) para cada banda de valência considerada.

A existência dos quasi-níveis de Fermi que entram nas funções de Fermi f_c e f_v na eq.(8.II.1), supõe que tanto os elétrons assim como os buracos estão num estado de quasi-equilíbrio entre eles mesmos, uma situação que se demonstrou ⁽³⁷⁾ ser aceitável em GaAs.

O passo seguinte é a substituição da forma explícita das densidades de estados ρ_c e ρ_v de acordo com as expressões dadas no capítulo 3 nas eqs.(3.27) e (3.28). Substituindo-se isto e mais as funções de Fermi na eq.(8.II.1), obtém-se:

$$\alpha(E) = \frac{8e^2 (m_c m_v)^{3/2}}{m^2 c \pi^3 \hbar^5 N E} (\eta_c \eta_v)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{E' - E_c}{\eta_c} - x \right)^{1/2} e^{-x^2} \cdot \left(\frac{E_v - E''}{\eta_v} - z \right)^{1/2} e^{-z^2} \cdot |M(E', E'')|_{av}^2 \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_{fc}}{kT}\right) \right]^{-1} \cdot \left[1 + \exp\left(\frac{E'' - E_{fv}}{kT}\right) \right]^{-1} dx dz dE' \quad (8.II.2)$$

onde η_c e η_v são os parâmetros que entram na densidade de estados de Kane e que serão calculados usando a aproximação de Stern

segundo o que já expusemos no capítulo 6. E é a energia do fóton; E_C e E_V são as energias do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência respectivamente. Para o elemento de matriz, usaremos a forma dada na eq. (6.11); nesta, deve-se notar que para calcular o elemento de matriz é preciso fazer uma integral dupla nas eqs. (6.5) e (6.6) a fim de achar E_C^* e E_V^* , para depois calcular β_C, β_V, k_C e k_V e finalmente ter o valor de $|M(E', E'')|_{av}^2$ para as energias dadas E' e E'' . Assim, juntando esta integral dupla com a integral tripla que aparece na eq. (8.II.2), obteremos que para se calcular o coeficiente de absorção $\alpha(E)$ para uma dada energia, se requer o cálculo de uma integral quintupla, o que daria tempos efetivos de computação enormes (mais do que 10 horas de CPU no computador PDP-10). Portanto, a fim de se poder fazer o cálculo da integral na eq. (8.II.2) foram feitas as seguintes aproximações:

i) A função de Kane $y(x)$ que tem a forma:

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x (x-u)^{1/2} e^{-u^2} du \quad (8.II.3)$$

foi aproximada no intervalo $-2.55 \leq x < \infty$ pelas funções:

a) $-2.55 \leq x \leq -0.45$

$$y(x) = 0.32474 \exp[0.045528x^3 - 0.65731x^2 + 1.4411x + 0.055071] \quad (8.II.4a)$$

erro máximo: 1.3%

b) $-0.45 \leq x < 1.03$

$$y(x) = 1.0157 \exp[-0.51451(x-1.4496)^2] \quad (8.II.4b)$$

erro máximo: 1.68%

c) $1.03 \leq x < \infty$

$$y(x) = 1.0021 [-0.11754 + 1.0039x]^{1/2} \quad (8.II.4c)$$

erro máximo: 1.66%

para valores de x menores que -2.55 , a função de Kane foi calculada calculando numericamente a integral na eq.(8.II.3).

Com este ajuste à função de Kane, são poupadas, duas das integrais que aparecem na eq.(8.II.2).

ii) No cálculo dos parâmetros E_C^* e E_V^* nas eqs.(6.5) e (6.6), as quais são necessários para se conhecer o valor do elemento de matriz, foi feito o seguinte:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\eta_C} \int_{-\infty}^{E' - E_C} y\left(\frac{u}{\eta_C}\right) du \right]^{2/3} \quad (8.II.5)$$

substituindo-se nesta equação a forma da função de Kane $y\left(\frac{u}{\eta_C}\right)$ dada na eq.(3.28) teremos:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\eta_C}{\pi}} \int_{-\infty}^{E' - E_C} \int_{-\infty}^{u/\eta_C} \left(\frac{u}{\eta_C} - t\right)^{1/2} e^{-t^2} du dt \right]^{2/3} \quad (8.II.6)$$

mudando a variável para: $p = \frac{u}{\eta_C} - t$, a eq. (8.II.6) fica:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\eta_C}{\pi}} \int_{-\infty}^{E' - E_C} \int_0^\infty p^{1/2} \exp\left[-\left(\frac{u}{\eta_C} - p\right)^2\right] dp du \right]^{2/3} \quad (8.II.7)$$

fazendo agora: $\omega = \sqrt{2}\left(\frac{u}{\eta_C} - p\right)$ na eq.(8.II.7), obtêm-se:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\eta_C}{\pi}} \cdot \frac{\eta_C}{\sqrt{2}} \int_0^\infty p^{1/2} \left\{ \int_{-\infty}^{\omega_0} \exp\left(-\frac{\omega^2}{2}\right) d\omega \right\} dp \right]^{2/3} \quad (8.II.8)$$

onde $\omega_0 = \sqrt{2}\left(\frac{E' - E_C}{\eta_C} - p\right)$. Pode-se escrever a eq.(8.II.8) na forma:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\eta_C}{2\pi}} \eta_C \int_0^\infty p^{1/2} \left\{ \int_{-\infty}^0 \exp\left(-\frac{\omega^2}{2}\right) d\omega + \int_0^{\omega_0} \exp\left(-\frac{\omega^2}{2}\right) d\omega \right\} dp \right]^{2/3} \quad (8.II.9)$$

mas a segunda integral está relacionada à função erro, então:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\eta_C}{2\pi}} \eta_C \int_0^\infty p^{1/2} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2}} \pm \sqrt{2\pi} \operatorname{erf}(|\omega_0|) \right\} dp \right]^{2/3} \quad (8.II.10)$$

onde o sinal (+) é escolhido se $\omega_0 > 0$ e o sinal (-) se $\omega_0 < 0$.

Portanto, finalmente obtemos a expressão:

$$E_C^* - E_C = \left[\frac{3}{4} \eta_C^{3/2} \int_0^\infty p^{1/2} \left[1 \pm 2 \operatorname{erf}(|\omega_0|) \right] dp \right]^{2/3} \quad (8.II.11)$$

sendo $\omega_0 = \sqrt{2} \left(\frac{E' - E_C}{\eta_C} - p \right)$, e os sinais escolhem-se tal que (+) se $\omega_0 > 0$, (-) se $\omega_0 < 0$.

Até agora nada foi substancialmente modificado na eq.(8.II.11) no que diz respeito à eq.(8.II.5). A modificação vem agora, quando a função erro: $\text{erf}(|\omega_0|)$ será aproximada no intervalo $[0, \infty)$ pelas funções:

$$\begin{aligned} \text{a) } 0 \leq x \leq 0.34 \quad \text{erf}(z) &= 3.3811 \text{ sen}(0.11758x) & (8.II.12a) \\ \text{erro máximo: } &1.52\% \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{b) } 0.34 < x \leq 1.05 \\ \text{erf}(z) &= -0.226267 + 0.148099 \left[2.334173 - 13.5044(0.079625 - x) \right]^{1/2} \\ \text{erro máximo: } &0.8\% & (8.II.12b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{c) } 1.05 < x < \infty \\ \text{erf}(z) &= 0.5 - 1.1396 \exp(-1.9294x) & (8.II.12c) \\ \text{erro máximo: } &1.1\% \end{aligned}$$

Assim, com estas aproximações poupamos uma integral no cálculo da energia E_C^* na eq.(8.II.11). Partindo da eq.(6.6) para o cálculo da energia E_V^* e fazendo-se as mesmas aproximações, chega-se à expressão:

$$E_V - E_V^* = \left[\frac{3}{4} \eta_V^{3/2} \int_0^\infty t^{1/2} \left[1 \pm 2\text{erf}(|\omega_1|) \right] dt \right]^{2/3} \quad (8.II.13)$$

onde agora $\omega_1 = \sqrt{2} \left(\frac{E_V - E''}{\eta_V} - t \right)$, os sinais sendo escolhidos de tal forma que:

(+) se $\omega_1 > 0$

(-) se $\omega_1 < 0$

Tendo feito as aproximações i) e ii), conseguimos poupar 3 das 5 integrais que aparecem na eq.(8.II.2), ficando agora só com uma integral dupla cujo cálculo numérico requer um tempo de computação razoavelmente menor do que no caso da integral quíntupla.

Uma vez expostas as aproximações usadas, vamos descrever os passos feitos para o cálculo computacional da equação(8.II.2). Tal como foi feito para o modelo de bandas parabólicas, os dados de entrada do programa são as densidades de aceitadores e doadores N_A e N_D respectivamente; a densidade de portadores injetados n e a temperatura T . Conhecidos n , N_A e N_D , conhece-se a densidade de buracos p por meio da equação de neutralidade de carga(material tipo p):

$$p = n + (N_A - N_D).$$

1) Densidade de Estados Autoconsistente.

Vamos agora para a descrição do cálculo autoconsistente que dará os valores dos parâmetros η_C e η_V das densidades de estados de Kane segundo a aproximação do Stern, da qual se falou no capítulo 5.

Ao mesmo tempo, obter-se-á o comprimento de blindagem autoconsistente L (Q^{-1}) e os quasi-níveis de Fermi autoconsistentes F_C e F_V para elétrons e buracos. Vamos descrever o caso da banda de condução.

i) Dá-se um valor de prova para o comprimento de blindagem:

$$L_0 (Q_0^{-1})$$

ii) Conhecendo I_0 (ou Q_0^{-1}), calculam-se os parâmetros E_Q , $\bar{V}$ e ξ da densidade de estados de Halperin-Lax por meio das eqs.:

$$E_Q^c = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_c} \quad (8.II.14)$$

$$\bar{V} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon Q^2} (N_A - N_D) \quad (8.II.15)$$

$$\xi = \frac{2\pi e^4}{Q\epsilon} (N_A + N_D) \quad (8.II.16)$$

onde m_c é a massa efetiva dos elétrons no fundo da banda de condução e ϵ é a constante dielétrica do GaAs. Depois, procura-se a energia E_1 que satisfaça à condição:

$$b \left[\frac{E_c - E_1 + \bar{V}}{E_Q} \right] = 10 \frac{\xi}{E_Q^2} \quad (8.II.17)$$

sendo $b(v)$ uma função tabulada no trabalho de Halperin e Lax. (22)

A energia E_1 deve ser uma energia na cauda da banda de condução, onde é válida a expressão de Halperin e Lax dada na eq. (3.30). É nesta energia E_1 , que será feito o ajuste do parâmetro η_c para a função de Kane.

iii) Conhecida a energia E_1 , calcula-se quanto vale a densidade de estados de Halperin e Lax para esta energia. Para isto usamos:

$$\rho_c^{HL}(E_1) = \frac{E_Q^3 Q^3}{\xi^2} a \left[\frac{E_c - E_1 + \bar{V}}{E_Q} \right] \exp \left[- \left(\frac{E_Q^2}{2\xi} \right) b \left(\frac{E_c - E_1 + \bar{V}}{E_Q} \right) \right] \quad (8.II.18)$$

iv) Agora temos que encontrar qual é o valor do parâmetro η_c na densidade de estados de Kane, de modo a satisfazer:

$$\rho_c^k(E_1) = \rho_c^{HL}(E_1) \quad (8.II.19)$$

ou, usando a forma explícita da densidade de Kane: .

$$\frac{m_C^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2\eta_C} Y\left(\frac{E_1 - E_C}{\eta_C}\right) = \rho_C^{HL}(E_1) \quad (8.II.20)$$

o procedimento para calcular η_C é iterativo, variando η_C no lado esquerdo da eq. (8.II.20) até que ela seja satisfeita dentro de um certo limite de precisão. Em nosso caso, usamos uma precisão de 0.1%.

v) Uma vez determinado o valor η_C , a densidade de estados de Kane $\rho_C^k(E')$ fica completamente conhecida, e, portanto, podemos proceder ao cálculo do quasi-nível de Fermi F_C . Isto é feito iterativamente variando o valor de F_C até satisfazer a seguinte equação:

$$n = \frac{m_C^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2\eta_C} \int_{-\infty}^{\infty} Y\left(\frac{x}{\eta_C}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{x - F_C}{kT}\right)\right]^{-1} dx \quad (8.II.21)$$

neste caso também a precisão foi de 0.1%.

vi) Os mesmos cálculos feitos para a banda de condução são repetidos para a banda de valência, resultando disto o conhecimento do parâmetro η_V para a densidade de Kane da banda de valência e do quasi-nível de Fermi F_V para os buracos; assim como da energia E_2 onde é feito o ajuste entre as densidades de Kane e Halperin e Lax, para a banda de valência.

vii) Uma vez obtidos os parâmetros η_C, η_V, F_C e F_V , vai ser calculado o comprimento de blindagem L (ou Q^{-1}), que pode ser expressado como⁽³⁸⁾:

$$Q^2 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} \left[\int_C \rho_C^k(E) \frac{-\partial f_C(E)}{\partial E} dE + \int_V \rho_V^k(E) \frac{-\partial f_V(E)}{\partial E} dE \right] \quad (8.II.22)$$

onde as integrais são feitas sobre as bandas de condução e valência.

A integração é feita numericamente, obtendo-se assim o valor de

$$L \equiv Q^{-1}.$$

viii) Compara-se este último valor de L com o valor de prova L_0 , sendo que se L e L_0 são aproximadamente iguais dentro de uma precisão de 0.1%, o programa chega ao fim. Se não for o caso, fazemos $L_0=L$ voltando-se ao item i), fazendo tudo novamente até conseguir obter entre L e L_0 uma precisão de 0.1%, já mencionado. O processo de auto-consistência converge rapidamente, precisando-se de 3 ou 4 passos para obter a precisão desejada.

Como resultado deste programa, são obtidos os valores auto-consistentes dos parâmetros n_c e n_v , dos quasi-níveis de Fermi F_c e F_v e do comprimento de blindagem L . As densidades de estados para as bandas de condução e valência em todo o intervalo de energia ficam assim completamente determinadas.

Este programa foi executado para diferentes valores de densidade de portadores injetados n . Na tabela 8.1 mostramos os valores dos parâmetros n_c, n_v, F_c, F_v e L para as diferentes injeções usadas.

TABELA 8.1

DENSIDADE DE PORTADORES INJETADOS $n(\text{cm}^{-3})$	COMPRIMENTO DE BLINDAGEM $L(\text{\AA})$	PARÂMETRO DE KANE DA BANDA DE CONDUÇÃO $n_c(\text{meV})$	PARÂMETRO DE KANE DA BANDA DE VALÊN- CIA $n_v(\text{meV})$	QUASI-NÍVEL DE FERMÍ DOS ELÉTRONS $F_c(\text{meV})$	QUASI-NÍVEL DE FERMÍ DOS BURACOS $F_v(\text{meV})$
0	40.05	10.273	20.472		- 58.494
2.5×10^{17}	34.063	7.865	17.254	- 10.349	- 52.688
5×10^{17}	30.627	6.368	15.065	10.014	- 47.590
7.5×10^{17}	28.361	5.485	13.658	24.749	- 43.766
1×10^{18}	26.372	4.905	12.543	37.424	- 39.669
1.5×10^{18}	24.042	4.077	10.994	56.346	- 34.221
2×10^{18}	22.092	3.498	9.751	72.091	- 28.579
3×10^{18}	19.718	2.940	8.144	99.437	- 20.657
4×10^{18}	18.167	2.582	7.129	122.186	- 14.533

2) Cálculo de $\alpha(E)$.

Já conhecidas as densidades de estados ρ_C^k e ρ_V^k , procede-se ao cálculo do elemento matriz $|M(E', E'')|_{av}^2$. A energia da banda proibida E_g que será usada, é a mesma que no caso do modelo de banda parabólica, incluídos os efeitos de temperatura e dos portadores na redução de E_{g0} .

Para calcular o elemento de matriz fazemos o seguinte:

- i) Com a ajuda de η_C e η_V , calculamos as integrais das eqs. (8.II.11) e (8.II.13), obtendo-se os valores de $E_C^* - E_C$ e de $E_V - E_V^*$.

Depois, para calcular os parâmetros h_C e h_V que entram nas eqs. (6.7b) e (6.8b), temos que conhecer quanto vale a energia cinética de localização de Halperin e Lax nos pontos onde é feito o ajuste entre as densidades de Kane e Halperin e Lax, ou seja, nas energias E_1 e E_2 para as bandas de condução e valência. Com isto, os parâmetros h_C e h_V são dados por:

$$h_C = \frac{T \left(\frac{E_C - E_1 + \bar{V}}{E_C} \right) E_Q^C}{(E_C^* - E_C) - (E_1 - E_C)} \quad (8.II.23)$$

$$h_V = \frac{T \left(\frac{E_2 - E_V - \bar{V}}{E_Q^V} \right) E_Q^V}{(E_V - E_V^*) - (E_V - E_2)} \quad (8.II.24)$$

A energia cinética de localização $T(v)$ é uma função dada no trabalho de Halperin e Lax⁽²²⁾.

- ii) Agora, podemos proceder ao cálculo dos parâmetros que caracterizarão as funções de onda dos estados de energia E' e E'' nas bandas de condução e valência, respectivamente, os quais são dados por:

$$k_C^2 = \frac{2m_C}{\hbar^2} (E_C^* - E_C) \quad (8.II.25a)$$

$$k_V^2 = \frac{2m_V}{\hbar^2} (E_V - E_V^*) \quad (8.II.25b)$$

$$\beta_C^2 = \frac{2m_C}{\hbar^2} h_C \left[(E_C^* - E_C) - (E' - E_C) \right] \quad (8.II.26a)$$

$$\beta_V^2 = \frac{2m_V}{\hbar^2} \hbar_V \left[(E_V - E_V^*) - (E_V - E'') \right] \quad (8.II.26b)$$

iii) Calculados k_C, k_V, β_C e β_V , podemos finalmente calcular o valor médio do elemento de matriz $|M(E', E'')|_{av}^2$, substituindo-os na eq. (6.11).

Tanto o cálculo das densidades de estados, assim como o do elemento de matriz devem ser feitos para cada energia E' na hora de fazer a integração numérica na equação (8.II.2). Isto tudo foi feito levando em conta as aproximações já mencionadas. As funções de Fermi são conhecidas uma vez que F_C e F_V já foram determinadas.

iv) Calcula-se a integral na eq. (8.II.2) para diferentes energias do fóton E . Desta maneira, se obterá o espectro de absorção em função da energia para GaAs, para uma dada dopagem, injeção e temperatura.

v) Fazendo uso das eqs. (2.22) e (2.27), calculam-se as razões de recombinação espontânea e estimulada para cada energia E .

vi) Por último, os valores calculados da curva de absorção $\alpha(E)$ para diferentes energias, são substituídos nas relações de Kramers-Kronig já expostas no capítulo 7, obtendo assim como resultado o comportamento do índice de refração $N(E)$ em função da energia do fóton E .

O cálculo tudo foi feito para diferentes valores da densidade de portadores injetados n , para uma dopagem e temperatura fixas, possibilitando isto a análise da variação dos diferentes parâmetros como função da concentração de portadores injetados.

Na figura 8.II.1 apresentamos um diagrama de blocos que descreve o programa feito para o cálculo do coeficiente de absorção e do índice de refração.

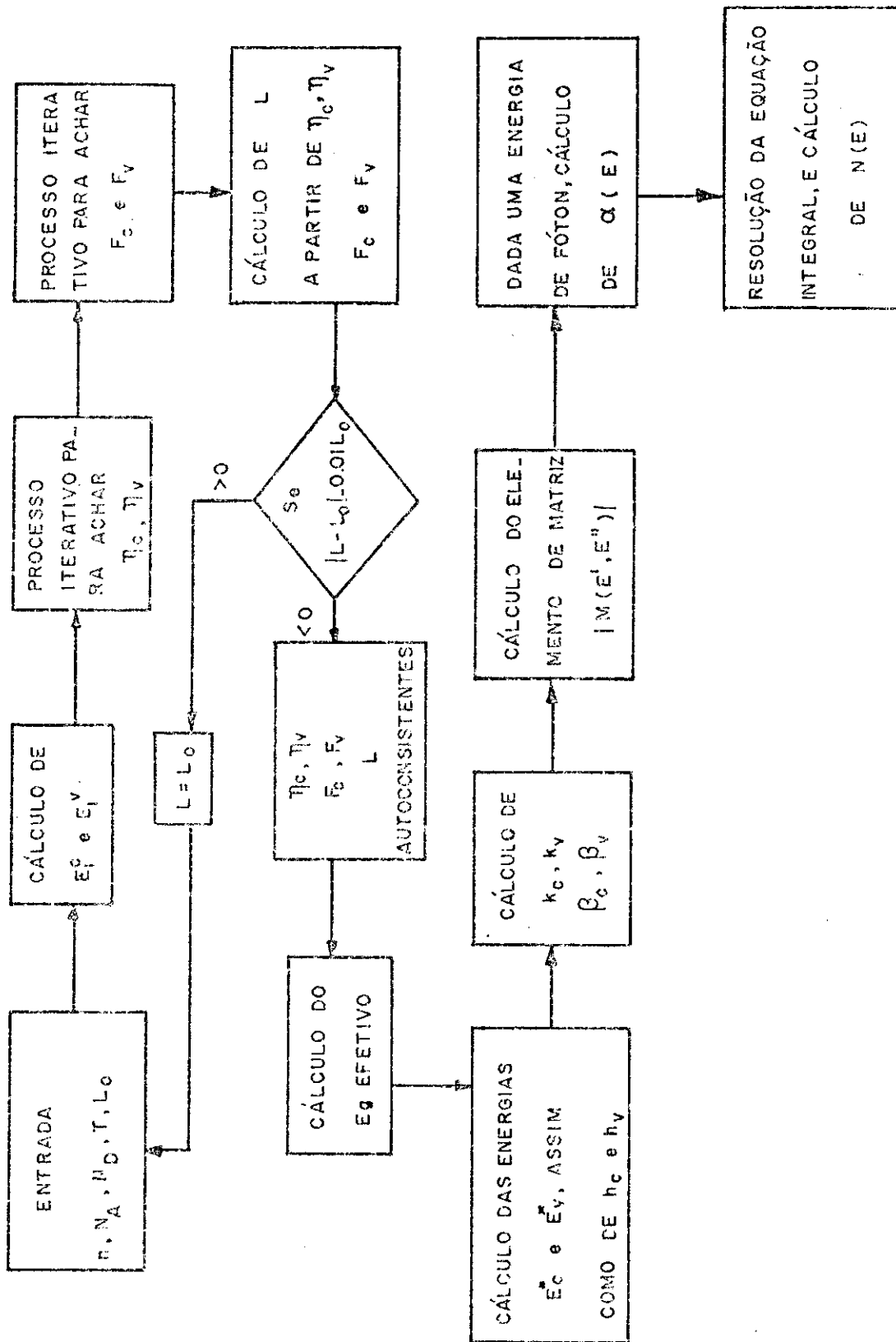


Fig. 8.II.1 . Diagrama de blocos, mostrando as etapas feitas para se calcular o índice de Refração $N(E)$.

C A P Í T U L O 9

RESULTADOS

Neste capítulo, nós mostraremos os resultados que obtivemos, usando a teoria já exposta nos capítulos anteriores, para os dois modelos aqui estudados:

- a) densidade de estados para bandas parabólicas com diferentes elementos de matriz segundo a transição eletrônica considerada.
- b) densidade de estados para bandas com caudas usando os resultados da teoria de Kane com as aproximações de Stern.

Para realizar os cálculos numéricos, os seguintes parâmetros foram usados:

- i) massa efetiva dos elétrons no fundo da banda de condução:

$$m_c = 0,072 m$$

- ii) massa efetiva dos buracos pesados no topo da banda de valência:

$$m_{hh} = 0,55 m$$

- iii) massa efetiva dos buracos leves no topo da banda de valência:

$$m_{lh} = 0,085 m$$

- iv) energia de separação entre as bandas de valência $j=1/2$ e $j=3/2$ devido à interação spin-órbita:

$$\Delta = 0,35 \text{ eV}$$

- v) energia da banda proibida do GaAs à $T=0^\circ\text{K}$:

$$E_{g_0} = 1,522 \text{ eV}$$

- vi) constante dielétrica do GaAs:

$$\epsilon = 13$$

vii) densidade de aceitadores:

$$N_A = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

viii) densidade de doadores:

$$N_D = 3.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

ix) temperatura da amostra de GaAs:

$$T = 297^\circ\text{K}$$

A medição experimental do coeficiente de absorção do GaAs para altas energias (acima de 1,45 e V) apresenta dificuldades técnicas, já que, como a absorção ultrapassa a 10^4 cm^{-1} , se faz necessário trabalhar com amostras com espessuras da ordem de 1 micron para conseguir se fazer as medidas de transmissão requeridas. Daí resulta que sejam poucos os trabalhos experimentais que reportam medidas do coeficiente de absorção $\alpha(E)$ no intervalo de alta energia. Nos dados experimentais mais recentes, nós vamos usar para fins de comparação a curva de absorção obtida por H. Casey, Jr. ⁽³⁹⁾ numa amostra de GaAs com densidade de impurezas de $N_A = 1.5 \times 10^{18}$ e $N_D = 3.10^{17}$ à temperatura $T=297^\circ\text{K}$. É esta a razão de usar os valores de N_A , N_D e T dados nos itens vii) a ix) com os quais fizemos os nossos cálculos.

9.1 Densidades de Estados

Vamos começar apresentando os dados correspondentes às densidades de estados usadas. Na figura 9.1 mostramos a densidade de estados de banda parabólica para as bandas de condução e valência as quais foram usadas nos cálculos descritos no capítulo 8 seção 1. A densidade de estados apresentada para a banda de valência corresponde à contribuição total das bandas de buracos pesados e de buracos leves.

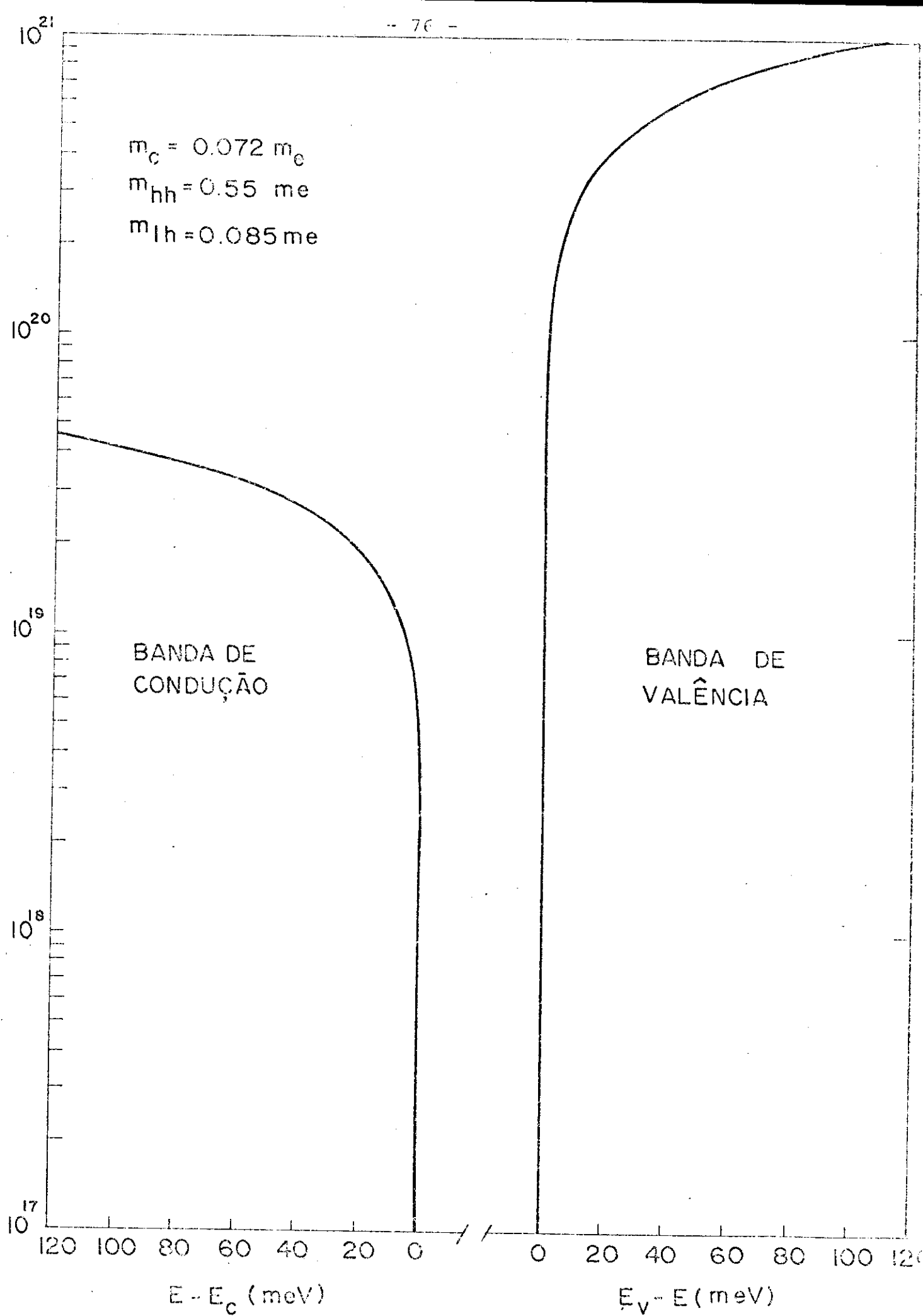


Fig. 9.1 . Densidades de estados tipo banda parabólica, para as bandas de condução e valência do GaAs. Na banda de valência foram incluídas as contribuições dos buracos pesados e dos buracos leves.

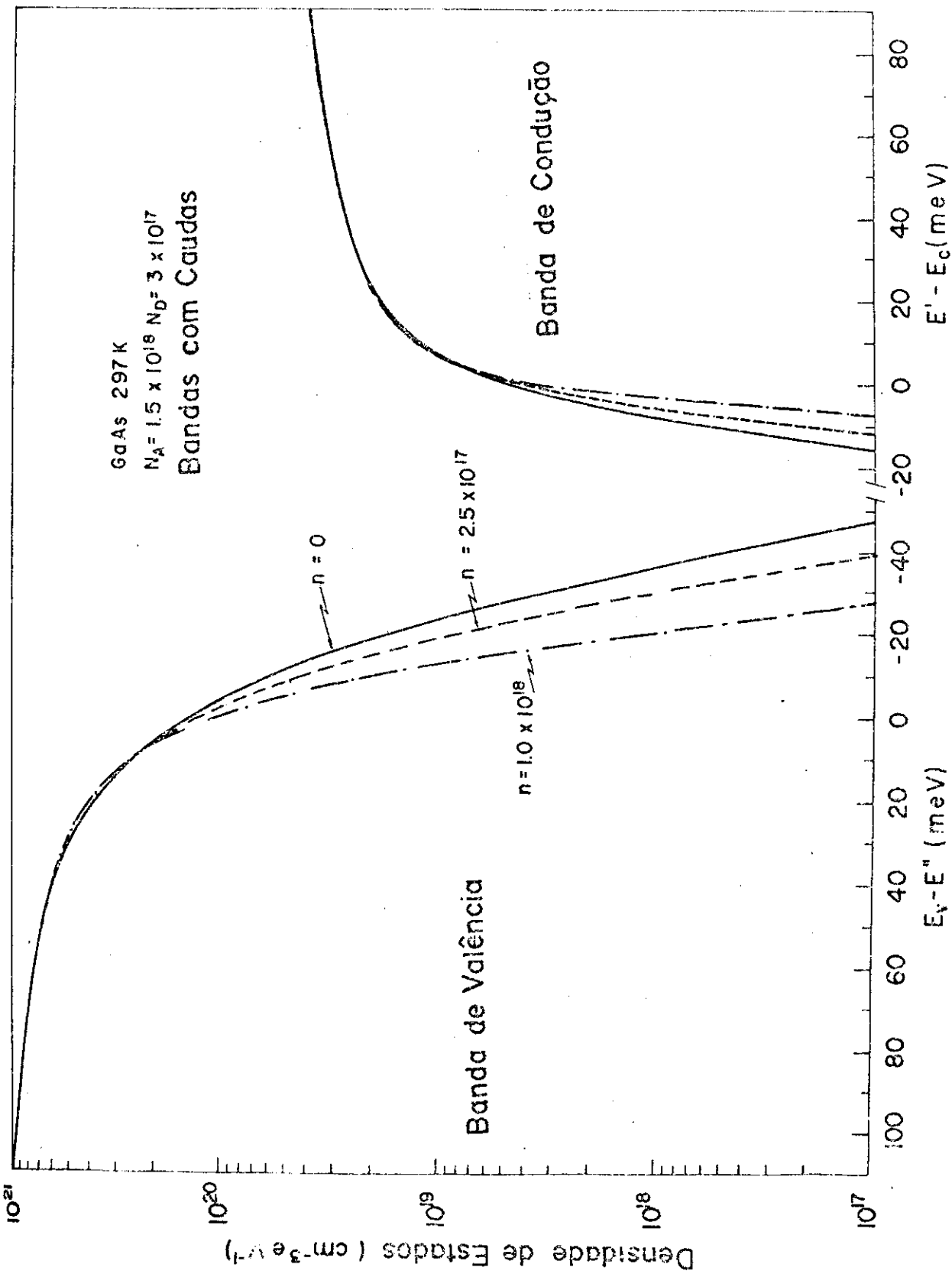


Fig. 9.2 . Densidades de estados com caudas para diferentes valores da injeção n , para as bandas de condução e valência, obtidas usando a aproximação de Stern entre os resultados de Kane e de Halperin e Lax.

No tratamento real do semicondutor com alta concentração de impurezas, a presença de caudas na densidade de estados foi levada em conta fazendo uso das expressões analíticas de Kane modificadas de acordo com o exposto no capítulo 5. A densidade de estados autoconsistente para as bandas de condução e valência do GaAs, resultante dessa aproximação, é mostrada na figura 9.2 para vários valores de densidade de portadores injetados n . Nesta figura observa-se que a extensão da cauda é maior para a banda de valência do que para a banda de condução para todos os níveis de injeção. Fisicamente isto é explicado fazendo-se uma comparação entre o comprimento de blindagem L com o raio efetivo de Bohr para os elétrons e buracos. Para todos os níveis de injeção, o comprimento de blindagem, que é da ordem de $30\text{\AA}$, é menor do que o raio de Bohr para os elétrons ($\sim 90\text{\AA}$), porém, maior do que o raio de Bohr dos buracos ($\sim 13\text{\AA}$)⁽¹⁹⁾; portanto, as flutuações do potencial que dão origem às caudas, serão muito mais blindadas para os elétrons do que para os buracos.

9.2 Comprimento de Blindagem

Para o cálculo das densidades de estados das bandas com caudas, foi preciso se fazer um processo de autoconsistência entre as densidades de estados $\rho_{c,v}^k$ e o comprimento de blindagem L , de acordo com o método exposto no capítulo 5; disto resulta um comprimento de blindagem L , o qual é mostrado na figura 9.3 em função da injeção n . O parâmetro L representa o alcance dos potenciais de Coulomb blindados das impurezas. O resultado mostrado na fig. 9.3 é o de que L diminui ao aumentarmos a concentração dos portadores injetados n . Isto se explica pelo fato de que, ao aumentar n , aumenta a densidade média de portadores livres em torno das impurezas, provocando um aumento na blindagem dos seus potenciais com a consequente diminuição do comprimento de blindagem L . Este resultado é consistente com aquele apresentado por Hwang⁽⁴⁰⁾, no qual ele mostra que em amostras de GaAs tipo n , o comprimento de blindagem L diminui ao se

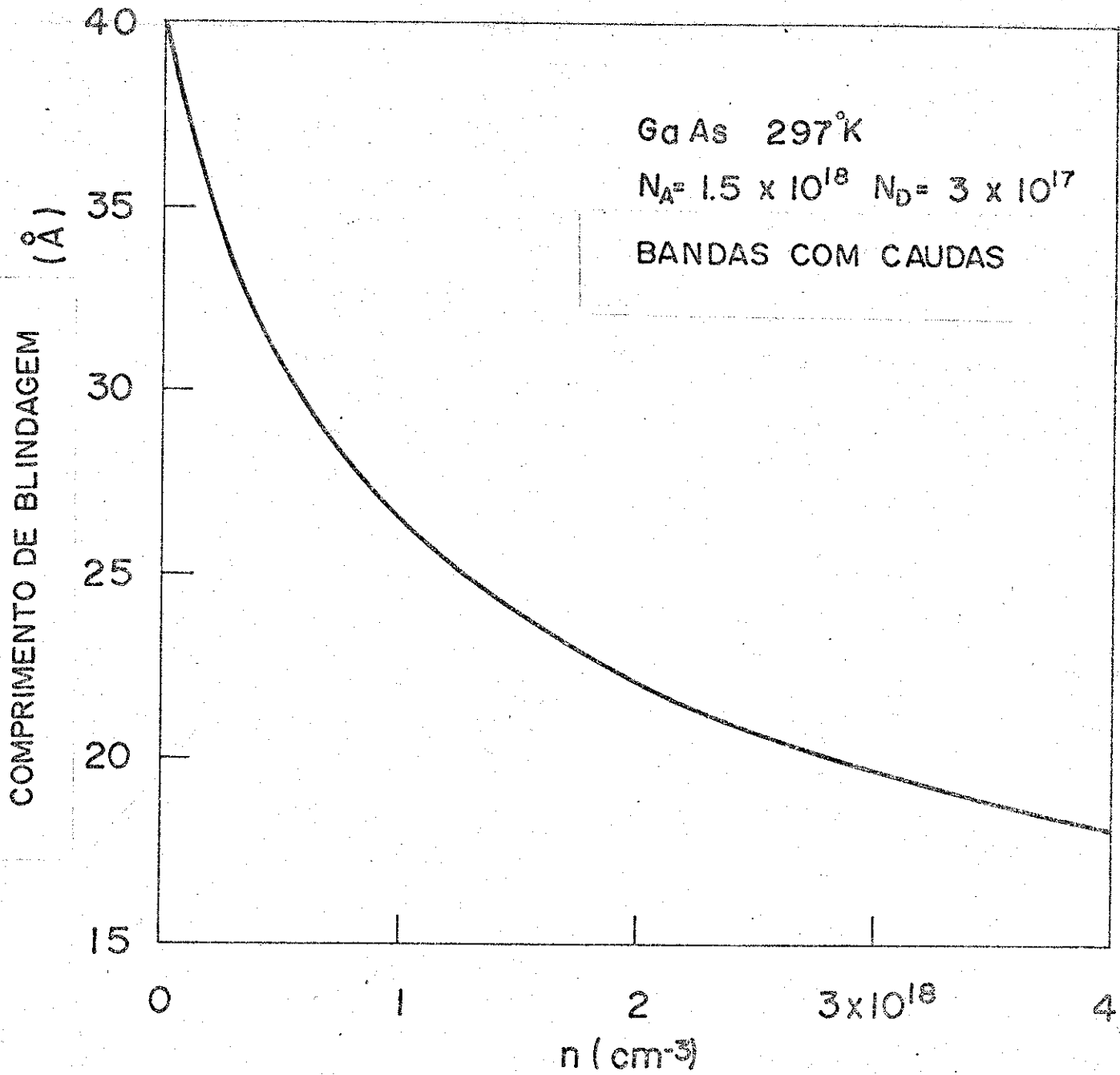


Fig. 9.3 . Comprimento de Blindagem autoconsistente, como função da injeção n , para o modelo de bandas com caudas.

aumentar a dopagem das amostras.

Esta comparação com os dados experimentais de Hwang mostra o mesmo comportamento no que diz respeito ao comprimento de blindagem, provocado pela injeção de elétrons num material tipo p, e a dopagem em um material tipo n. Isto pode ser explicado como segue abaixo.

À temperatura ambiente (297°K) os doadores estão praticamente ionizados, de modo que, ao se aumentar a dopagem, se está aumentando o número de elétrons na banda de condução. Isto é análogo a provocar o enchimento da banda através da injeção, como no caso de um material tipo p (ou n), e em ambos os casos se aumenta o número médio de portadores livres em torno das impurezas doadoras.

Dai resulta na semelhança de resultados entre os nossos, teóricos associados à injeção, e os experimentais de Hwang, associados à dopagem.

Embora o nosso cálculo seja feito de modo diferente do de Hwang, não verificamos nenhuma diferença, significativa, entre os nossos resultados de comprimento de blindagem e os dele para os mesmos parâmetros.

Além disso, devemos ressaltar que para temperaturas abaixo daquela de ionização das impurezas, esta semelhança na dependência de L com a dopagem e a injeção de portadores livres poderá sofrer alterações, pois a ionização aumenta o número de portadores na banda.

9.3 Quasi-Níveis de Fermi

Outras quantidades que são indispensáveis se conhecer para poder-se calcular as propriedades radiativas dos lasers, são os quasi-níveis de Fermi para elétrons e buracos nas bandas de condução e valência respectivamente. Na figura 9.4 damos a variação destes quasi-níveis F_C e F_V em função da injeção n , assim como da sua soma $F_C + F_V$, calculados para uma densidade de estados do tipo banda

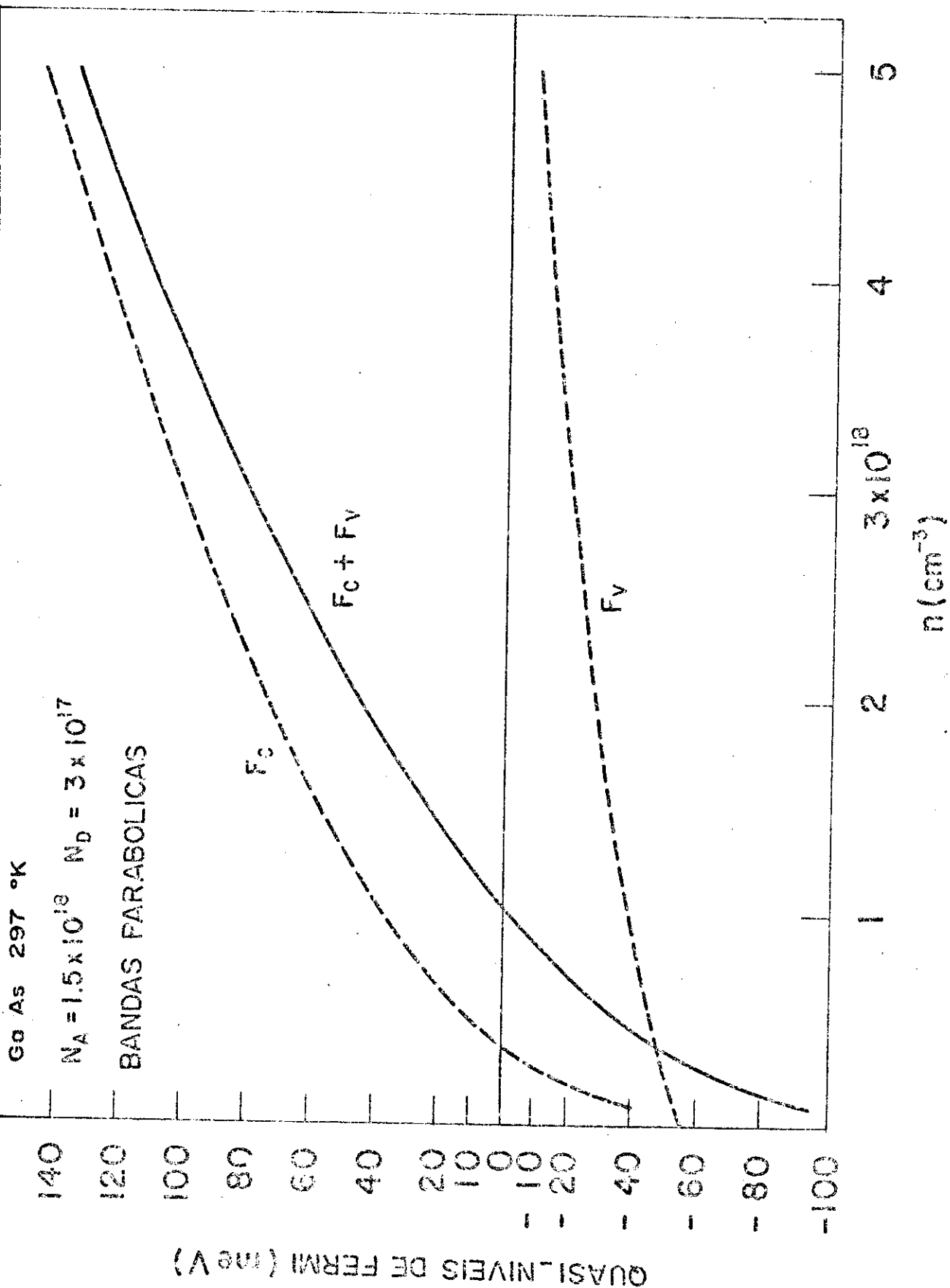


Fig. 2.4 - Quasi-níveis de Fermi para elétrons e buracos em função da injeção n , calculados usando densidades de estados do tipo banda parabólica.

parabólica. Note-se na fig. 9.4 que, no intervalo de injeções usado ($n=0 - 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), o valor de F_v é sempre negativo, ou seja, fica sempre dentro da banda proibida por causa da maior massa associada à banda de buracos pesados. Por outro lado, o quasi-nível dos elétrons F_c só é negativo para injeções menores do que, aproximadamente, $n=3,8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, sendo que para injeções maiores, F_c entra na banda de condução.

Bernard e Durauffourg⁽⁴¹⁾, impondo a condição de que o número de fótons emitidos fosse maior do que os absorvidos, obtiveram que a condição para a existência de emissão estimulada, ou ganho, era a de que:

$$F_c + F_v \geq h\nu - E_g \quad (9.1)$$

onde a energia da banda proibida E_g , já inclui as reduções produzidas pela temperatura e pelos portadores.

Esta condição foi obtida supondo transições entre as bandas não perturbadas de condução e valência. No caso das bandas parabólicas: $h\nu > E_g$; portanto da eq. (9.1) teremos que:

$$F_c + F_v \geq 0 \quad (9.2)$$

sendo que a emissão estimulada, ou ganho, começará a partir da injeção para a qual:

$$F_c + F_v = 0 \quad (9.3)$$

Na fig. 9.4, referindo-nos à curva $F_c + F_v$, obtemos que para os valores usados, o ganho começa a partir de uma injeção de aproximadamente $n = 1,03 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Na figura 9.5 são mostrados os quasi-níveis de Fermi auto-consistentes para os elétrons e buracos, em função da densidade de portadores injetados n , calculados usando o modelo de bandas com caudas, segundo o exposto no capítulo 8. Da comparação das figs. 9.4 e 9.5, notamos que, no que diz respeito aos quasi-níveis, a diferença entre os valores e o comportamento de F_c e F_v , com bandas

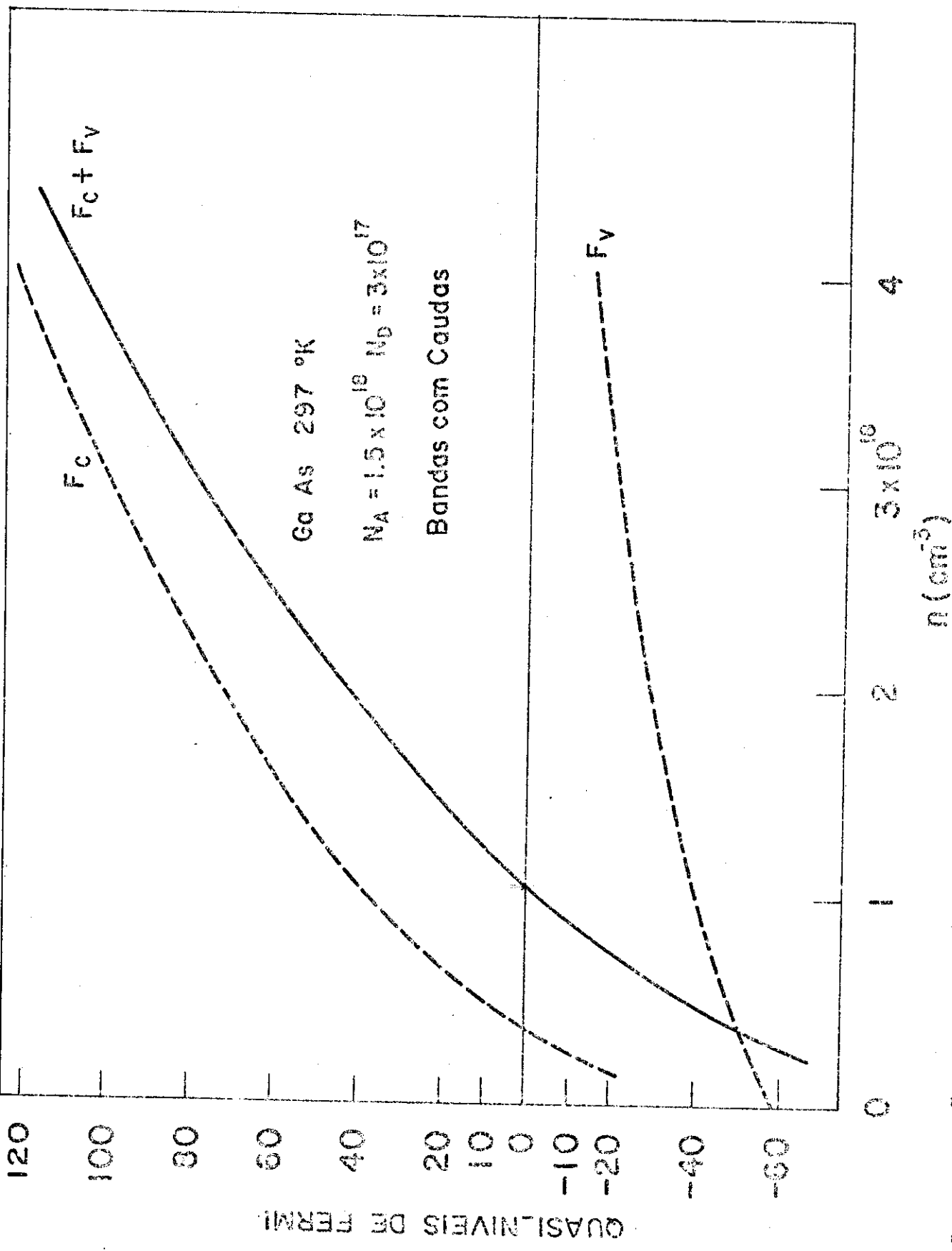


Fig. 9.5 . Variação com a injeção dos quasi-níveis de Fermi autoconsistentes para elétrons e buracos, calculados usando densidades de estados de bandas com caudas. A soma $F_c + F_v$ também é mostrada.

parabólicas ou com bandas com caudas, é mínima. Portanto, o modelo de bandas parabólicas pode ser usado com muito boa aproximação para o cálculo de F_c e F_v sem se ter que usar processos de auto-consistência mais elaborados.

9.4 Elemento de Matriz

No modelo de bandas com caudas, o elemento de matriz do operador momento é indispensável para o cálculo das propriedades radiativas do laser. No capítulo 5 nós já apresentamos e discutimos o elemento de matriz a ser usado. Na figura 9.6 mostram-se os resultados assim obtidos para o valor médio da envolvente do elemento de matriz para transições com a banda de buracos pesados. Nesta figura é mostrado $|M|_{env}^2$ para 3 diferentes injeções $n=0,5 \times 10^{17}$ e $1,5 \times 10^{18}$ e para duas energias fixas: 1.35eV e 1.50eV. Como já foi comentado no capítulo 5, para a energia mais baixa, $|M|_{env}^2$ é mais aberto, o que equivale a um relaxamento da regra de seleção; já para a energia mais alta, $|M|_{env}^2$ se fecha, diminuindo o número efetivo de transições possíveis levando assim a um caráter de regra de seleção.

9.5 Emissões Espontânea e Estimulada

Uma vez determinadas as densidades de estados, quasi-níveis de Fermi e o elemento de matriz das transições eletrônicas, podemos calcular as propriedades radiativas. Começaremos primeiro pela razão de recombinação espontânea, resultados os quais são mostrados nas figuras 9.7 e 9.8 em função da energia do fóton E , para duas densidades de portadores $n=2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ e $n=2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Nestas figuras nós apresentamos os resultados para os cinco modelos usados: banda parabólicas, que inclui as quatro transições possíveis entre bandas e níveis de impureza; o modelo de bandas com caudas.

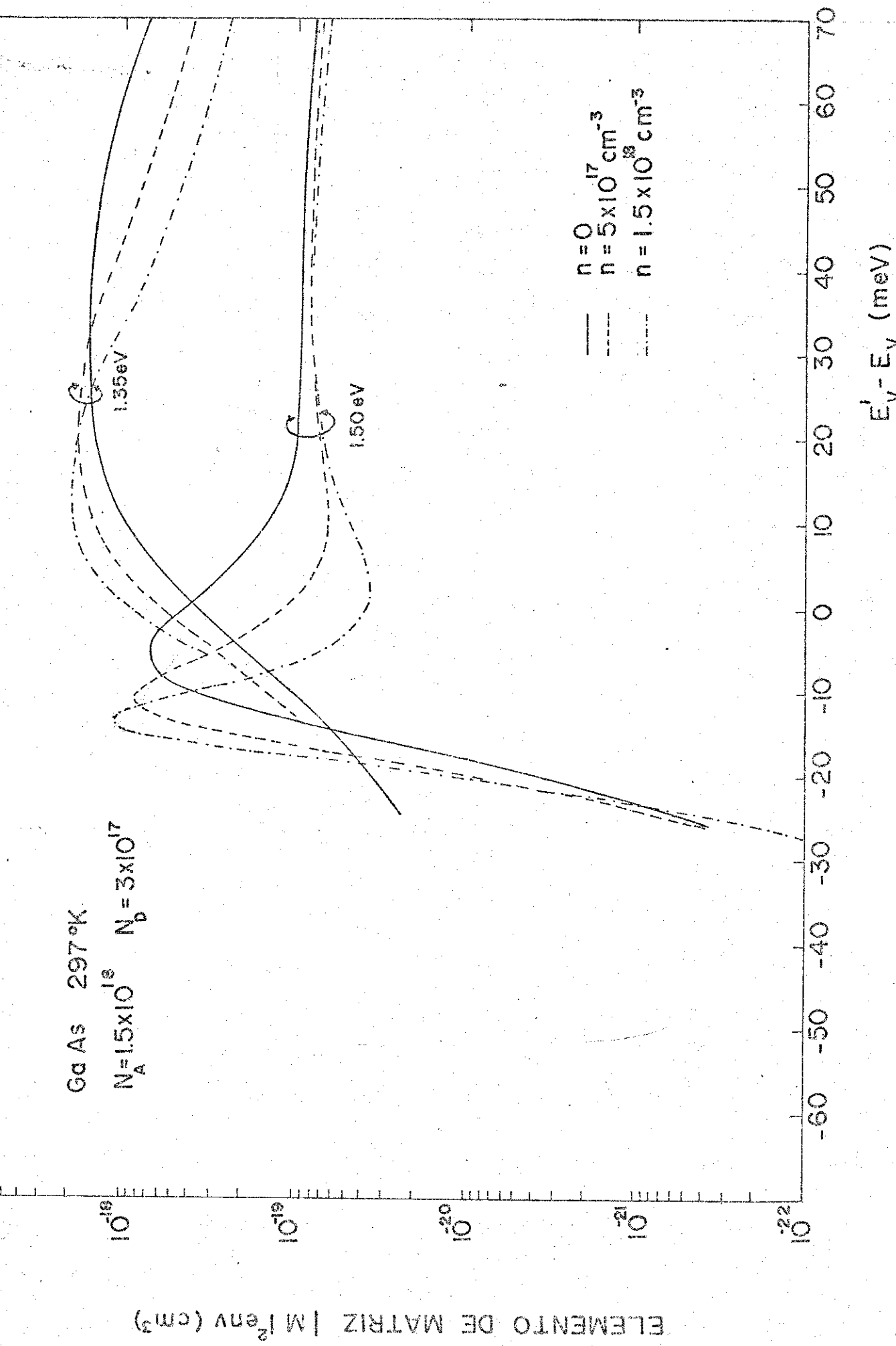


Fig. 9.6 . Envolvente do elemento de matriz(usado para as transições entre estados nas bandas com caudas), em função da energia do estado na banda de valência(E'_V), referida à energia correspondente ao topo da mesma(E_V).

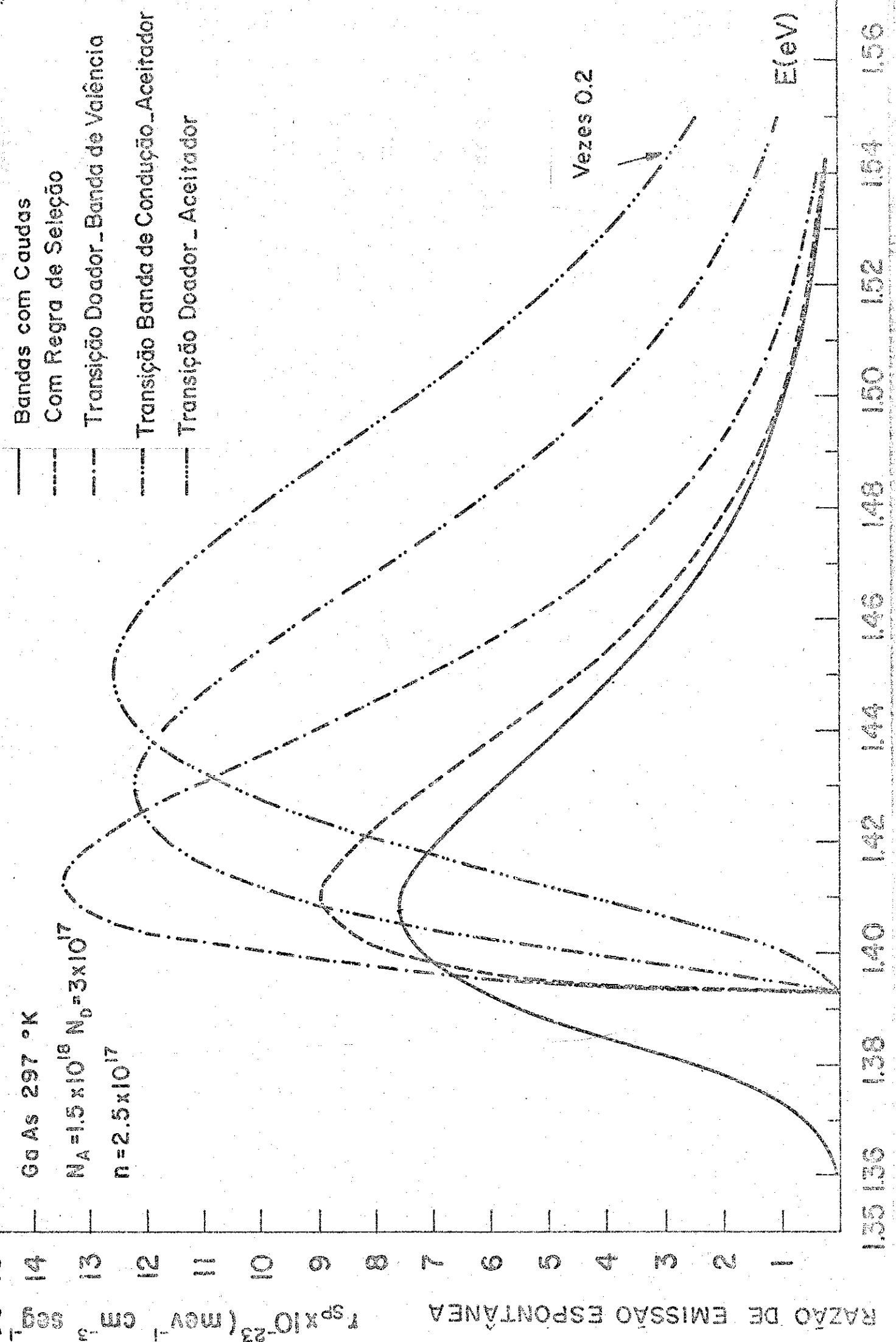


Fig. 9.7 . Espectros de Emissão espontânea para o modelo de bandas parabólicas (com seus 4 tipos de transições), e para o modelo de bandas com cauda

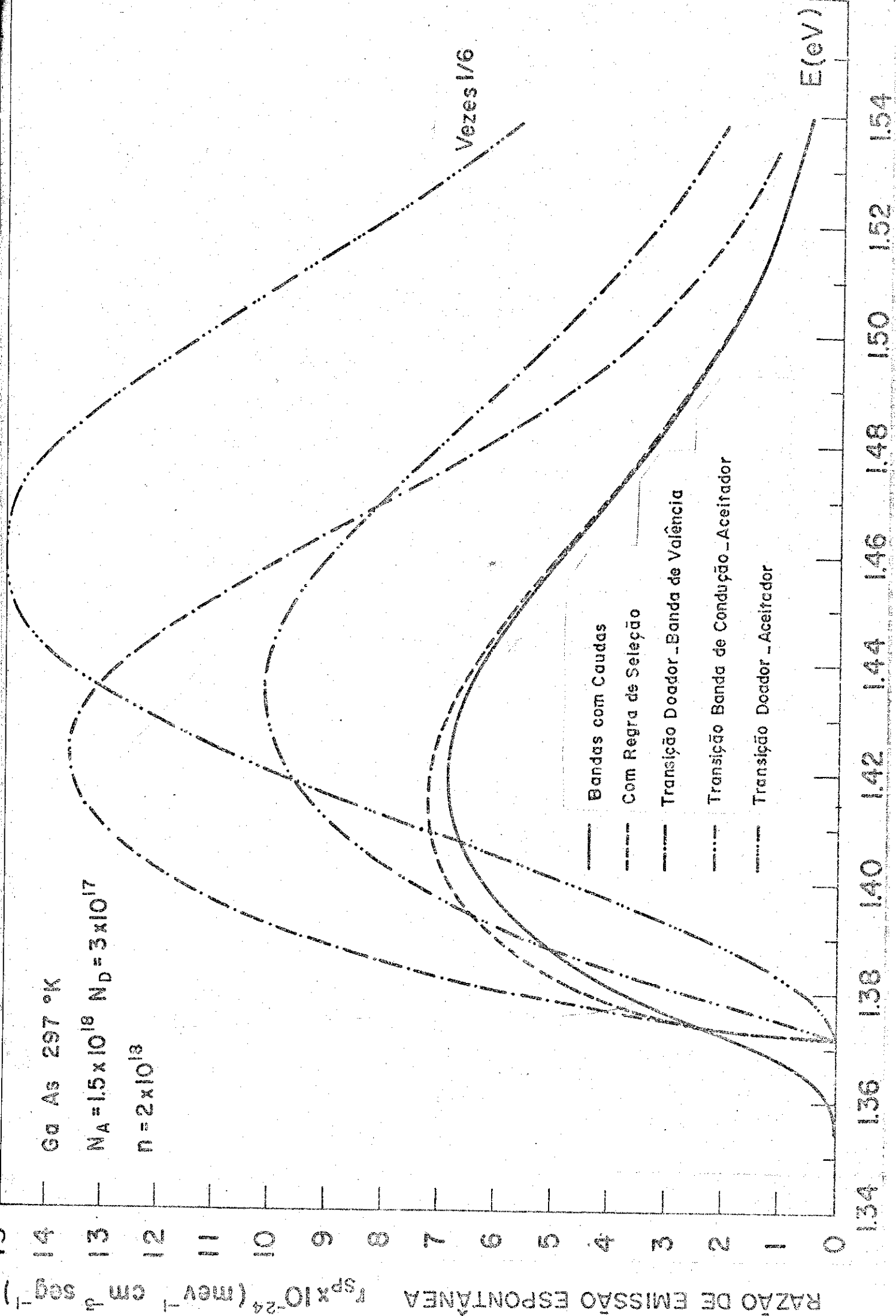


Fig 9.8 . Espectros de emissão espontânea do GaAs tipo p, para o modelo de bandas parabólicas, e o modelo de bandas com caudas.

O valor da injeção na fig. 9.7 corresponde a uma injeção baixa, pois não é suficiente para se obter ganho num laser de GaAs das características apresentadas (para o que precisa-se neste caso de $n \sim 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Já a injeção usada para se obter a fig. 9.8 é suficiente para ter ganho. Nestas figuras nota-se que a intensidade da curva correspondendo ao elemento de matriz da transição doador-aceitador é bem maior do que as outras, de um fator ~ 9 em relação à curva de bandas com caudas; isto é consequência do fato deste tipo de transições ter um elemento de matriz constante no qual não existe regra de seleção no vetor de onda do elétron, o que permite um número muito maior de transições e consequentemente um aumento na intensidade da emissão espontânea. Nas quatro curvas correspondentes ao modelo de bandas parabólicas, a emissão só começa a partir de energias maiores do que a energia da banda proibida; a qual tem o valor de 1.393 eV e 1.372 eV nas figs. 9.7 e 9.8 respectivamente. Observa-se também das figuras que, para $E < 1.40$ eV, nenhuma das 4 curvas correspondentes às bandas parabólicas consegue descrever a parte de baixa energia do espectro de emissão espontânea, já que esta parte da curva de $r_{sp}(E)$ tem sua origem nas transições entre as caudas das bandas de condução e valência, as quais só são devidamente consideradas no modelo de bandas com caudas.

Nas figuras 9.7 e 9.8 nós podemos observar que para a curva correspondente à transição doador-aceitador, a parte de baixa energia do espectro de $r_{sp}(E)$ apresenta também uma "cauda" deslocada aproximadamente uns 15 meV para energias maiores com relação à curva do modelo de bandas com caudas; isto vem do fato do elemento de matriz da transição ser constante, independente da energia, a diferença dos elementos de matriz das outras transições, os quais são funções da energia que só permitem transições numa determinada faixa de energias. Portanto, deste comportamento se deduz que a aparição de caudas nos espectros de emissão, podem também ser produzidas pelas transições eletrônicas envolvidas, e não apenas por caudas nas densidades de estados das bandas.

Nas figs. 9.7 e 9.8 nota-se que para altas energias (>1.45 eV) existe uma aproximação muito boa ao resultado do modelo de bandas com caudas, por parte da curva correspondente às transições com regra de seleção entre bandas parabólicas; na fig.9.7 a posição do pico difere em apenas 2 meV, e na fig.9.8 essa diferença é de 5 meV. Repare-se que para alta injeção, acima de 1.52 eV, as duas curvas são praticamente iguais.

Com as razões de emissão espontânea já calculadas, a obtenção das razões de emissão estimulada segue, diretamente, usando a eq. 4.9. Como já foi mencionado antes, para os valores de dopagem e temperatura que nós estamos usando, a emissão estimulada, ou ganho, só começa para densidades de portadores injetados maiores do que $1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

As razões de emissão estimulada como função da energia do fóton E são apresentados nas figuras 9.9 e 9.10 para dois valores da injeção: $n=1,5-2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Nestas figuras são mostrados os resultados dos cálculos tanto para o modelo de bandas com caudas, assim como para os de bandas parabólicas com seus 4 possíveis tipos de transições. Tal como aconteceu para a emissão espontânea, cabe ressaltar o fato de que para energias abaixo ou da ordem da energia da banda proibida, nenhuma das 4 transições do modelo de banda parabólica dá uma descrição aproximada da curva de emissão estimulada resultante do modelo de bandas com caudas, que é a que mais se aproxima do caso real. Já para energias maiores do que aproximadamente 1.385 eV, a curva que corresponde às transições com regra de seleção é a que mais se aproxima da de bandas com caudas, embora a aproximação não seja tão boa como no caso da emissão espontânea. Nas duas figuras, a curva de traço contínuo corresponde ao modelo de bandas com caudas, as quais são responsáveis pela porção de baixa energia (energia menor do que da banda proibida) na emissão estimulada.

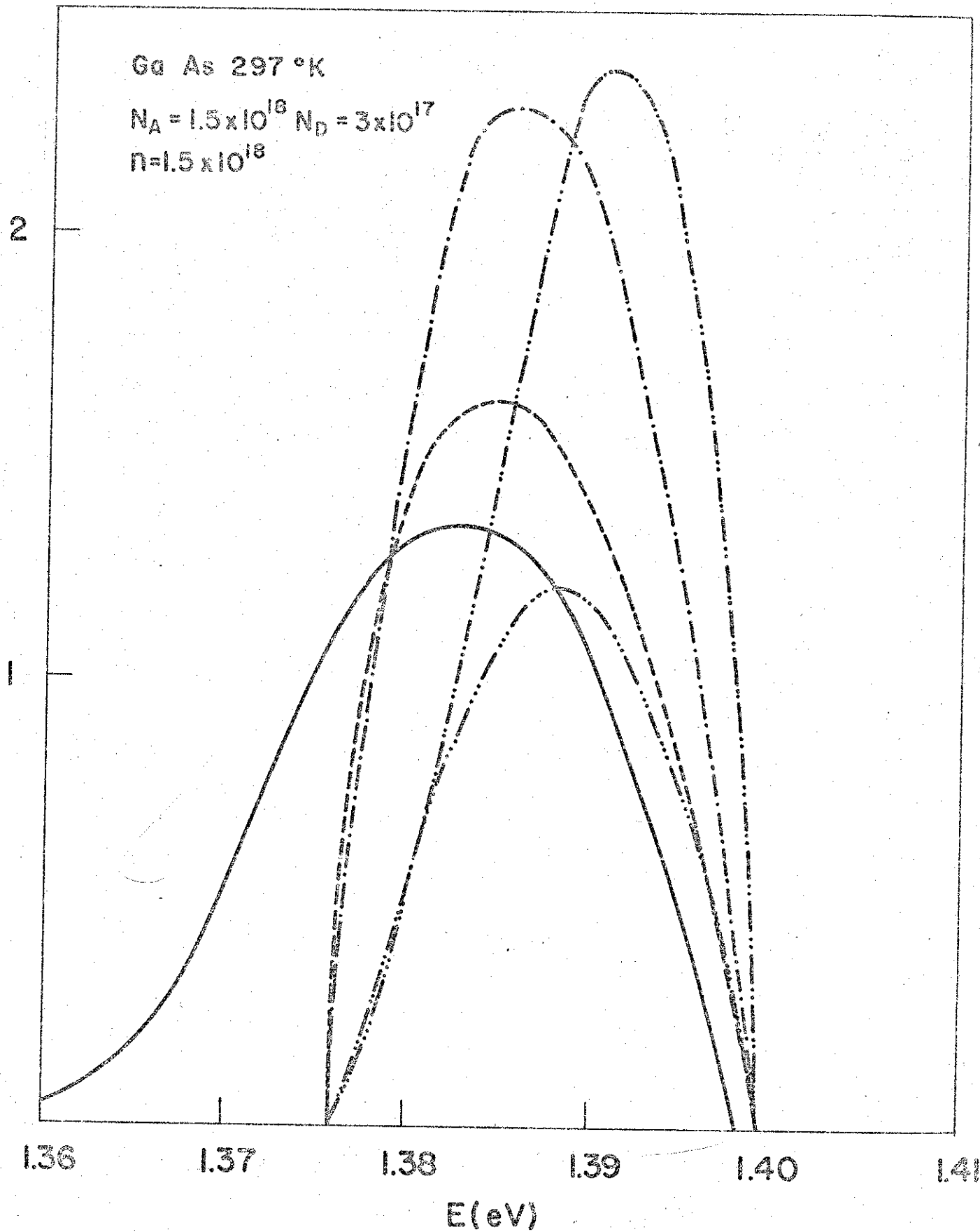


Fig. 9.9 . Espectros de emissão estimulada calculados para o modelo de bandas parabólicas (4 transições), e para o modelo de bandas com caudas. A identificação das curvas segue as mesmas linhas do que na figura anterior. Para esta injeção: $g_{\max} = 138 \text{ cm}^{-1}$.

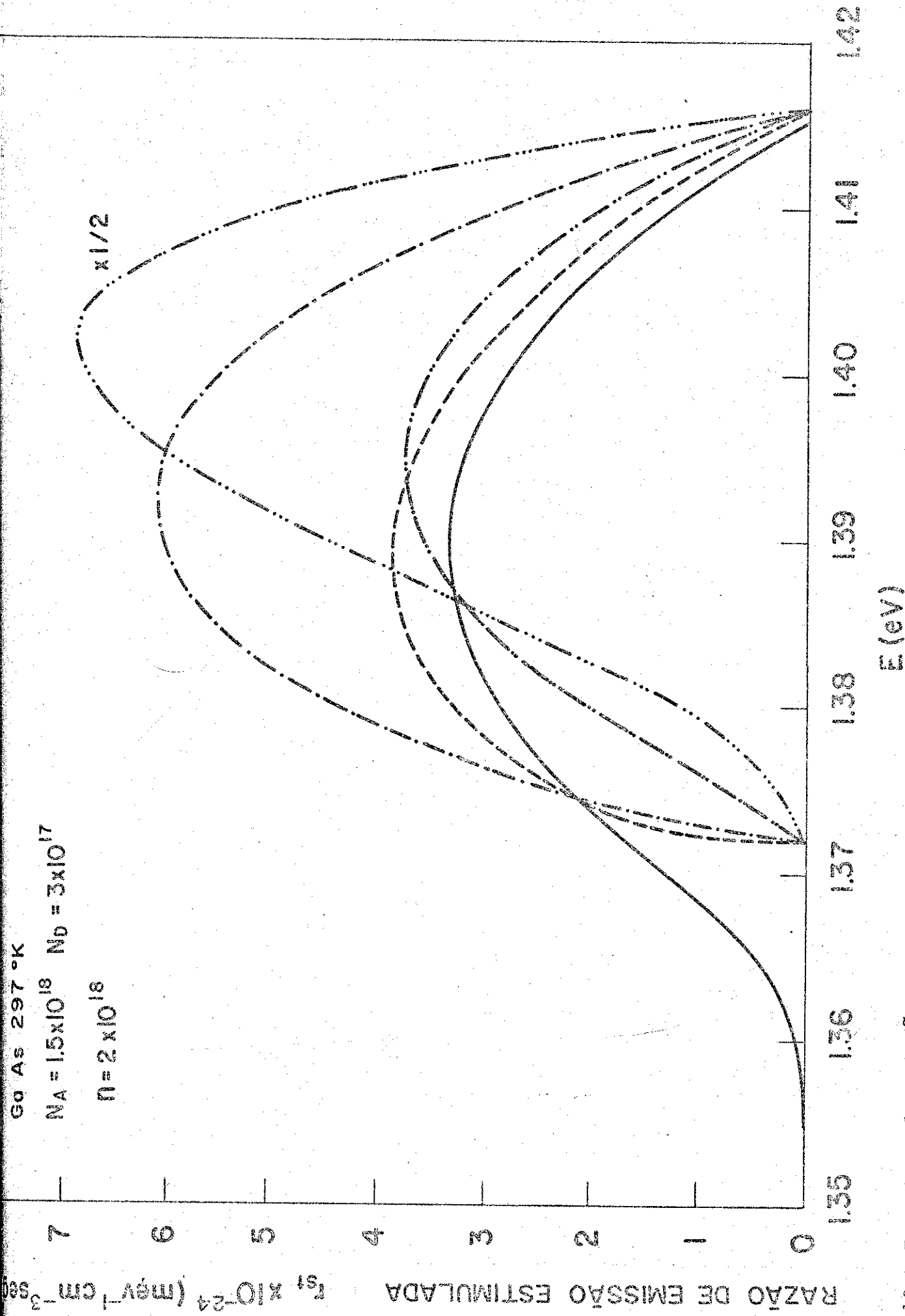


Fig. 9.10 . Espectros de emissão estimulada obtidos para bandas parabólicas (linhas tracejadas), e bandas com caudas (linha contínua). Os tipos de tracejado seguem as regras da fig. 9.8. Para esta injeção: g_{max} 340 cm

No capítulo 2 na eq. (2.31) obtivemos a condição para a existência de absorção negativa, ou ganho, a qual, na nossa notação de F_C e F_V como os quasi-níveis de Fermi, referidos às extremidades das bandas, tem a forma:

$$F_C + F_V + E_g > E = h\nu \quad (9.4)$$

Portanto, para uma injeção n fixa, $F_C + F_V + E_g$ é uma constante, e então, existirá emissão estimulada só para energias menores do que a soma $F_C + F_V + E_g$. Isto é mostrado nas figs. 9.9 e 9.10. Nessas figuras nota-se que existe uma diferença no ponto de corte ($E = F_C + F_V + E_g$), entre o modelo de bandas parabólicas e o de bandas com caudas. A razão desta diferença em energia é porque $F_C + F_V$ é menor para as bandas com caudas devido à contribuição dos estados nas caudas ao se fazer a integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_C(E) \left[1 + \exp \left(\frac{E - F_C}{kT} \right) \right]^{-1} dE$$
, o que resulta num valor de F_C menor do que o obtido usando-se densidade de banda parabólica. O mesmo acontece para F_V na banda de valência. Das figs. 9.9 e 9.10 vemos que a diferença no valor de $F_C + F_V$ é pequena, da ordem de 1.2 meV.

9.6 Coeficiente de Absorção

O coeficiente de absorção $\alpha(E)$, obtem-se uma vez conhecida a emissão estimulada de acordo com a eq. 2.27. Vamos agora apresentar os resultados obtidos para as diferentes transições consideradas.

Nas figuras 9.11, 9.12, 9.13 e 9.14 mostram-se os espectros do coeficiente de absorção α em função da energia do fóton E obtidos usando-se densidades de estados tipo banda parabólica. A figura 9.11 corresponde às transições com regra de seleção,

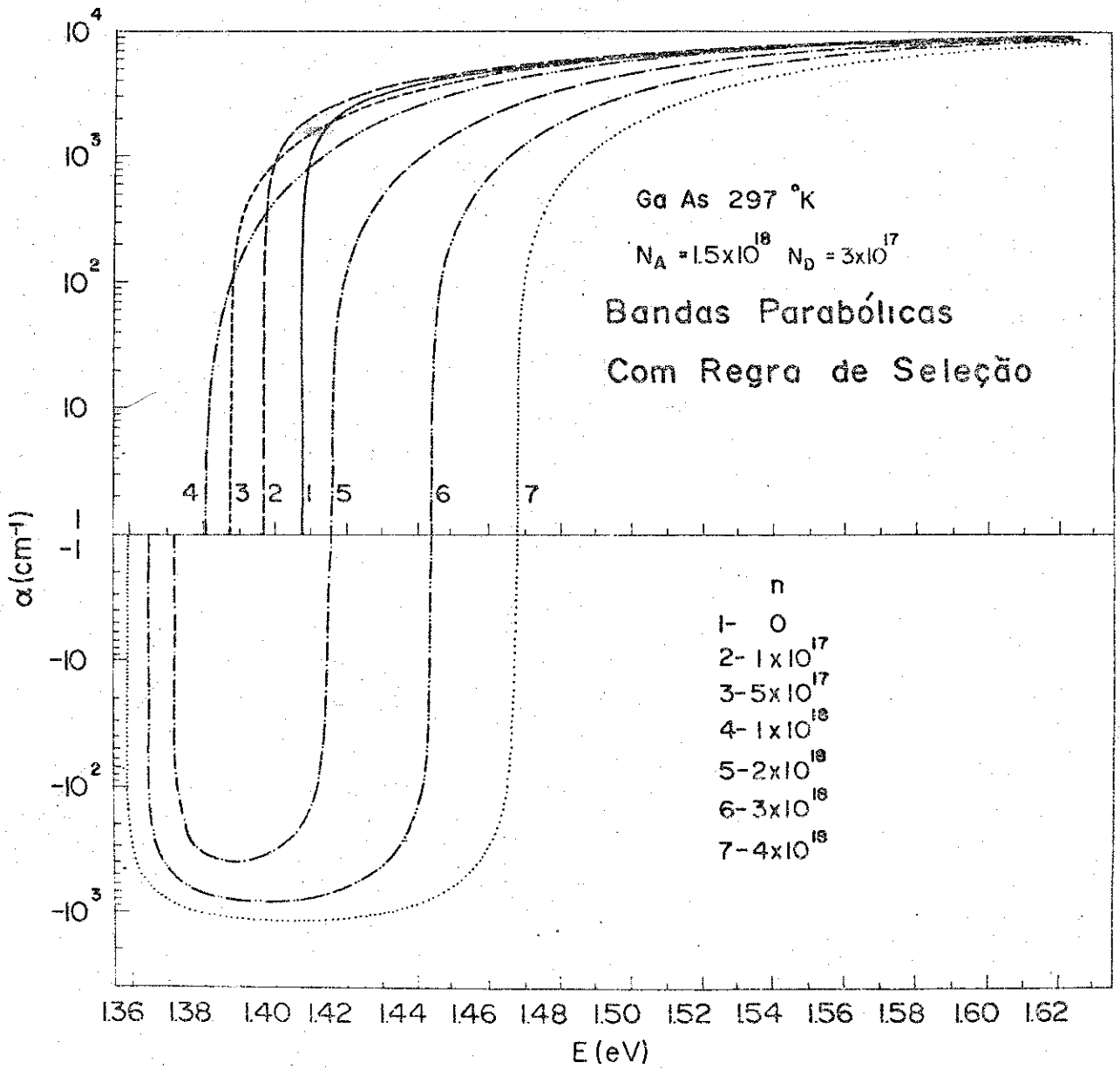


Fig 9.11 . Coeficiente de absorção, em função da energia do fóton E, para diferentes injeções n na faixa $0-4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Estas curvas correspondem ao modelo de bandas parabólicas junto com um elemento de matriz para transições banda-banda. A região de absorção negativa corresponde à região de ganho.

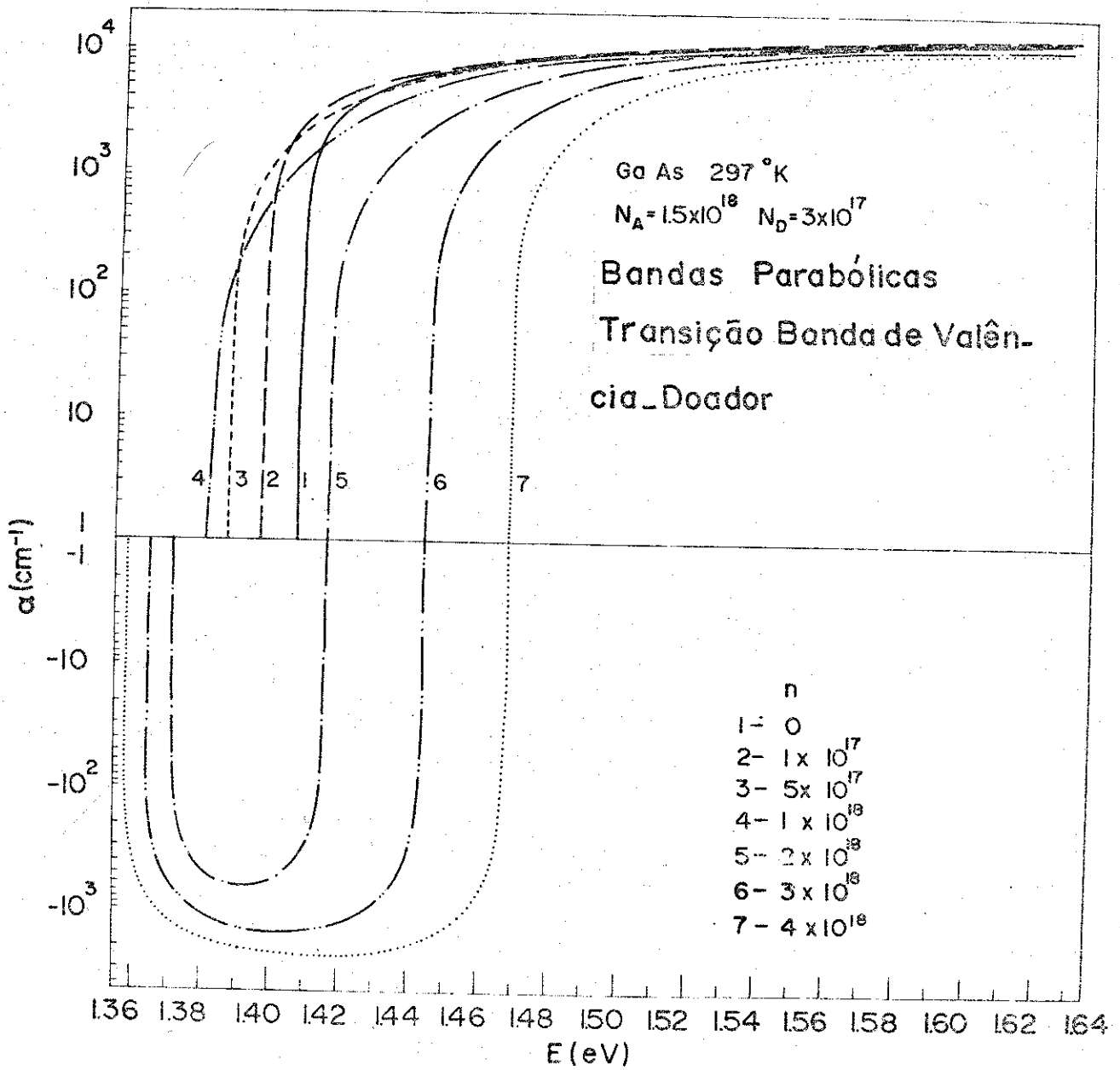


Fig. 9.12 . Curvas de absorção em função da energia para o GaAs, calculadas para injeções na faixa $0-4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Estes resultados correspondem ao modelo de bandas parabólicas com um elemento de matriz para transições da banda de valência a níveis doadores.

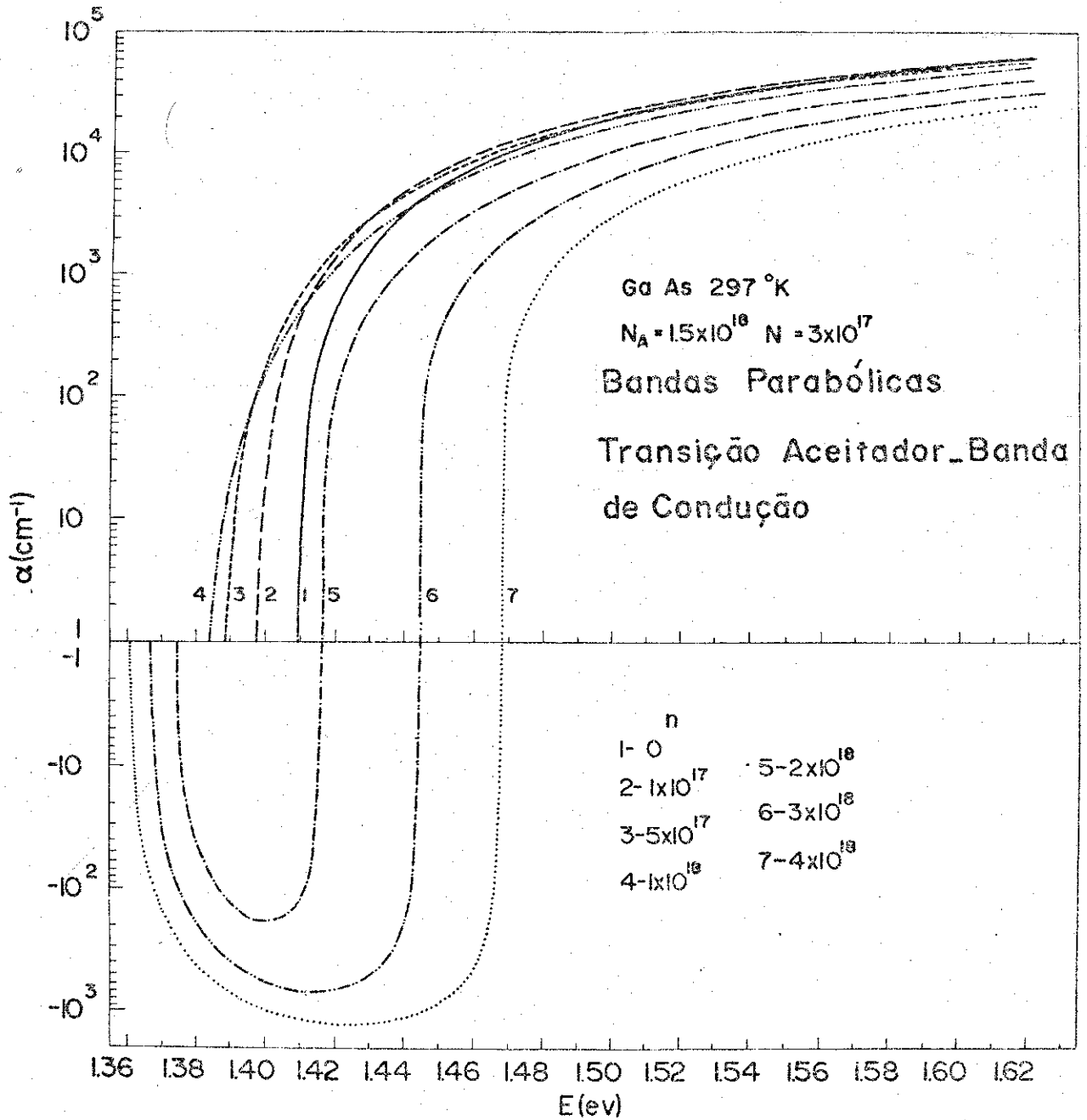


Fig. 9.13 . Variação da absorção no GaAs com a energia do fóton, para diferentes valores da injeção no intervalo $0-4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Estas curvas foram obtidas usando-se o modelo de bandas parabólicas, junto com um elemento de matriz correspondente às transições de níveis aceitadores à banda de condução.

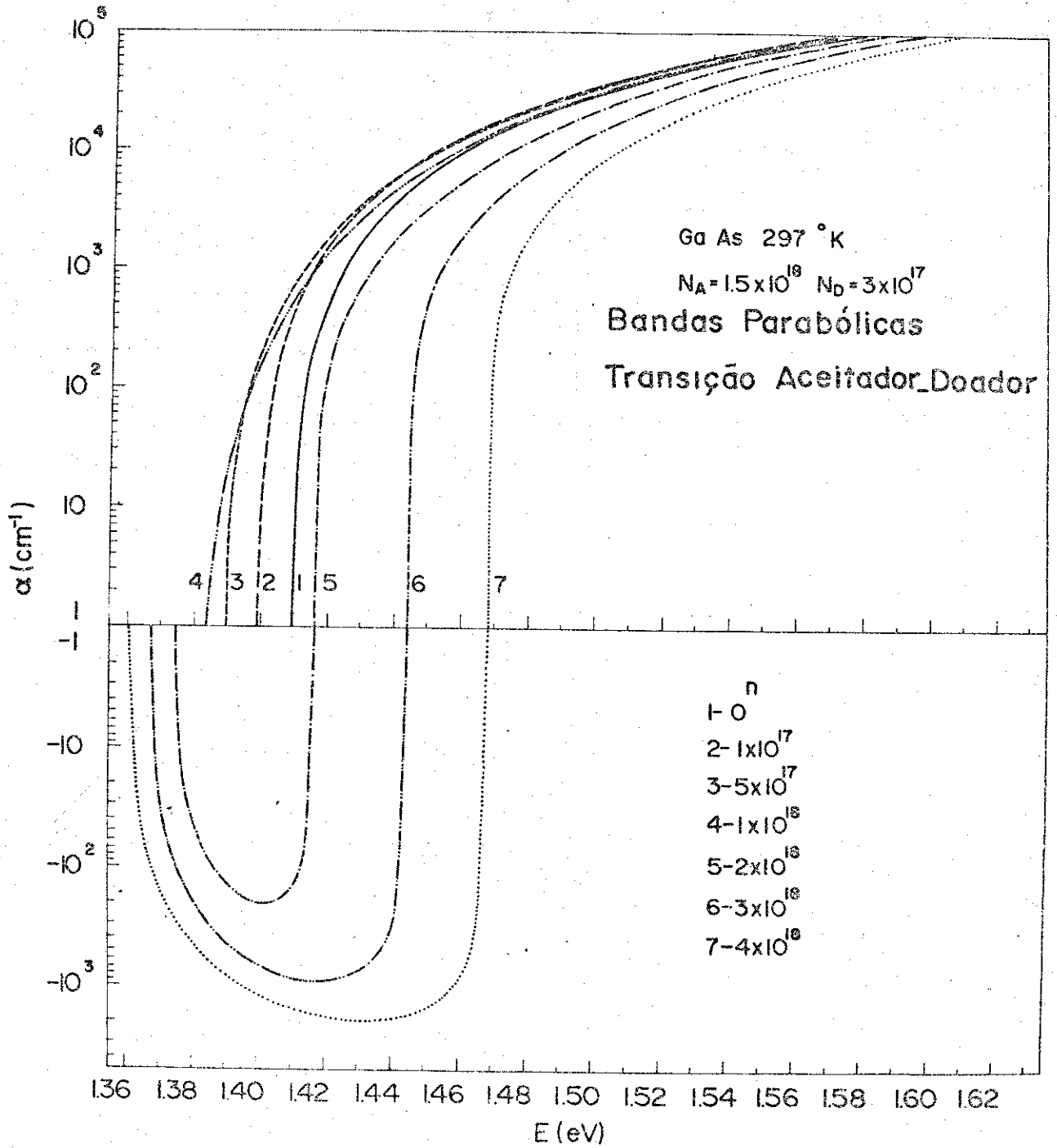


Fig 9.14 . Coeficiente de absorção em função da energia, para injeções na faixa n : $0-4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Estes resultados obtiveram-se usando o modelo de bandas parabólicas e mais o elemento de matriz correspondente às transições entre níveis aceitadores e doadores.

a fig. 9.12 às transições banda de valência-doador, a fig. 9.13 às transições aceitador-banda de condução, e a fig. 9.14 às transições aceitador -doador respectivamente. As diferentes curvas mostradas em cada figura correspondem a diferentes densidades de portadores injetados n , no intervalo $0-4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Um comportamento comum aos quatro tipos de transições, é o de que a medida que a injeção aumenta a partir de zero, ocorre um deslocamento da extremidade da absorção para baixas energias provocado pela diminuição da energia da banda proibida devida aos portadores injetados; isto acontece até uma injeção de aproximadamente $1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, após a qual, a injeção é suficiente para que os processos de emissão estimulada superem a absorção, de modo que exista ganho ($\alpha < 0$) para uma certa faixa de energias; isto é mostrado nas curvas 5, 6 e 7 de cada figura, correspondentes a injeções de 2, 3 e $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ portadores. Note-se que a medida que aumenta a injeção, aumenta também o intervalo de energias no qual $\alpha < 0$, assim como o ganho g_{max} do material, definido como o máximo valor da curva de ganho para uma injeção dada. A energia de g_{max} aumenta também ao aumentar n . Um outro detalhe a ser notado nestas curvas de absorção é o de que, para baixas injeções (menores do que 10^{18} cm^{-3}), a derivada na curva de absorção diminui ao se incrementar a injeção a partir de zero. O comportamento da derivada da curva de absorção é importante, já que pode-se mostrar⁽²⁸⁾, que as relações de dispersão de Kramers-Kronig podem ser escritas de modo que o cálculo do índice de refração depende da derivada da absorção.

O coeficiente de absorção $\alpha(E)$ resultante dos cálculos usando o modelo de bandas com caudas, é apresentado na figura 9.15 para várias densidades de portadores injetados n a partir de $n=0$. O primeiro a ser notado é que para baixas injeções o crescimento de α não é abrupto, mas apresenta uma cauda devido às caudas nas densidades de estados. Também deve-se observar que ao aumentar a

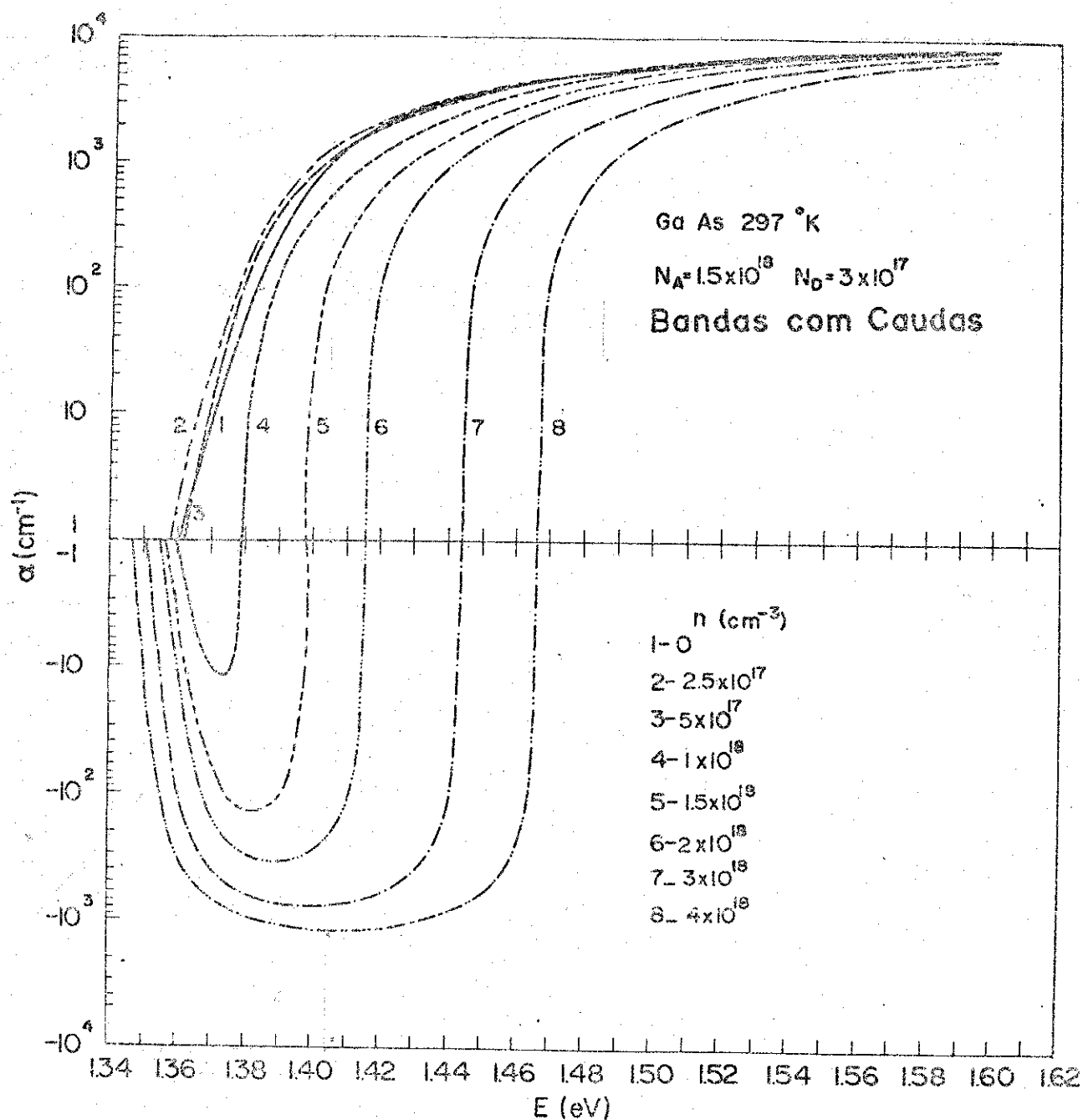


Fig 9.15 . Curvas de absorção, para o GaAs tipo p, em função da energia, para diferentes densidades de portadores injetados n , obtidas usando-se o modelo de bandas com caudas, junto com o elemento de matriz discutido no capítulo 6. Para altas energias, a absorção praticamente independe da injeção.

injeção a partir de zero, a extremidade da absorção se desloca primeiro para baixas energias, e, continuando a aumentar n , desloca-se para altas energias até atingir uma injeção que permita a existência de ganho, o que acontece para $n \sim 1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. O comportamento da extremidade da absorção, explica-se pelo fato de que às baixas injeções a diminuição na energia da banda proibida produzida pelos portadores injetados é maior do que o incremento na separação dos quasi-níveis de Fermi, deslocando assim a extremidade de α para baixas energias; mas, ao se continuar a aumentar n , o efeito de preenchimento da banda, chega a ser dominante, invertendo a situação, com a extremidade de α indo para energias maiores. Observa-se que para energias suficientemente altas ($> 1.60 \text{ eV}$) a absorção praticamente independe da injeção n .

Com o objetivo de comparar os resultados obtidos com os diferentes modelos de bandas e os diferentes tipos de transições, apresentamos nas figuras 9.16, 9.17 e 9.18, as curvas de absorção em função da energia para cada modelo e para 3 diferentes densidades de portadores injetados: $n=0, 2.5 \times 10^{17}$ e $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

A fig. 9.16 corresponde ao caso de sem injeção ($n=0$), incluindo-se nesta figura a curva experimental (curva 1) obtida por Casey (39) numa amostra de GaAs tipo p, das características já sinaladas, à temperatura de 297°K . A curva 3 é a que corresponde ao modelo de bandas com caudas. Comparando as curvas 1 e 3, experimental e teórica, observamos que, para baixas energias, o resultado teórico prediz valores de α menores que os experimentais, e que a absorção diminui mais rapidamente na curva teórica do que na experimental; mostrando assim caudas maiores do que as calculadas. Existem várias razões possíveis para esta diferença:

- i) A concentração de impurezas nas amostras usadas foi maior do que a estimada por Casey (39). Nas amostras usadas, a concentração de buracos livres ($N_A - N_D$) foi determinada usando-se

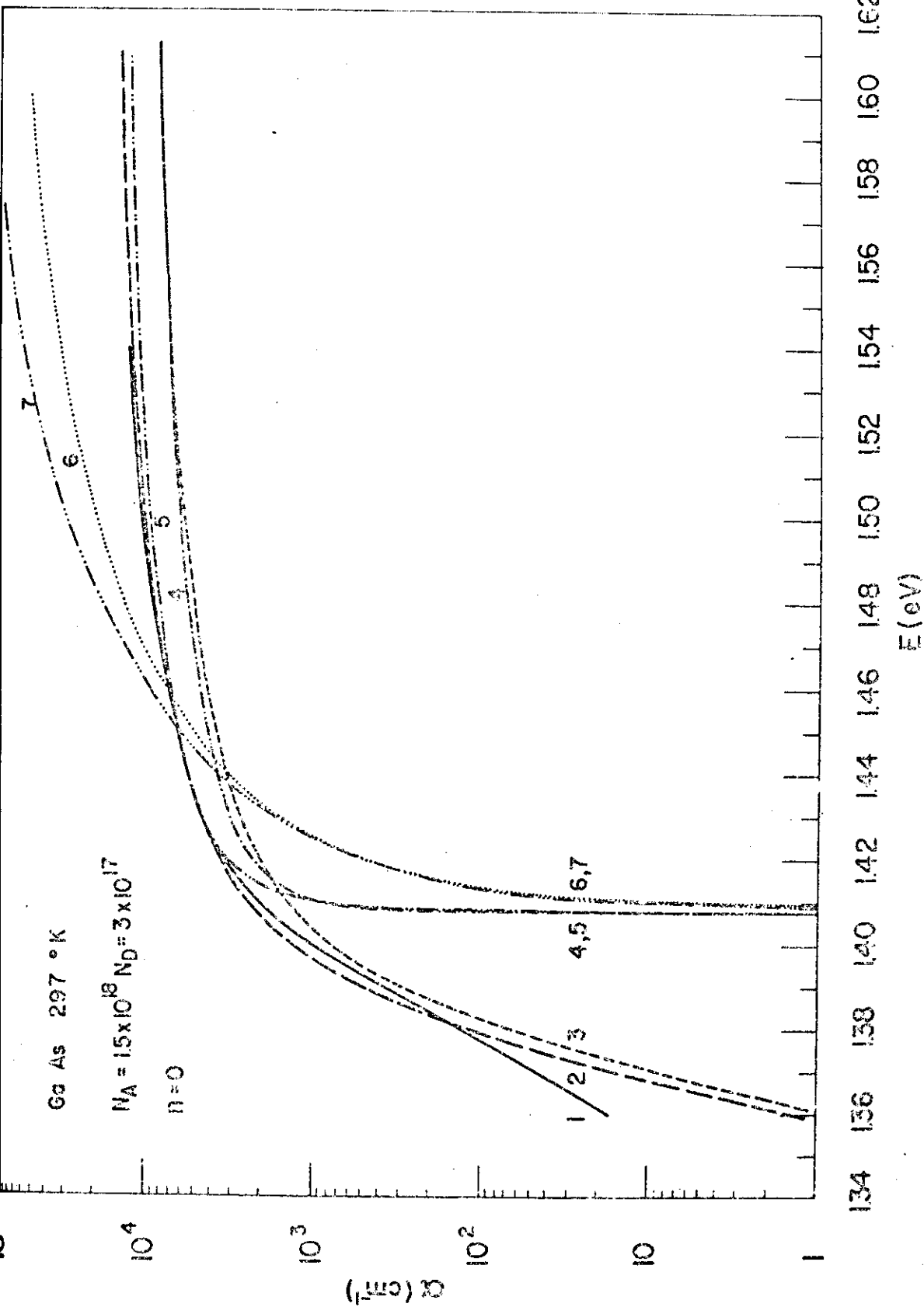


Fig 9.16 . Comparação das curvas de absorção obtidas com os diferentes modelos usados, no caso de injeção zero. A identificação das curvas é a seguinte: 1---experimental (Casey); 2---bandas com caudas x 1.7; 3-----bandas com caudas; 4-----b.p., transição BV-BC; 5-----b.p., transição BV-D; 6-----b.p., transição A-D; 7-----b.p., transição A-D.

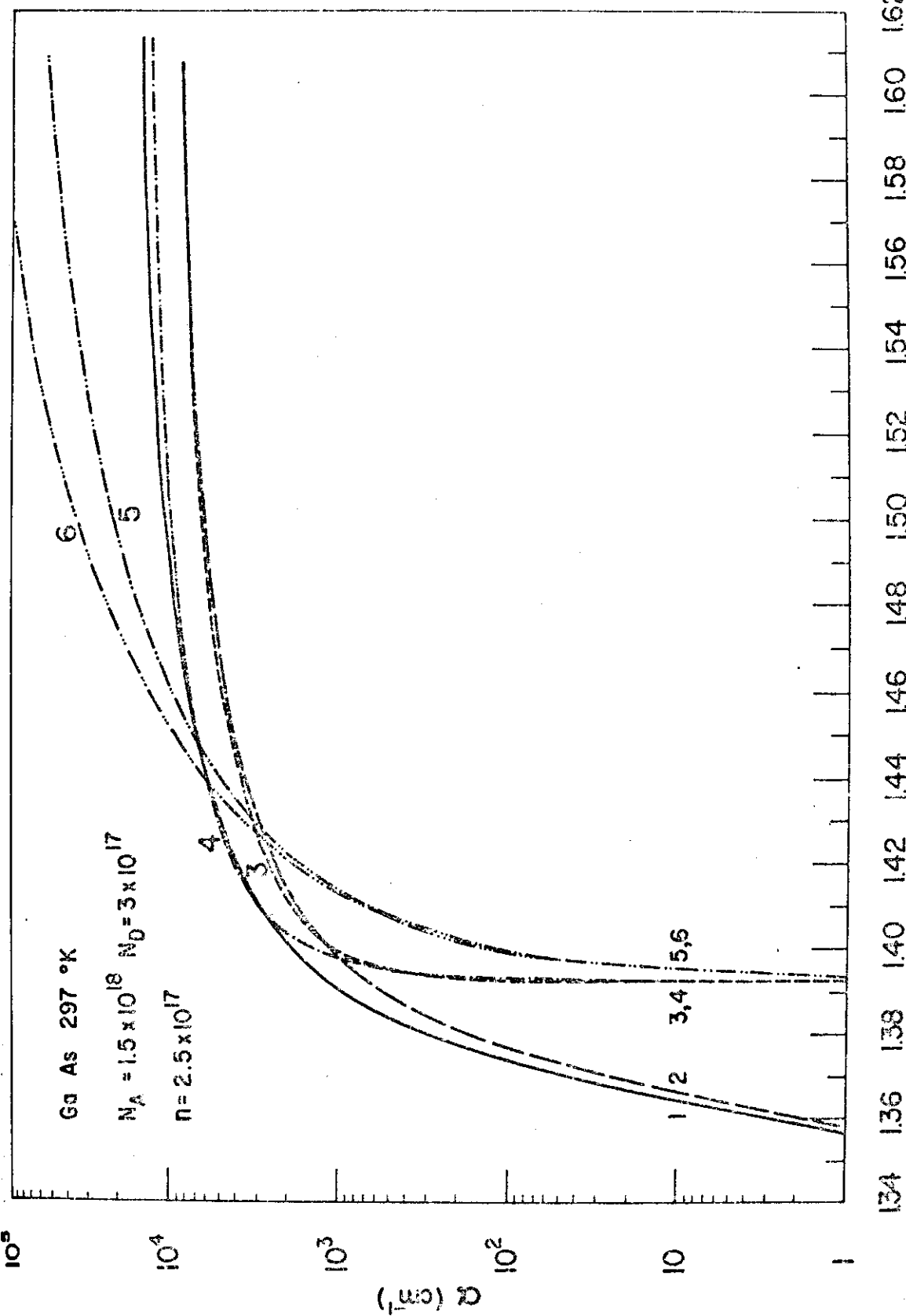


Fig. 9.17

. Curvas de absorção, para os diferentes modelos usados, com uma injeção de $n=2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. 1----- bandas com caudas xl.7; 2-----b.p.,transição BV-BC; 3-----b.p.,transição BV-D; 4-----b.p.,transição A-D; 5-----b.p.,transição A-D; 6-----b.p.,transição A-D.

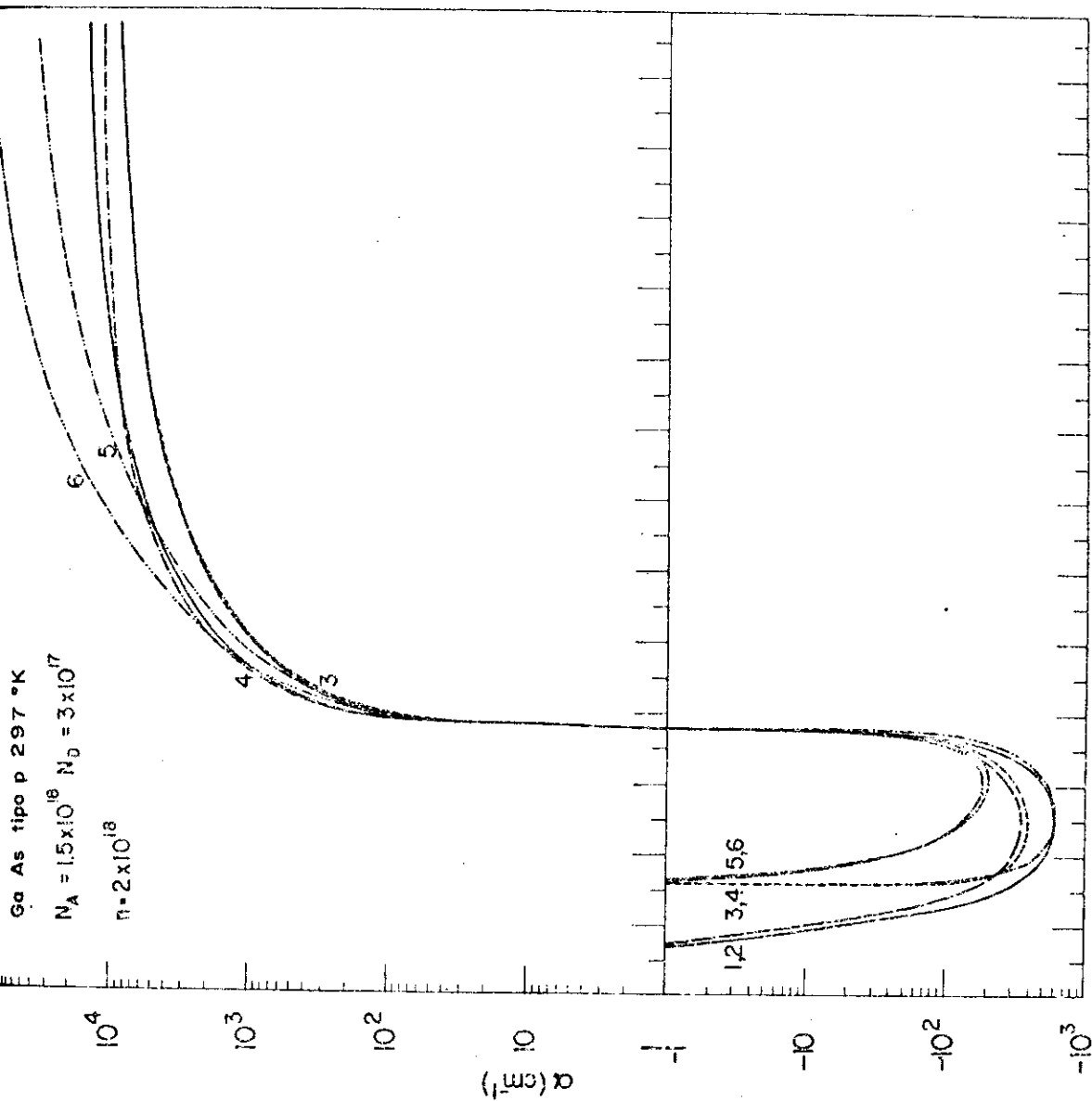


Fig. 9.18 . Coeficiente de absorção vs. E para os diferentes modelos usados. A identificação das curvas segue a da fig. 9.17. A curva tracejada 2 corresponde aos resultados de bandas com caudas. A injeção neste caso foi de $n=2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

medidas de efeito Hall; o conhecimento da concentração de aceitadores N_A , e de doadores N_D para uma dada concentração de buracos é difícil. No caso das amostras dopadas com Zn (como foi usada e correspondente a $p=1.2 \times 10^{18}$), resultados de estudos prévios de Ermanis e Wolfstirn⁽⁴²⁾ mostram que a razão N_A/N_D é de 5.0. Porém, pode ter acontecido que nas amostras de Casey a razão de compensação fosse diferente de 5, resultando numa maior concentração de impurezas do que a estimada.

- ii) O modelo gaussiano usado no cálculo da densidade de estados de Kane, ignora a assimetria das flutuações do potencial. No capítulo 3 quando tratamos da dedução da densidade de estados de Kane, quando procurávamos pela função de distribuição de probabilidade, na equação 3.17 usamos a aproximação de usar só até o termo quadrático em r^2 . De fato se poderia ter continuado a expansão da exponencial, em particular, quando se considera o termo em r^3 , Morgan⁽²³⁾ mostra que aparecem assimetrias nas flutuações do potencial produzidas pelo momento de terceira ordem $\langle n^3 \rangle$, dando como resultado um aumento na cauda da banda de valência e uma diminuição na cauda da banda de condução. Uma vez que a massa efetiva dos buracos pesados é maior por um fator de ~8 do que a massa efetiva dos elétrons, a contribuição da densidade de estados na banda de valência vai dominar no cálculo da absorção, dando, como resultado, um aumento na largura da cauda da absorção, o que está de acordo com os dados experimentais.
- iii) A função de Kane, na região de baixa energia da cauda, diminui mais rapidamente do que a densidade de Halperin e Lax. No capítulo 5, quando se tratou da aproximação à densidade de estados, vimos que o parâmetro η da função de Kane, foi ajustado de modo a coincidirem as densidades de estados de Kane e

Halperin e Lax para um valor particular da energia na região onde são válidos os cálculos de Halperin e Lax para as caudas. Porém, o valor da energia escolhido foi até certo ponto arbitrário, já que, em princípio, qualquer valor da energia no intervalo onde são válidos os resultados de Halperin e Lax poderia ter sido escolhido para se fazer o ajuste. Assim, se em vez de escolher a energia que satisfaz à condição: $b(v) = 10\xi/E_Q^2$, tivéssemos escolhido aquela que satisfizesse: $b(v) = 12\xi/E_Q^2$, o ponto de ajuste estaria mais dentro da cauda, aumentando a profundidade dela, e consequentemente aumentando o valor da absorção na cauda.

Com respeito ao comportamento das curvas 1 e 3 para altas energias (acima de 1.42 eV), observa-se que, fora um fator multiplicativo, o comportamento delas é semelhante. A discrepância entre os valores teórico e experimental da absorção para altas energias, não tem sido até agora entendida.

Devido ao grande valor da absorção no GaAs para altas energias ($> 10000 \text{ cm}^{-1}$), as medidas experimentais de absorção devem ser feitas com amostras muito finas $< 1 \mu\text{m}$. Isto pode levar a modificações, incontrolláveis até, das medidas de transmissão.

Outra possível causa da discrepância de α para altas energias pode estar na não parabolicidade das bandas. Para transições de absorção de alta energia, os estados que fazem parte da transição serão estados na parte não perturbada das bandas, isto é, estados de $\vec{k}$ significativo para os quais não é mais válida a aproximação $E \propto k^2$, na qual a massa efetiva dos portadores na banda é constante, independente da energia. Então, neste caso de transições de alta energia (acima da energia da banda proibida), a massa efetiva passa a ser dependente da energia, aumentando ao se aumentar a energia da transição⁽⁴³⁾. Isto vai se refletir num aumento da absorção para energias altas, o que estará de acordo com os dados

experimentais. Por exemplo, para uma energia do fóton de 1.55 eV, a absorção resultante de se levar em conta a variação da massa efetiva dos elétrons com a energia vai aumentar de um valor de $\sim 7.4 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ para $\sim 1.26 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

Um fator também importante para se obter uma boa descrição de α para altas energias é o uso de um elemento de matriz que descreva bem as transições envolvidas. Nós usamos o elemento de matriz desenvolvido por Stern, no qual as funções de onda dos estados nas bandas, foram funções "ad hoc" escolhidas de modo que o elemento de matriz tivesse o comportamento limite correto para altas energias, onde a regra de seleção em $\vec{k}$ é aplicável. Na fig. 9.16, nós podemos ver que a curva 5 correspondente à transição banda de valência-doador dá uma muito boa aproximação à curva experimental (1), para energias acima da energia da banda proibida. Quando comparados o elemento de matriz da transição banda de valência-doador, com o correspondente ao modelo de bandas com caudas, resulta que para altas energias, o primeiro é uma função bem mais fechada em energia e com intensidade muito maior do que o segundo; e é isto que produz o aumento de absorção para alta energia observado na curva 5. Será portanto necessário, o estudo do elemento de matriz ótico no qual sejam incluídos os efeitos da alta dopagem e os efeitos coulombianos, para poder se reconciliar a teoria e o experimento nos lasers de semicondutor.

Na figura 9.16, a curva 2 corresponde à absorção da curva 3 multiplicado por um fator 1.7, isto foi feito a fim de mostrar que não é só um fator multiplicativo o que diferencia as curvas teórica e experimental, e que a discrepância no fator 1.7 entre as curvas 1 e 3 é válida só para alta energia.

Na figura 9.17 mostram-se as curvas de absorção resultantes para todos os modelos, só que agora para uma injeção de $2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Nesta figura a curva 2 representa o cálculo do modelo de bandas com caudas, enquanto que a curva 1 corresponde à

absorção da curva 2 vezes o fator 1.7. A curva 3 é a correspondente às transições com regra de seleção; neste ponto devemos ressaltar o fato de que para energias maiores a 1.42 eV, a curva 3 aproxima muito bem à curva 2, dando como resultado o mesmo que se falou com respeito à emissão espontânea, isto é, que a altas energias os resultados do modelo de bandas com caudas, podem muito bem ser aproximadas pelo modelo de transições com regra de seleção.

Para uma injeção de $n=2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, com o qual já se tem ganho, as curvas de absorção resultantes $\alpha(E)$ estão dadas na figura 9.18; nesta, a curva 2 é a correspondente às bandas com caudas, e a curva 3 (traço contínuo) é a das transições com regra de seleção. Observamos que na região onde se tem ganho, g_{max} , para as curvas 2 e 3, ocorre aproximadamente à mesma energia (diferença de ~1meV); e que o valor de g_{max} não é muito diferente (~400 cm^{-1} para regra de seleção e ~350 cm^{-1} para as caudas). Naturalmente, devido à presença dos estados nas caudas, a região em energia onde existe ganho é maior para as bandas com caudas do que no modelo parabólico.

Vamos agora nos restringir ao modelo de bandas com caudas, o qual, para as dopagens usadas nos lasers de GaAs, é o modelo mais correto. Já que os nossos cálculos foram feitos variando a densidade de portadores injetados n , pode-se fazer, para uma energia fixa, o gráfico de $\alpha(E)$ como função de n . Na figura 9.19, nós apresentamos estas curvas para diferentes energias E na faixa de 1.36 eV - 1.40 eV, que para os dados usados, é onde ocorre a emissão estimulada. Nesta figura pode-se observar que, em geral, as curvas apresentam o seguinte comportamento: partindo de injeção zero, com E fixo, a absorção cresce ao aumentar n até atingir o máximo numa injeção de aproximadamente $n \sim 2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, após o que, a absorção começa a diminuir ao se aumentar n , podendo inclusive se tornar negativa para altas injeções, dependendo da energia considerada. Note-se que quanto maior for a energia do fóton E , serão precisas injeções cada vez maiores para se obter amplificação da

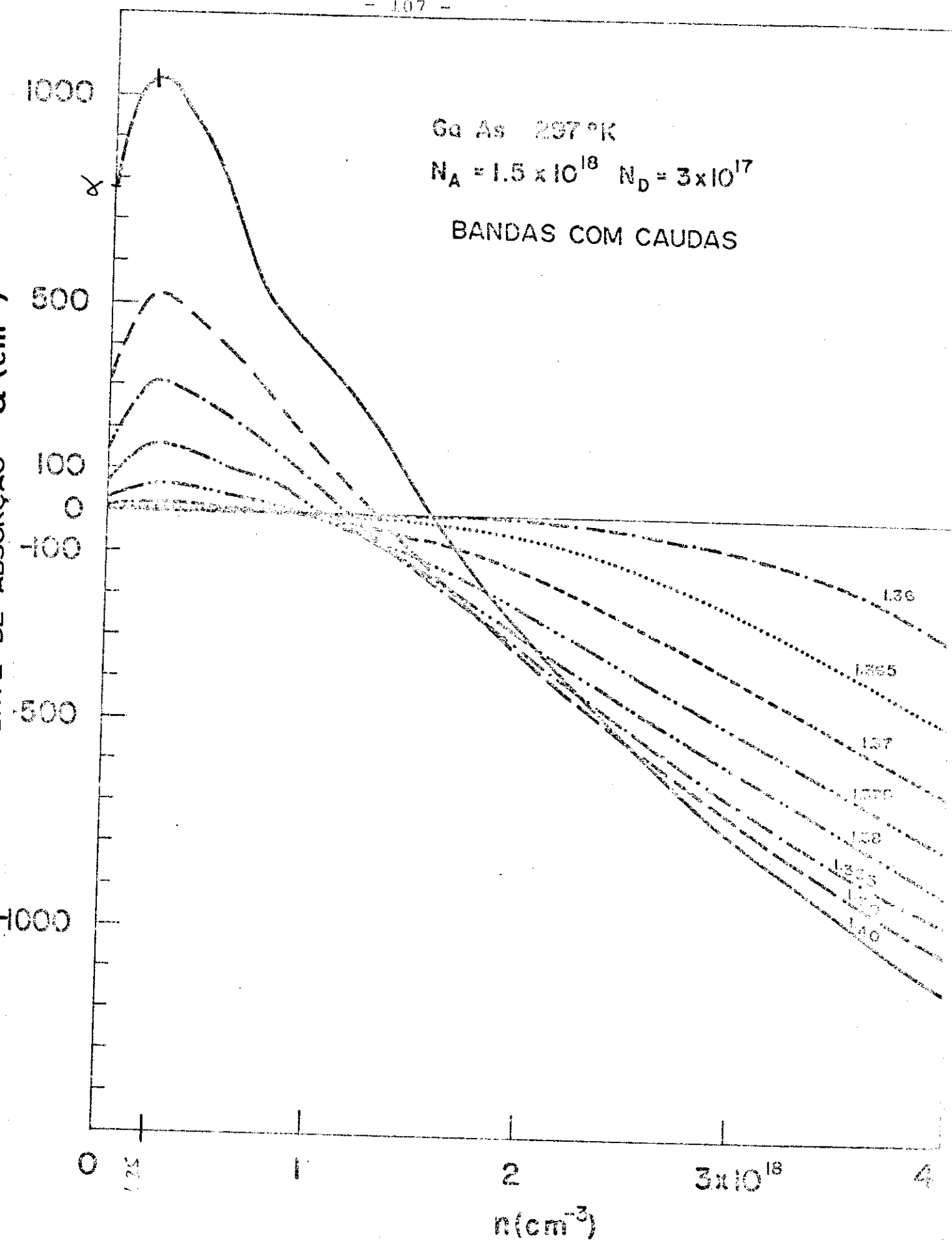


Fig 9.19 . Coeficiente de absorção do GaAs tipo p, em função da densidade de portadores injetados, para diferentes valores da energia do fóton E . Estes resultados correspondem ao modelo de bandas com caudas.

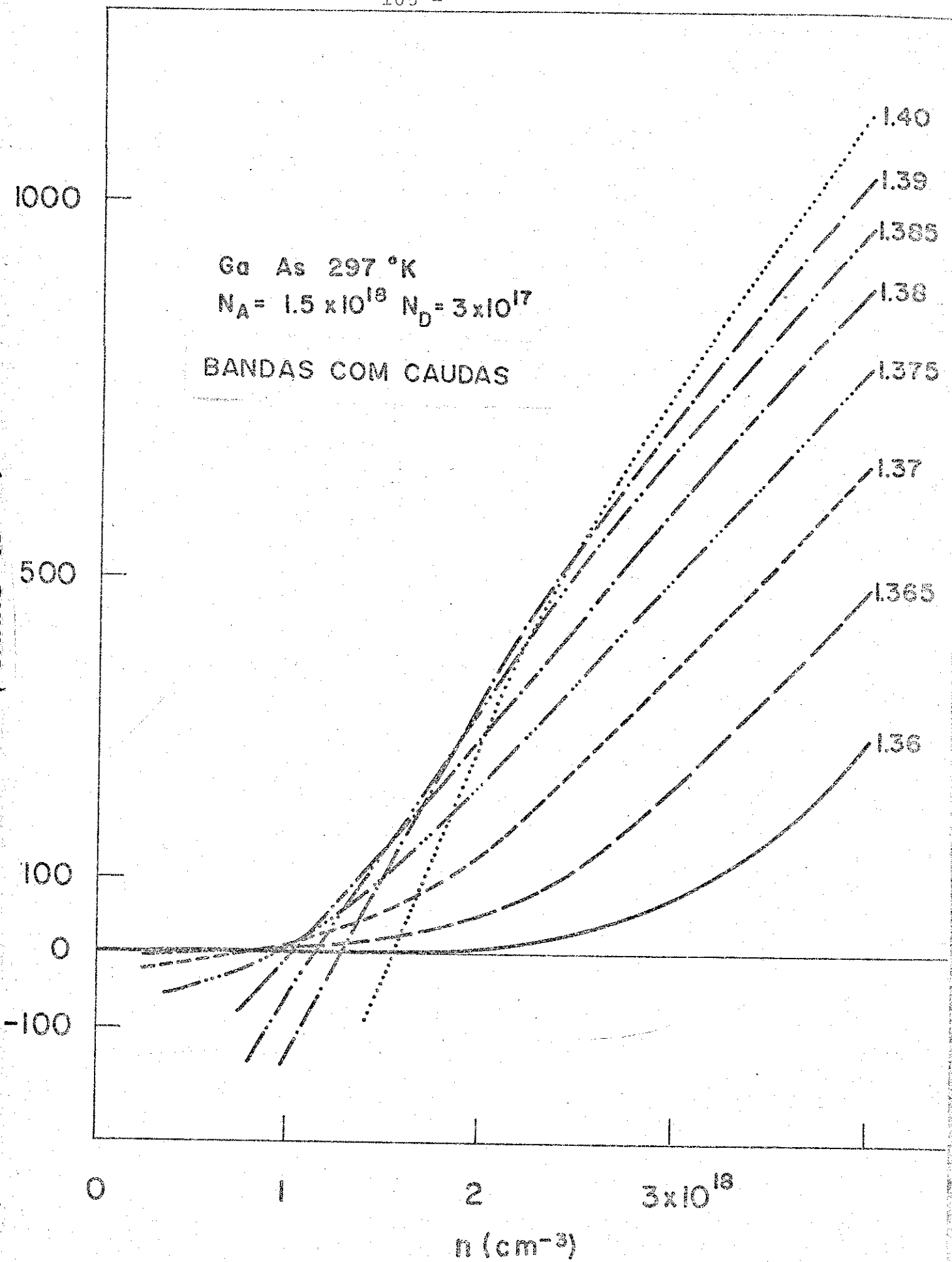


Fig 9.20 . Curvas de ganho para o GaAs tipo p, em função da injeção de portadores, para diferentes valores da energia do fóton E , e calculadas usando o modelo de bandas com caudas.

radiação (absorção negativa).

O ganho e o seu comportamento com a energia e a injeção é de primordial importância nos lasers de GaAs; é por isto que nós mostramos na figura 9.20 o gráfico do ganho em função da injeção para diferentes energias E . Podemos notar nesta figura que para altas injeções, acima de $2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, o ganho aumenta com a energia por uma injeção n fixa. Para injeções menores, o comportamento muda; por exemplo, para uma injeção de $1.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, o ganho é máximo para uma energia de $\sim 1.38 \text{ eV}$ e tem o valor de $\sim 110 \text{ cm}^{-1}$; já para uma injeção de 1.6×10^{18} , o ganho é máximo para uma energia de $\sim 1.385 \text{ eV}$ atingindo o valor de $\sim 175 \text{ cm}^{-1}$.

9.7 Índice de Refração

Uma vez que já foram calculados os espectros do coeficiente de absorção para os diferentes modelos e transições possíveis, estamos em condição de, finalmente, podermos calcular o índice de refração para o GaAs e seu comportamento com a injeção e a energia do fóton. Para isto, nós usamos o cálculo descrito no capítulo 7 baseado nas relações de dispersão de Kramers-Kronig.

Nós nos restringiremos a dar os resultados para os seguintes casos: bandas com caudas, e bandas parabólicas com as transições: com regra de seleção e doador-banda de valência. As outras duas transições do modelo de bandas parabólicas, isto é, banda de condução-aceitador e doador-aceitador não foram consideradas, já que, por causa do alto valor de absorção que apresentam, dão como resultado valores extremamente grandes (>10), irrealísticos para o índice de refração do GaAs, que tem valores em volta de 3.6.

As figuras 9.21 e 9.22 mostram o índice de refração em função de E para diferentes níveis de injeção para as transições: com regra de seleção e doador-banda de valência respectivamente.

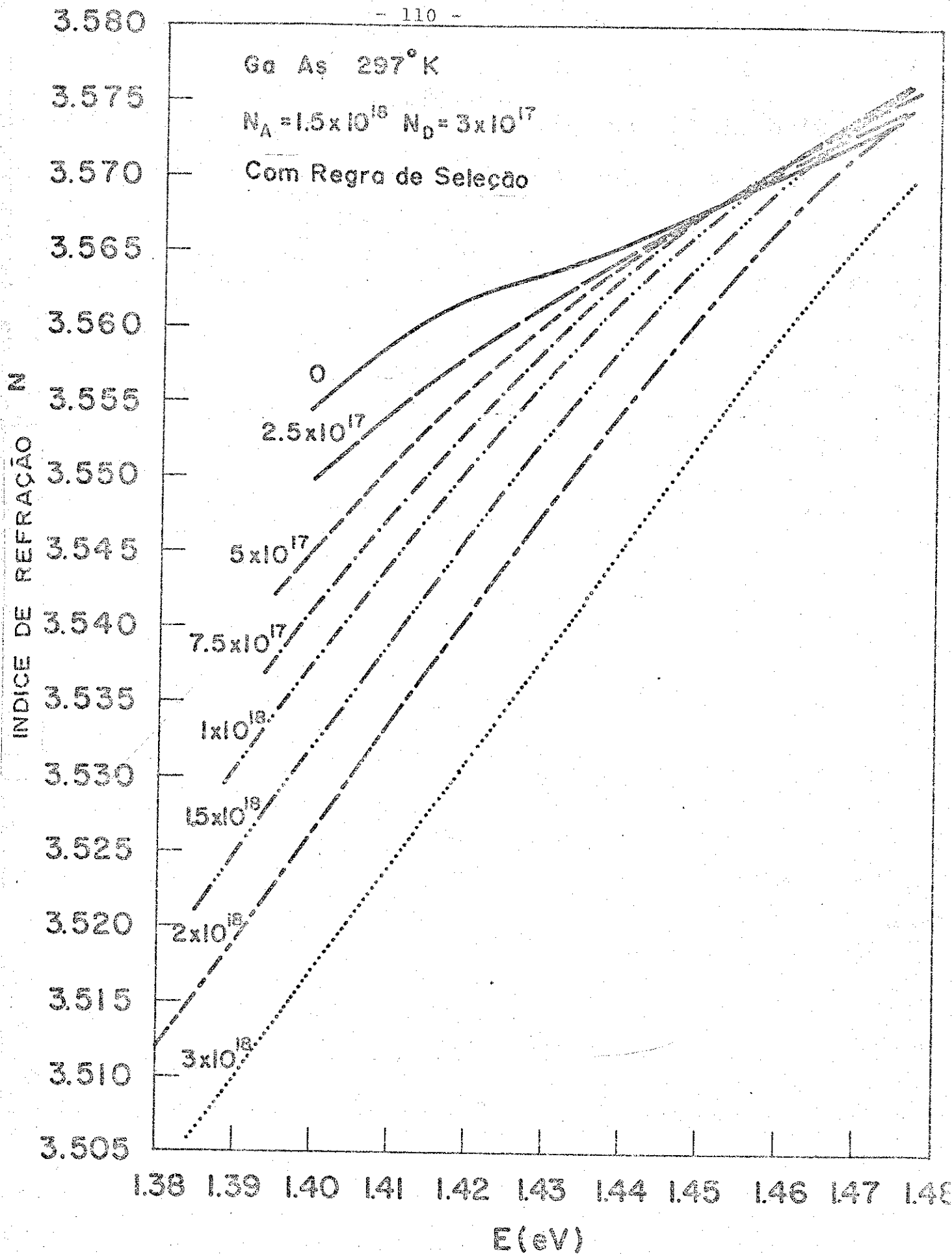


Fig 9.21 . Índice de Refração vs. E para as várias injeções usadas, na faixa $0-3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Estes resultados correspondem ao modelo de bandas parabólicas para transições banda-banda.

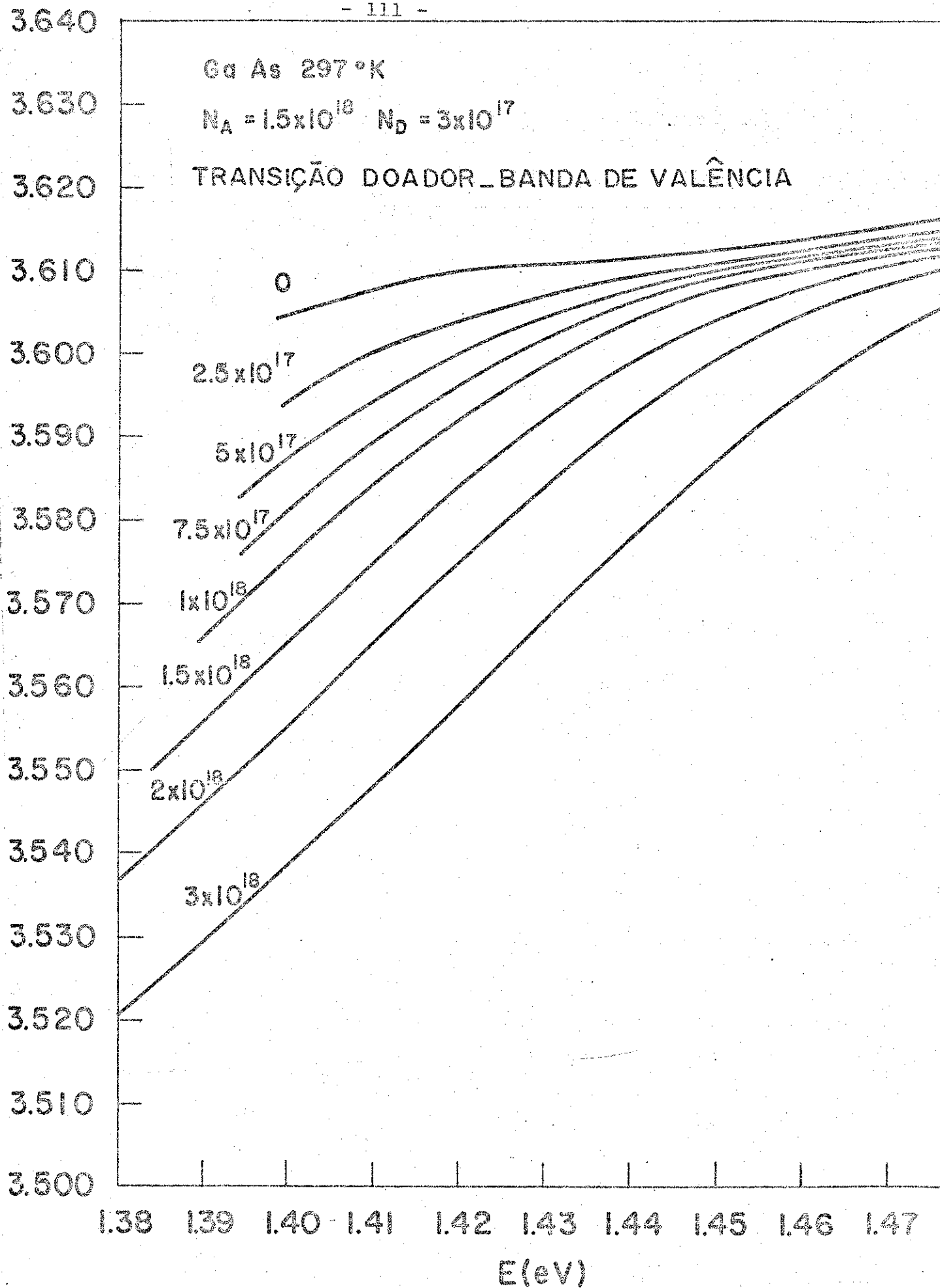


Fig 9.22 . Índice de Refração vs. E, para injeções na faixa $0-3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$,
 obtido usando-se o modelo de bandas parabólicas com transições do
 tipo doador-banda de valência.

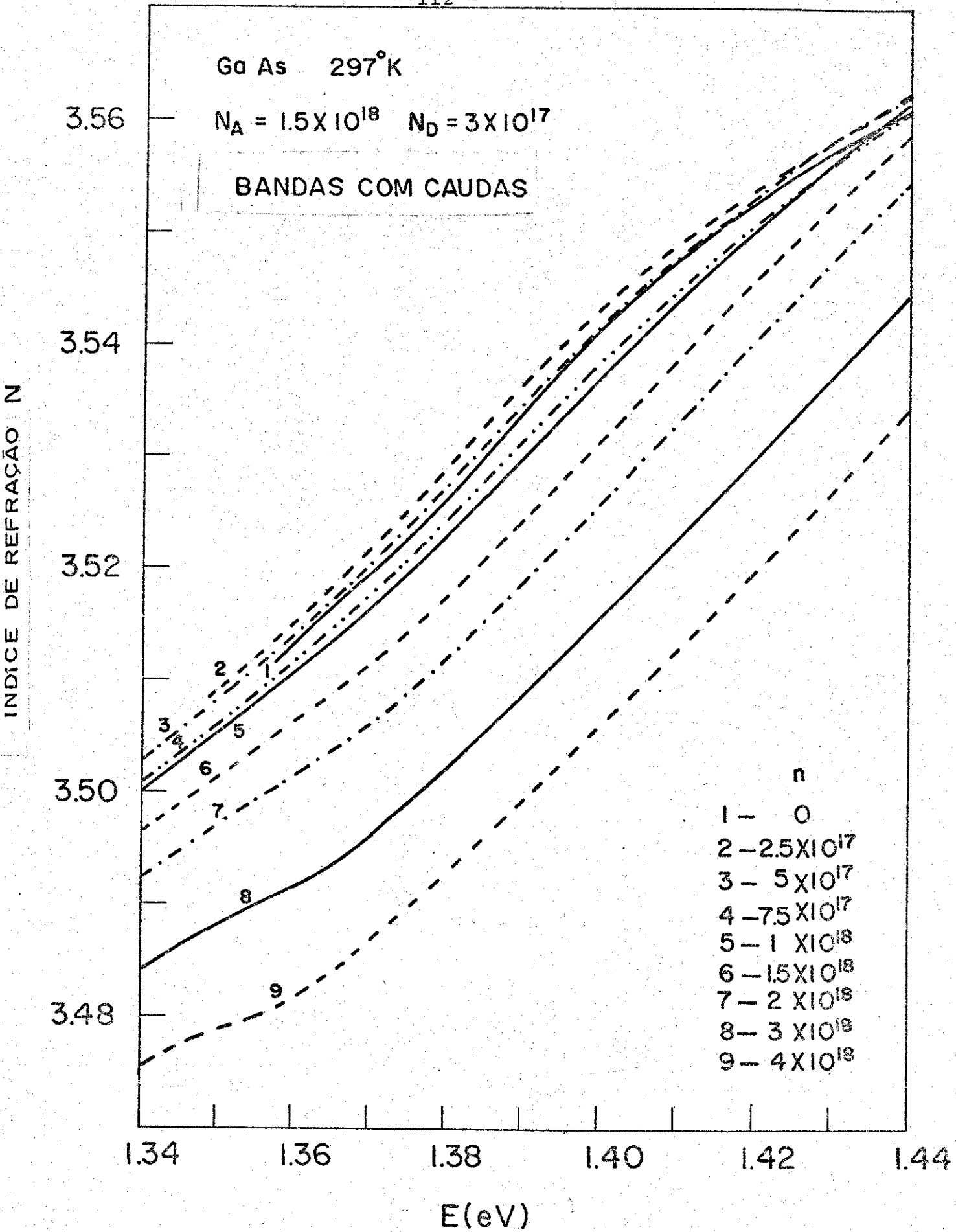


Fig 9.23 . Índice de Refração vs. E, para o GaAs tipo p, para injeções no intervalo $0-4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, resultante do uso do modelo de bandas com caudas.

Nota-se da fig. 9.21 que, para energias menores a 1.45eV o N diminui ao se aumentar a injeção n; sendo para energias maiores do que esta, a situação se complica, já que as curvas começam a se cruzar mudando o comportamento assinalado. Na fig. 9.22 observamos que aqui também o índice de refração diminui numa forma sistemática ao se aumentar n, na faixa de energias considerada.

Os resultados para o modelo de bandas com caudas são mostrados na figura 9.23; notamos que neste caso, o comportamento do índice de refração muda: para baixas injeções, N inicialmente aumenta com n, até uma certa injeção, após o que ele volta ao comportamento anterior de diminuir com n. Isto acontece no intervalo de energias usado. Este comportamento do índice de refração com a densidade de portadores injetados, tem um análogo com medidas experimentais do índice de refração feitas em cristais de GaAs tipo n por Sell⁽⁴⁴⁾ conforme se mostra na figura 9.24; nesta figura notamos que, para um certo intervalo de energia, o índice de refração medido, primeiro aumenta com a concentração de impurezas doadoras N_D até um certo limite, após o qual, N diminui ao se aumentar mais a dopagem N_D .

De novo, como se falou no caso do comprimento de blindagem na seção 9.2, pelo fato da semelhança no que diz respeito ao número de portadores na banda quando se dopa um material tipo n ou se injeta elétrons num material tipo p, é de se esperar um comportamento qualitativamente semelhante do índice de refração quando se aumenta a dopagem no material tipo n, ou quando se aumenta a injeção.

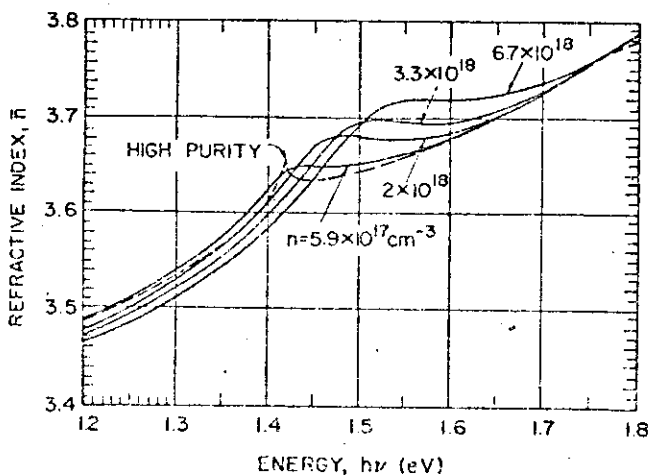


Fig. 9.24 . Índice de Refração a $T=297^\circ\text{K}$ para amostras de GaAs tipo n com diferentes dopagens. Também se mostra o índice de refração para uma amostra de alta pureza. (44)

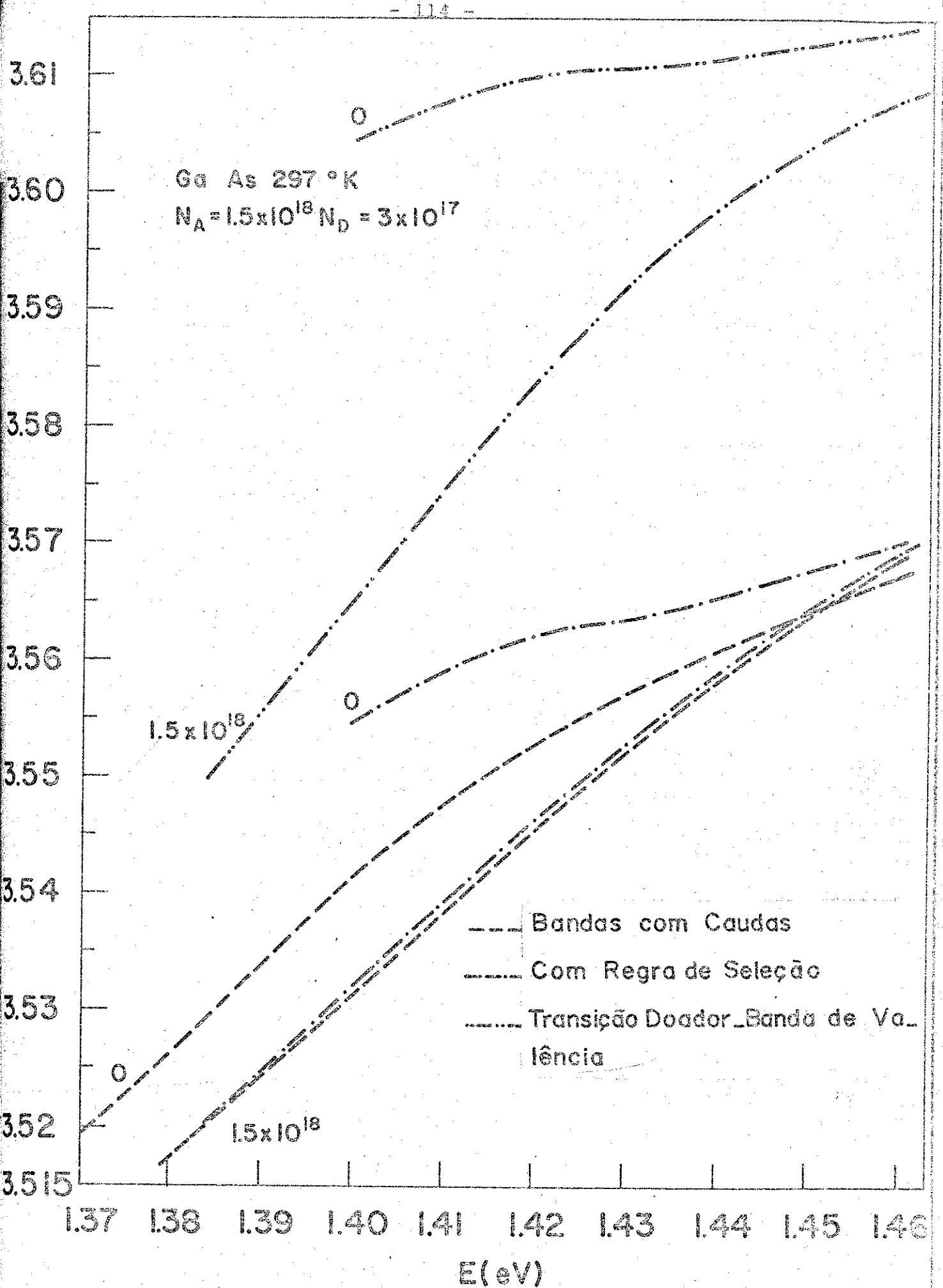


Fig 9.25 . Índice de Refração vs. E, para os três modelos que mais aproximam à curva de absorção experimental mostrada na fig. 9.16 (curva 1), para duas injeções: $n=0$ e $n=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Para se ter uma idéia das diferenças nas curvas do índice de refração resultante para os três casos apresentados anteriormente, mostramos na fig. 9.25, o gráfico de N vs. E para estes 3 casos: bandas com caudas, regra de seleção e transições doador-banda de valência. Nesta figura nós mostramos duas situações: sem injeção ($n=0$) e uma injeção que permite a existência de ganho ($n=1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Primeiro, notamos que para todas as energias, o N resultante das transições doador-banda de valência é bem maior para as duas injeções consideradas. Também vemos que para $n=0$, as curvas de bandas com caudas e de regra de seleção tem uma diferença apreciável; mas, quando a injeção é alta ($n=1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), estas duas curvas são muito semelhantes, de modo que o N resultante de transição com regra de seleção se aproxima muito bem do N resultante do modelo de bandas com caudas.

Com referência às curvas de absorção para o modelo de bandas com caudas apresentadas na fig. 9.16, nós mencionamos o fato de que, a curva teórica (curva 3) resultava em valores menores do que os reportados experimentalmente (curva 1), dando como resultado uma diferença na absorção por um fator de aproximadamente 1.7 para altas energias. Nessa figura, a curva 2 representa o resultado teórico vezes 1.7, que mostrava uma melhor aproximação à curva experimental. Então, a fim de se conhecer a mudança que este fator poderia provocar no índice de refração, foi calculado o N correspondente à curva 2 de absorção da figura 9.16. O resultado é apresentado na figura 9.26 para as injeções $n=0$ e $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, onde se mostra o comportamento de N vs. E com e sem incluir o fator 1.7 na curva de absorção. Da figura observamos que praticamente o único efeito do fator é um deslocamento da curva de N vs. E para valores maiores de N ; deslocamento que está na faixa de $5-6 \times 10^{-2}$. Mas, o mais importante, que é a variação de N com respeito à curva de $n=0$, nota-se que se mantém praticamente sem nenhuma mudança. Isto quer dizer que as curvas de ΔN vs. n vão ser pouco influenciadas pela inclusão ou não do fator 1.7.

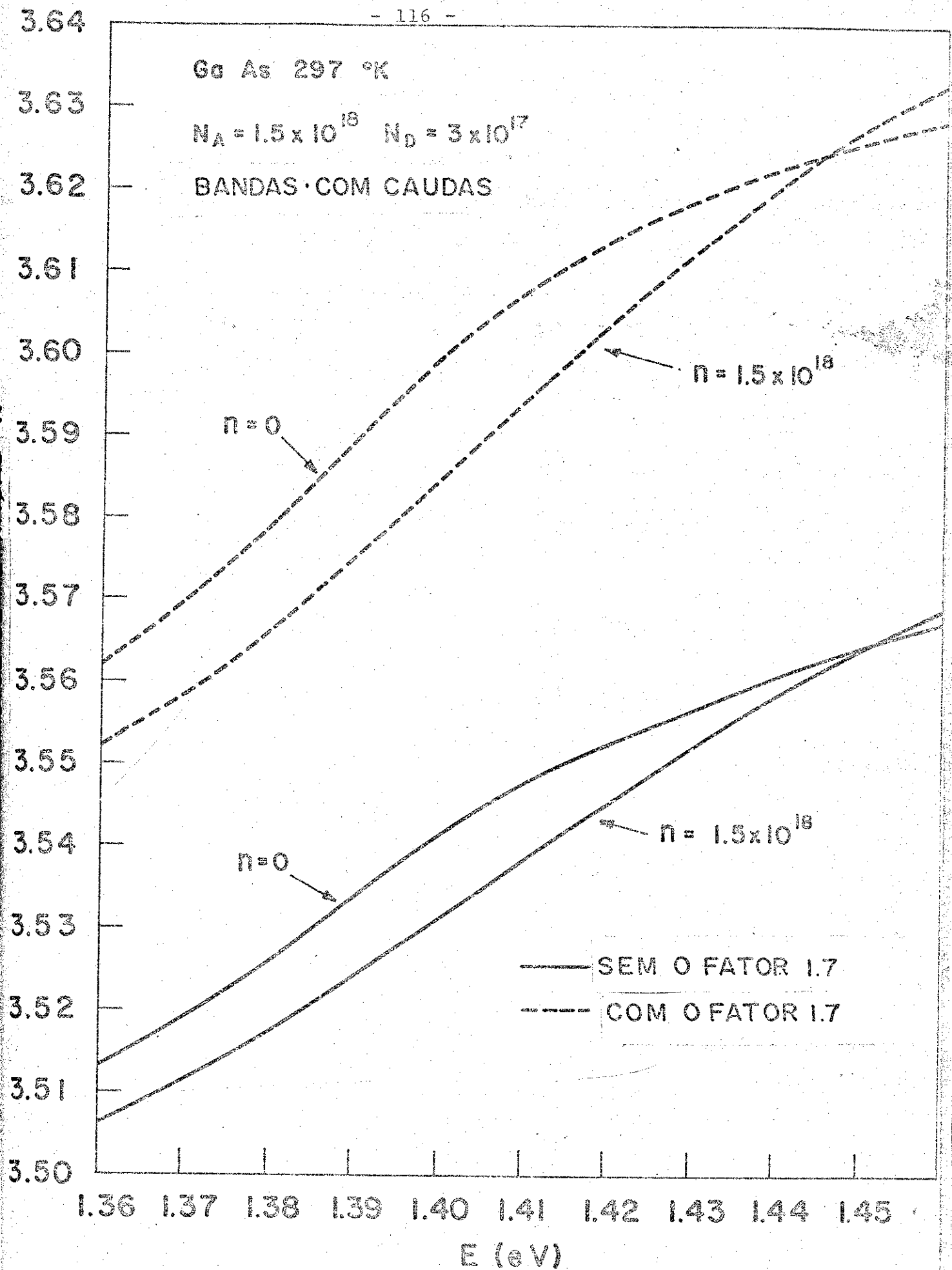


Fig 9.26 . Índice de Refração vs. E, calculado usando os resultados da absorção mostrados nas curvas 2 e 3 da fig.9.16 para injeção zero, e também para uma injeção $n=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. O fator 1.7 muda o valor de N, mas não o seu comportamento qualitativo com a energia.

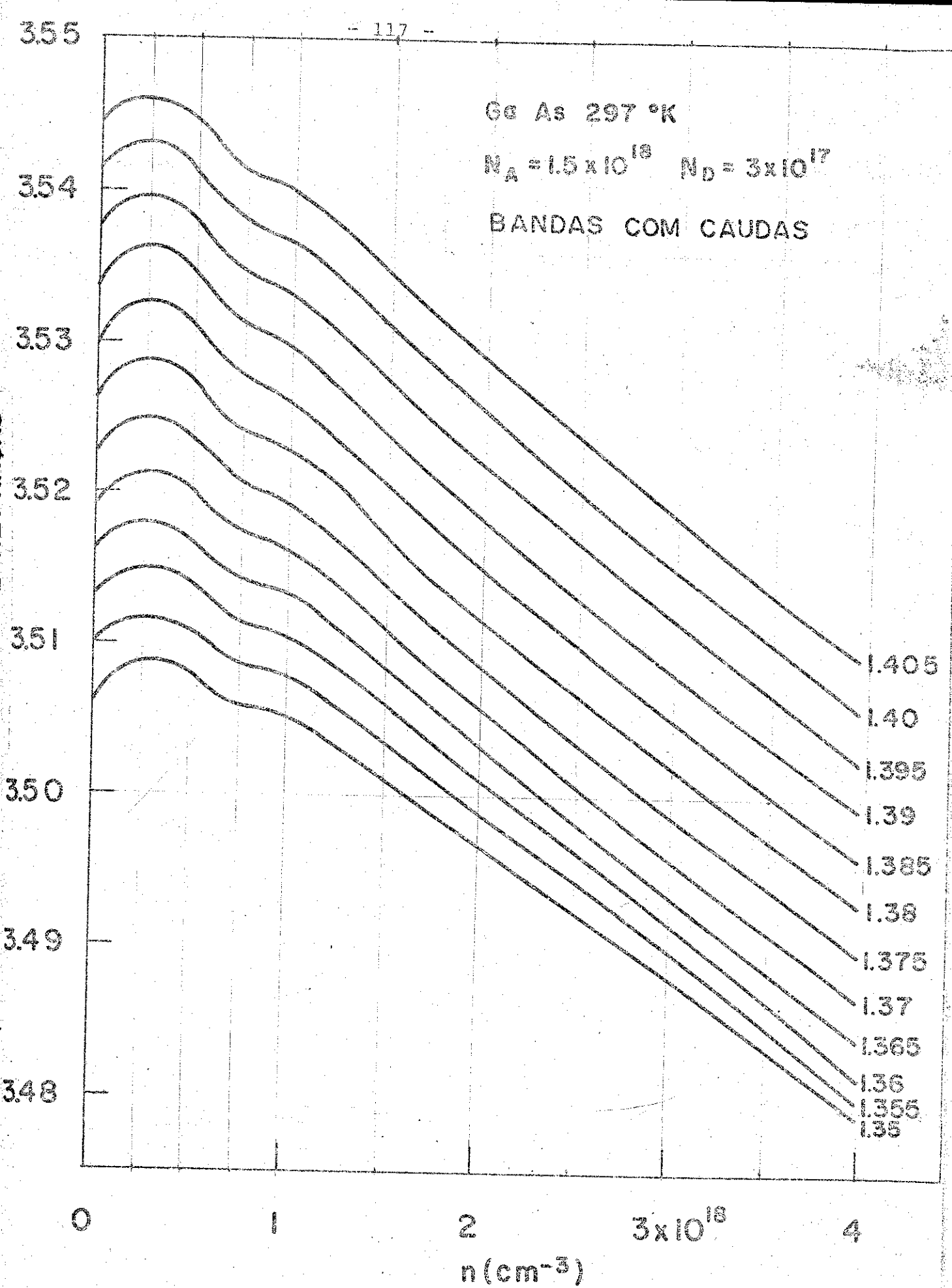


Fig 9.27 . Curvas do Índice de refração em função dos portadores injetados, para diferentes energias do fóton no intervalo 1.35eV - 1.405 eV. Estes resultados correspondem ao modelo de bandas com caudas.

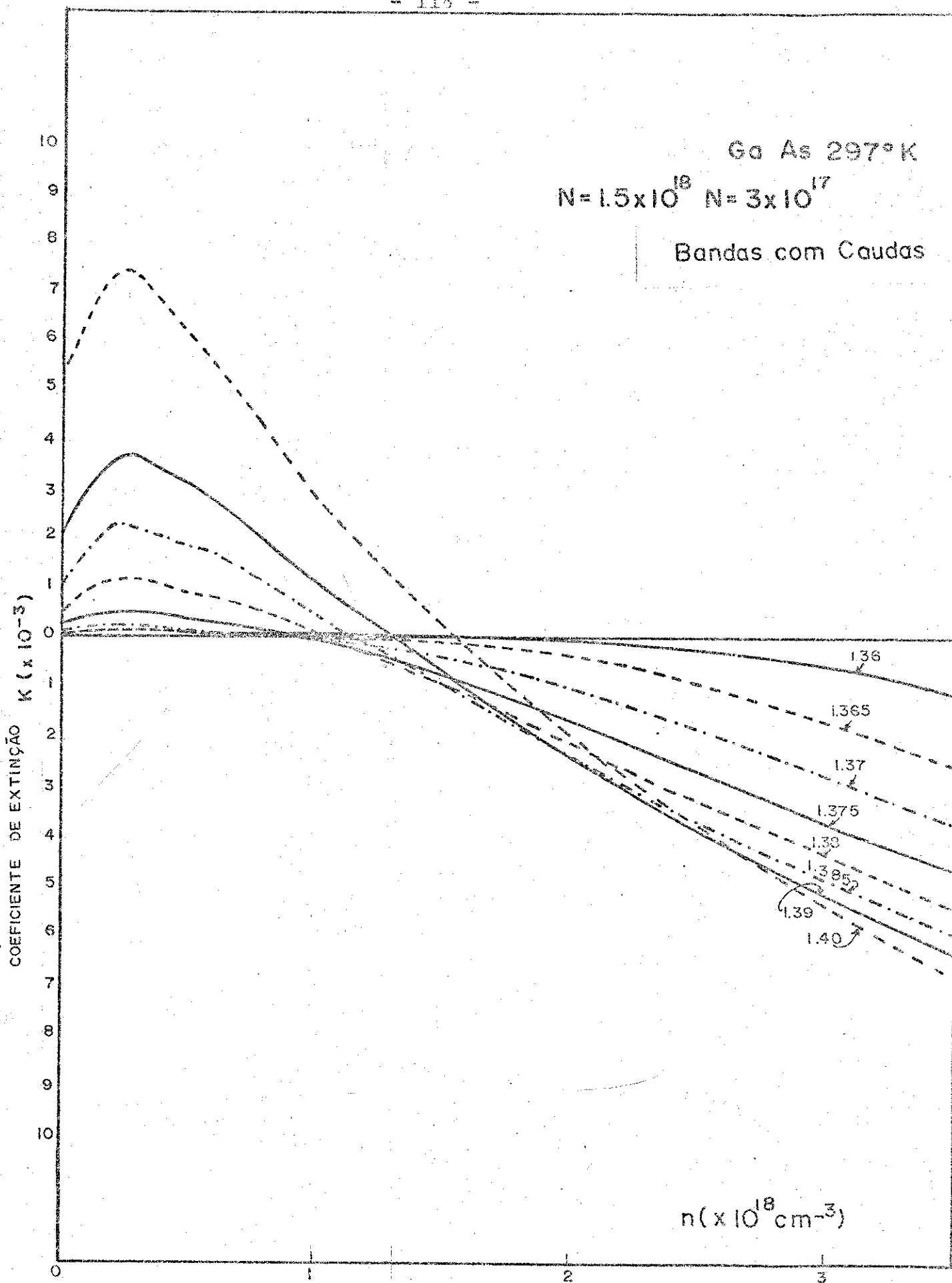


Fig 9.28 . Coeficiente de extinção (parte imaginária do índice de refração complexo), como função da injeção para diferentes valores da energia; resultados obtidos para o modelo de bandas com caudas.

Para saber como se comporta o índice de refração complexo $N+ik$ em função da densidade dos portadores injetados n , mostramos nas figuras 9.27 e 9.28 os gráficos das partes real (N) e imaginária (κ) do índice de refração em função da injeção n correspondentes aos resultados do modelo de bandas com caudas; são apresentadas curvas para diferentes energias E . Na fig. 9.27 se observa que o comportamento geral de N para as diferentes energias é o de, a partir de $n=0$, aumentar ao se incrementar n até atingir um máximo por volta de $\sim 2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ após o qual N diminui com a injeção n . A figura 9.28 é muito semelhante à fig. 9.19 já que $\kappa = \frac{hc}{2E} \alpha(E)$; nesta figura, portanto, as curvas de κ para as diferentes energias apresentam o mesmo comportamento de α vs. n , isto é, a partir de $n=0$, κ aumenta com n até $\sim 2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ sendo que depois desta injeção κ diminui ao se aumentar a injeção n . Nota-se que quanto maior for a energia do fóton E , maior será o valor máximo do coeficiente de extinção κ .

9.8 Variação no Índice de Refração

Com o conhecimento das curvas de N e κ vs. n para diferentes energias E , podemos calcular qual vai ser o comportamento da variação nas partes real e imaginária do índice de refração complexo em função da injeção n .

As figuras 9.29, 9.30 e 9.31 mostram $-\Delta N$ vs. n para várias energias para os modelos: com regra de seleção, transição doador-banda de valência e o modelo de bandas com caudas, respectivamente. As figs. 9.29 e 9.30 mostram que a variação ΔN é sempre negativa com n , e que, para injeções acima de $\sim 1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, a aproximação linear entre $-\Delta N$ e n é bastante razoável, segundo se mostra nas retas traçadas nestas figuras. Repare que a inclinação das retas é muito maior no caso das transições doador-banda de valência do que para as transições com regra de seleção. É importante sinalar que as retas não saem da origem, cruzando o eixo n em pontos $n \neq 0$.

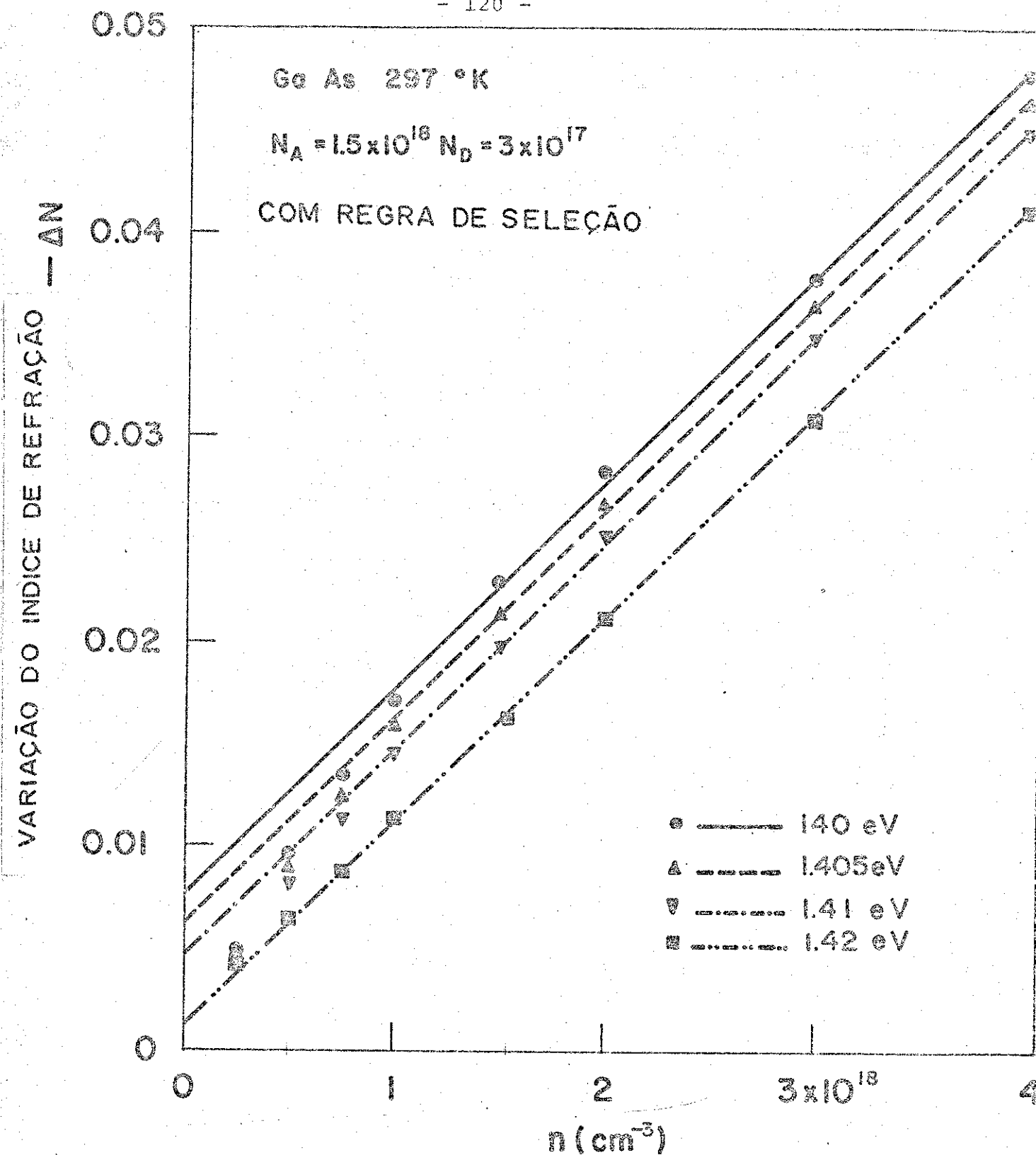


Fig 9.29 . Variação do Índice de Refração em função da densidade de portadores injetados, obtida usando-se o modelo de bandas parabólicas com transições do tipo banda de valência-banda de condução. Mostram-se 4 energias do fóton, sendo que as retas foram ajustadas aos pontos correspondentes segundo se indica na figura.

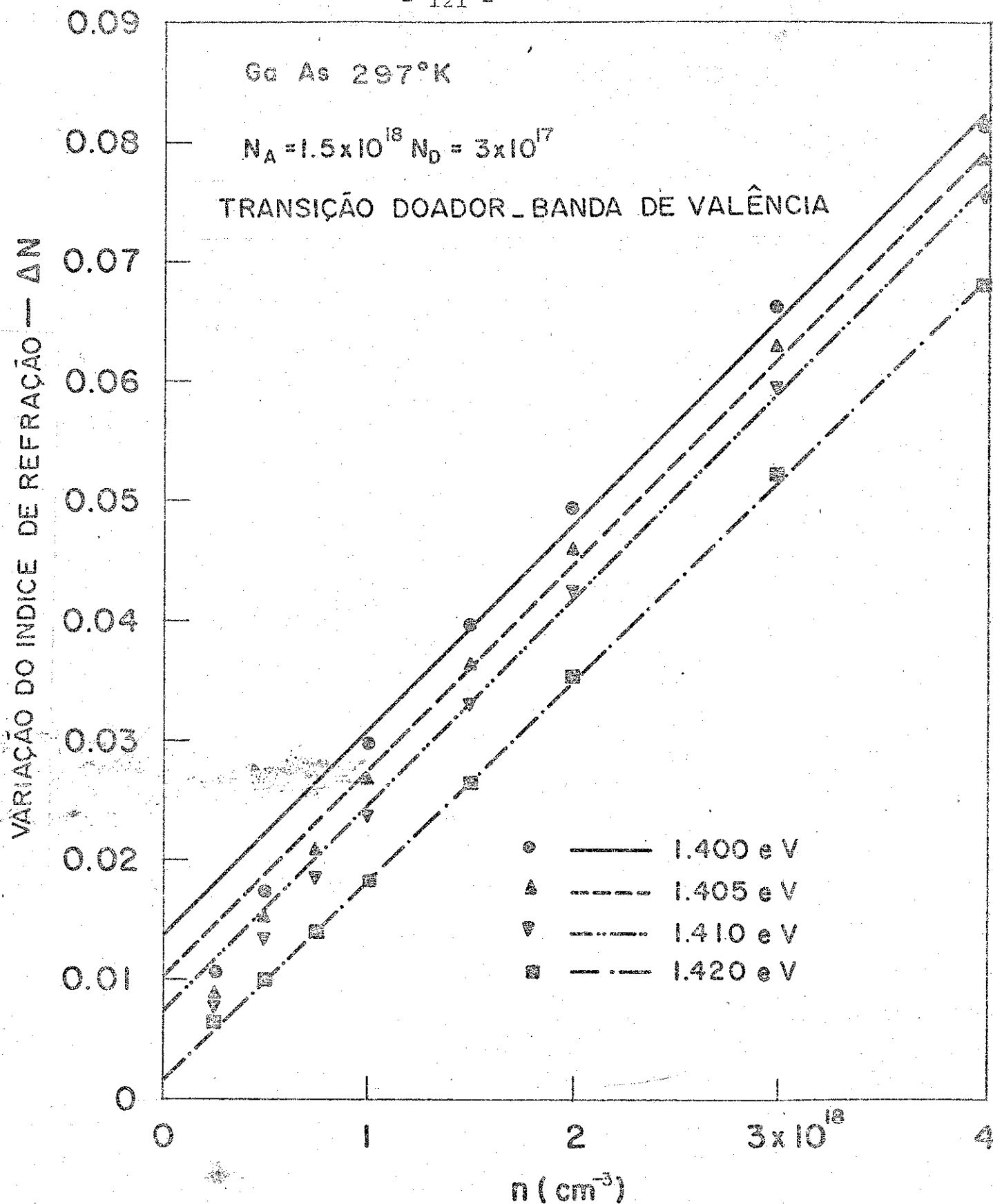


Fig 9.30 . Variação do Índice de Refração em função da injeção, obtida usando-se o modelo de bandas parabólicas com transições do tipo banda de valência-doador. As retas foram ajustadas aos pontos correspondentes, segundo se mostra para cada energia do fóton.

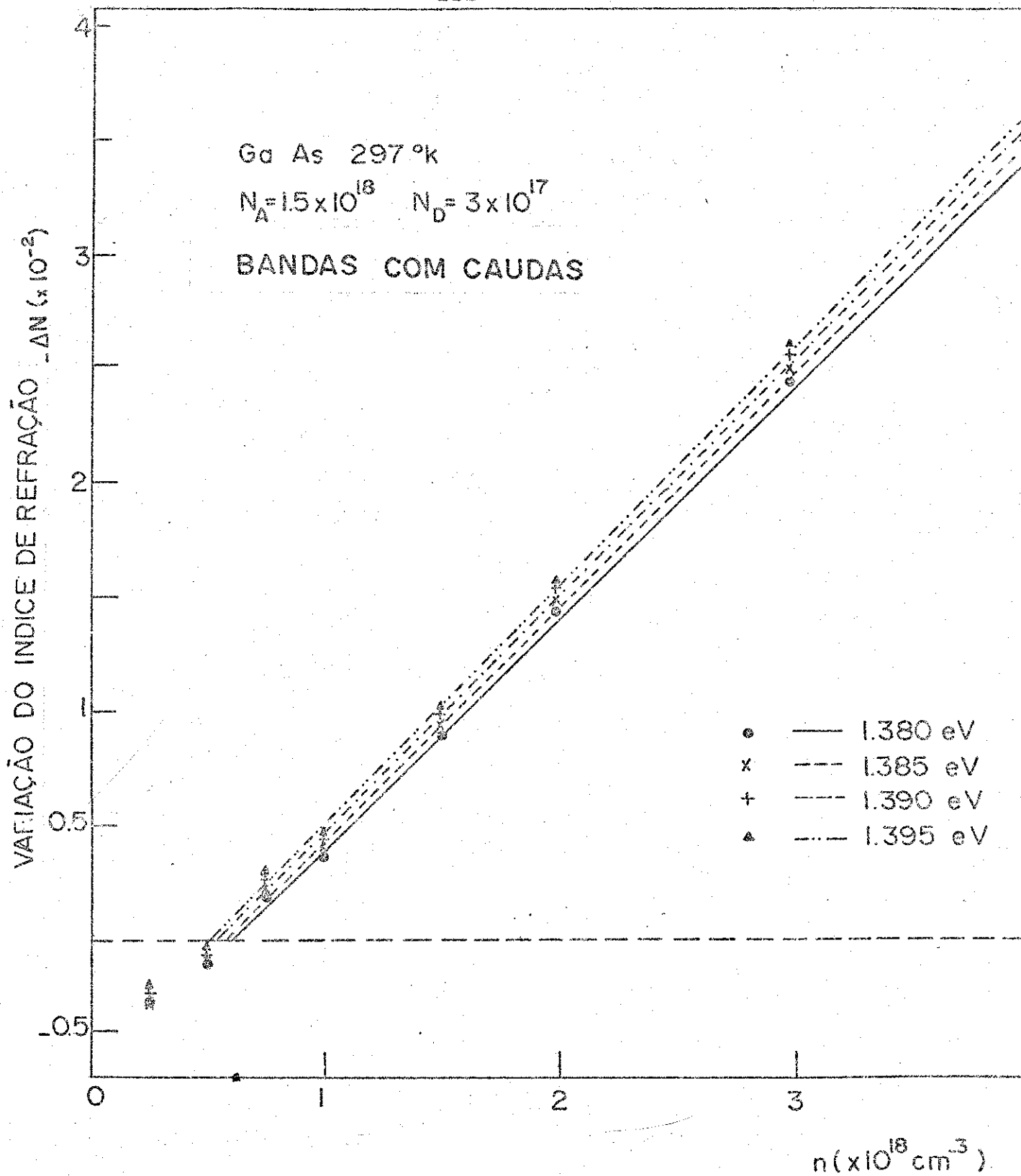


Fig 9.31 . Variação do Índice de Refração como função da densidade de portadores injetados, para o GaAs tipo p, obtida usando-se o modelo de bandas com caudas. Para injeções maiores a $n=1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, foram ajustadas retas aos pontos correspondentes, segundo se mostra para cada energia.

A figura 9.31 nos dá o resultado de $-\Delta N$ vs. n para o modelo de bandas com caudas; aqui, observamos que na região aproximada de $0-7.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, ΔN aumenta, é positivo, até um certo n_0 que depende da energia, e para $n > n_0(E)$ o ΔN passa a ser negativo. Para injeções acima de $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ o comportamento é de novo aproximadamente linear entre $-\Delta N$ e n , segundo se mostra com as retas ajustadas que se apresentam na figura.

O conhecimento de como muda o índice de refração quando se varia a injeção de portadores é muito importante, já que o efeito dos portadores no índice de refração tem sido utilizado para explicar alguns fenômenos observados nos lasers de semicondutor^(1,2). Também, este efeito tem sido usado para criar novos dispositivos optoeletrônicos⁽⁴⁵⁾. Em 1972, G.H.B. Thompson fez um estudo teórico para chegar a uma relação entre a variação do índice de refração N e a densidade de portadores injetados n . O objetivo do estudo foi o de explicar a formação de filamentos nos dispositivos de junção p-n. No seu trabalho, Thompson fez uma série de aproximações a fim de relacionar, a variação na absorção provocada pelo aumento de portadores, com a variação resultante dos quasi-níveis de Fermi para elétrons e buracos. Uma vez conseguido isto, usou as relações de Kramers-Kronig para relacionar isso à variação do índice de refração. No apêndice D está dado com detalhes o cálculo feito por Thompson. O resultado final que ele obteve, foi o de que a variação no índice de refração N podia ser escrita na forma:

$$\Delta N = -A n \quad (9.5)$$

sendo A uma constante que tem valores na faixa: $3.5 \times 10^{-21} - 9 \times 10^{-21}$.

O cálculo que nós fizemos, como já foi descrito nos capítulos anteriores, é completamente direto, no sentido de que o coeficiente de absorção $\alpha(E)$ é calculado diretamente levando em conta as variações com a injeção de todos os fatores: caudas, elemento de matriz e quasi-níveis de Fermi.

Portanto, ele vai nos proporcionar uma melhor descrição

do índice de refração e de suas variações com a injeção n . Assim então, os resultados para o modelo de bandas com caudas mostrados na fig.9.31 nos permitem concluir o seguinte:

a) para injeções $n > 1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (na região de ganho e de frequências de interesse), a variação no índice de refração pode ser aproximada pela relação:

$$\Delta N = - A n + B(E) \quad (9.5)$$

onde A é aproximadamente constante da ordem de 10×10^{-21} , e B uma constante que depende da energia, e que tem valores na faixa de $5 \times 10^{-3} - 9 \times 10^{-3}$.

b) Para baixas injeções, até aproximadamente 6×10^{17} (dependendo da energia do fóton), a variação ΔN com a injeção é positiva. Este é um resultado que não tinha sido até agora ventilado, e que é importante porque ele vai influenciar o perfil do índice de refração existente ao longo da junção provocado pelo perfil de portadores injetados, como se verá mais adiante.

Para os resultados apresentados nas figuras 9.29 e 9.30 podemos usar uma relação semelhante à dada na eq. (9.5), onde, em geral, o valor e comportamento com a energia das constantes A e B será diferente para cada modelo.

O comportamento da constante A da eq.(9.5) com a energia é mostrado na figura 9.32 para os três modelos considerados. Como pode ser notado, no caso das bandas com caudas A praticamente não varia com a energia, o mesmo acontecendo para as transições com regra de seleção. Já para as transições doador-banda de valência, a variação de A com a energia é maior. Repare-se que no que diz respeito ao valor da constante A , o modelo aproximado de transições com regra de seleção dá valores muito próximos aos obtidos usando o modelo real das bandas com caudas.

Finalmente, na figura 9.33 se mostra o comportamento de B vs. E para aqueles 3 casos. Quando usamos bandas parabólicas, isto é, para as transições com regra de seleção e doador-banda de valência, a

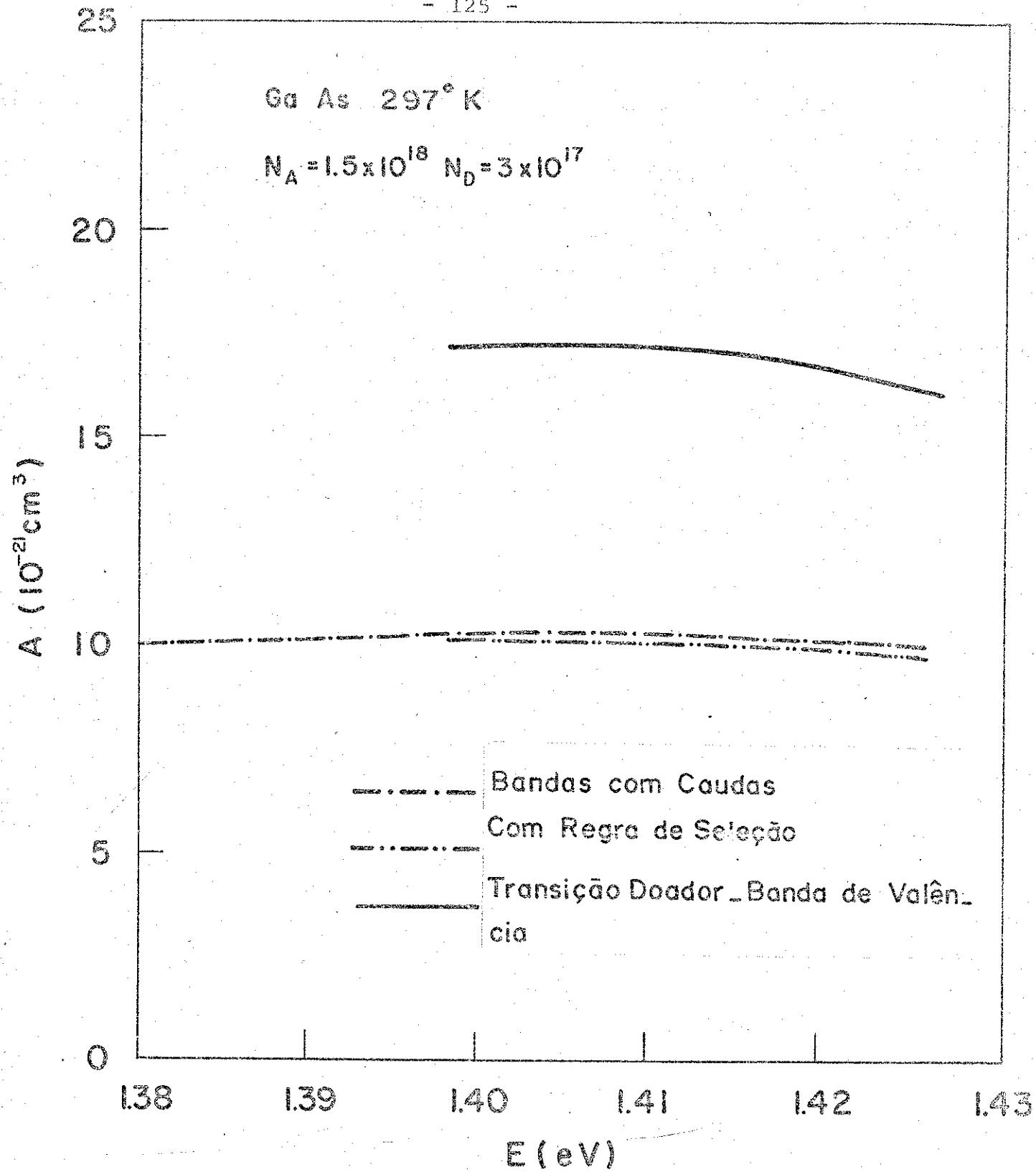


Fig. 9.32 . Constante A, que nos dá a inclinação das retas ajustadas nas figuras 9.29, 9.30 e 9.31, em função da energia do fóton E; e para os três modelos usados em cada uma dessas figuras.

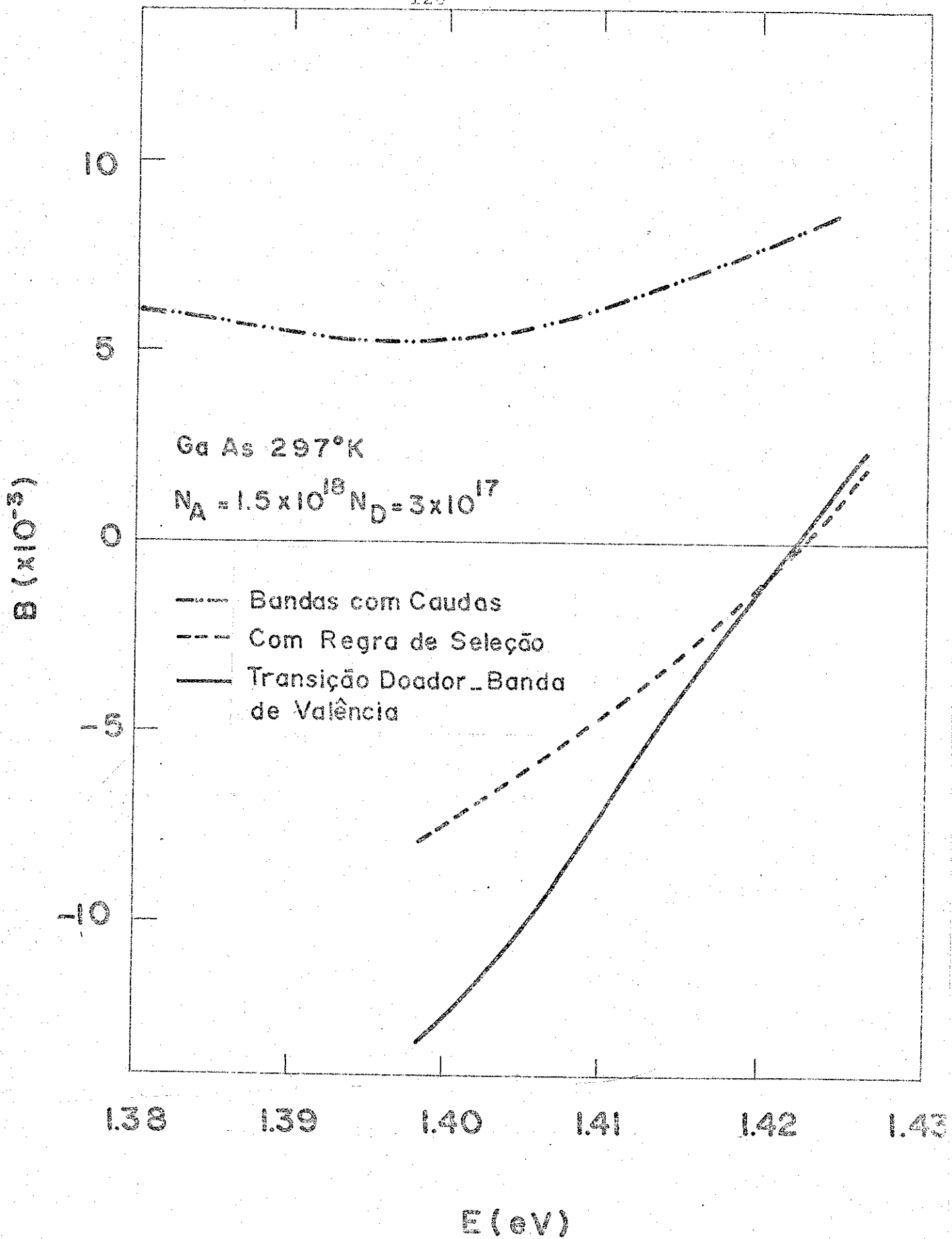


Fig 9.33 . Constante B, correspondente às retas An-B das figuras 9.29, 9.30 e 9.31, em função da energia do fóton E; e para os três modelos usados em cada uma dessas figuras.

constante B depende fortemente da energia e ainda tem sinal contrário ao valor de B obtido com o modelo de bandas com caudas, o qual apresenta uma variação suave com a energia. Os valores de B são bem diferentes para os dois modelos de bandas, e a variação no sinal de B faz com que a variação em N nos modelos que usam bandas parabólicas, seja maior em comparação ao modelo de bandas com caudas.

C A P I T U L O 10

PERFIL DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO

E MODOS RESSONANTES PARA LASERS DE GaAs. ⁽⁴⁶⁾

Um dos pontos importantes no conhecimento do laser de junção de GaAs é o da origem e natureza do guiamento dos modos na direção paralela à junção. Em particular, um dos nossos interesses foi o de explicar dados espectrais observados experimentalmente relacionados com os modos transversais que aparecem no espectro de lasers de GaAs.

Em 1968 Zachos e Ripper ⁽⁴⁷⁾ propuseram um modelo de guia de onda a fim de explicar os modos ressonantes dos lasers de homojunção de GaAs. No modelo, foi considerada uma variação parabólica do índice de refração nas direções transversal, paralela e perpendicular ao plano de junção. Na figura 10.1 mostramos o sistema de coordenadas usado no laser. A junção p-n do laser está no plano y-z assim, x é a direção transversal ao guia perpendicular à junção e y é a outra direção transversal, paralela à junção. Assim, eles consideraram um índice de refração da forma:

$$N(x,y) = N_0 \left[1 - \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - \left(\frac{y}{y_0} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (10.1.1)$$

Usando este índice de refração na equação de onda do campo elétrico ou magnético, obtiveram como resultado que as frequências dos modos guiados eram dadas pela equação:

$$\nu_{m,n,q} = \left(\frac{c}{4\pi N_0} \right) \left[\frac{2m+1}{x_0} + \frac{2n+1}{y_0} \right] + \frac{cq}{2LN_0} \quad (10.1.2)$$

onde N_0 é o índice de refração não perturbado, x_0 e y_0 parâmetros que medem a largura do perfil do índice de refração nas direções x e y; m, n e q são os números do modo, e L é o comprimento da cavidade do

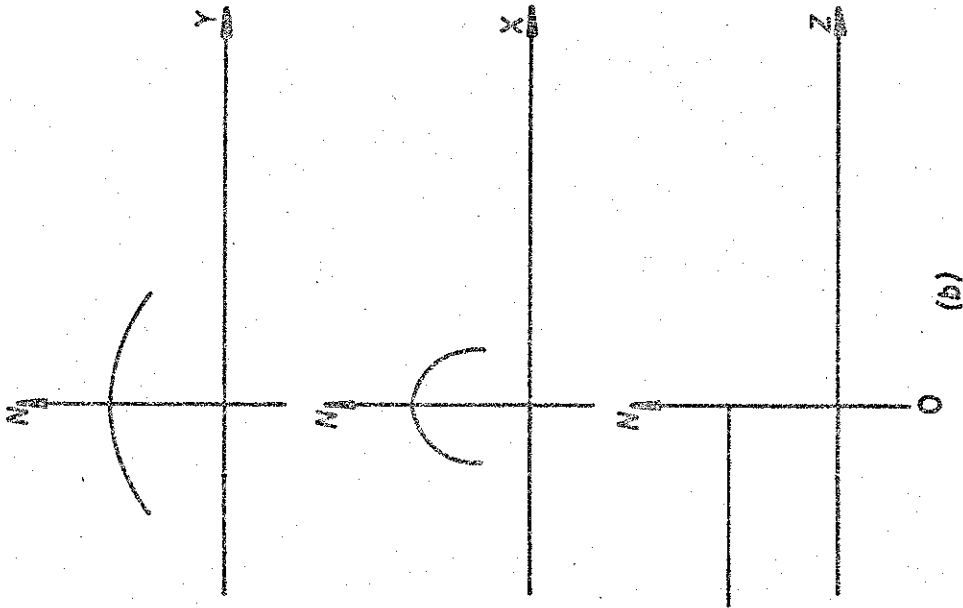
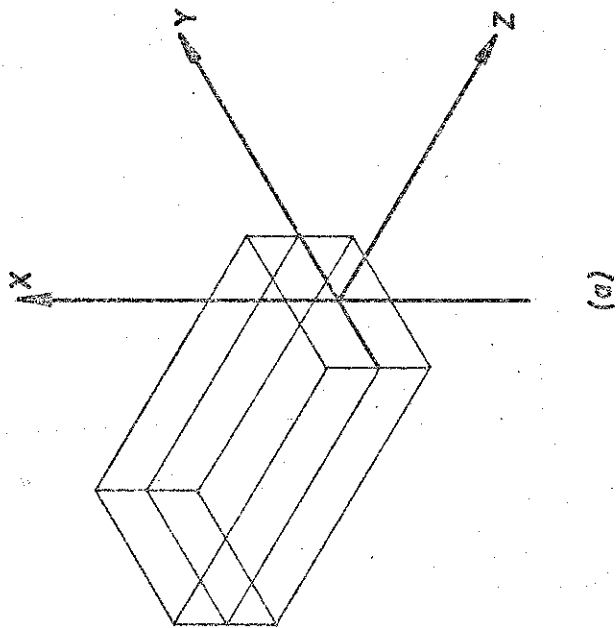


Fig 10.1 . (a) Definição do sistema coordenado cartesiano (x, y, z) , num laser de geometria de faixa.
(b) Variações do índice de refração nas direções x, y e z para lasers de homojunção de GaAs, usadas por Zachos e Ripper.

laser. O valor de q é determinado pela condição de ter um número semi-inteiro de comprimentos de onda na cavidade do laser, ou seja:

$$q \left(\frac{\lambda}{2N_0} \right) = L \quad (10.1.3)$$

sendo λ o comprimento de onda da radiação.

A partir da eq. (10.1.2), Zachos e Ripper obtiveram que a separação em comprimento de onda entre os diferentes modos guiados era uma constante, em particular para os modos transversais paralelos à junção. Porém, isto não concorda com os dados experimentais que indicam uma diminuição na separação em comprimento de onda entre os modos transversais paralelos à junção ao aumentar o número do modo, segundo pode-se ver da fig. 10.2.

Nós consideraremos aqui o caso comum de lasers de GaAs com contato de faixa. Originalmente foi observado⁽⁴⁸⁻⁵⁰⁾ que a radiação emergente do laser era de natureza "filamentar", isto é, o confinamento da energia eletromagnética localizava-se em regiões ao longo da junção. Deste modo, a emissão de luz nestes lasers poderia ocorrer em 2 ou mais regiões imprevisíveis ao longo da junção. Então, a fim de se obter lasers nos quais a emissão de luz ocorresse somente numa região bem definida na junção, foram feitos lasers com contatos metálicos com geometria de faixa⁽⁵¹⁾. Na figura 10.3 mostra-se a construção de um destes contatos de faixa. Uma camada isolante de SiO_2 separa a região p do contato metálico. A difusão da origem a uma camada de resistência suficientemente alta que possa confinar a difusão transversal da corrente na camada p. A partir disto, obtém-se uma região ativa que estará limitada pela porção efetiva do contato, que tem uma largura s e um comprimento L .

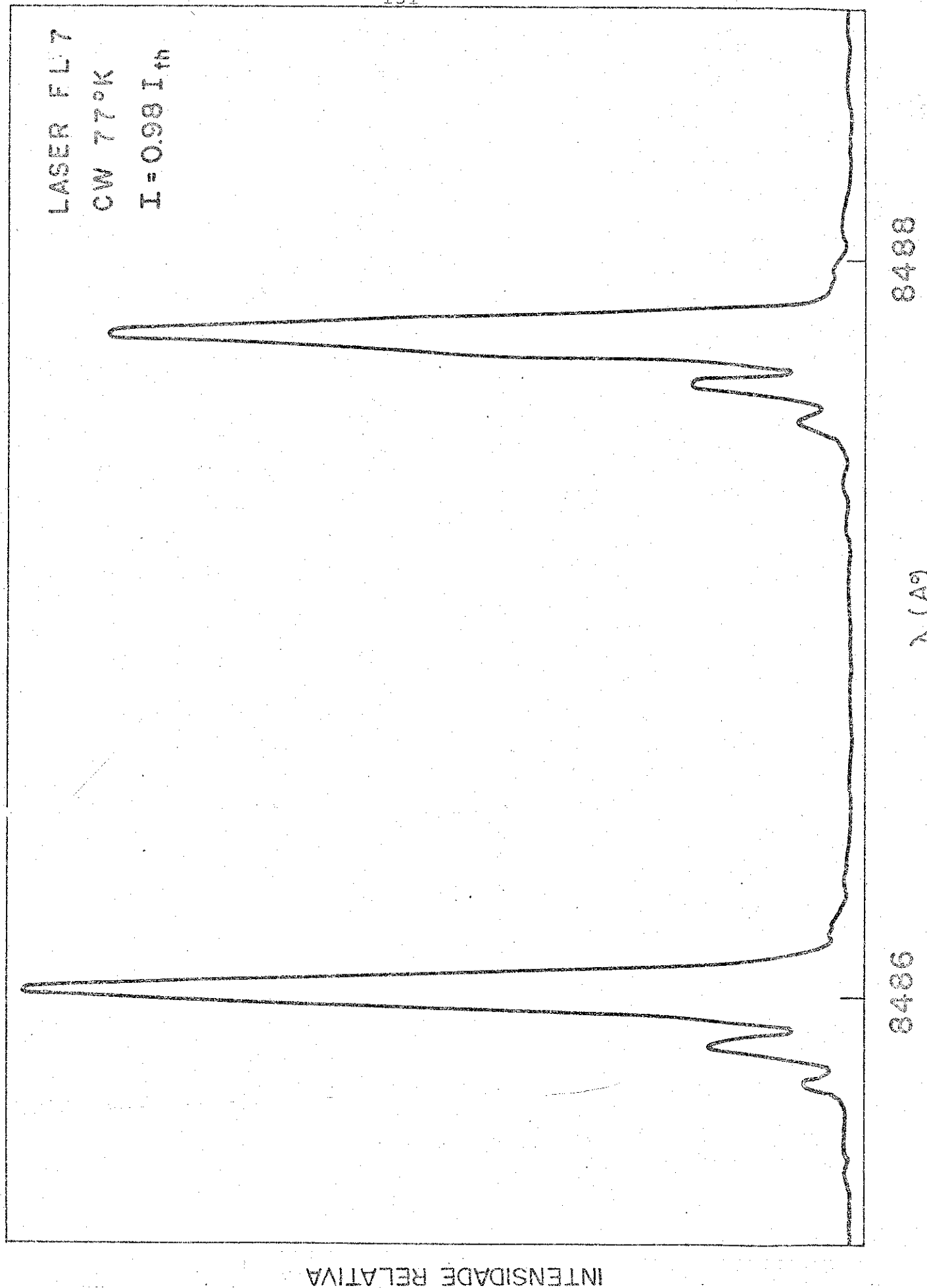


Fig. 10.2 . Espectro de frequência CW de um laser de GaAs, mostrando que a cada frequência de modo longitudinal, estão associadas frequências correspondentes aos modos transversais paralelos à junção.

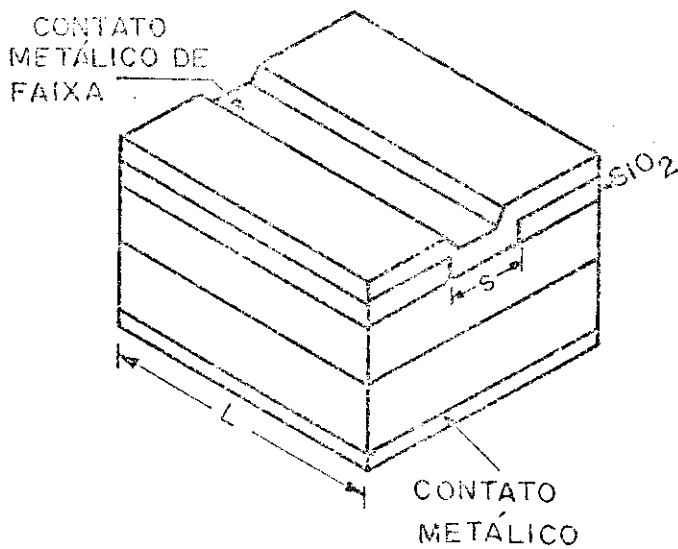


Fig. 10.3 . Diagrama mostrando a estrutura do contato metálico de faixa num laser de homoes- trutura.

Foi observado^(51,52) que lasers com geometria de faixa geralmen- te produzem padrões de modos com simetria de Hermite-Gauss ao longo do plano de junção. Dymont⁽⁵¹⁾ concluiu que a presença deste tipo de sime- tria precisava de um meio focalizador no laser com uma variação espacial do índice de refração ao longo do plano da junção. É esta a razão da va- riação na direção y proposta no modelo de Zachos e Ripper dado na eq. (10.1.1).

Nós limitaremos a nossa atenção ao confinamento da luz na di- reção paralela à junção e portanto somente vamos analisar a variação do índice de refração nesta direção. Quando o laser está em operação, um perfil desconhecido de índice de refração na direção paralela à junção pode ser criado por vários mecanismos, sendo que os mais importantes são:

- i) perfil de temperatura provocado pelo confinamento da corrente ao longo da faixa⁽⁵³⁾.
- ii) um perfil de ganho⁽⁵⁴⁾.
- iii) um perfil de portadores injetados^(5,55).

A variação do índice de refração que estamos con- siderando de- ve ser criada por uma variação local do índice de refração que deve ocorrer de uma maneira suave e simétrica desde um valor máximo até um

valor não perturbado longe da região da faixa. A perturbação advém principalmente dos 3 mecanismos já citados que tem perfis simétricos (56,57)

10.1 Perfil de Índice de Refração

Para descrever a variação do índice de refração na direção paralela à junção, escolhemos a função simétrica:

$$\Delta N = \delta \operatorname{sech}^2 (y/y') \quad (10.1.4)$$

onde δ representa o valor máximo da variação no índice de refração e y' é uma medida da largura da variação. Na figura 10.4 mostramos o perfil de índice de refração dado pela eq. (10.1.4).

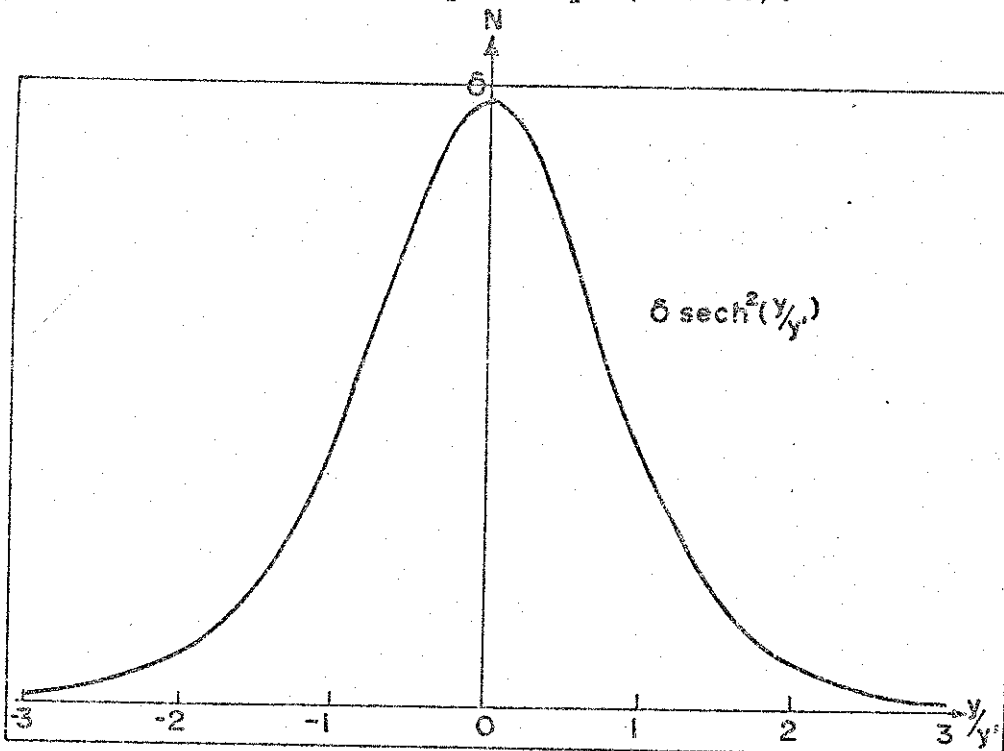


Fig. 10.4 . Variação do índice de refração ao longo da junção.

δ dá a variação máxima, e y' mede a largura da função $\operatorname{sech}^2(y/y')$.

Na direção perpendicular à junção, continuaremos supondo uma variação parabólica do índice de refração, que seria originada pelas diferentes camadas do laser, nas quais muda a energia da banda proibida, mudando assim o índice de refração. Então, escreveremos o índice de refração na forma:

$$N(x,y) = N_0 \left[1 - \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 - \frac{2\delta}{N_0} \left(1 - \text{sech}^2 y/y' \right) \right]^{1/2} \quad (10.1.5)$$

a equação de onda escalar é:

$$\nabla^2 \phi + N^2 k^2 \phi = 0 \quad (10.1.6)$$

onde k é o vetor de onda da radiação.

Substituindo-se a eq. (10.1.5) na eq. (10.1.6) e separando as variáveis usando: $\phi(x,y,z) = X(x) Y(y) Z(z)$ obteremos:

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\gamma^2 - k^2 \quad (10.1.7a)$$

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + \left[\gamma_x^2 k^2 - \alpha^2 - \frac{N_0^2 k^2}{x_0^2} x^2 \right] X = 0 \quad (10.1.7b)$$

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} + \left[\gamma_y^2 k^2 + \alpha^2 + 2N_0 \delta k^2 \text{sech}^2(y/y') \right] Y = 0 \quad (10.1.7c)$$

onde γ e α são constantes de separação, e γ_x, γ_y estão definidos pela equação:

$$\gamma_x^2 + \gamma_y^2 = N_0^2 - 2N_0 \delta - \gamma^2 \quad (10.1.8)$$

A equação (10.1.7a) tem solução imediata, obtendo-se:

$$Z = Z_0 \exp(\pm i k Y Z) \quad (10.1.9)$$

A equação (10.1.7b) é da forma da eq. de Hermite, dando como resultado as funções de Hermite-Gauss:

$$X_m(x) = \frac{1}{\sqrt{2^m m!}} \left[\frac{N_0 k}{\pi x_0} \right]^{1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{N_0 k}{x_0} x^2 \right] H_m \left[\sqrt{\frac{N_0 k}{x_0}} x \right] \quad (10.1.10)$$

A equação (10.1.7c) pode ser transformada para a seguinte eq. diferencial:

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1-\xi^2) \frac{dY}{d\xi} \right] + \left[S(S+1) - \frac{\epsilon^2}{1-\xi^2} \right] Y = 0 \quad (10.1.11)$$

$$\text{onde: } \xi = \tanh(y/y') \quad (10.1.12a)$$

$$S(S+1) = 2N_0 \delta k^2 y'^2 \quad (10.1.12b)$$

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left[-(2n+1) + \sqrt{1+8N_0 \delta k^2 y'^2} \right] \quad (10.1.12c)$$

A equação diferencial (10.1.11) é a equação das funções de Legendre generalizadas. A solução finita⁽⁵⁸⁾ para $\xi=1$ ou $y=\infty$ é:

$$Y(y) = \left[\text{sech}(y/y') \right]^\varepsilon F \left[\varepsilon-s, \varepsilon+s+1, \varepsilon+1, (1-\xi)/2 \right] \quad (10.1.13)$$

onde F é a função hipergeométrica. Para ter soluções finitas para $\xi = -1$ ou $y=-\infty$, ε, s e n devem satisfazer a seguinte equação:

$$n=s-\varepsilon, \quad n=0,1,2,3, \dots \quad (10.1.14)$$

com $n < s$. Assim, dado o perfil do índice de refração, se conhece N_0, δ e y' , e dado o vetor de onda da radiação, o parâmetro s fica fixo da eq. (10.1.12b), e já que $n < s$, então o número de modos será limitado, dependendo dos valores de N_0, δ, y' e k .

O parâmetro γ que entra na eq. (10.1.9) é determinado impondo condições de contorno na função Z , assim, se:

$$Z(0) = Z(L) \Rightarrow k\gamma L = q\pi$$

sendo q um número inteiro, portanto:

$$\gamma = \frac{q\pi}{kL} \quad (10.1.15)$$

As frequências obtidas para os modos guiados serão:

$$\begin{aligned} v_{m,n,q} = & \left(\frac{c}{4\pi N_0 X_0} \right)^{2m+1} + \left(\frac{c}{4\pi N_0^2 Y'} \right)^{2n+1} \sqrt{2N_0 \delta} + \\ & + \frac{c}{2\pi N_0} \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \frac{1}{4 Y'^2} (2n+1)^2 \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (10.1.16)$$

Diferenciando-se esta equação, levando em conta que N_0 varia com o comprimento de onda λ , obteremos que a variação no comprimento de onda da radiação tem a forma:

$$\delta\lambda = - \frac{\lambda^2}{2LN_e} \delta q - \frac{\lambda^2}{2\pi X_0 N_e} \delta m - \frac{\lambda^2 Y'}{2\pi N_e} \left[\sqrt{\frac{2\delta}{N_0}} - \frac{L}{2\pi q Y'} (2n+1) \right] \delta n \quad (10.1.17)$$

onde N_e é um índice de refração efetivo, que tem a forma:

$$\begin{aligned} N_e = N_0 \left\{ 1 - \left[\frac{2\lambda}{N_0} - \frac{(2m+1)}{X_0} - \frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2} - \frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2 Y'} \sqrt{\frac{\delta}{2N_0}} (2n+1) - \right. \right. \\ \left. \left. - 2 \left(\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \frac{(2n+1)^2}{4Y'^2} \right)^{1/2} \cdot \frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2} \right] \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \right\} \end{aligned} \quad (10.1.18)$$

No apêndice E nós mostramos o cálculo detalhado das equações (10.1.16) e (10.1.17) com as aproximações envolvidas.

Da equação (10.1.17) se obtém a separação em comprimento de onda dos modos adjacentes nas direções longitudinal, perpendicular e paralela à junção, respectivamente da forma:

$$\delta\lambda_q = \frac{\lambda^2}{2LN_e} \quad (10.1.19a)$$

$$\delta\lambda_m = \frac{\lambda^2}{2\pi N_e X_0} \quad (10.1.19b)$$

$$\delta\lambda_n = \frac{\lambda^2}{2\pi N_e y'} \left[\sqrt{\frac{2\delta}{N_0}} - \frac{L}{2\pi q y'} (2n+1) \right] \quad (10.1.19c)$$

Pode-se mostrar que o N_e dado na eq.(10.1.18), pode ser muito bem aproximado pela conhecida expressão⁽⁴⁷⁾ para o índice de refração efetivo:

$$N_e \approx N_0 \left[1 - \frac{\lambda}{N_0} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \right] \quad (10.1.20)$$

No apêndice E mostra-se a redução do N_e dado na equação (10.1.18) à forma dada na equação (10.1.20).

Da equação (10.1.19c) podemos ver que para o nosso modelo, a separação entre os modos adjacentes transversais paralelos à junção não é mais constante, sendo que agora depende do número do modo m , diminuindo a separação quando aumenta m . Na eq.(10.1.19c) existem 2 parâmetros ajustáveis: δ e y' .

Na figura 10.5 mostramos um espectro de frequência de um laser de GaAs junto com os valores da separação entre os modos transversais. Os valores dos parâmetros δ e y' foram encontrados ajustando a equação (10.1.19c) aos valores mostrados na figura 10.5. Para os parâmetros restantes da equação (10.1.19c) usaram-se os seguintes valores: $L=380\mu$; $\lambda=0.8401\mu$; $q=2NL/\lambda=3257$; $\delta\lambda_q=1.75\text{\AA}$ e $N_e=5.3$.

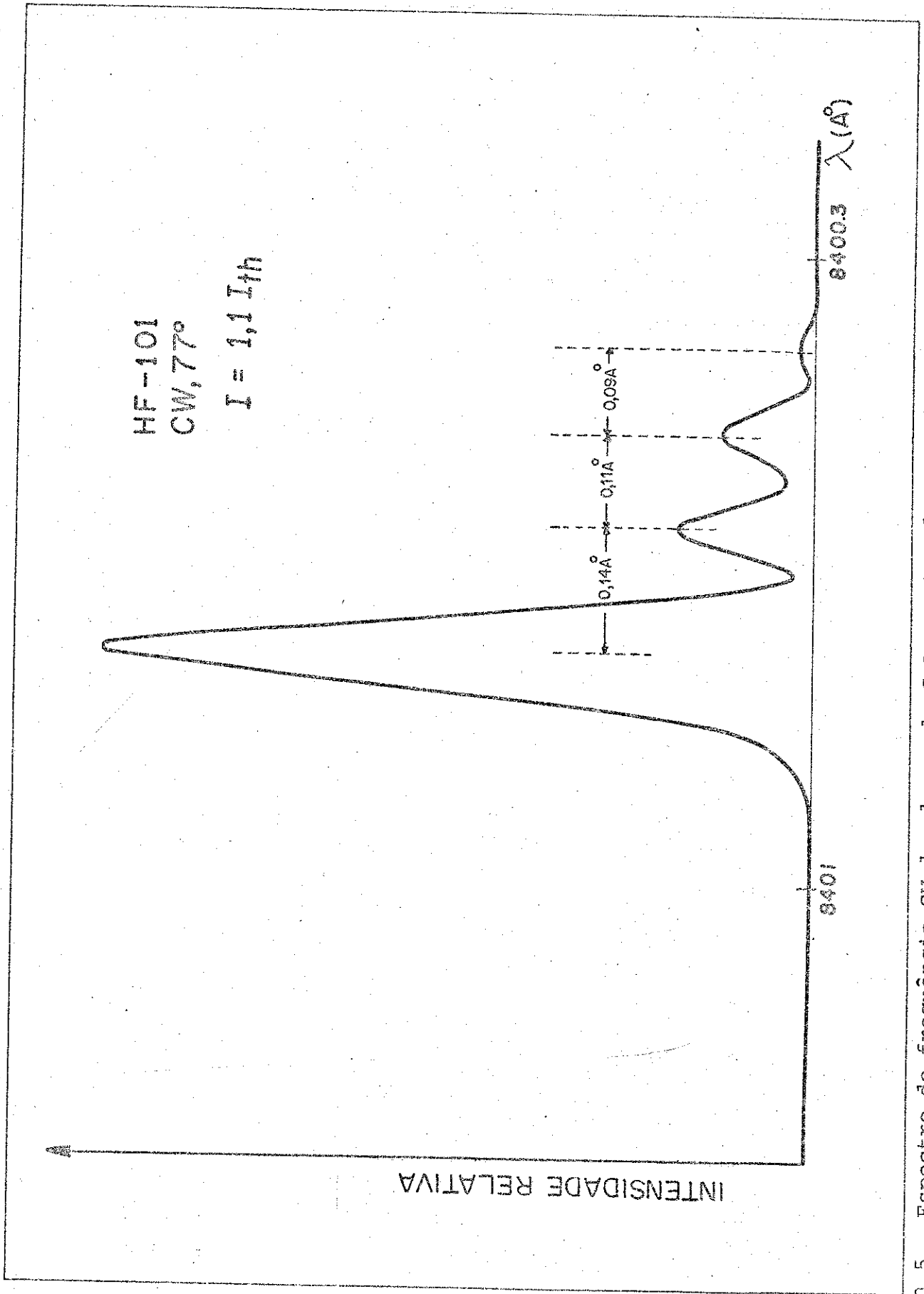


Fig. 10.5 . Espectro de frequência CW dum laser de GaAs mostrando um modo longitudinal e seus modos transversais paralelos à junção associados, com as respectivas separações em λ dos modos transversais.

Na tabela 10.1 são dados os valores obtidos pelo ajuste, para δ e y' , assim como as separações entre modos tanto teóricas como experimentais. Notamos que os valores experimentais são reproduzidos muito bem com o perfil de índice de refração que escolhemos. O valor de y' é consistente com a largura da faixa do laser mostrado na figura 10.5 (faixa $\approx 15\mu\text{m}$), e o valor de δ necessário para o ajuste é da ordem que foi estimada. Para os valores de δ e y' dados na tabela 10.1, obtemos da equação (10.1.12b) que $s=5.6$, portanto, da condição que $n < s$, tiramos que o número máximo de modos transversais permitidos neste caso será de 6. Na realidade, o número de modos observados experimentalmente pode ser menor porque o ganho líquido necessário para a oscilação de um modo de alta ordem pode não ser suficiente. No caso mostrado na figura 10.5, o número de modos transversais paralelos à junção observados é de quatro.

Campos Próximo e Distante

O campo próximo, na direção y paralela à junção vai ser dado pela função $Y(y)$ dada na equação (10.1.13), onde usaremos: $S=5.6$, $n=0,1,2,3,4,5$ e $\epsilon=s-n$. Substituindo-se estes valores na função hipergeométrica da equação (10.1.9) obteremos⁽⁵⁹⁾ que o campo próximo para os primeiros modos será dado por:

$$Y_0(y) = \text{sech}^S (y/y') \quad (10.1.21a)$$

$$Y_1(y) = \text{sech}^{S-1} (y/y') \tanh (y/y') \quad (10.1.21b)$$

$$Y_2(y) = \frac{\text{sech}^{S-2} (y/y')}{s-1} \left[(s-1/2) \tanh^2 (y/y') - \frac{1}{2} \right] \quad (10.1.21c)$$

$$Y^3(y) = \frac{\text{sech}^{S-3} (y/y')}{2(s-2)} \tanh (y/y') \left[(2s-1) \tanh^2 (y/y') - 3 \right] \quad (10.1.21d)$$

onde y' tem o valor dado na tabela 10.1 e $S=5.6$.

O campo distante é calculado a partir do campo próximo através da

TABELA 10.1

COMPARAÇÃO DA SEPARAÇÃO ENTRE MODOS,
MEDIDA E CALCULADA, PARA O CASO DO PERFIL
SECH²

$$\delta$$

$$2.9 \times 10^{-4}$$

$$y'(\mu m)$$

$$17.7$$

Nº DO MODO	SEPARAÇÃO ENTRE MODOS (EXP.)	SEPARAÇÃO ENTRE MODOS (CALC.)
m	$(\Delta\lambda)_n(\text{\AA})$	$(\Delta\lambda)_n(\text{\AA})$
0	0.14	0.139
1	0.11	0.114
2	0.09	0.089

sua transformada de Fourier, isto é:

$$\phi(\rho) = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(y) \exp \left[2\pi i y \rho / \lambda Z_0 \right] dy \quad (10.1.22)$$

este é o caso da difração de Frannhoffer que cumpre as condições: $\rho \gg y$ e $\rho y \ll Z_0^2$. Na figura 10.6 são especificados ρ , y e Z_0 . λ é o comprimento de onda da radiação.

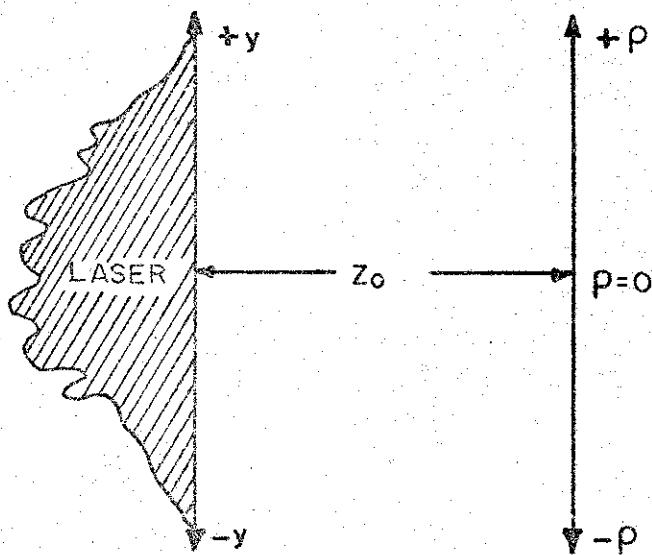


Fig. 10.6 . Mostram-se a variável y no plano do espelho (campo próximo), e ρ no plano do campo distante medido a uma distância Z_0 do espelho do laser.

Já que as funções que descrevem o campo próximo nas equações (10.1.21) não darão integrais diretas quando substituídas na equação (10.1.22), o cálculo delas é feito numericamente.

Nas figuras 10.7 (a) e (b), mostramos os campos próximo e distante calculados para os modos de ordem zero e um, para os quais o campo próximo foi dado nas equações (10.1.21a) e (10.1.21b). Nestes casos, a diferença entre estes modos obtidos para o perfil sech^2 e o modos Hermite-Gauss que se obtêm com o perfil parabólico do índice de refração, é muito pequena para ser detectada experimentalmente.

Nas figuras 10.7 (c) e (d), são mostrados os campos próximo e distante para os modos de ordem dois e três. Observando-se os campos distantes, notamos que neste caso a relação de intensidades

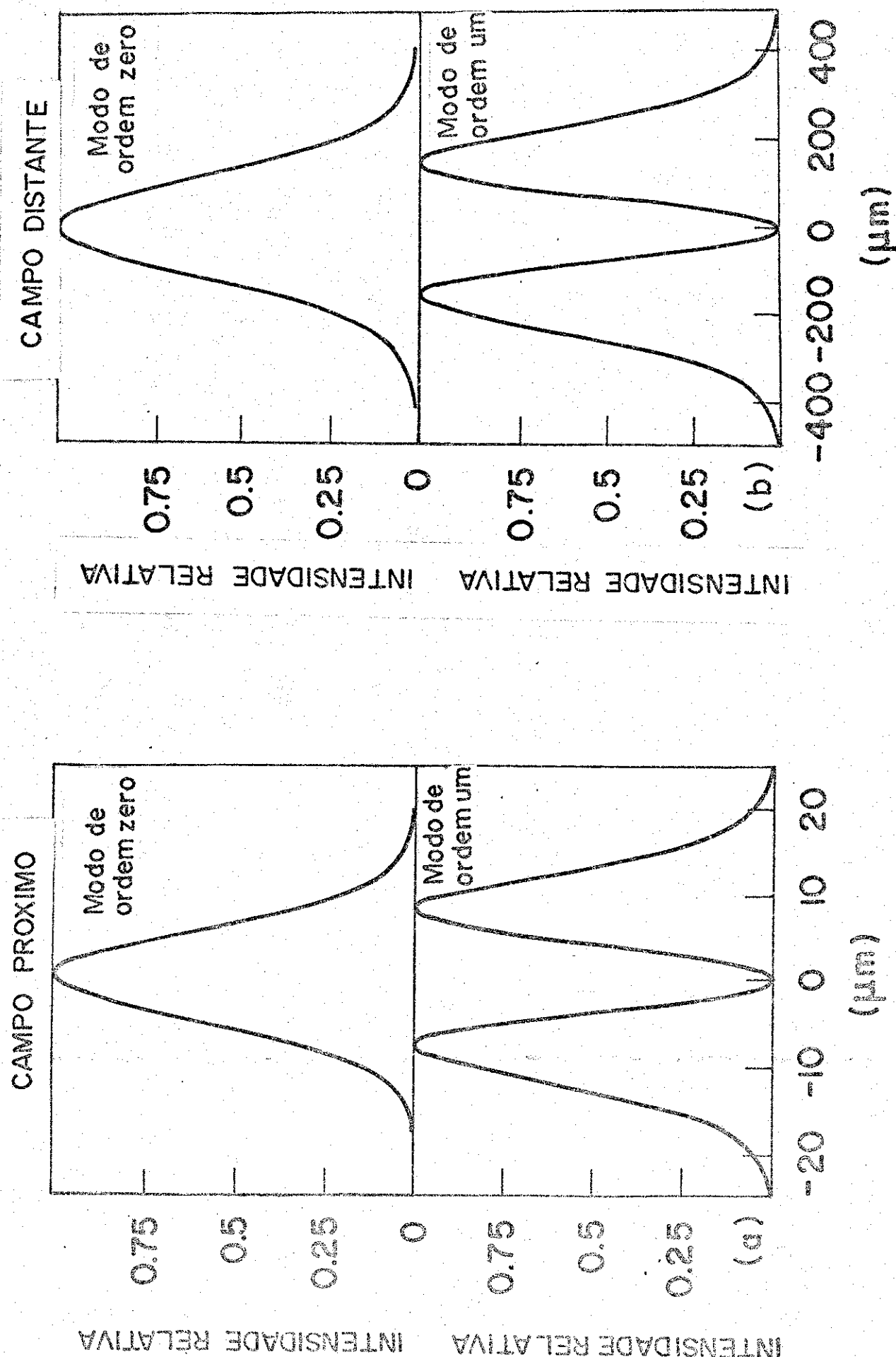


Fig. 10.7 . (a) e (b) . Campos próximo e distante calculados para os modos de ordem zero e um resultantes do perfil sech^2 no índice de refração ao longo da junção.

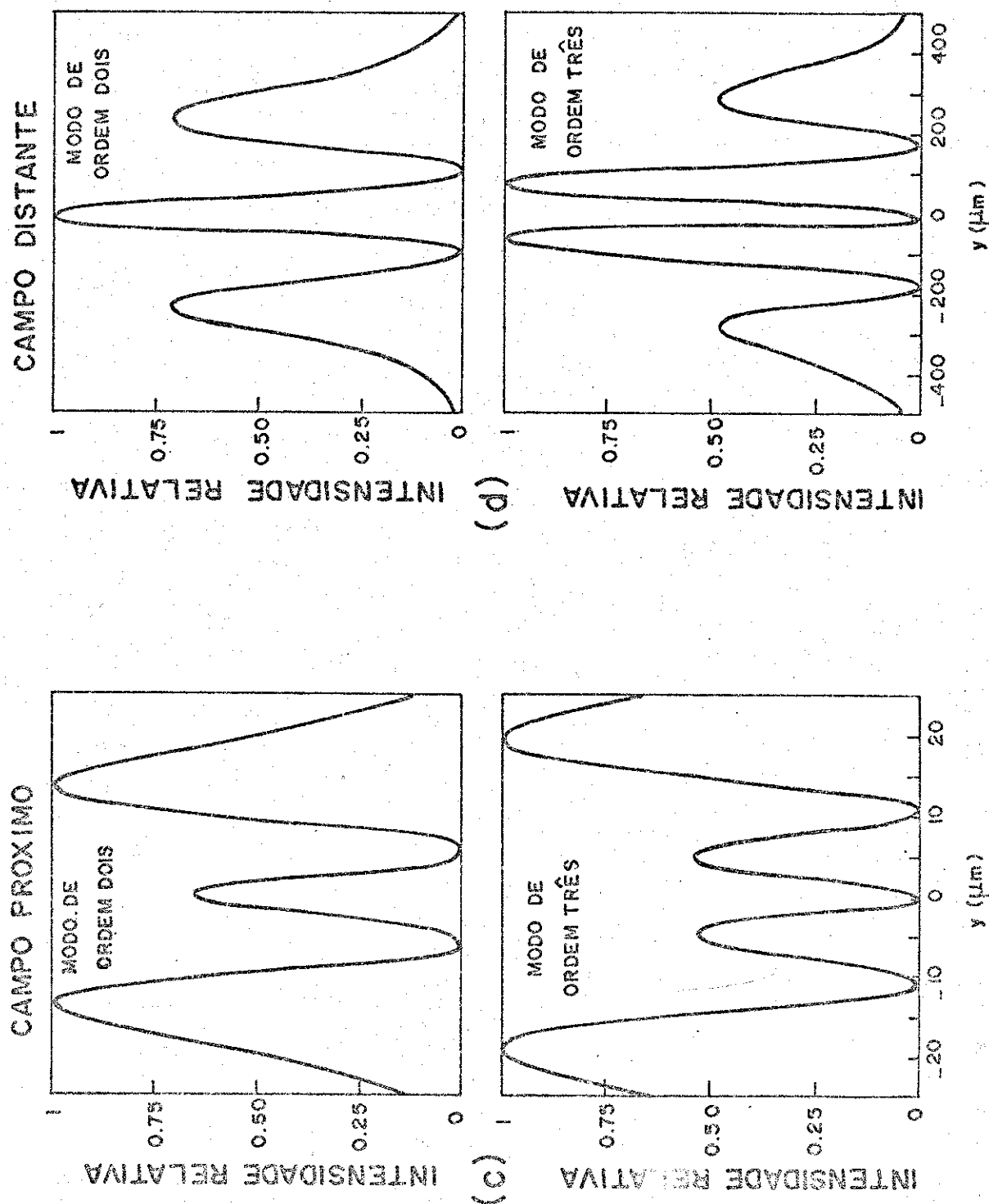


Fig. 10.7 . (c) e (d) . Campos próximo e distante calculados para os modos de ordem dois e três, resultantes do perfil sech^2 no índice de refração ao longo da junção.

entre os picos do campo distante está invertida em comparação às do campo próximo. No que diz respeito ao campo próximo, os resultados obtidos são praticamente os mesmos do que os obtidos com o perfil parabólico. Porém, na hora de se fazer a transformada de Fourier destes campos próximos para calcular os campos distantes, os campos distantes do perfil sech^2 resultam numa relação dos picos de intensidade oposta aos do perfil parabólico, que são funções Hermite-Gauss. Experimentalmente⁽⁶⁰⁾, os campos distantes seguem em geral a forma dos polinômios de Hermite-Gauss. Portanto, o comportamento dos campos distantes de um laser de semicondutor para modos de alta ordem não dependerá unicamente do perfil do índice de refração ao longo da direção transversal paralela à junção, senão que outros fatores, entre os quais perfis de ganho (ou absorção) e fatores de fase dependentes de y , deverão ser considerados para se ter uma explicação satisfatória dos resultados experimentais.

10.2 PERFIL DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO NO CASO DE DH LASERS.

Na seção 10.1 foi usado um perfil de índice de refração ao longo do plano da junção, que serviu para explicar os dados experimentais relativos aos modos transversais paralelos à junção. Entre as possíveis causas que originariam o perfil de índice de refração na direção correspondente ao modo, foi citado o perfil na injeção de portadores causado pelo uso do contato de faixa no laser. Como já foi mostrado no capítulo 9, para altas injeções acontece uma diminuição no índice de refração ao se aumentar a injeção n . Isto portanto, vai dar origem a um perfil negativo de N , isto é, no centro, onde n é maior, o N terá valor mínimo, aumentando ao se afastar do centro, até um certo valor constante. No capítulo 11 mostraremos com mais detalhe este perfil.

O caso tratado na seção anterior correspondia a lasers de homoestrutura nos quais, a largura da região ativa é de $\approx 2 \mu\text{m}$. Nestes lasers de homoestrutura a variação do índice de refração, formando o guia na direção transversal perpendicular à junção não é abrupta, de modo que pode ser representada por uma variação parabólica, tal e como foi feito na seção 10.1 .

Os lasers atualmente usados, são os lasers de heteroestrutura dupla (DH), nos quais, a região ativa (p-GaAs) do laser é de $d \approx 0.2 \mu\text{m}$, e fica entre duas camadas de $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$ ($x \approx 0.3$), as quais tem uma energia de banda proibida maior do que a do GaAs, e conseqüentemente, menor índice de refração. Isto dá lugar à criação de um perfil do índice de refração na direção perpendicular à junção, segundo se mostra na figura 10.8 .Como se pode ver nesta figura, este tipo de estrutura vai dar um forte confinamento da luz e dos portadores na direção x.

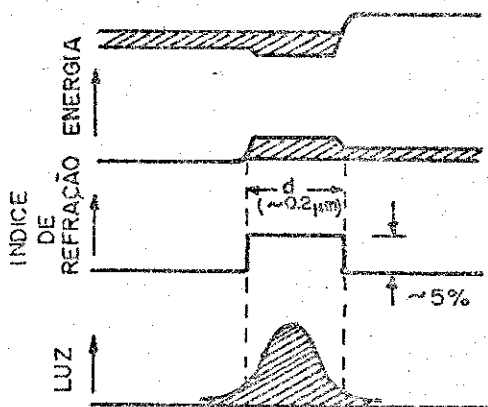


Fig. 10.8 . Representação esquemática do diagrama de bandas num laser de heteroestrutura dupla com tensão direta. Também estão representadas a variação no índice de refração, e a distribuição da intensidade de luz, tudo na direção perpendicular ao plano da junção.

Por causa do batente no índice de refração, o guiamento na direção perpendicular à junção será muito forte, e como a região ativa é muito fina, as variações no índice de refração que acontecem nas camadas vizinhas podem influenciar a propagação do modo na cavidade. De acordo com isto, nós deveremos levar em conta os perfis no N na direção paralela à junção, que se produzem nas camadas com Al que "prensam" a re-

gião ativa, e estudar a sua influência no perfil "efetivo" que se obterá na região ativa.

Para estimarmos isto, vamos supor nas 3 regiões, perfis de índice de refração que tenham a mesma forma funcional: $\sim \text{sech}^2(\beta y)$, com a mesma largura, porém com variações absolutas diferentes. Isto é

$$N^2(x, y) = \begin{cases} N_1^2 - 2\delta_1 N_1 (1 - \text{sech}^2 \beta y) & |x| > d/2 \\ N_0^2 - 2\delta_0 N_0 (1 - \text{sech}^2 \beta y) & |x| \leq d/2 \end{cases} \quad (10.2.1)$$

Onde d é a largura da região ativa, e estamos escolhendo a origem, no meio dela. Substituindo-se este perfil na equação de onda (eq.(10.1.6)), e usando a separação de variáveis, obteremos:

$$\frac{1}{z} \frac{d^2 z}{dz^2} = -\gamma^2 k^2 \quad (10.2.2)$$

$$\frac{x'''}{x} + \frac{y'''}{y} + N^2 k^2 - \gamma^2 = 0 \quad (10.2.3)$$

Já que o guiamento na direção x é muito mais forte do que na direção y , suporemos que⁽⁶¹⁾: $x'''/x = -\beta_x^2$, portanto, a equação diferencial para Y será:

$$y''' + (N^2 k^2 - \gamma^2 - \beta_x^2) y = 0 \quad (10.2.4)$$

Substituindo-se explicitamente N^2 pela forma dada na eq.(10.2.1) multiplicando a eq.(10.2.4) por $x^* x$ e integrando em toda a direção x :

$$y''' + \left\{ \left[N_0^2 - 2\delta_0 N_0 (1 - \text{sech}^2 \beta y) \right] k^2 \Gamma - \left[N_1^2 - 2\delta_1 N_1 (1 - \text{sech}^2 \beta y) \right] k^2 \Gamma + \left[N_1^2 - 2\delta_1 N_1 (1 - \text{sech}^2 \beta y) \right] k^2 - \gamma^2 - \beta_x^2 \right\} y = 0 \quad (10.2.5)$$

onde Γ é o assim chamado "fator de confinamento" do modo na direção x :

$$\Gamma \equiv \int_{-d/2}^{d/2} x^* x dx \quad (10.2.6)$$

Rearranjando os termos na eq.(10.2.5), poderemos escrever:

$$Y'' + \left\{ \left[N_1^2 - \Gamma(N_1^2 - N_0^2) - 2\delta_1 N_1 + 2\Gamma(\delta_1 N_1 - \delta_0 N_0) \right] k^2 - \gamma^2 - \beta_x^2 \right. \\ \left. + 2 \left[\delta_0 N_0 \Gamma + \delta_1 N_1 (1-\Gamma) \right] k^2 \operatorname{sech}^2 \beta y \right\} Y = 0 \quad (10.2.7)$$

Então, da eq.(10.2.7) vemos que, o efeito dos perfis de índice de refração nas camadas com Al, é o de nos dar um índice de refração "efetivo" dado por:

$$N_0 \delta N_{ef} = \delta_1 N_1 (1-\Gamma) + \delta_0 N_0 \Gamma = (\delta_0 N_0 - \delta_1 N_1) \Gamma + \delta_1 N_1 \quad (10.2.8)$$

Fazendo $N_1 = N_0 - \Delta$, onde Δ é a altura do batente no índice de refração que se observa na fig. 10.8, obteremos:

$$N_0 \delta N_{ef} = N_0 \left[\delta_0 \Gamma + \delta_1 (1-\Gamma) \right] - \Delta \delta_1 (1-\Gamma) \quad (10.2.9)$$

desprezando o termo $\Delta \delta_1 (1-\Gamma)$, já que Δ é muito pequeno, teremos:

$$N_0 \delta N_{ef} = N_0 \left[\delta_0 \Gamma + \delta_1 (1-\Gamma) \right] \quad (10.2.10)$$

de modo que, finalmente, a variação efetiva no índice de refração que teremos na direção y, será:

$$\delta N_{ef}(y) = \delta_0 \Gamma + \delta_1 (1-\Gamma) \quad (10.2.11)$$

A variação δ_0 da região ativa terá, principalmente, duas causas: o perfil de portadores, e a variação de temperatura; já no caso de δ_1 , esta variação terá a sua origem principal na variação de temperatura devido aos efeitos de difusão térmica. Por causa do modo transversal perpendicular à junção ficar muito confinado na região ativa, a distância que ele penetra nas camadas adjacentes vai ser muito pequena ($< 0.01 \mu m$), e assim, a variação de temperatura na região ocupada pelo modo será considerada aqui como sendo praticamente a mesma.

Para estimar a variação de N com a injeção de portadores, vamos usar os resultados obtidos no capítulo 9, para ΔN vs. n . Dos nossos resultados nós obtivemos que para injeções suficientemente altas ($n > 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), a variação ΔN tinha um comportamento aproximadamente linear com a injeção, ou seja: $\Delta N = -An + B$. Para baixas injeções, esta aproximação linear não é mais válida, e a variação correspondente de N se calcula para cada injeção e energia.

Vamos supor, então, que se tem uma injeção de $n = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, de modo que seja válido o uso da relação linear entre ΔN e n . Para estimar a contribuição a δ_0 dos portadores, consideraremos a variação do N entre o centro da faixa e o N correspondente a valores de y muito longe do centro da faixa onde deve-se ter injeção zero; deste modo a tal variação será: $-A(1 \cdot 10^{18}) + B$. Assim, teremos:

$$\delta N_{\text{ef}}(y) \approx \left[-A(1 \cdot 10^{18}) + B + \frac{\partial N_0}{\partial T} \delta T \right] \Gamma + \left(\frac{\partial N_1}{\partial T} \delta T \right) (1 - \Gamma) \quad (10.2.12)$$

Para se obter uma estimativa qualitativa da variação δN_{ef} , vamos usar os seguintes valores:

$$A = 10^{-20} \text{ cm}^3 \quad (\text{Fig. 9.32})$$

$$B = 6 \cdot 10^{-3} \quad (h\nu = 1.38 \text{ eV, Fig. 9.33})$$

$$\frac{\partial N_0}{\partial T} \approx 5.7 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}; \quad \frac{\partial N_1}{\partial T} \approx 5 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1} \quad (\text{ref. 56})$$

com isto, para uma injeção de $n = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, obtém-se:

$$\delta N_{\text{ef}}(y) \approx \left\{ -4\Gamma + (0.5 + 0.07\Gamma) \delta T \right\} \cdot 10^{-3} \quad (10.2.13)$$

deste modo, a variação efetiva no índice de refração vai depender de dois parâmetros: a variação de temperatura e o fator de confinamento.

Na figura 10.9 mostramos o gráfico de $\delta N_{\text{ef}}(y)$ em função de δT para diferentes valores do fator Γ . Nesta figura vemos que a obtenção

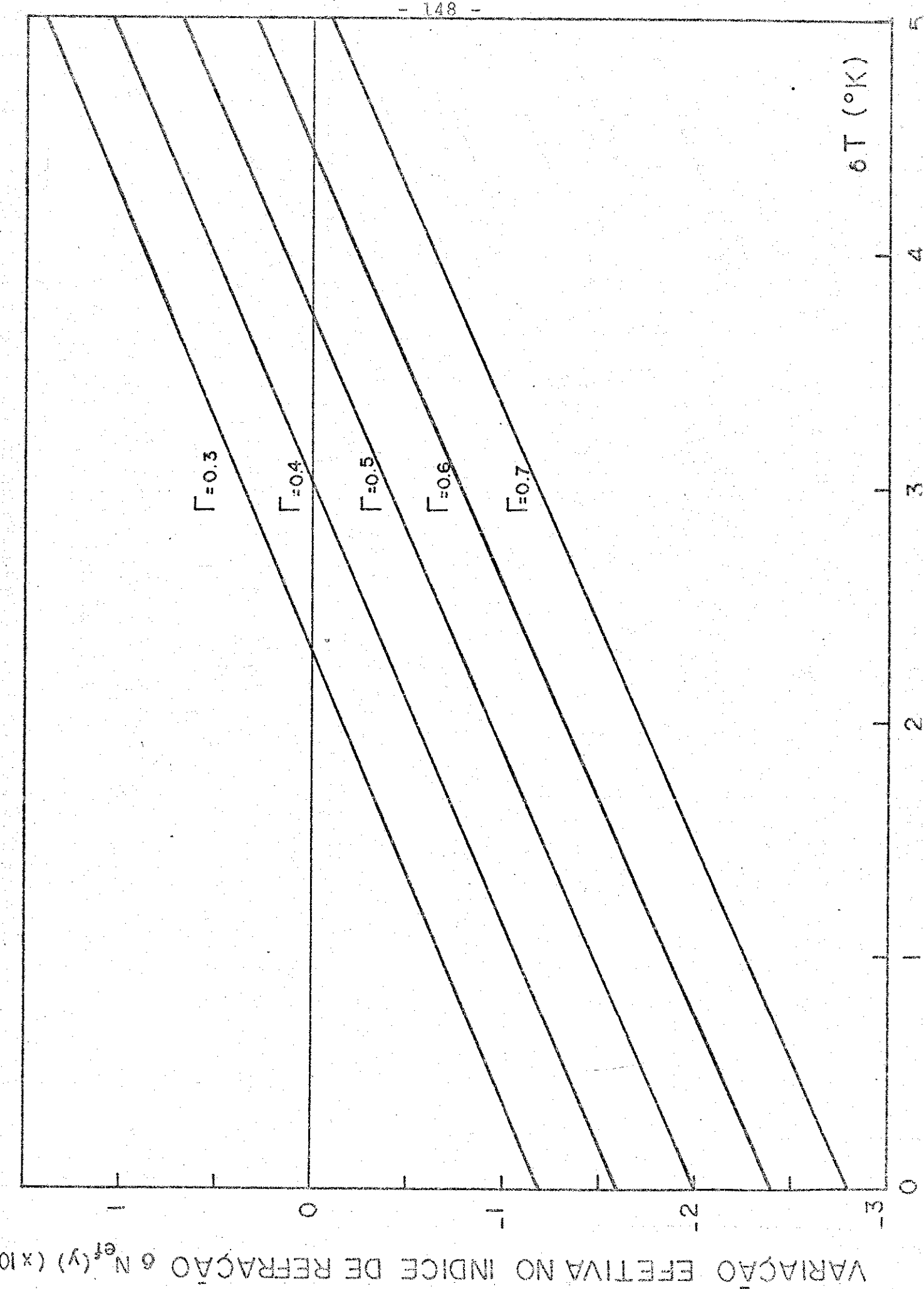


Fig 10.9 . Variação efetiva no índice de refração como função da variação de temperatura na região ativa do laser, para diferentes valores do fator de confinamento Γ .

de uma variação $\delta N_{ef}(y)$ positiva ou negativa, depende do confinamento do modo, e da variação da temperatura. Por exemplo, para um fator de confinamento de 0.5, precisaremos de variações de temperatura maiores do que 3.8 °K, a fim de que se produza um perfil positivo no índice de refração. Quanto maior for o confinamento do modo, maiores variações de temperatura, (entre o centro da faixa e as regiões longe dos extremos da faixa) serão necessárias para se obter um perfil de guiamento pelo índice de refração. Para pequenas variações de temperatura, nós teremos perfis negativos de N , os quais tenderam a desconfinar o modo na direção y .

Destes resultados, obtem-se que, considerando a parte real do índice de refração complexo, a variação no índice de refração $\delta N_{ef}(y)$ pode ser positiva (guiamento), de acordo com Paoli⁽⁶¹⁾; ou negativa (antiguiamento) de acordo com Buus⁽⁴⁾. Em ambos os casos, para se obter uma imagem correta do guiamento dos modos na cavidade, na direção paralela à junção, se deverá incluir nesta variação, a contribuição da parte imaginária do índice de refração complexo.

Como se explicou no capítulo 7, as relações de dispersão de Kramers-Kronig, relacionam as partes real e imaginária do índice de refração. Portanto, a existência de um perfil no índice de refração implica na existência de um perfil no coeficiente de extinção (ou no ganho), tal como se obteve no capítulo 9.

Nash⁽⁵⁶⁾ calculou qual deveria ser o valor do ganho no guia de ondas, que desse o mesmo confinamento num modo gaussiano, do que um batente positivo no índice de refração δN ; e obteve o seguinte resultado:

$$\delta N(g) = \frac{\lambda (\text{variação no perfil de ganho})}{8 \pi} \quad (10.2.14)$$

onde a variação no perfil de ganho δg , pode ser obtida da fig.9.20.

Para uma injeção de $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e uma energia $E=1.38 \text{ eV}$, temos:

$\delta g \approx 72 \text{ cm}^{-1}$. Sendo a contribuição do ganho, uma contribuição positiva ao índice de refração. Com isto, a variação efetiva no índice de refração terá a forma:

$$\delta N_{\text{ef}}(y) = \left[-An+B + \frac{\partial N_0}{\partial T} \delta T + \frac{\lambda \delta g}{8\pi} \right] \Gamma + \left(\frac{\partial N_1}{\partial T} \delta T \right) (1-\Gamma) \quad (10.2.15)$$

a contribuição do ganho só acontece na região ativa do laser, que é onde se tem a injeção de portadores.

Usando o valor de δg dado, a contribuição do ganho à variação do índice de refração será: $\lambda \delta g/8\pi \approx 2.55 \cdot 10^{-4}$; enquanto que a contribuição dos portadores a δN_{ef} é de: $-An+B \approx -4 \cdot 10^{-3}$. Vemos então, que para esta injeção de $n=1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, o ganho ainda não consegue superar o efeito desconfiante dos portadores injetados; de modo que a variação de temperatura na região ativa devida à corrente injetada vai ser um fator muito importante no guiamento para estes níveis de injeção.

Quando a injeção de portadores aumenta até conseguir que o ganho se iguale às perdas na cavidade, isto é, quando há oscilação do modo, vai ocorrer um "achatamento" progressivo no perfil de portadores injetados ao longo da junção. A razão deste achatamento é a seguinte: uma vez que o modo comece a oscilar, a emissão estimulada que oscila na cavidade na direção z supera em muito a emissão espontânea nesta direção, produzindo um número muito grande de fótons na cavidade, o que faz com que o tempo de vida médio da recombinação estimulada diminua⁽⁶²⁾. Assim, ao aumentar a densidade de portadores injetados, o excedente do valor de n para o qual a emissão estimulada foi disparada vai se recombinar rapidamente (10^{-12} seg), fazendo com que o valor de n sature⁽⁵⁾. Já que no centro da faixa o ponto $y=0$ é o que tem o valor máximo de n , será neste ponto que se alcançará primeiro o valor de saturação. Ao se aumentar a corrente, a densidade n nos pontos fora do

centro da faixa, aumentará até chegar ao valor de saturação, igual ao do centro da faixa. Deste modo alcançar-se-á um achatamento progressivo no perfil da densidade de portadores injetados ao longo da junção.

A consequência desta saturação dos portadores injetados, vai ser a de que as contribuições dos portadores injetados e do ganho à variação do índice de refração, vão alcançar um valor de saturação. Assim, ao se aumentar a corrente, estas contribuições permanecem fixas; porém, a temperatura aumenta por causa das transições não radiativas⁽⁶³⁾, de modo que a contribuição da variação de temperatura a δN_{ef} na eq.(10.2.5) aumenta, favorecendo o confinamento do modo.

A análise feita, precisa ser aperfeiçoada, já que o efeito do ganho sobre δN_{ef} dado na eq.(10.2.14) é uma estimativa de caráter mais qualitativo do que quantitativo. Uma análise mais exata deverá levar em conta o perfil das partes real e imaginária do índice de refração complexo na equação de onda, para encontrar as autofunções que nos darão os modos permitidos na cavidade.

Uma maneira de se usar uma constante dielétrica complexa foi feita por Buus⁽⁴⁾ para a resolução dos campos eletromagnéticos nos lasers de faixa DH, usando um modelo bidimensional para a constante dielétrica. Na direção perpendicular à junção ele usou um modelo de batente para a constante dielétrica; e na direção paralela, a constante dielétrica foi usada diretamente desenvolvendo-a numa expansão de funções de Hermite-Gauss, sem aproximar por uma parábola ou batente. Neste trabalho, a autofunção Y na direção paralela à junção é dada por uma serie de funções de Hermite-Gauss. Este cálculo feito por Buus é bastante complexo, e para o modo de ordem zero que fica muito dentro da faixa, o uso dum perfil tipo sech^2 para o índice de refração deve-se constituir numa boa aproximação.

C A P Í T U L O 1 1

APLICAÇÕES

11.1 Comportamento das Bandas em Função da Temperatura.

Nosso interesse, foi o de fazer um estudo da variação dos diferentes parâmetros que entram no cálculo auto consistente da densidade de estados, com respeito à sua variação com a temperatura no intervalo 77°K - 340°K.

Para o comprimento de blindagem, como já foi dito, para altas temperaturas, onde seja aplicável a estatística de Boltzmann, o L deve-se reduzir ao comprimento de Debye: $(\epsilon kT/4\pi e^2)^{1/2}$, dando assim uma dependência do tipo $L \propto T^{1/2}$. Na figura 11.1 mostra-se o comportamento de L com a temperatura; observa-se que as baixas temperaturas o comportamento de L é linear com T , mudando para um comportamento do tipo $L \propto T^{1/2}$ para altas temperaturas.

Os parâmetros η_c e η_v , que medem a profundidade das caudas nas bandas de condução e valência respectivamente, são mostradas em função da temperatura na figura 11.2.

Nota-se que tanto η_c como η_v aumentam com a temperatura, sendo que η_c tem uma variação mais ou menos linear, enquanto que a de η_v é da forma: $\eta_v \sim T^a$. Da figura 11.2 nós obtivemos expressões de ajuste para η_c e η_v como função da temperatura, sendo as expressões as seguintes:

$$\eta_c \approx 1.945 + 0.028 T \quad (11.1.1)$$

$$\eta_v \approx (2.048 T)^{0.471} \quad (11.1.2)$$

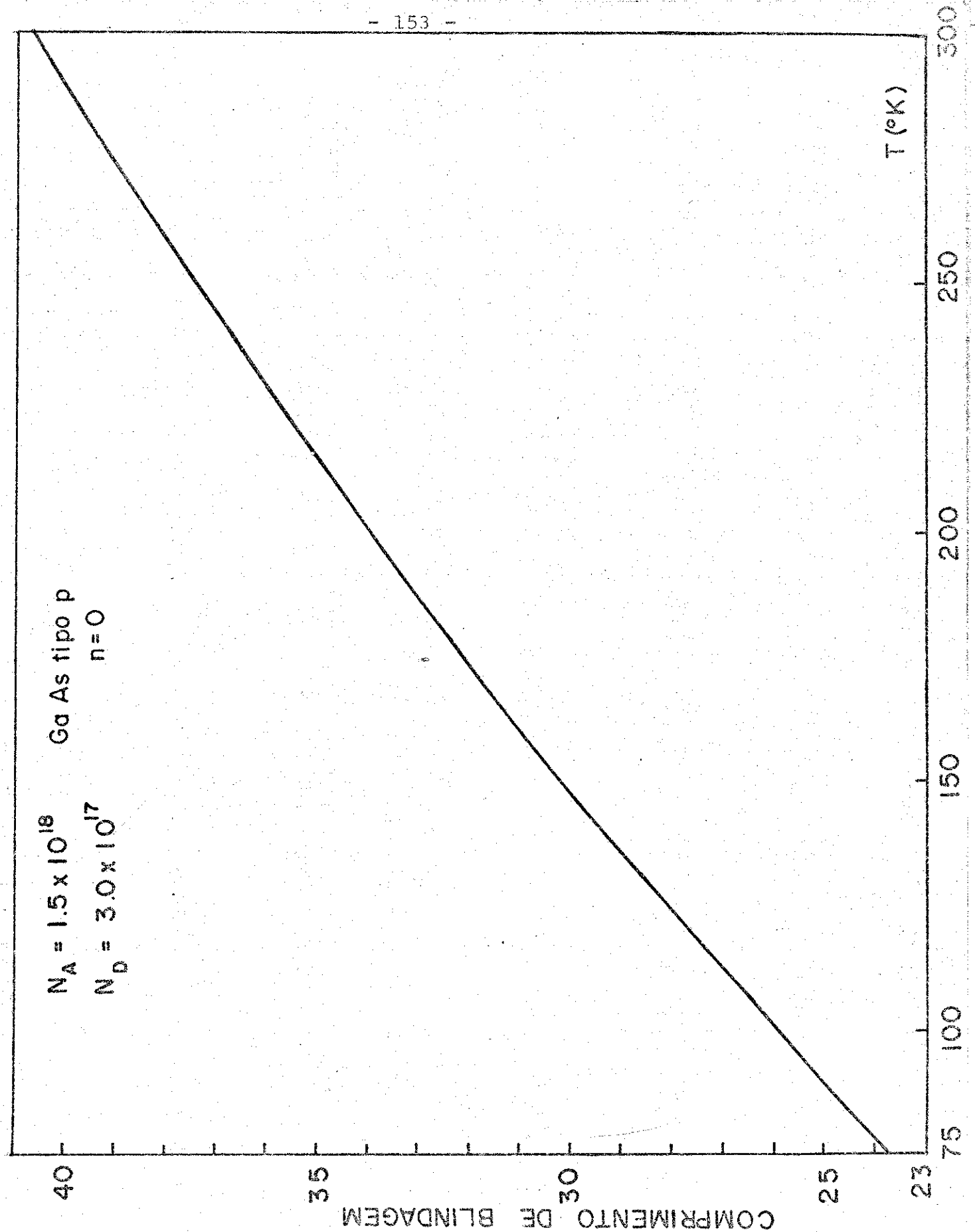


Fig 11.1 . Variação com a temperatura do comprimento de blindagem autoconsistente, calculado usando o modelo para a densidade de estados descrito no capítulo 5.

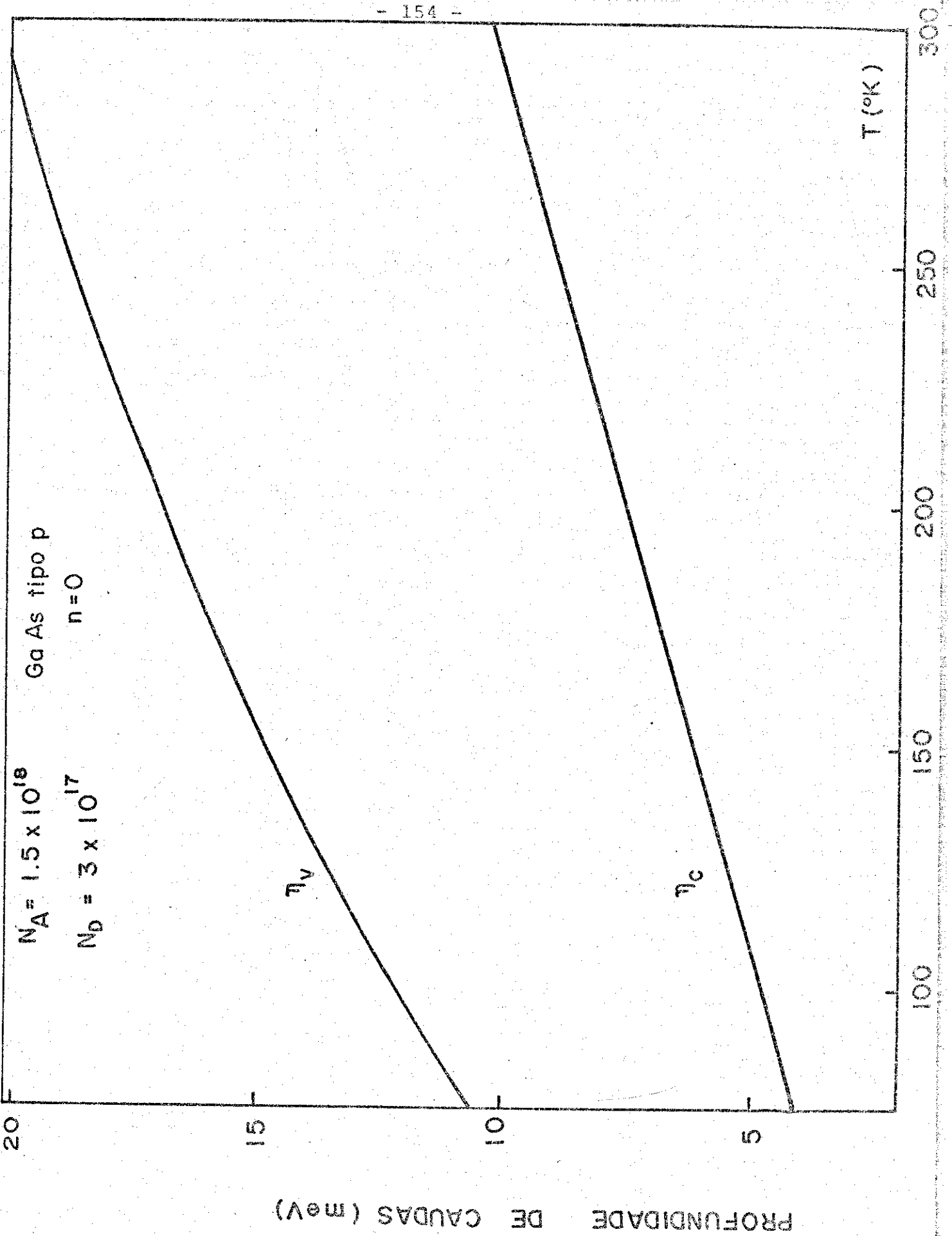


Fig. 11.2 . Variação com a temperatura, dos parâmetros η_c e η_v que medem a profundidade das caudas nas bandas de condução e valência respectivamente.

As densidades de estados autoconsistentes, tanto para a banda de condução, assim como para a banda de valência, foram calculadas para diferentes temperaturas. Na figura 11.3 temos os resultados para $T = 77^{\circ}\text{K}$, 150°K , 250°K e 300°K . Estes resultados correspondem ao caso quando não se tem injeção, isto é, $n=0$. Observa-se que as caudas das bandas aumentam com a temperatura, sendo este aumento maior para a banda de valência. Por outro lado, deve-se notar que na faixa de energias de 10 a 50 meV dentro das bandas, este comportamento se inverte, com a densidade de estados diminuindo levemente ao aumentar a temperatura.

Na figura 11.4 apresentamos também a variação das densidades de estados com a temperatura para temperaturas próximas à ambiente (300°K), observando o mesmo comportamento anterior.

11.2 Uma expressão para $g(E,n)$.

As curvas de ganho em torno do seu valor máximo, são mostradas na figura 11.5 para diferentes níveis de injeção. Estes resultados permitem encontrar uma expressão que nos dê ganho em função da energia do fóton e da densidade de portadores injetados para energias próximas ao máximo da curva de ganho. Este tipo de expressão é muito útil, pois com isto poderá conhecer-se o ganho para os diferentes modos do laser. Uma vez que as energias destes modos estarão em geral perto de g_{max} , pois é nesta faixa que o ganho conseguirá se igualar primeiro com as perdas, dando assim os picos na emissão estimulada.

O valor máximo nas curvas de ganho vai ter uma dependência com a injeção n , que será da forma (2) :

$$g_{\text{max}} = \beta (n-n_0)^a \quad (11.2.1)$$

onde a e β serão constantes a serem ajustadas, e n_0 será o valor da injeção a partir do qual se tem ganho, o que em nosso caso dá

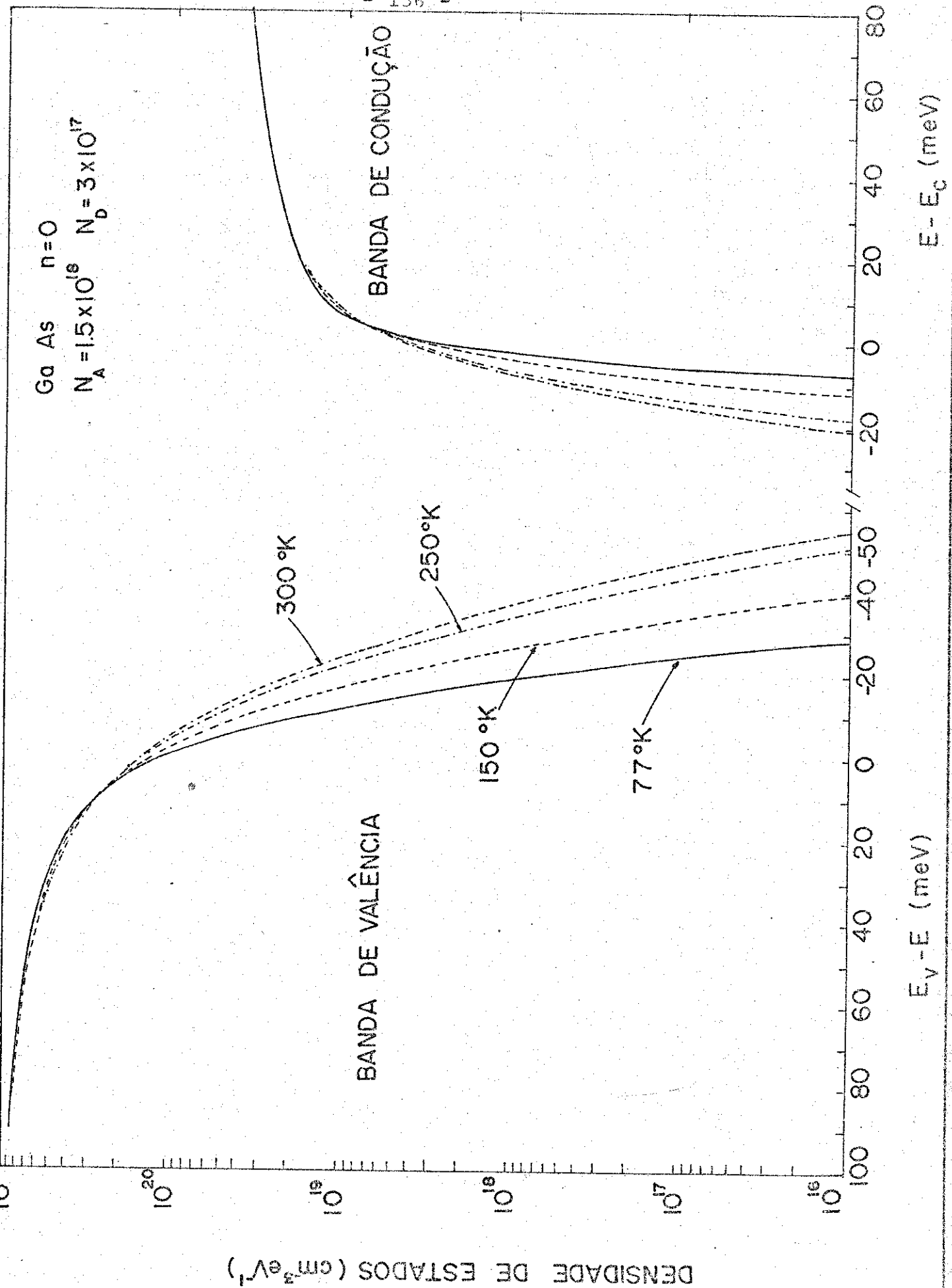


Fig. 11.3 . Variação das densidades de estados com caudas, do GaAs tipo p, nas bandas de condução e valência, com a temperatura no intervalo de 77 - 300 °K.

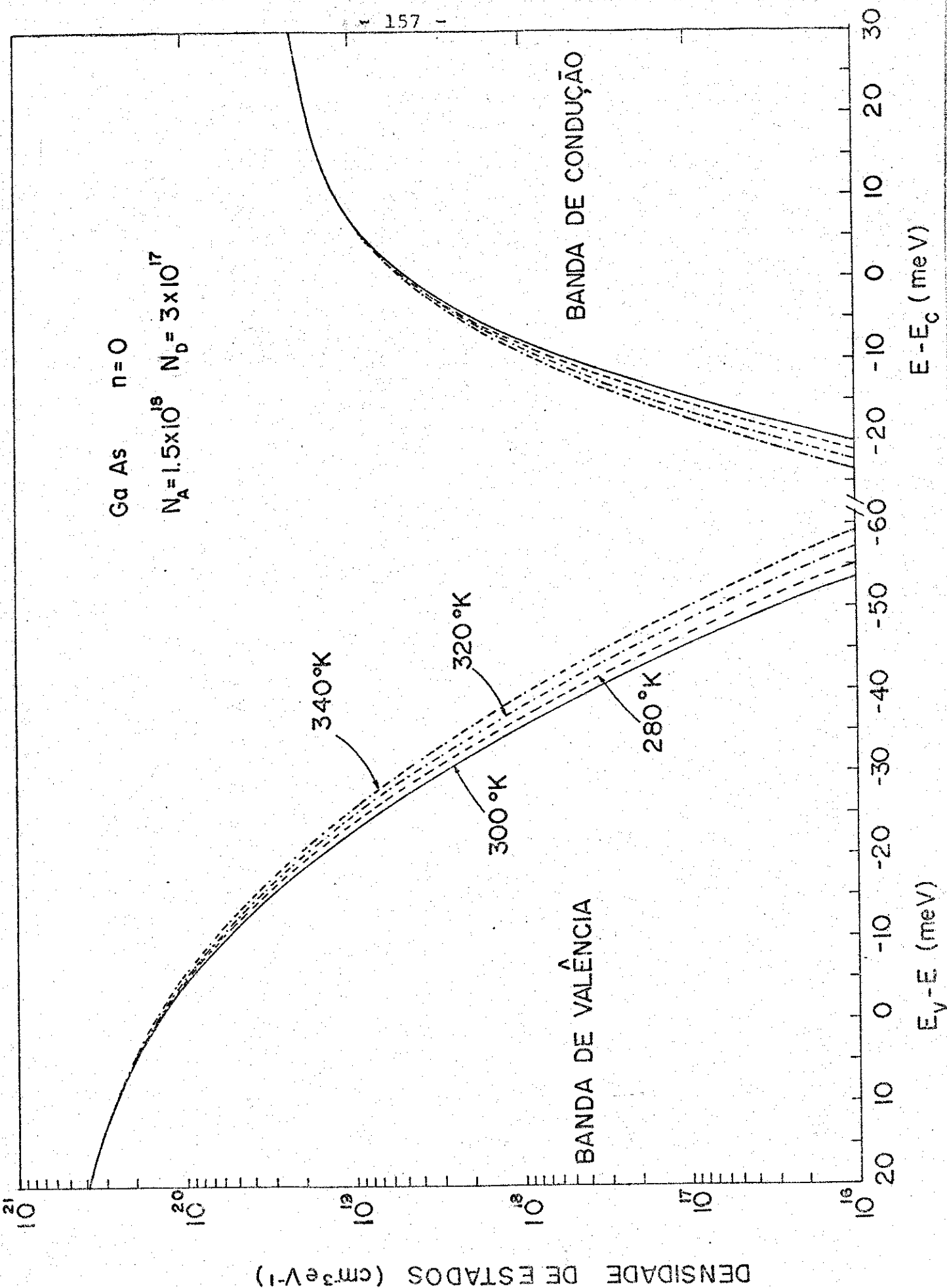


Fig. 11.4 . Densidades de estados com caudas nas bandas de condução e valência, para diferentes valores da temperatura em torno da temperatura ambiente.

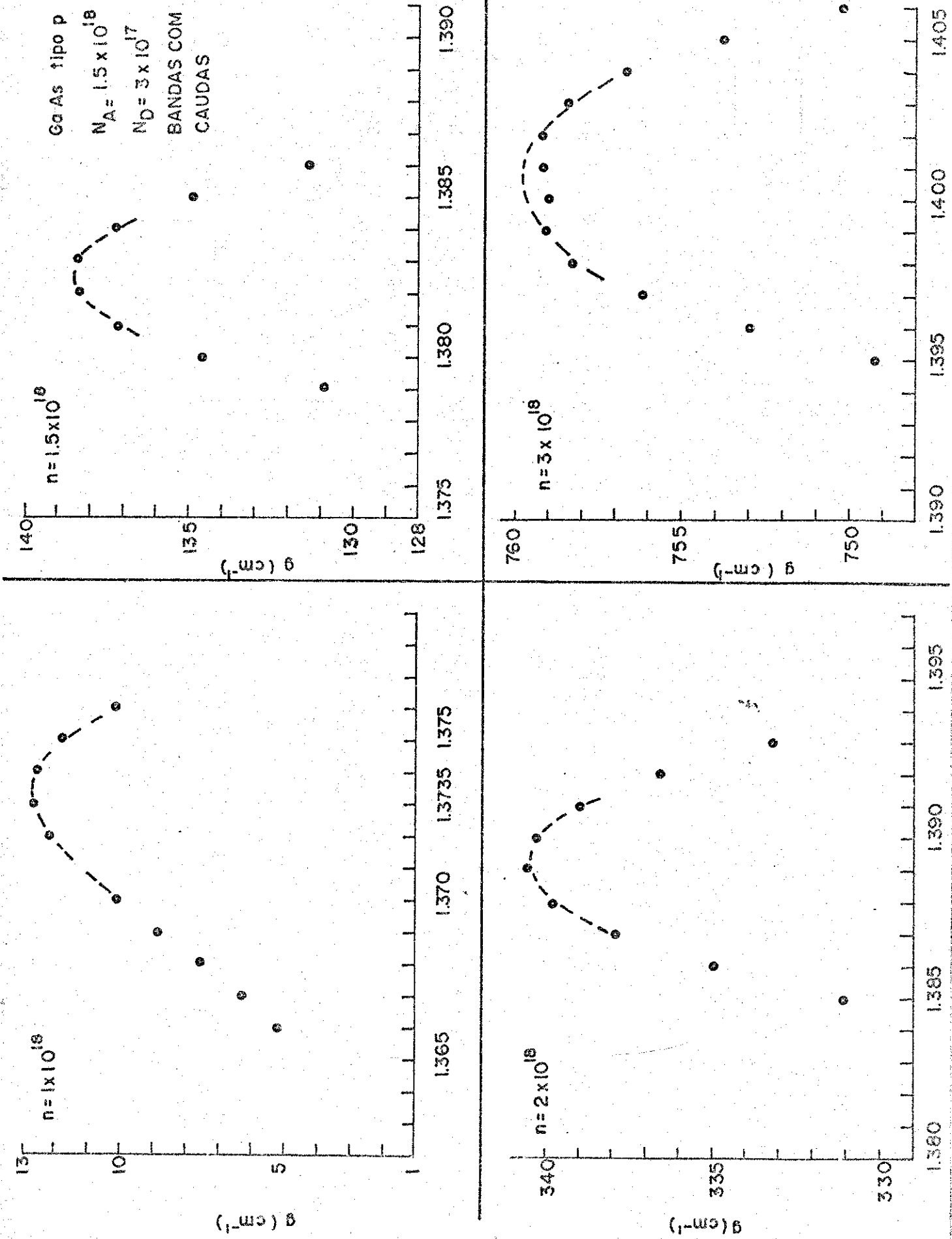


Fig 11.5 . Curvas de ganho vs. energia, em torno de g_{max} , para diferentes valores da densidade de portadores injetados n .

$n_0 \approx 9.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Por outro lado, em torno do máximo das curvas de ganho, vamos ajustar uma parábola da forma:

$$g = g_{\max} \left[1 - b (E - E_{0\max})^2 \right] \quad (11.2.2)$$

onde b será um parâmetro dependente da injeção n .

Ajustando a expressão dada na equação (11.2.2) aos pontos na figura 11.5, teremos uma expressão para $b(n)$ da forma:

$$b(n) \approx \frac{4.205 \times 10^{21}}{n - 8.1126 \times 10^{17}} - 1.7316 \times 10^3 \quad (11.2.3)$$

Da mesma forma, ajustando os máximos das curvas na figura 11.5 à equação (11.2.1), obteremos para a e β os valores:

$$a = 1.262 \quad \beta = 5.8542 \times 10^{-21} \quad (11.2.4)$$

Finalmente, juntando as equações (11.2.1), (11.2.2), (11.2.3) e (11.2.4) chegaremos a uma expressão para o ganho em função da energia e da injeção, válida para energias perto da correspondente ao máximo da curva de ganho, ou seja:

$$g(E, n) = \beta (n - n_0)^a \left[1 - b(n) (E - E_{0\max})^2 \right] \quad (11.2.5)$$

11.3 Perfil do Índice de Refração Complexo

Vamos examinar a formação do perfil de índice de refração complexo devido à injeção na direção transversal paralela ao plano da junção no laser de semiconductor.

Quando se injeta a corrente no contato de faixa do laser de semiconductor, nós vamos ter uma difusão de corrente na região ativa, na direção transversal paralela à junção, de modo que a corrente vai ter um valor máximo no centro da faixa, diminuindo ao se afastar dele (ao aumentar y). Isto vai dar origem então a um perfil na densidade de portadores injetados ao longo do eixo y , que dependerá do comprimento de difusão dos portadores.

Na figura 11.6 mostramos um perfil de densidade de portadores⁽⁶⁴⁾, no qual o valor máximo está por volta de $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Uma vez conhecido o perfil dos portadores injetados, nós podemos agora usar os resultados obtidos no capítulo 9, a fim de calcular o perfil de N complexo produzido por este perfil de injeção dos portadores. Para isto, faremos uso das figuras 9.26 e 9.27 que nos dão o comportamento do índice de refração e do coeficiente de extinção em função de n , para diferentes energias do fóton E . Assim, para cada valor de n no perfil de injeção da figura 11.6, teremos valores correspondentes para N e κ , isto é, para as partes real e imaginária do índice de refração.

O perfil do índice de refração e do coeficiente de extinção, ao longo da direção paralela à junção, está mostrado na figura 11.7. A curva de linha contínua corresponde ao índice de refração N , e a de linha tracejada corresponde ao coeficiente de extinção $\kappa = \alpha \lambda / 4\pi$. Um coeficiente de extinção negativo, ou seja uma absorção negativa, corresponde a ganho no meio. Examinando o perfil do índice de refração obtido, observamos que na região de $|y| < 20\mu$, já que o N é menor no centro ($y=0$) e aumenta com $|y|$, sua tendência vai ser a de desconfinar o modo. Porém, ao se levar em conta o perfil de ganho, obteremos o que se conhece por "guiamento pelo ganho" na cavidade do laser.

O perfil do coeficiente de extinção possui uma parte negativa (até $\sim 8\mu$) que corresponde ao ganho, e uma parte positiva ($y > 8\mu$) relacionada à absorção α . Observa-se que para $y > 20\mu$, o comportamento dos perfis não é o de chegar a um valor estacionário longe do centro da faixa ($y=0$). Em vez disso, tanto N quanto κ chegam a um valor máximo por volta de $y \sim 24\mu$, após o que eles diminuem suavemente até o valor correspondente à injeção zero; o qual para N é de aproximadamente 3.5262 e para κ de $\sim 4.5 \times 10^{-4}$. Este comportamento está diretamente relacionado com o comportamento de N e κ vs. n .

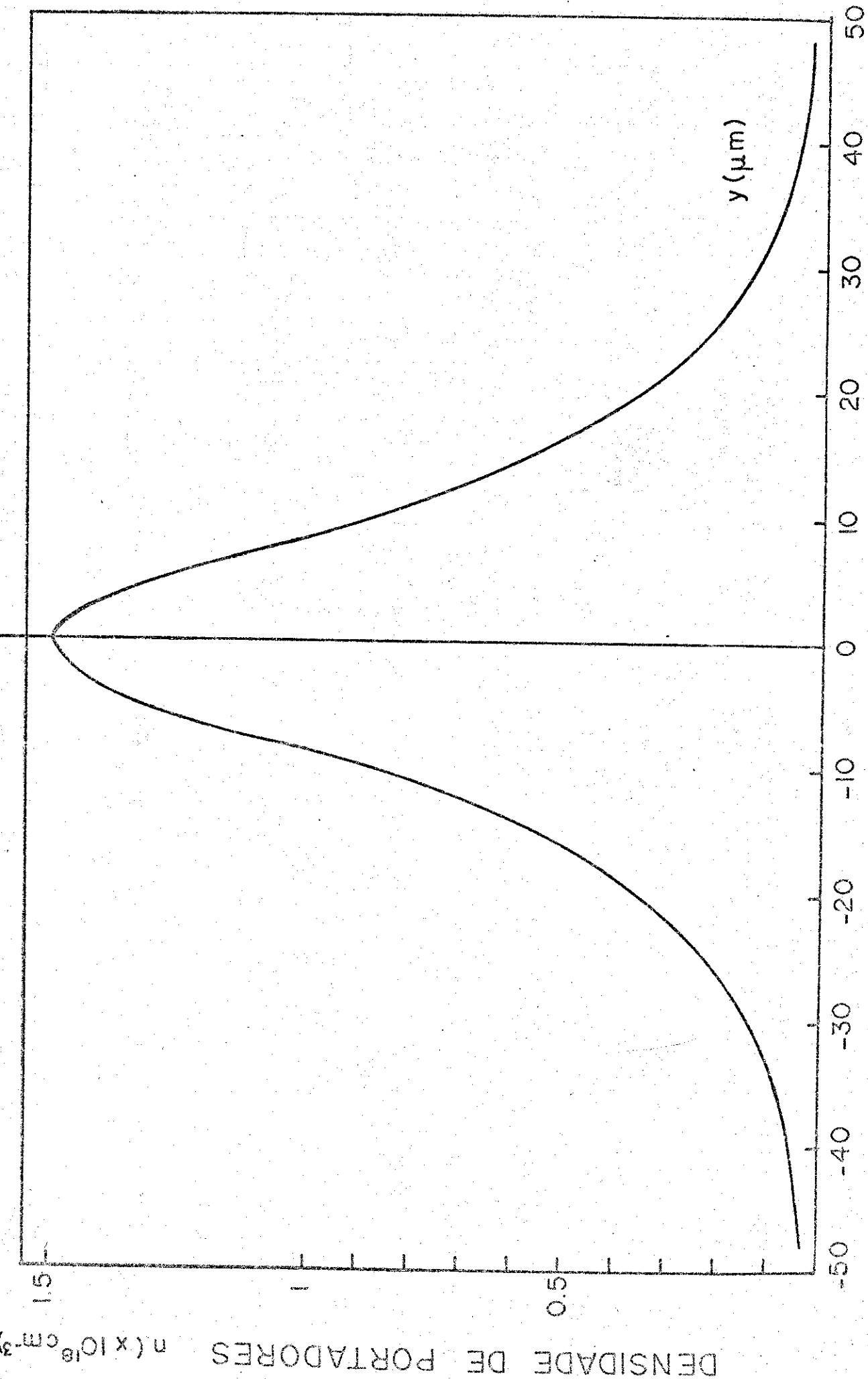


Fig. 11.6 . Perfil de injeção de portadores ao longo da junção, provocado pela injeção de corrente no contato de faixa do laser. Neste caso, o valor máximo da injeção no centro da faixa ($y=0$), é de $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

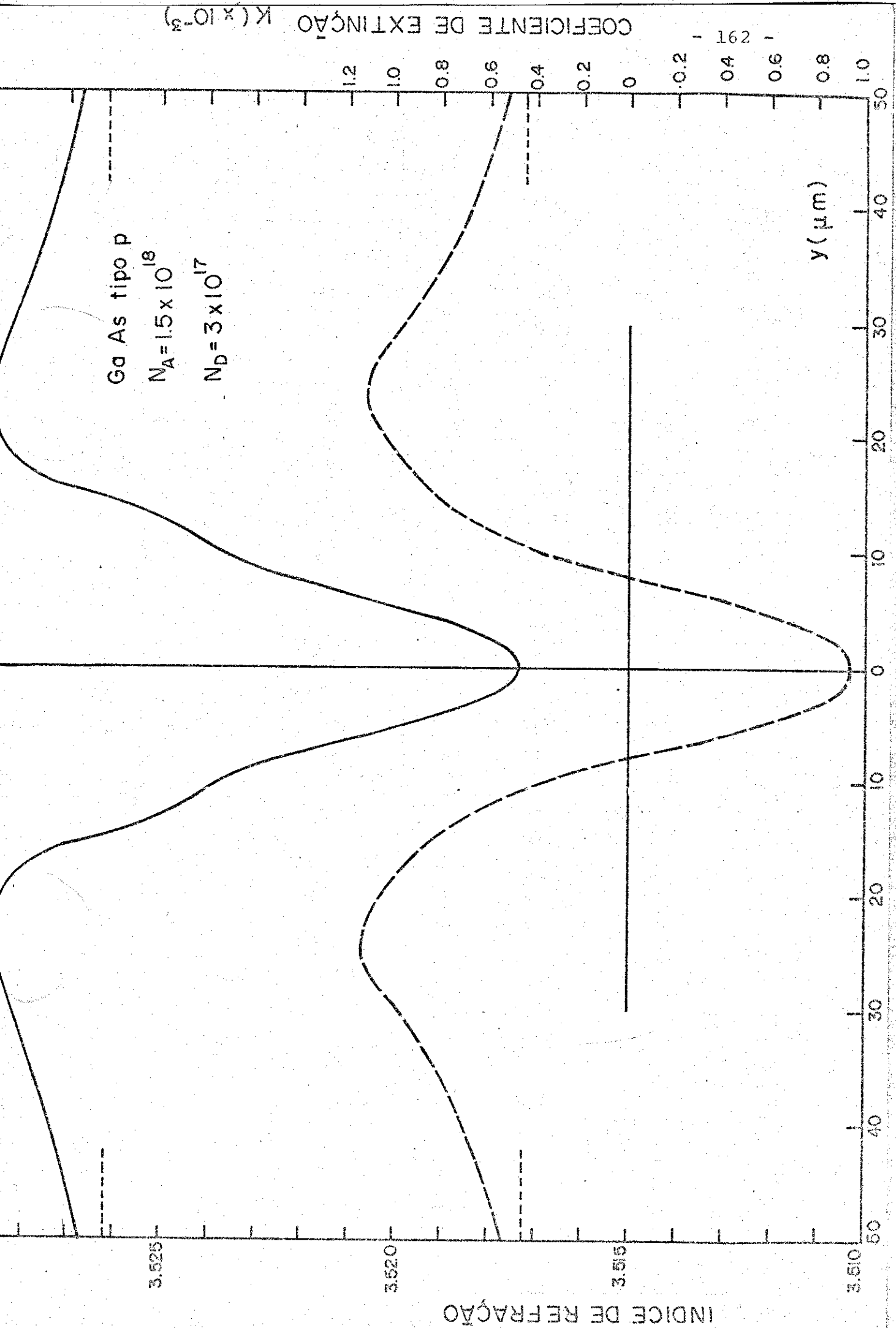


Fig. 11.7 . Perfis do índice de refração N e do coeficiente de extinção κ , na direção paralela à junção, produzidos pelo perfil de portadores injetados mostrado na fig. 11.6 .

das figuras 9.27 e 9.28. Por causa disto, a porção do modo que fica em $y > 20\mu$ vai experimentar confinamento devido ao índice de refração e desconfinamento devido à absorção.

No caso de se ter alguma assimetria no perfil dos portadores livres injetados, isto afetaria o perfil do índice de refração complexo, o que poderia provocar assimetria no guiamento, no caso do modo ser o suficientemente largo, de modo a "sentir" as assimetrias no perfil do índice de refração complexo.

Do comportamento do índice de refração complexo como função da densidade de portadores injetados, dado nas figuras 9.27 e 9.28, notamos que a forma dos perfis de N e κ na direção paralela à junção vai depender de qual seja a corrente de injeção, já que dependendo disto o índice de refração vai atuar como guia ou anti-guia de ondas. Assim por exemplo, para correntes bem abaixo da corrente limiar do laser, isto é, correntes que correspondam a injeções menores a $2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, o perfil do índice de refração produzido pelo perfil dos portadores injetados, será positivo, de modo que formará um guia de ondas na cavidade do laser.

No caso de que a extensão do modo transversal na direção paralela à junção não seja grande, pode-se notar da figura 11.7, que os perfis das partes real e imaginária do índice de refração complexo poderão se aproximar por funções do tipo $\sim \text{sech}^2(y/y')$, de modo a ter aproximadamente a mesma largura. Isto é, o índice de refração complexo terá a forma:

$$N^2(y) = N_0^2 \left[1 - \frac{2(\delta_1 + i\delta_2)}{(N_0 + i\kappa)} (1 - \text{sech}^2(y/y')) \right] \quad (11.3.1)$$

sendo δ_1 o valor máximo da variação no índice de refração real, e δ_2 o valor máximo da variação no coeficiente de extinção κ .

A substituição desta expressão do índice de refração complexo na equação de onda escalar (eq. 10.1.6), dará como solução, na direção y , as mesmas funções hipergeométricas da equação (10.1.13);

exceto que agora ϵ e S serão quantidades complexas, ou seja:

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = \frac{1}{2} - (2n+1) + (1+8(N+i\kappa))(\delta_1 + i\delta_2)k^2 y'^2{}^{1/2} \quad (11.3.2)$$

com S cumprindo: $S = n + \epsilon$ $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Vamos examinar com mais detalhe o caso do modo de ordem zero ($S=\epsilon$). Neste caso, sabemos que o campo próximo é dado por (veja equação 10.1.21a):

$$Y_0(y) = \text{sech}^{(\epsilon_1 + \epsilon_2)}(y/y') \quad (11.3.3)$$

onde ϵ_1 e ϵ_2 serão as partes real e imaginária da equação (11.3.2). Da equação (11.3.2), podem-se obter as expressões para ϵ_1 e ϵ_2 , que serão (modo de ordem zero, $n=0$):

$$\epsilon_1 = \left[(1+A)^2 + B^2 \right]^{1/4} \cos \left[\frac{1}{2} \text{tg}^{-1} \left(\frac{B}{1+A} \right) \right] - \frac{1}{2} \quad (11.3.4)$$

$$\epsilon_2 = \left[(1+A)^2 + B^2 \right]^{1/4} \text{sen} \left[\frac{1}{2} \text{tg}^{-1} \left(\frac{B}{1+A} \right) \right] \quad (11.3.5)$$

onde:

$$A = 2 \left(\frac{4\pi y'}{\lambda} \right)^2 (\delta_1 N_0 - \delta_2 \kappa) \quad (11.3.6)$$

$$B = 2 \left(\frac{4\pi y'}{\lambda} \right)^2 (\delta_2 N_0 + \delta_1 \kappa) \quad (11.3.7)$$

O campo distante será dado pela transformada de Fourier da equação (11.3.3), e terá a forma:

$$\phi_0(\rho) = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}^{\epsilon_1}(y/y') \exp \left[i \left(\frac{2\pi y \rho}{\lambda Z_0} + \epsilon_2 \ln \text{sech}(y/y') \right) \right] dy \quad (11.3.8)$$

No caso de modos de alta ordem, os quais são mais estendidos em y , a aproximação de $\text{sech}^2(y/y')$ não será mais válida, e a presença das "lombadas" no índice de refração N deverão ser levadas em conta.

C A P I T U L O 1 2

12.1 Conclusões

i) Devido aos efeitos de competição entre: o preenchimento da banda devido aos portadores injetados, e a diminuição na energia da banda proibida produzida pelos mesmos portadores, o comportamento da extremidade da absorção com a injeção (fig.9.15) apresenta um deslocamento para energias menores quando a diminuição na energia da banda proibida domina, deslocando depois para energias maiores quando o efeito do preenchimento da banda passa a dominar ao se aumentar mais a injeção n , até se chegar numa injeção suficiente para se obter ganho.

ii) Para energias acima de E_g , a curva experimental de absorção tem a sua melhor aproximação com a curva teórica que usa densidade de estados de banda parabólica com um elemento de matriz correspondente às transições banda de valência-doador. Este elemento de matriz apresenta uma forma fechada em energia, com um máximo bastante maior do que o correspondente ao calculado no modelo de bandas com caudas. Isto nos leva a sugerir que o problema da absorção a altas energias deve estar ligado aos elemento de matriz, e que uma melhor eleição das funções de onda que descrevem os estados nas bandas com caudas, e o estudo da influência da interação coulombiana no elemento de matriz, poderão alterá-lo, de modo a aumentar absorção.

iii) Aplicando-se os resultados obtidos em nossos cálculos, estudamos o comportamento das caudas nas bandas com a temperatura. Obtivemos como resultado uma diminuição na profundidade das caudas ao diminuir a temperatura. Para a profundidade da cauda na banda de condução obteve-se uma dependência aproximadamente linear com T ; e para a profundidade da cauda na banda de valência resultou uma variação aproximada com $T^{1/2}$. As expressões para n_c e n_v obtidas, estão dadas nas eqs.

(11.1.1) e (11.1.2).

iv) O comportamento do índice de refração complexo ($\bar{N}=N+ik$) com a densidade de portadores injetados n , é o de: para $0 < n < 2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, aumentar com n , até atingir um máximo, após o qual $\bar{N}$ diminui sistematicamente ao se continuar aumentando a injeção; para o coeficiente de extinção, dependendo da energia do fóton E , vai existir um certo n' a partir do qual κ se torna negativo, isto é, começa a aparecer ganho.

v) A variação do índice de refração ΔN com a densidade de portadores injetados n , apresenta o seguinte comportamento: para baixas injeções (até $\sim 7.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), a variação no N é positiva; para injeções acima de $\sim 7.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, as variações tornam-se negativas, e para $n > 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (região de ganho), a variação $-\Delta N$ é linear com a injeção n , isto é:

$$\Delta N \approx -An + B(h\nu) \quad (n > 10^{18} \text{ cm}^{-3}) \quad (12.1.1)$$

sendo A uma constante da ordem de 10^{-20} cm^3 , e B uma constante dependente da energia do fóton, que para $E = 1.38 \text{ eV}$ (0.9μ), tem o valor de 6×10^{-3} .

vi) Dos resultados obtidos para os quasi-níveis de Fermi (figs. 9.4 e 9.5); a emissão espontânea (figs. 9.7 e 9.8); coeficiente de absorção (figs. 9.16, 9.17 e 9.18); índice de refração (fig. 9.25 curvas para $n = 1.5 \times 10^{18}$); e para a constante A de proporcionalidade entre $-\Delta N$ e n (fig. 9.32), concluímos que o uso do modelo que inclui densidades de estados do tipo banda parabólica, e mais transições banda-banda, se constitui numa boa aproximação aos resultados obtidos para o modelo de bandas com caudas, para energias maiores à energia da banda proibida. Com a vantagem de que o modelo aproximado de regra de seleção é muito mais rápido e fácil de calcular ($\sim 5 \text{ min. CPU}$), do que o de bandas com caudas ($\sim 4 \text{ horas CPU}$).

vii) Ao se fazer uso de um perfil do tipo $\text{sech}^2(y/y')$ para a parte real do índice de refração, conseguiu-se explicar a diminuição na separação em comprimentos de onda, dos modos transversais paralelos

ã junção, ao se aumentar o número do modo m , segundo mostravam os resultados experimentais obtidos para lasers de homoestrutura de GaAs (figs. 10.2 e 10.5). O ajuste entre as separações teórica e experimental nos deu os valores : $\delta = 2.9 \times 10^{-4}$ e $y' = 17.7 \mu$.

viii) O uso de perfil $N(y) \sim \text{sech}^2(y/y')$, deu como resultado para os modos permitidos na cavidade, funções hipergeométricas. Para os modos de ordem zero e um (figs. 10.7 (a) e (b)), os campos próximo e distante resultantes foram praticamente iguais às funções de Hermite-Gauss que se obtém do perfil parabólico, e essencialmente indistinguíveis destas, do ponto de vista experimental. Para os modos de mais alta ordem, modos de ordem 2 e 3 (figs. 10.7 (c) e (d)), os campos próximos são muito parecidos com os obtidos experimentalmente; porém, os campos distantes (obtidos pela transformada de Fourier dos campos próximos) mostram uma inversão na relação de intensidades dos picos com respeito aos dados experimentais. Concluimos que estudos mais completos, nos quais sejam incluídos entre outros: o perfil na parte imaginária do $\bar{N}$ (ganho) e a presença de fatores de fase dependentes de y , deverão ser feitos para se explicar os dados experimentais.

ix) Para lasers de heteroestrutura dupla, com região ativa muito fina ($d \sim 0.2 \mu\text{m}$), o modo confinado nesta região vai ser afetado por variações no N , provocadas pela difusão térmica, nas camadas vizinhas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Usando um N do tipo:

$$N^2(x,y) = \begin{cases} N_1^2 - 2\delta_1 N_1 (1 - \text{sech}^2 \beta y) & |x| > d/2 \\ N_0^2 - 2\delta_0 N_0 (1 - \text{sech}^2 \beta y) & |x| \leq d/2 \end{cases} \quad (12.1.2)$$

obtivemos uma variação efetiva do índice de refração na região ativa (GaAs) dada por:

$$\delta N_{\text{ef}}(y) \approx \delta_0 \Gamma + \delta_1 (1 - \Gamma) \quad (12.1.3)$$

sendo Γ o fator de confinamento. δ_0 teria origem nos portadores

injetados e na variação de temperatura, enquanto que δ_1 , seria causado principalmente pela variação de temperatura devido aos efeitos de difusão térmica.

x) Por causa do contato de faixa nos lasers, a injeção de corrente vai provocar um perfil ao longo de y na densidade de portadores injetados (fig. 11.6). Usando os nossos resultados de N , κ vs. n , obtivemos então perfis na direção y para as partes real e imaginária do índice de refração complexo. Dependendo de n , o perfil de N apresenta uma região de desconfinamento da radiação (veja fig. 11.7, para $|y| < 20\mu$), e uma região de confinamento, longe do centro da faixa ($|y| > 25\mu$). O oposto acontecendo para o coeficiente de extinção (ganho).

12.2 Discussão sobre cálculos futuros.

Vários são os possíveis cálculos que poderão ser feitos a fim de aplicar os resultados por nós obtidos ou aperfeiçoar estes resultados, de modo a melhorar a comparação entre a teoria e as experiências. Entre eles temos os seguintes:

i) Um estudo teórico da densidade de estados no intervalo de energias entre a cauda de baixa energia (onde a densidade de estados é conhecida a partir do trabalho de Halperin e Lax); e a parte não perturbada da banda, onde a densidade de estados deve-se aproximar à de banda parabólica. Esta é uma região importante, porque até agora, só aproximações "ad hoc"⁽²⁷⁾, tem sido usadas para se obter valores da densidade de estados nesta região.

ii) O cálculo do elemento de matriz das transições entre estados nas bandas com caudas, de modo a obter uma melhor descrição da mudança do caráter de com a sem regra de seleção, quando os estados envolvidos passam da parte não perturbada da banda, à cauda dela. Uma condição que poderá ser usada, é o fato de que para baixas energias, quando k_c e k_v tendam para zero (segundo se viu no capítulo 6), enquanto os parâmetros β_c^{-1} e β_v^{-1} tendam para os raios de Bohr das impurezas doadoras e

aceitadoras respectivamente.

No cálculo desse novo elemento de matriz deverá levar-se em conta a interação coulombiana entre elétrons e buracos, a qual se pensa⁽²⁷⁾ possa dar um aumento no elemento de matriz, com o correspondente aumento na absorção, na direção dos resultados experimentais.

iii) Baseados no cálculo da absorção descrito no capítulo 8 seção 2, poderão se obter resultados para diferentes densidades de impurezas e temperaturas. Isto permitirá estudar a variação do índice de refração com a temperatura e dopagem, o que possibilitará o estudo das mudanças no perfil do índice de refração. Também poderá se obter o comportamento de parâmetros importantes como o ganho, em função da temperatura e da compensação.

iv) Para baixas temperaturas, estados de excitons deverão ser levados em conta na hora de se fazer o cálculo teórico da absorção, a fim de poder descrever os resultados experimentais. Um estudo terá que ser feito a fim de se conhecer o efeito das impurezas nos estados de excitação no limite de alta densidade de impurezas.

v) A dependência da massa efetiva dos elétrons com a energia da transição E , para valores grandes de E , onde a aproximação parabólica deixa de ser válida⁽⁴³⁾, deverá ser considerada nos cálculos futuros das propriedades radiativas do laser. Também deverá estudar-se a possibilidade de incluir a variação da massa efetiva dos portadores como a função da dopagem, tanto de doadores como de aceitadores, na amostra.

iv) Com respeito aos modos ressonantes na cavidade do laser, a inclusão de um perfil para a parte imaginária do índice de refração deverá ser examinada, e poderão se fazer cálculos dos campos próximo e distante usando o perfil do índice de refração complexo, para se obter como estes campos mudam ao se mudar as larguras ou intensidades dos perfis, e qual a variação deles com o ganho, ou a absorção. A presença de fases dependentes de y no espelho do laser deverá ser estudada, pois este será um fator importante para explicar os campos distantes medidos experimentalmente.

A P Ê N D I C E A.

RAZÕES DE EMISSÃO ESPONTÂNEA E ESTIMULADA.

I.- Com Regra de Seleção.

Consideremos a transição de um elétron no estado I com energia E_I , para um estado J com energia E_J , sendo que $E_I > E_J$. O estado I pertence a um grupo de estados, denotado por i, os quais tem todos o mesmo quasi-nível de Fermi F_i ; e o estado J faz parte do grupo de estados j com quasi-nível de Fermi F_j .

A interação entre o campo de radiação e os átomos numa rede cristalina é estudada quantizando o campo de radiação; depois, usando a teoria de perturbação para achar as probabilidades de transição e, fazendo uso da estatística dos fótons, obtemos as expressões para as razões de emissão espontânea e estimulada que são dadas por:

$$r_{sp}(E) = \frac{4Ne^2E}{Vm^2\hbar^2c^3} \sum_{I,J} |M_{IJ}|^2_{av} \rho_i(k_I) \rho_j(k_J) f_I(E_I(\vec{k}_I)) \left[1 - f_J(E_J(\vec{k}_J)) \right] \delta(E_I - E_J - E) \quad (A.1)$$

$$r_{st}(E) = \frac{4Ne^2E}{Vm^2\hbar^2c^3} \sum_{I,J} |M_{IJ}|^2_{av} \rho_i(k_I) \rho_j(k_J) \left[f_I(E_I(\vec{k}_I)) - f_J(E_J(\vec{k}_J)) \right] \delta(E_I - E_J - E) \quad (A.2)$$

onde cada somatória é feita sobre todos os estados I do grupo i, e todos os estados J do grupo j.

N - Índice de Refração

E - Energia do fóton

ρ_i, ρ_j - Densidades de estados nos grupos i e j respectivamente.

f_I - Probabilidade de ocupação do estado I por um elétron.

$1 - f_J$ - Probabilidade de ocupação do estado J por um buraco.

Nas equações (A.1) e (A.2), a função $\delta (E_I - E_J - E)$ dá conta da conservação da energia na transição.

M_{IJ} é o elemento de matriz do operador momento entre os estados I e J. Fisicamente, ele dá a probabilidade de ocorrência da transição entre I e J. Nas eqs. (A.1) e (A.2) é usado o valor médio de $|M_{IJ}|^2$ sobre todas as direções do vetor de onda $\vec{k}$ do fóton e sobre as polarizações do vetor de onda do fóton $\vec{k}$. A expressão para $|M_{IJ}|^2_{av}$ vai ser :

$$|M_{IJ}|^2_{av} = \sum_{\alpha=1,2} \int |\langle a_I | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\epsilon}_\alpha \cdot \vec{p} | a_J \rangle|^2 \frac{d\Omega_k}{8\pi} \quad (A.3)$$

Na eq. (A.3), a_I e a_J são as funções de onda correspondentes aos estados I e J respectivamente; o vetor unitário $\vec{\epsilon}_\alpha$ representa as duas possíveis direções de polarização do fóton, que são perpendiculares ao vetor $\vec{k}$.

Vamos considerar agora que I seja um estado na banda de condução, J seja um estado na banda de valência, e vamos definir o elemento de matriz do operador momento como :

$$\vec{p}_{cv}(\vec{k}_c, \vec{k}_v) \equiv \langle a_c | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{p} | a_v \rangle \quad (A.4)$$

Já que estamos tratando do caso de transições entre duas bandas, sabemos do Teorema de Bloch que as funções de onda a_c e a_v serão da forma :

$$a_c = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{c,k_c}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}_c \cdot \vec{r}) \quad (A.5)$$

$$a_v = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{v,k_v}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}_v \cdot \vec{r})$$

Então, usando para a_c e a_v as expressões dadas na eq. (A.5) e,

substituindo-as na eq. (A.4) teremos:

$$\vec{P}_{cv}(\vec{k}_c, \vec{k}_v) = \frac{1}{V} \int_V u_{c,k_c}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}_c \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{P} u_{v,k_v}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_v \cdot \vec{r}} d^3r \quad (A.6)$$

Já que o operador momento tem a forma :

$$\vec{P} = -i\hbar \nabla$$

aplicando-o ao produto :

$$u_{v,k_v} e^{i\vec{k}_v \cdot \vec{r}}$$

obtem-se :

$$\vec{P}_{cv}(\vec{k}_c, \vec{k}_v) = \frac{1}{V} \int_V u_{c,k_c}^*(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}_c - \vec{k}_v - \vec{k}) \cdot \vec{r}} (\vec{P} + \hbar \vec{k}_v) u_{v,k_v}(\vec{r}) d^3r \quad (A.7)$$

Para poder resolver a integral, faremos uso do Teorema citado por Landsberg , o qual diz o seguinte: "Se $f(r)$ é uma função periódica em r , então se cumpre o seguinte:

$$\int_V e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) d^3r = N \sum_m \{ \delta_{\vec{\lambda}, \vec{k}_m} \left(\int_{\Omega} e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) d^3r \right) \} \quad (A.8)$$

Onde $\Omega = \frac{V}{N}$ é o volume da célula unitária, e $\vec{k}_m$ são os vetores da rede recíproca.

Comparando as eqs. (A.7) e (A.8), vemos que neste caso:

$$f(\vec{r}) = u_{c,k_c}^*(\vec{r}) (\vec{P} + \hbar \vec{k}_v) u_{v,k_v}(\vec{r}) \quad (A.9)$$

e que esta função tem a periodicidade da rede. Portanto, usando o teorema dado pela eq. (A.8) na eq. (A.9), obteremos :

$$\begin{aligned} \vec{P}_{cv}(\vec{k}_c, \vec{k}_v) &= \frac{\delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v + \vec{k}}}{\Omega} \int_{\Omega} u_{c,k_c}^*(\vec{r}) (\vec{P} + \hbar \vec{k}_v) u_{v,k_v}(\vec{r}) d^3r + \\ &+ \sum_{\substack{m \\ (K_m \neq 0)}} \frac{\delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v + \vec{k} + \vec{k}_m}}{\Omega} \int_{\Omega} u_{c,k_c}^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}} (\vec{P} + \hbar \vec{k}_v) u_{v,k_v}(\vec{r}) d^3r \end{aligned} \quad (A.10)$$

Nesta equação, a contribuição da somatória é desprezível em comparação ao primeiro termo, já que o fator $\exp(i\vec{k}_m \cdot \vec{r})$ é fortemente oscilatório e faz com que a integral seja muito pequena. O vetor de onda $\vec{k}$ do fóton é em geral desprezível quando comparado com $\vec{k}_c$ ou $\vec{k}_v$, portanto, é uma boa aproximação usar $\vec{k}_v + \vec{k} \approx \vec{k}_v$; usando estas duas aproximações na eq. (A.10), chegamos a :

$$\begin{aligned} \vec{P}_{cv}(\vec{k}_c, \vec{k}_v) = \frac{1}{\Omega} \delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v} \left\{ \int_{\Omega} u_{c, k_c}^*(\vec{r}) \vec{P} u_{v, k_v}(\vec{r}) d^3r \right. \\ \left. + \hbar \vec{k}_v \int_{\Omega} u_{c, k_c}^*(\vec{r}) u_{v, k_v}(\vec{r}) d^3r \right\} \end{aligned} \quad (A.11)$$

A função delta expressa a conservação do vetor de onda do elétron na transição. Já que funções de Bloch que pertencem a bandas diferentes são ortogonais, teremos que :

$$\int_{\Omega} u_{c, k_c}^*(\vec{r}) u_{v, k_v}(\vec{r}) d^3r = 0 \quad (A.12)$$

Definindo :

$$\vec{P}_{cv} \equiv \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{c, k_c}^*(\vec{r}) \vec{P} u_{v, k_v}(\vec{r}) d^3r \quad (A.13)$$

Agora, substituindo-se as eqs. (A.12) e (A.13) na eq. (A.11), obtemos:

$$\vec{P}_{cv}(\vec{k}_c, \vec{k}_v) = \delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v} \vec{P}_{cv} \quad (A.14)$$

Substituindo-se a eq. (A.14) na eq. (A.3), o valor médio do elemento de matriz terá a forma:

$$|M_{IJ}|^2_{av} = \sum_{\alpha=1,2} \int |\vec{\epsilon}_{\alpha} \cdot \vec{P}_{cv}|^2 \frac{d\Omega_k}{8\pi} \delta_{\vec{k}_c, \vec{k}_v} \quad \begin{matrix} I \in C \\ J \in V \end{matrix} \quad (A.15)$$

No Apêndice C é calculada a média do elemento de matriz sobre

as direções do vetor $\vec{k}$ e sobre as polarizações do vetor de onda do fóton $\vec{k}$, obtendo-se na eq. (C.1.15) a expressão:

$$|M_{cv}|_{av}^2 = \sum_{\alpha=1,2} \int |\vec{e}_{\alpha} \cdot \vec{p}_{cv}|^2 \frac{d\Omega_k}{8\pi} = \frac{mE_g}{12} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left\{ \frac{E_g + \Delta}{E_g + 2/3 \Delta} \right\} \quad (A.16)$$

Substituindo-se a eq. (A.16) na eq. (A.15) e o resultado disto na eq. (A.1), a razão de emissão espontânea será :

$$r_{sp}(E) = \frac{4Ne^2E}{V m_c^2 \hbar^2 c^3} |M_{cv}|_{av}^2 \sum_{I,J} \delta_{\vec{k}_I, \vec{k}_J} \rho_i \rho_j f_I (1-f_J) \delta(E_I - E_J - E) \quad (A.17)$$

Considerando que os valores dos momentos cristalinos formam um quasi-contínuo, nós podemos transformar a soma sobre os estados I e J em integrais. Para tanto temos que fazer as transformações :

$$\delta_{\vec{k}_I, \vec{k}_J} \rightarrow \frac{8\pi^3}{V} \delta(\vec{k}_C - \vec{k}_V) = \frac{8\pi^3}{V} \frac{1}{k_V^2 \sin^2 \theta_V} \delta(k_C - k_V) \delta(\theta_C - \theta_V) \delta(\phi_C - \phi_V) \quad (A.18)$$

Já que estamos considerando o caso de bandas parabólicas :

$$\sum_I \rho_i \rightarrow 2 \frac{V}{8\pi^3} \int k_C^2 dk_C \sin \theta_C d\theta_C d\phi_C \quad (A.19)$$

$$\sum_J \rho_j \rightarrow 2 \frac{V}{8\pi^3} \int k_V^2 dk_V \sin \theta_V d\theta_V d\phi_V \quad (A.20)$$

onde o fator 2 leva em conta a degeneração das bandas pelo spin.

Portanto, usando as transformações dadas pelas eqs. (A.18), (A.19) e (A.20) na eq. (A.17) teremos :

$$r_{sp}^{CR}(E) = \frac{2Ne^2E}{m^2\pi^3\hbar^2c^3} |M_{cv}|_{av}^2 \int \{k_c^2 dk_c \sin\theta_c d\theta_c d\phi_c$$

$$\left[\int f_c(1-f_v) dk_v \delta(k_c-k_v) \delta(\theta_c-\theta_v) d\theta_v \delta(\phi_c-\phi_v) d\phi_v \delta(E'_c-E'_v-E) \right] \} \quad (A.21)$$

As integrais em k_v , θ_v e ϕ_v podem ser facilmente feitas, usando as funções delta, correspondentes em cada caso. Obteremos assim :

$$r_{sp}^{CR}(E) = \frac{2Ne^2E}{m^2\pi^3\hbar^2c^3} |M_{cv}|_{av}^2 \int k_c^2 \sin\theta_c \left[\int f_c(1-f_v) \delta(E'_c-E'_v-E) \right]_{k_c=k_v=k} dk_c d\theta_c d\phi_c \quad (A.22)$$

Temos agora que obter uma relação entre k_c e a energia $E'_c - E'_v$, a fim de poder resolver a integral com ajuda da função delta.

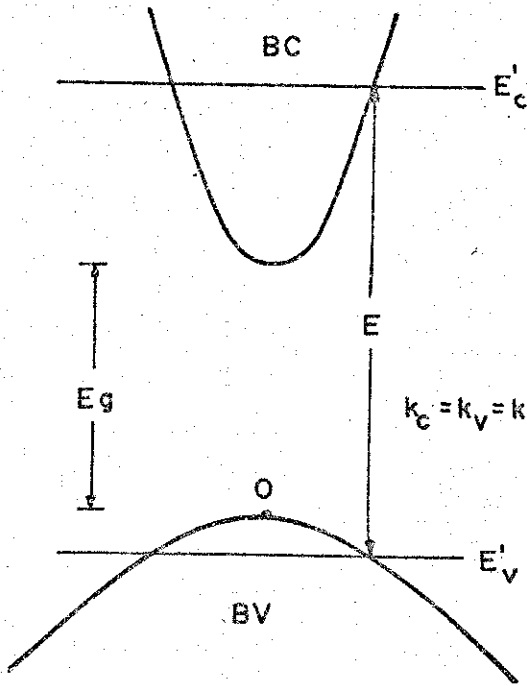


Fig. A.1 . Nesta figura mostram-se as bandas parabólicas de condução e valência junto com os níveis de energia E'_c e E'_v entre os quais se efetua a transição. Note-se que escolhemos a origem das energias no topo da banda de valência.

Olhando a figura A.1, usando o fato de que as bandas são parabólicas, e dentro da aproximação da massa efetiva, obtêm-se entre E'_c , E'_v e $|\vec{k}| \equiv k$ as seguintes relações :

$$E'_C = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_C} \quad (A.23)$$

$$E'_V = - \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_V} \quad (A.24)$$

ou :

$$E'_C - E'_V = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_C} + \frac{1}{m_V} \right)$$

Definindo a massa reduzida por :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_C} + \frac{1}{m_V} = \frac{m_V + m_C}{m_C m_V} \quad (A.25)$$

Com isto teremos que :

$$E'_C - E'_V = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (A.26)$$

e daí obtemos para k a expressão :

$$k^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E'_C - E'_V - E_g) \quad (A.27)$$

Diferenciando-se a eq. (A.27) temos :

$$2 k dk = \frac{2m^*}{\hbar^2} d(E'_C - E'_V) \quad (A.28)$$

Agora, já que $k_C = k_V = k$, substituindo-se a eq. (A.28) na eq. (A.22) e fazendo as integrações nas variáveis θ_C e ϕ_C , teremos :

$$r_{sp}^{CR}(E) = \frac{2Ne^2 E}{m \pi \hbar^2 C^3} |M_{CV}|_{av}^2 4\pi \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int (E'_C - E'_V - E_g)^{1/2} \cdot \quad (A.29)$$

$$\{f_C(1-f_V)\} \delta(E'_C - E'_V - E) d(E'_C - E'_V)$$

$$k_C = k_V = k$$

A integral então é direta e a eq. (A.29) fica :

$$r_{sp}^{CR}(E) = \frac{4Ne^2 E}{m \pi \hbar^2 C^3} |M_{CV}|_{av}^2 \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2} \left[f_C(1-f_V) \right]_{k_C = k_V = k}^{E'_C - E'_V = E} \quad (A.30)$$

Precisamos agora, ter a forma explícita das funções f_c e f_v quando são impostas as condições $k_c=k_v=k$ e $E'_c-E'_v=E$. Da forma das funções de Fermi temos:

$$f_c = \left\{ 1 + \exp\left(\frac{E'_c - E'_{F_c}}{k T}\right) \right\}^{-1} \quad (A.31)$$

vamos fazer:

$$E'_c - E'_{F_c} = E'_c - E_c - (E'_{F_c} - E_c)$$

Definamos:

$$F_c \equiv E'_{F_c} - E_c \quad (A.32)$$

onde E_c é a energia do fundo da banda de condução. Então :

$$E'_c - E'_{F_c} = E'_c - E_c - F_c$$

Referindo-os à figura A.1, vemos que: $E_c = E_g$. Portanto temos que:

$$E'_c - E'_{F_c} = E'_c - E_g - F_c \quad (A.33)$$

Substituindo-se a equação (A.27) na eq. (A.23) e o resultado na eq. (A.33) obteremos :

$$E'_c - E'_{F_c} = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E'_c - E'_v - E_g) \frac{\hbar^2}{2m_c} - F_c \quad (A.34)$$

Usando na eq. (A.34) a condição: $E'_c - E'_v = E$, e a definição da massa reduzida dada pela eq. (A.25), obtem-se:

$$E'_c - E'_{F_c} = \frac{m_v}{m_c + m_v} (E - E_g) - F_c \quad (A.35)$$

Por último, substituindo-se a eq. (A.35) na eq. (A.31), a função de Fermi fica:

$$f_c = \left\{ 1 + \exp\left(\frac{m_v}{m_c + m_v} \left(\frac{E - E_g}{k T}\right) - \frac{F_c}{k T}\right) \right\}^{-1} \quad (A.36)$$

A função f_v é dada por :

$$f_v = \{ 1 + \exp(\frac{E'_v - E_{F_v}}{kT}) \}^{-1} \quad (A.37)$$

Agora faremos o seguinte:

$$E'_v - E_{F_v} = E'_v - E_v + (E_v - E_{F_v}) \quad (A.38)$$

Definimos:

$$F_v \equiv E_v - E_{F_v} \quad (A.39)$$

onde E_v é a energia do topo da banda de valência. Na figura A.1 vemos que $E_v = 0$, portanto, usando a definição dada na eq. (A.39) na eq. (A.38), teremos:

$$E'_v - E_{F_v} = E'_v + F_v \quad (A.40)$$

Substituindo-se a eq. (A.27) na eq. (A.24), usando neste resultado a definição da massa reduzida dada na eq. (A.25) e, substituindo-se isto todo na eq. (A.40), junto com a condição: $E'_c - E'_v = E$, obtém-se:

$$E'_v - E_{F_v} = - \frac{m_c}{m_c + m_v} (E - E_g) + F_v \quad (A.41)$$

Usando agora a eq. (A.41) na eq. (A.37), a expressão para a função de Fermi f_v fica:

$$f_v = \{ 1 + \exp(- \frac{m_c}{m_c + m_v} (\frac{E - E_g}{kT}) + \frac{F_v}{kT}) \}^{-1} \quad (A.42)$$

Tomando as formas explícitas de f_c e f_v , dadas pelas eqs. (A.36) e (A.42) e, substituindo-as na eq. (A.30), chegamos finalmente à expressão para a razão de emissão espontânea com regra de seleção no vetor de onda $\vec{k}$. Ela é dada por:

$$r_{sp}^{CR}(E) = \frac{4Ne^2 E}{m^2 \pi \hbar^5 c^3} |M_{cv}|_{av}^2 (2m^*)^{3/2} (E-E_g)^{1/2} \cdot$$

$$\{1 + \exp(\frac{m_v}{m_c + m_v} (\frac{E-E_g}{kT}) - \frac{F_c}{kT})\}^{-1} \cdot$$

$$\{1 + \exp(\frac{m_c}{m_c + m_v} (\frac{E-E_g}{kT}) - \frac{F_v}{kT})\}^{-1} \quad (A.43)$$

Para obter a razão de emissão estimulada, partimos da equação (A.2) e, seguindo o mesmo procedimento, chega-se à expressão:

$$r_{st}^{CR}(E) = \frac{4Ne^2 E}{m^2 \pi \hbar^5 c^3} |M_{cv}|_{av}^2 (2m^*)^{3/2} (E-E_g)^{1/2} \cdot$$

$$\left[\{1 + \exp(\frac{m_v}{m_c + m_v} (\frac{E-E_g}{kT}) - \frac{F_c}{kT})\}^{-1} - \right.$$

$$\left. \{1 + \exp(\frac{-m_c}{m_c + m_v} (\frac{E-E_g}{kT}) + \frac{F_v}{kT})\}^{-1} \right] \quad (A.44)$$

A P Ê N D I C E B

RAZÕES DE EMISSÃO ESPONTÂNEA E ESTIMULADA

II.- Sem Regra de Seleção.

Para deduzirmos a expressão para calcular as razões de emissão espontânea e estimulada, partiremos das eqs. (A.1) e (A.2) respectivamente do Apêndice A. Assim consideremos:

$$r_{sp}(E) = \frac{4Ne^2 E}{V_m \hbar^2 c^3} \sum_{I,J} |M_{IJ}|_{av}^2 \rho_i \rho_j f_I (1-f_J) \delta(E_I - E_J - E) \quad (B.1)$$

$$r_{st}(E) = \frac{4Ne^2 E}{V_m \hbar^2 c^3} \sum_{I,J} |M_{IJ}|_{av}^2 \rho_i \rho_j (f_I - f_J) \delta(E_I - E_J - E) \quad (B.2)$$

Porém, neste caso o elemento de matriz $|M_{IJ}|_{av}^2$ não inclui a função delta que dá a regra de seleção do vetor momento cristalino $\vec{k}$. Esta violação da regra de seleção é possível porque as impurezas presentes no cristal proporcionam o momento extra necessário. As expressões para $|M_{IJ}|_{av}^2$ neste caso da ausência da regra de seleção em $\vec{k}$ para os diferentes tipos de transições, estão dadas no Apêndice C.

Assim como foi feito no Apêndice A, considerando que os valores dos momentos cristalinos formam um quasi-contínuo, na eq. (B.1) vamos passar das somatórias para integrais, usando as seguintes transformações:

$$\sum_I \rho_i \rightarrow 2 \frac{V}{8\pi^3} k_C^2 dk_C \sin\theta_C d\theta_C d\phi_C \quad (B.3)$$

$$\sum_J \rho_j \rightarrow 2 \frac{V}{8\pi^3} k_V^2 dk_V \sin\theta_V d\theta_V d\phi_V \quad (B.4)$$

Para fazer estas transformações estamos usando novamente o fato de que as bandas são parabólicas e, com o fator 2, levamos

em conta a degeneração das bandas pelo spin. Usando estas transformações na eq. (B.1), obtemos:

$$r_{sp}^{SR}(E) = \frac{Ne^2 E_V}{4m^2 \hbar^2 C^3 \pi^6} \int' \{ k_C^2 dk_C \sin\theta_C d\theta_C d\phi_C (\int f_C (1-f_V) |M_{IJ}|_{av}^2 \delta(E'_C - E'_V - E) k_V^2 dk_V \sin\theta_V d\theta_V d\phi_V) \} \quad (B.5)$$

A fim de poder resolver uma das integrais com a ajuda da função delta da energia, teremos que expressar k_V em função de E'_V .

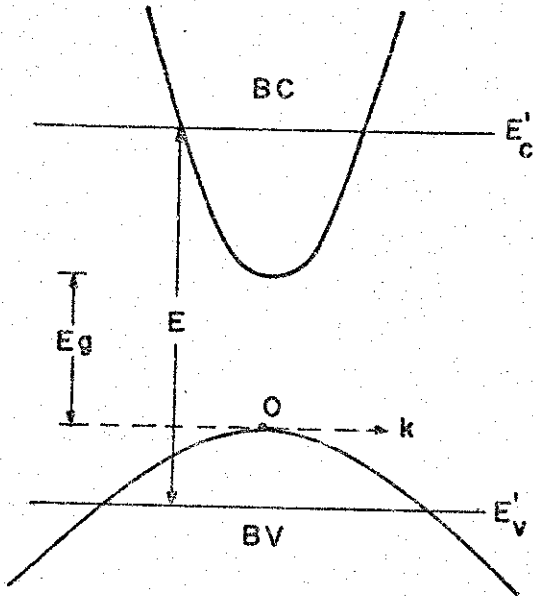


Fig. B.1 . Mostram-se as bandas parabólicas de condução e valência e os níveis E'_C e E'_V que entram na transição. A origem das energias foi escolhida no topo da banda de valência. Note-se que neste caso o k correspondente a E'_C e E'_V não tem que ser necessariamente o mesmo.

Olhando a figura B.1, levando-se em conta que as bandas sejam parabólicas, e usando-se a aproximação da massa efetiva, teremos:

$$E'_V = - \frac{\hbar^2 k_V^2}{2m_V} \quad (B.6)$$

portanto:
$$k_V^2 = - \frac{2m_V}{\hbar^2} E'_V \quad (B.7)$$

Diferenciando-se a eq. (B.7) temos:

$$k_V dk_V = - \frac{m_V}{\hbar^2} dE'_V \quad (B.8)$$

Substituindo-se estas relações dadas pelas eqs. (B.7) e (B.8)

na eq. (B.5) obteremos:

$$r_{sp}^{SR}(E) = \frac{Ne^2EV}{4m^2\hbar^2c^3\pi^6} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{2m_V}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int \{ k_C^2 dk_C \sin\theta_C d\theta_C d\phi_C (\int f_C(1-f_V) \cdot |M_{IJ}|_{av}^2 \delta(E'_C - E'_V - E) (-E'_V)^{1/2} d(-E'_V) \sin\theta_V d\theta_V d\phi_V) \} \quad (B.9)$$

Fazendo as integrais em E'_V , θ_V e ϕ_V chegamos a:

$$r_{sp}^{SR}(E) = \frac{Ne^2EV}{2m^2\hbar^5c^3\pi^5} (2m_V)^{3/2} \int \{ k_C^2 dk_C \sin\theta_C d\theta_C d\phi_C (E - E'_C)^{1/2} \cdot (\int f_C(1-f_V) |M_{IJ}|_{av}^2)_{E'_C - E'_V = E} \} \quad (B.10)$$

Vamos agora expressar k_C em função de E'_C . Referindo-nos à figura B.1 obtemos:

$$E'_C = E_g + \frac{\hbar^2 k_C^2}{2m_C} \quad (B.11)$$

Portanto:

$$k_C^2 = \frac{2m_C}{\hbar^2} (E'_C - E_g) \quad (B.12)$$

Diferenciando-se a eq. (B.12) temos:

$$k_C dk_C = \frac{m_C}{\hbar^2} dE'_C \quad (B.13)$$

Substituindo-se as eqs. (B.12) e (B.13) na eq. (B.10), e fazendo as integrais em θ_C e ϕ_C chega-se a:

$$r_{sp}^{SR}(E) = \frac{8Ne^2EV}{m^2\hbar^8c^3\pi^4} (m_C m_V)^{3/2} \int (E - E'_C)^{1/2} (E'_C - E_g)^{1/2} \cdot \{ \int f_C(1-f_V) |M_{IJ}|_{av}^2 \}_{E'_C - E'_V = E} dE'_C \quad (B.14)$$

Para obter os limites da integral em E'_C , vamos nos referir à eq. (B.11), da qual obtemos que o valor mínimo de E'_C acontece quando

$k_c=0$, ou seja:

$$(E'_c)_{\min} = E_g \quad (B.15)$$

O máximo valor que E'_c pode ter, será fixado pela condição de conservação da energia na transição:

$$E'_c - E'_v = E \quad (B.16)$$

De onde obtemos que o máximo valor de E'_c acontece quando $E'_v=0$, ficando:

$$(E'_c)_{\max} = E \quad (B.17)$$

Definindo:

$$x = E'_c - E_g \quad (B.18)$$

e substituindo-se as eqs. (B.15), (B.17) e (B.18) na eq. (B.14) teremos:

$$r_{sp}^{SR}(E) = \frac{8Ne^2 E_V}{m^2 \hbar^3 c^3 \pi^4} (m_c m_v)^{3/2} \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \cdot \{f_c(1-f_v) |M_{IJ}|^2\}_{av} dx \quad (B.19)$$

$E'_c - E'_v = E$

Obteremos agora a forma explícita das funções de Fermi f_c e f_v quando $E'_c - E'_v = E$. Da sua definição:

$$f_c = \left\{ 1 + \exp\left(\frac{E'_c - E_{F_c}}{kT}\right) \right\}^{-1} \quad (B.20)$$

Vamos fazer:

$$E'_c - E_{F_c} = E'_c - E_c + E_c - E_{F_c} \quad (B.21)$$

Definamos:

$$F_c \equiv E_{F_c} - E_c \quad (B.22)$$

Onde E_c é a energia do fundo da banda de condução. Então usando as definições dadas pelas eqs. (B.18) e (B.22) e lembrando da fig. B.1 que $E_c = E_g$ teremos:

$$E'_c - E_{F_c} = E'_c - E_g - (E_{F_c} - E_c) = x - F_c \quad (B.23)$$

Substituindo-se a eq. (B.22) na eq. (B.20), a forma final da fun

ção de Fermi f_c será:

$$f_c = \left\{ 1 + \exp\left(\frac{x - F_c}{kT}\right) \right\}^{-1} \quad (B.24)$$

Da definição de f_v temos:

$$f_v = \left\{ 1 + \exp\left(\frac{E'_v - E_{F_v}}{kT}\right) \right\}^{-1} \quad (B.25)$$

Vamos fazer:

$$E'_v - E_{F_v} = E'_c - E - E_v + E_v - E_{F_v} \quad (B.26)$$

onde temos usado o fato que: $E'_c - E'_v = E$.

Definamos:

$$F_v = E_{F_v} - E_v \quad (B.27)$$

onde E_v é a energia correspondente ao topo da banda de valência, a qual, olhando a fig. B.1, é $E_v = 0$. Portanto, fazemos na eq. (B.26)

$$E'_v - E_{F_v} = E'_c - E + F_v = E'_c - E_g + E_g - E + F_v$$

Usando a definição dada pela eq. (B.18) para a variável x , ficamos com:

$$E'_v - E_{F_v} = x + E_g - E + F_v \quad (B.28)$$

Substituindo-se a eq. (B.28) na eq. (B.25) que define f_v , teremos:

$$f_v = \left\{ 1 + \exp\left(\frac{x + E_g - E + F_v}{kT}\right) \right\}^{-1} \quad (B.29)$$

Por último, substituindo-se as eqs. (B.24) e (B.29) na eq. (B.19), chega-se à expressão para a razão de recombinação espontânea sem regra de seleção:

$$r_{sp}^{SR}(E) = \frac{8Ne^2 E_v}{m^2 \hbar^3 c^3 \pi^4} (m_c m_v)^{3/2} \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \{ |M_{IJ}|^2 \}_{av} \frac{E'_c - E'_v = E}{\left\{ 1 + \exp\left(\frac{x - F_c}{kT}\right) \right\}^{-1} \left\{ 1 + \exp\left(\frac{x + E_g - E + F_v}{kT}\right) \right\}^{-1}} dx \quad (B.30)$$

Para se obter a razão de emissão estimulada, partimos da eq. (A.2) e seguindo o mesmo procedimento chega-se à expressão:

$$r_{st}^{SR}(E) = \frac{8Ne^2EV}{m^2\hbar^3c^4\pi} (m_cm_v)^{3/2} \int_0^{E-E_g} x^{1/2} (E-E_g-x)^{1/2} \cdot \{ |M_{IJ}|_{av}^2 \}_{E'_C-E'_V=E} \cdot \left\{ \left(1+\exp\left(\frac{x-F_C}{kT}\right)\right)^{-1} - \left(1+\exp\left(\frac{x+E_g-E+F_V}{kT}\right)\right)^{-1} \right\} dx$$

(B.31)

A P Ê N D I C E C

ELEMENTOS DE MATRIZ

1.-) Transição Banda-Banda.

Da eq. (A.3) do Apêndice A obtemos a expressão do valor médio do elemento de matriz, sobre as orientações do vetor de onda do fóton e sobre suas polarizações possíveis, para a transição entre a banda de condução e a banda de valência, que é:

$$|M_{IJ}|_{av}^2 = \sum_{\alpha=1,2} \int |\vec{\epsilon}_{\alpha} \cdot \vec{P}_{IJ}|^2 \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (C.1.1)$$

Para se obter $\vec{P}_{IJ}$, pode se usar a regra de suma f para os elementos de matriz do operador momento entre os estados I e J:

$$\frac{1}{m} + \sum_{I \neq J} \frac{2 |\langle I | P_b | J \rangle|^2}{m^2 (E_J - E_I)} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\delta^2 E_J}{\delta k_b^2} = \frac{1}{m_{Jb}} \quad b=x,y,z \quad (C.1.2)$$

Somando segundo as componentes x,y,z:

$$\sum_{b=x}^z \sum_{I \neq J} \frac{|\langle I | P_b | J \rangle|^2}{E_J - E_I} = \sum_{b=x}^z \frac{m}{2} \left(\frac{m}{m_{Jb}} - 1 \right) = \frac{3m}{2} \left(\frac{m}{m_J^*} - 1 \right) \quad (C.1.3)$$

onde:

$$\frac{3}{m_J^*} \equiv \sum_{b=x}^z \frac{1}{m_{Jb}} \quad (C.1.4)$$

A eq.(C.1.1) pode ser expressa como:

$$|M_{IJ}|_{av}^2 = \int \sum_{\alpha=1,2} |\vec{\epsilon}_{\alpha} \cdot \vec{Q}|^2 \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (C.1.5)$$

Definamos:

$$\vec{Q} \equiv \langle I | \vec{P} | J \rangle \quad (C.1.6)$$

Os vetores $\vec{\epsilon}_\alpha$ na eq. (C.1.5) nos dão as duas possíveis polarizações do fóton e são portanto perpendiculares ao vetor de onda do fóton κ .

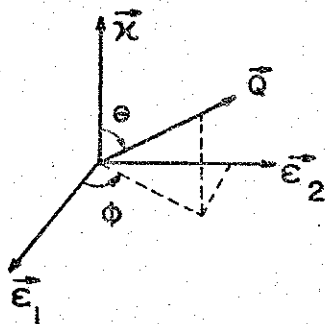


Fig. C.1 O nosso sistema coordenado está formado pelo vetor de onda $\vec{\kappa}$ do fóton e pelos vetores ortogonais $\vec{\epsilon}_1$ e $\vec{\epsilon}_2$ que representam as duas polarizações do fóton. Neste sistema de coordenadas o vetor $\vec{Q}$ tem componentes angulares θ e ϕ .

Olhando para a figura C.1 vemos que:

$$\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{Q} = Q \sin\theta \cos\phi \quad (C.1.7)$$

$$\vec{\epsilon}_2 \cdot \vec{Q} = Q \sin\theta \sin\phi$$

substituindo-se a eq. (C.1.7) junto com a definição de $\vec{Q}$ dada pela eq. (C.1.6) na eq. (C.1.5), temos:

$$|M_{IJ}|_{av}^2 = \int |\langle I | \vec{P} | J \rangle|^2 \sin^3\theta \frac{d\theta d\phi}{8\pi} \quad (C.1.8)$$

Já que $\langle I | \vec{P} | J \rangle$ não varia com θ ou ϕ , a integral é direta e obtemos:

$$|M_{IJ}|_{av}^2 = \frac{1}{3} |\langle I | \vec{P} | J \rangle|^2 = \frac{1}{3} \sum_{b=x}^z |\langle I | P_b | J \rangle|^2 \quad (C.1.9)$$

Combinando as eqs. (C.1.3) e (C.1.9) chega-se a:

$$\sum_{I(\neq J)} \frac{|M_{IJ}|_{av}^2}{E_J - E_I} = \frac{m}{2} \left(\frac{m_*}{m_J} - 1 \right) \quad (C.1.10)$$

onde m_J^* é dada pela eq. (C.1.4).

Vamos agora aplicar a eq. (C.1.10) para as transições entre a banda de condução (C) e as três bandas de valência: buracos pesados (H), buracos leves (L) e a banda correspondente à separação provocada pela interação spin-órbita (S), sendo que levaremos em conta o fato de que cada banda de valência assim como a de condução tem dupla degeneração causada pelo spin do elétron.

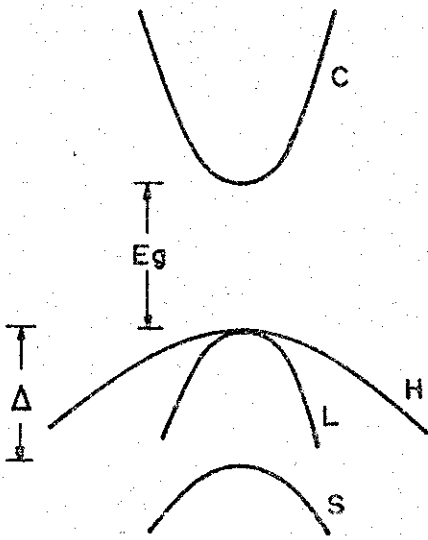


Fig. C.2 Nesta figura mostra-se a estrutura de bandas do Ga As para valores de $\vec{k}$ perto de zero. A separação Δ da banda S em relação às bandas H e L é devido à interação spin-órbita.

Usando (C.1.10) teremos então:

$$\frac{2|M_{HC}|^2_{av}}{E_g} + \frac{2|M_{LC}|^2_{av}}{E_g} + \frac{2|M_{SC}|^2_{av}}{E_g + \Delta} = \frac{m}{2} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \quad (C.1.11)$$

Na eq. (C.1.11) supusemos que a massa efetiva dos elétrons na banda de condução fosse isotrópica e portanto, da eq. (C.1.4):

$$m_J^* = m_c.$$

No caso do Ga As que tem uma estrutura cristalina do tipo "zincblende", pode-se mostrar por simetria que:

$$\langle C|P_1|L \rangle = \langle C|P_2|H \rangle = \langle C|P_3|S \rangle \quad (C.1.12)$$

sendo as outras componentes zero. Portanto:

$$\langle C | \vec{P}_1 | L \rangle = \langle C | \vec{P}_2 | H \rangle = \langle C | \vec{P}_3 | S \rangle \quad (C.1.13)$$

Então, da definição de $|M_{IJ}|^2_{av}$ dada na eq. (C.1.5) e usando a eq. (C.1.13) temos:

$$|M_{CL}|^2_{av} = |M_{CH}|^2_{av} = |M_{CS}|^2_{av} \equiv |M_{CV}|^2_{av} \quad (C.1.14)$$

Finalmente, substituindo-se a eq. (C.1.14) na eq. (C.1.11) obtemos o valor médio do elemento de matriz do operador momento para transições entre a banda de condução e a banda de valência, que é dado por:

$$|M_{CV}|^2_{av} = \frac{mE_g}{12} \left(\frac{m}{m_c} - 1 \right) \left(\frac{E_g + \Delta}{E_g + \frac{2}{3}\Delta} \right) \quad (C.1.15)$$

2.-) Transição Banda- Impureza.

Da eq. (A.3) no Apêndice A temos que:

$$|M_{IJ}|^2_{av} = \sum_{\alpha=1,2} \int | \langle a_I | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\epsilon}_\alpha \cdot \vec{P} | a_J \rangle |^2 \frac{d\Omega_K}{8\pi} \quad (C.2.1)$$

Vamos tomar a_I como sendo a função de onda da banda que chamaremos n , portanto a_I vai ser uma função de Bloch da forma:

$$a_I = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (C.2.2)$$

a_J será então a função de onda da impureza que suporemos estar associada à banda v . Para a_J usaremos uma função de onda localizada do tipo hidrogenóide:

$$a_J = \frac{1}{\sqrt{\pi a_v^3}} \exp(-r/a_v) u_{v\vec{k}}(\vec{r}) \quad (C.2.3)$$

onde a_v é o raio de Bohr da impureza, dado por:

$$a_v = \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 m_v} \quad (C.2.4)$$

Definamos: $\vec{P}_{nI} \equiv \langle a_I | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{P} | a_J \rangle \quad (C.2.5)$

Substituindo-se as funções de onda dadas pelas eqs. (C.2.2) e (C.2.3) na eq. (C.2.5) :

$$\vec{P}_{nI} = - \frac{i\hbar}{\sqrt{\pi V a_v^3}} \int u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \exp(-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}) \nabla \{ \exp(-r/a_v) u_{v\vec{k}} \} d^3r \quad (C.2.6)$$

na eq. (C.2.6) usamos a forma explícita do operador $\vec{P} = -i\hbar \nabla$. Fazendo para $\exp(-r/a_v)$ uma expansão de Fourier da forma:

$$\exp(-r/a_v) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}'} A(\vec{k}') \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \quad (C.2.7)$$

substituindo-se a eq. (C.2.7) na eq. (C.2.6) e aplicando o operador ∇ nas funções à sua direita, temos que:

$$\begin{aligned} \vec{P}_{nI} = & - \frac{i\hbar}{V \sqrt{\pi a_v^3}} \sum_{\vec{k}'} A(\vec{k}') \{ i\vec{k}' \int \exp(-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}) \cdot \vec{r}) u_{n\vec{k}}^* u_{v\vec{k}} d^3r + \\ & + \int \exp(-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}) \cdot \vec{r}) u_{n\vec{k}}^* \nabla u_{v\vec{k}} d^3r \} \quad (C.2.8) \end{aligned}$$

Aplicando à eq. (C.2.8) o Teorema de Landsberg usado no Apêndice A na sua forma simplificada:

$$\int_V \exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}) f(\vec{r}) d^3r = N \delta_{\vec{\lambda}, 0} \int_{\Omega} f(\vec{r}) d^3r \quad (C.2.9)$$

obteremos:

$$\vec{P}_{nI} = - \frac{i\hbar}{W\pi a_v^3} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}') \{ i\vec{k}' \delta_{\vec{k}-\vec{k}', \vec{k}'} N \int_{\Omega} u_{n\vec{k}}^* u_{v\vec{k}} d^3r + \delta_{\vec{k}-\vec{k}', \vec{k}'} N \int_{\Omega} u_{n\vec{k}}^* \nabla u_{v\vec{k}} d^3r \} \quad (C.2.10)$$

Novamente, usaremos o fato de que o vetor de onda $\vec{k}$ do fóton é, em geral, desprezível quando comparado com $\vec{k}$. Então, usaremos a aproximação:

$$\delta_{\vec{k}-\vec{k}', \vec{k}'} \approx \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \quad (C.2.11)$$

Definamos:

$$\vec{P}_{n\vec{k}, v\vec{k}} \equiv \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{n\vec{k}}^* \vec{P} u_{v\vec{k}} d^3r \quad (C.2.12)$$

Pela ortogonalidade das funções de onda, já que $u_{n\vec{k}}$ e $u_{v\vec{k}}$ pertencem a bandas diferentes:

$$\int_{\Omega} u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{v\vec{k}}(\vec{r}) d^3r = 0 \quad (C.2.13)$$

Agora, usando as eqs. (C.2.11), (C.2.12) e (C.2.13) na eq. (C.2.10) obteremos:

$$\vec{P}_{nI} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_v^3}} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}') \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \vec{P}_{n\vec{k}, v\vec{k}} \quad (C.2.14)$$

Fazendo a somatória com a ajuda da função delta:

$$\vec{P}_{nI} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_v^3}} A(\vec{k}) \vec{P}_{n\vec{k}, v\vec{k}} \quad (C.2.15)$$

Multiplicando a expansão de Fourier de $\exp(-r/a_v)$ dada pela eq. (C.2.7) por $\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})$ e integrando em todo o espaço, tem-se:

$$\int_V \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r} - r/a_v) d^3r = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \int A(\vec{k}') \exp(-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}) d^3r \quad (C.2.16)$$

Já que os vetores $\vec{k}'$ formam um quasi-contínuo, pode-se transformar a somatória na eq. (C.2.16) em uma integral, isto é:

$$\int_V \exp(-r/a_v - i\vec{k}' \cdot \vec{r}) d^3r = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot \frac{8\pi^3}{V} \iint A(\vec{k}') \exp(i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}) d^3r d^3k' \quad (C.2.17)$$

A função delta de Dirac define-se por:

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}) d^3r \quad (C.2.18)$$

Substituindo-se a eq. (C.2.18) na eq. (C.2.17) e fazendo a integral em k' , usando a função delta, resulta:

$$A(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V \exp(-r/a_v - i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3r \quad (C.2.19)$$

Para resolver a integral vamos usar coordenadas esféricas com os eixos orientados de modo que o eixo z positivo esteja na direção de $\vec{k}$. Teremos então:

$$I \equiv \int_V \exp(-r/a_v - i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3r = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \exp(-r/a_v + ikr \cos \theta) \cdot r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (C.2.20)$$

Fazendo a integral em ϕ e mudando a variável θ para $u = ikr \cos \theta$ temos:

$$I = 2\pi \frac{i}{k} \int_0^\infty \exp(-r/a_v) r \left\{ \int_{ikr}^{-ikr} \exp(u) du \right\} dr \quad (C.2.21)$$

Resolvendo a integral em u obtemos:

$$I = \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r \exp(-r/a_v) \sin kr dr = \frac{4\pi a_v^2}{k} \frac{d}{da_v} (\text{Im} \int \exp(ikr - r/a_v) dr) \quad (C.2.22)$$

Finalmente, resolvendo-se esta última integral chega-se a:

$$I = \frac{8\pi a_v^3}{(1+a_v^2 k^2)^2} \quad (C.2.23)$$

Substituindo-se agora a eq. (C.2.23) na eq. (C.2.19) temos:

$$A(\vec{k}) = \frac{8\pi a_v^3}{\sqrt{V}(1+a_v^2 k^2)^2} \quad (C.2.24)$$

substituímos então a eq. (C.2.24) na eq. (C.2.15) e obteremos:

$$\vec{P}_{nI} = 8 \sqrt{\frac{\pi a_v^3}{V}} (1+a_v^2 k^2)^{-2} \vec{P}_{n\vec{k}, v\vec{k}} \quad (C.2.25)$$

Substituindo-se a eq. (C.2.25) na eq. (C.2.1), teremos que o valor médio do elemento de matriz para a transição banda-impureza será:

$$|M_{BI}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} (1+a_v^2 k^2)^{-4} \left\{ \sum_{\alpha=1,2} \int |\vec{\epsilon}_\alpha \cdot \vec{P}_{n\vec{k}, v\vec{k}}|^2 \frac{d\Omega_k}{8\pi} \right\} \quad (C.2.26)$$

Repare-se que o termo entre as chaves é exatamente o valor médio do elemento de matriz do operador momento para transições banda-banda, isto é, corresponde ao nosso $|M_{CV}|_{av}^2$ já calculado na eq. (C.1.15). Portanto finalmente chegamos à seguinte expressão para $|M_{BI}|_{av}^2$:

$$|M_{BI}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} (1+a_v^2 k^2)^{-4} |M_{CV}|_{av}^2 \quad (C.2.27)$$

3.-) Transição Impureza - Impureza.

Novamente faremos uso da eq. (C.2.1) :

$$|M_{IJ}|_{av}^2 = \sum_{\alpha=1,2} \int | \langle a_I | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{\epsilon}_{\alpha} \cdot \vec{p} | a_J \rangle |^2 \frac{d\Omega_k}{8\pi} \quad (C.3.1)$$

Já que agora estamos considerando transições entre impurezas, a_I e a_J serão as funções de onda das impurezas que suporemos estarem associadas às bandas C e V, doadores e aceitadores, respectivamente. Portanto a_I e a_J serão de seguinte forma:

$$a_I(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_C}} u_{C\vec{k}}(\vec{r}) \exp(-r/a_C) \quad (C.3.2)$$

$$a_J(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_V}} u_{V\vec{k}}(\vec{r}) \exp(-|\vec{r}+\vec{R}|/a_V)$$

onde $\vec{R}$ é a separação entre doador e aceitador; a_C e a_V são os raios de Bohr dos doadores e aceitadores respectivamente e estão dados pela eq. (C.2.4) com as massas apropriadas. Definamos:

$$\vec{P}_{DA} \equiv \langle a_I | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{p} | a_J \rangle \quad (C.3.3)$$

Substituindo-se a eq. (C.3.2) na eq. (C.3.3) teremos:

$$\vec{P}_{DA} = \frac{1}{\pi(a_C a_V)^{3/2}} \int u_{C\vec{k}}^*(\vec{r}) \exp(-r/a_C + i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{p} u_{V\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(-|\vec{r}+\vec{R}|/a_V) d^3r \quad (C.3.4)$$

Fazendo uma expansão de Fourier para $\exp(-r/a_C)$ e também para $\exp(-|\vec{r}+\vec{R}|/a_V)$:

$$\exp(-r/a_C) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (C.3.5)$$

$$\exp(-|\vec{r}+\vec{R}|/a_V) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}'} B(\vec{k}') \exp(i\vec{k}' \cdot (\vec{r}+\vec{R})) \quad (C.3.6)$$

Substituindo-se estas expansões de Fourier na eq. (C.3.4), e usando-se a forma explícita do operador momento obtemos:

$$\vec{p}_{DA} = \frac{-i\hbar}{\pi V (a_c a_v)^{3/2}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}') \left\{ \int u_{c\vec{k}}^* \exp(-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}) \cdot \vec{r}) \nabla u_{v\vec{k}} d^3r + i\vec{k}' \int u_{c\vec{k}}^* \exp(-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}) \cdot \vec{r}) \cdot u_{v\vec{k}} d^3r \right\} \quad (C.3.7)$$

Aplicando à eq. (C.3.7) o Teorema de Landsberg na sua forma simplificada:

$$\int_V \exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}) f(\vec{r}) d^3r = N \delta_{\vec{\lambda}, 0} \int_{\Omega} f(\vec{r}) d^3r \quad (C.3.8)$$

obteremos:

$$\vec{p}_{DA} = \frac{-i\hbar}{\pi V (a_c a_v)^{3/2}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}') N \delta_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}} \cdot \left\{ \int_{\Omega} u_{c\vec{k}}^* \nabla u_{v\vec{k}} d^3r + i\vec{k}' \int_{\Omega} u_{c\vec{k}}^* u_{v\vec{k}} d^3r \right\} \quad (C.3.9)$$

Mais uma vez, vamos usar o fato de que $\vec{k}$ do fóton é, em geral, desprezível comparado com $\vec{k}$, fazendo portanto a aproximação:

$$\delta_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{k}} \approx \delta_{\vec{k}', \vec{k}} \quad (C.3.10)$$

Definamos:

$$\vec{p}_{CV} \equiv \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{c\vec{k}}^* \vec{p} u_{v\vec{k}} d^3r \quad (C.3.11)$$

usando a ortogonalidade de $u_{c\vec{k}}$ e $u_{v\vec{k}}$ teremos:

$$\int_{\Omega} u_{c\vec{k}}^* u_{v\vec{k}} d^3r = 0 \quad (C.3.12)$$

Substituindo-se agora as eqs. (C.3.10), (C.3.11) e (C.3.12) na eq. (C.3.9) chegamos a:

$$\vec{p}_{DA} = \frac{1}{\pi(a_c a_v)^{3/2}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{R}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}') \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \vec{p}_{CV} \quad (C.3.13)$$

Fazendo-se a somat6ria, usando a fun76o delta, tem-se:

$$\vec{p}_{DA} = \frac{1}{\pi(a_c a_v)^{3/2}} \vec{p}_{CV} \sum_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}) \quad (C.3.14)$$

Multiplicando o complexo conjugado da expans6o de Fourier de $\exp(-r/a_c)$ dada na eq. (C.3.5) pela eq. (C.3.6) e integrando em tudo o espa7o obtemos:

$$\int_V \exp(-r/a_c - |\vec{r} + \vec{R}|/a_v) d^3r = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{R}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}') \cdot \int_V \exp(-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}) d^3r \quad (C.3.15)$$

A integral no espa7o, da exponencial de $\vec{k} - \vec{k}'$, 6 a fun76o delta de Dirac :

$$\int_V \exp(-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}) d^3r = (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (C.3.16)$$

J6 que os vetores $\vec{k}'$ formam um quasi-cont6nuo, vamos transformar a somat6ria em $\vec{k}'$ na eq. (C.3.15) em uma integral em $\vec{k}'$, fazendo uso da eq. (C.3.16). Assim sendo teremos:

$$\int_V \exp(-r/a_c - |\vec{r} + \vec{R}|/a_v) d^3r = \frac{(2\pi)^3}{V} \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}} A^*(\vec{k}) \cdot \int \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{R}) B(\vec{k}') \delta(\vec{k} - \vec{k}') d^3k' \quad (C.3.17)$$

Fazendo a integral em $\vec{k}'$:

$$\int_V \exp(-r/a_c - |\vec{r} + \vec{R}|/a_v) d^3r = \sum_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}) \quad (C.3.18)$$

Para a resolu76o da integral usaremos coordenadas esf6ricas com os eixos orientados de tal forma que o eixo z positivo este-

ja na direção de $\vec{R}$. Fica então:

$$I \equiv \int_V \exp(-r/a_c - |\vec{r} + \vec{R}|/a_v) d^3r = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \exp(-r/a_c - (r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta)^{1/2} / a_v) r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \quad (C.3.19)$$

Fazendo a integral em ϕ e mudando de variável de θ para $u^2 = r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta$ teremos:

$$I = \frac{2\pi}{R} \int_0^\infty r \exp(-r/a_c) \left\{ \int_{|r-R|}^{r+R} \exp(-u/a_v) u du \right\} dr \quad (C.3.20)$$

Fazendo-se a integral em u obtemos:

$$I = \frac{2\pi a_v}{R} \int_0^\infty r \exp(-r/a_c) \{ -(a_v + r + R) \exp(-(r+R)/a_v) + (a_v + |r-R|) \exp(-|r-R|/a_v) \} dr \quad (C.3.21)$$

Resolvendo-se esta integral, obtem-se:

$$I = \frac{8\pi a_c^3}{\rho(\alpha^2 - 1)^3} \left[\exp(-\alpha\rho) (\rho(\alpha^2 - 1) + 4\alpha) + \exp(-\rho) (\alpha\rho(\alpha^2 - 1) - 4\alpha) \right] \quad (C.3.22)$$

$$\text{onde:} \quad \rho = \frac{R}{a_c} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{a_c}{a_v} \quad (C.3.23)$$

Substituindo-se o resultado para I da eq. (C.3.22) na eq. (C.3.18) teremos:

$$\sum_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) A^*(\vec{k}) B(\vec{k}) = \frac{8\pi a_c^3}{\rho(\alpha^2 - 1)^3} \{ \exp(-\alpha\rho) (\rho(\alpha^2 - 1) + 4\alpha) + \exp(-\rho) (\alpha\rho(\alpha^2 - 1) - 4\alpha) \} \quad (C.3.24)$$

Depois, usando-se este resultado na eq. (C.3.14), tem-se que $\vec{P}_{DA}$ fica :

$$\vec{P}_{DA} = \frac{8\alpha^{3/2}}{\rho(\alpha^2 - 1)^3} \{ \exp(-\alpha\rho) (\rho(\alpha^2 - 1) + 4\alpha) + \exp(-\rho) (\alpha\rho(\alpha^2 - 1) - 4\alpha) \} \vec{P}_{CV} \quad (C.3.25)$$

Esta expressão para $\vec{P}_{DA}$ tem ainda a variável R que corresponde à separação entre doador e aceitador. Supondo que a distribuição das impurezas é isotrópica, faremos a média de todas as configurações integrando a eq. (C.3.25) em R sobre todo o volume V e dividindo por V. Isto é:

$$|\vec{P}_{DA}|_{av}^2 = \int |\vec{P}_{DA}|^2 \frac{d\vec{R}}{V} = 4\pi a_v^3 \int_0^\infty |\vec{P}_{DA}|^2 \rho^2 \frac{d\rho}{V} \quad (C.3.26)$$

Então, substituindo a eq. (C.3.25) na eq. (C.3.26), e resolvendo a integral, encontramos:

$$|\vec{P}_{DA}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} \cdot \frac{(1+7\alpha+17\alpha^2+7\alpha^3+\alpha^4)}{(1+\alpha)^7} \vec{P}_{CV} \quad (C.3.27)$$

Substituindo-se esta eq. (C.3.27) na eq. (C.3.1) teremos para o elemento de matriz de uma transição entre níveis doador e aceitador:

$$|M_{DA}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} \cdot \frac{(1+7\alpha+17\alpha^2+7\alpha^3+\alpha^4)}{(1+\alpha)^7} \cdot \left\{ \sum_{\alpha=1,2} \int |\vec{\epsilon}_\alpha \cdot \vec{P}_{CV}|^2 \frac{d\Omega_\kappa}{8\pi} \right\} \quad (C.3.28)$$

De novo, a expressão entre as chaves é o já conhecido valor médio do elemento de matriz entre bandas $|M_{CV}|_{av}^2$. Portanto, obtemos finalmente que o valor médio do elemento de matriz para transições entre impurezas doadoras e aceitadoras é da forma:

$$|M_{DA}|_{av}^2 = \frac{64\pi a_v^3}{V} \cdot \frac{(1+7\alpha+17\alpha^2+7\alpha^3+\alpha^4)}{(1+\alpha)^7} |M_{CV}|_{av}^2 \quad (C.3.29)$$

onde: $\alpha = \frac{a_c}{a_v}$

A P Ê N D I C E D

APROXIMAÇÃO DE THOMPSON PARA O CÁLCULO DA VARIAÇÃO
DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO COM A INJEÇÃO.

Em 1972, G.H.B. Thompson⁽⁵⁾, propôs um modelo baseado num mecanismo de autofocalização nos lasers de semicondutor para explicar a formação de filamentos nos dispositivos de junção p-n. A autofocalização devia-se a um incremento da constante dielétrica do semicondutor nas regiões de alta intensidade de luz, provocado por uma diminuição na concentração dos portadores injetados causada por um decréscimo no tempo de vida dos portadores. Dois mecanismos foram propostos a fim de levar em conta a dependência da constante dielétrica com a concentração dos portadores: o efeito dos portadores livres, e as transições banda-banda.

Vamos fazer aqui um resumo do cálculo e hipóteses feitas por Thompson⁽⁵⁾ a fim de encontrar a relação existente entre a variação da constante dielétrica e a variação na densidade de portadores injetados.

Thompson considera a influência dos portadores injetados sobre a constante dielétrica como consequência da mudança que eles provocam no coeficiente de absorção do material como função da energia do fóton E . Uma relação fundamental derivada por Kramers e Kronig⁽⁶⁵⁾ estabelece que qualquer interação elétrica num material, que dê origem a uma distribuição de ganho ou perdas para uma onda que está se propagando, deverá inevitavelmente afetar a constante dielétrica do material, afetando portanto o índice de refração. Para se calcular o índice de refração $N(E)$ para uma energia do fóton fixa usando as integrais de Kramers-Kronig, é necessário o

conhecimento da absorção(ou ganho) para o espectro completo de energia, de zero a infinito. Isto portanto, requer uma quantidade muito grande de conhecimentos sobre o comportamento do material. Agora, Thompson faz a hipótese de que, já que o interesse é em achar a variação do índice de refração resultante dos portadores injetados, e já que as relações de Kramers-Kronig são lineares no coeficiente de absorção, então só é necessário levar em conta o intervalo de energia no qual o coeficiente de absorção é afetado pelos portadores injetados. Este intervalo corresponde a uma faixa de energia limitada na região onde a absorção cresce abruptamente.

Para qualquer energia, o coeficiente de absorção depende das densidades de estados inicial e final, do seu estado de ocupação e da probabilidade de ocorrência da transição de absorção. O que Thompson faz é associar a variação de absorção, com a absorção original e com a mudança nos quasi-níveis de Fermi das bandas, provocada pela corrente injetada. A expressão para o coeficiente de absorção α para a energia do fóton E , é dada por:

$$\alpha(E) = - \int_{-\infty}^{\infty} B(\epsilon) \rho_C(F_C + E' + \epsilon) \rho_V(F_V + E' - \epsilon) \cdot \{ f_C(E' + \epsilon) - f_V(-E' + \epsilon) \} d\epsilon \quad (D.1)$$

As energias usadas na eq. (D.1) estão dadas na figura D.1 .

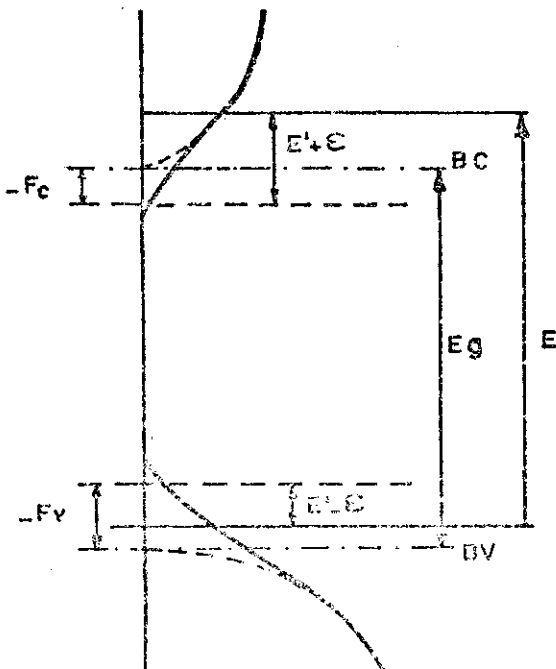


Fig. D.1 . Definição das diferentes energias usadas na eq.(D.1). As linhas BC e BV correspondem ao fundo e o topo das bandas de condução e valência respectivamente.

Na eq. (D.1), F_c e F_v são os quasi-níveis de Fermi referidos às extremidades das bandas de condução e valência respectivamente; $2E'$ é a diferença entre a energia do fóton E e a separação entre os quasi-níveis F_{cv} , ϵ é uma energia variável a qual determina a energia dos estados inicial e final, sempre separados pela energia E . ρ_c e ρ_v são as densidades de estados nas bandas de condução e valência respectivamente, e são função da energia. B é o coeficiente de Einstein, o qual varia com ϵ , e é proporcional ao elemento de matriz do operador momento entre os estados inicial e final da transição. f_c e f_v são as funções de Fermi nas bandas de condução e valência respectivamente, expressas na forma geral:

$$f(x) = \frac{1}{2} (1 - \tanh(x/2kT)) \quad (D.2)$$

A diferença entre as funções de Fermi nas bandas de condução e valência, respectivamente, será:

$$f_c(E'+\epsilon) - f_v(-E'+\epsilon) = -\sinh(E'/kT) / (\cosh \frac{E'}{kT} + \cosh \frac{\epsilon}{kT}) \quad (D.3)$$

Quando a corrente aumenta, aumentando a densidade de portadores injetados, aumenta-se a separação entre os quasi-níveis de Fermi F_{cv} . Portanto, para uma energia fixa E , o valor de E' diminui quando é aumentada a corrente de injeção. A variação de $f_c - f_v$ provocada por uma variação na corrente, e portanto em E' , é obtida diferenciando-se a eq. (D.3) respeito da variável E' . Daí segue que:

$$\delta(f_c - f_v) = - \frac{1 + \cosh(E'/kT)\cosh(\epsilon/kT)}{\{\cosh(E'/kT) + \cosh(\epsilon/kT)\}^2 kT} \delta E' \quad (D.4)$$

Então, a variação no coeficiente de absorção $\delta\alpha$, pode ser expressa em termos do incremento na separação dos quasi-níveis de Fermi (que é igual a $-2\delta E'$), substituindo-se a eq. (D.4) na eq. (D.1).

A seguir, Thompson faz uma aproximação a fim de eliminar na eq.(D.4) a dependência em ϵ , que é a variável de integração na eq.(D.1).

A aproximação se faz com o objetivo de que $\delta(f_c - f_v)$ possa ser tirada fora da integral na eq.(D.1) e assim poder separar a expressão na eq.(D.1), no produto de um termo de injeção e um termo de absorção. Para poder fazer isto, é necessário que a principal contribuição à absorção α tenha origem numa pequena faixa de ϵ na qual a expressão dada pela eq.(D.4) varie muito pouco.

A explicação dada por Thompson a fim de usar este ultimo fato é a seguinte: "Vamos supor que uma das bandas esteja composta de - uma cauda exponencial com profundidade média E_0 e da forma e^{E/E_0} , a qual se junta a uma parte parabólica para altas energias como se mostra na figura D.2(a). Suporemos que a segunda banda tem uma cauda menos profunda à qual também se junta uma parte parabólica para altas energias. Para energias do fóton E menores que a energia da banda proibida E_g , o produto $\rho_c \rho_v$ para estados separados pela energia E terá seu valor máximo quando os estados na banda menos profunda estejam em torno do ponto onde a cauda e a parte parabólica se encontram. Isto é justificado da seguinte maneira: se a transição parte dum estado na parte parabólica da banda menos profunda, terá seu extremo na parte de baixa energia da cauda da outra banda onde a densidade de estados diminui rapidamente. Se por outro lado a transição ocorre entre um estado na cauda da banda menos profunda, terá neste ponto uma densidade de estados, diminuindo também, rapidamente, que não é compensada pelo lento incremento na densidade de estados na banda oposta. Um exemplo disto é dado na figura D.2(b), para o caso onde a banda menos profunda é a banda de condução.

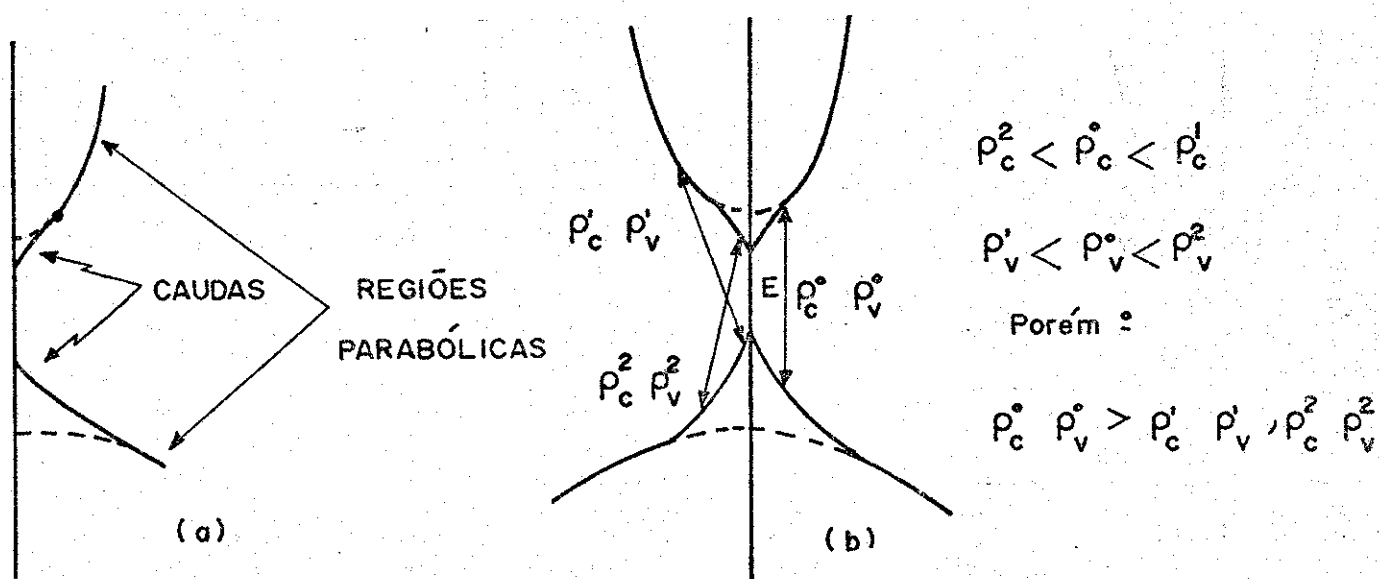


Fig. D.2 (a) Esquema de bandas mostrando uma região parabólica que se junta às caudas. (b) Produto das densidades $\rho_c \rho_v$ para diferentes transições da mesma energia E .

A largura do pico no produto $\rho_c \rho_v$ é da ordem de E_0 , que é tomado por Thompson como sendo menor que kT . Portanto, a largura do pico inclui somente uma variação pequena de $\delta(f_c - f_v)$ na eq.(D.4), e se ϵ não é grande, resultará apenas numa variação pequena de $(f_c - f_v)$ na eq.(D.3). Assim então, $\delta(f_c - f_v)$, e na maioria dos casos $(f_c - f_v)$ podem sair da integral. No caso onde E é maior que E_g , suporemos que são aplicáveis as regras de seleção, e portanto, para qualquer valor de E , só existe uma pequena faixa de valores de ϵ para a qual $B(\epsilon)$ é diferente de zero.

Com esta aproximação, a variação do coeficiente de absorção α dado pela eq.(D.1), produzida pela injeção de portadores, é dada por:

$$\delta \alpha_a(E) \approx - \delta(f_c - f_v)_E \alpha_0(E) \quad (D.5)$$

onde $\alpha_0(E)$ é a absorção característica do material na ausência de injeção, e tem a expressão:

$$\alpha_0(E) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\epsilon) \rho_c(E_c + E' + \epsilon) \rho_v(E_v + E' - \epsilon) d\epsilon \quad (D.6)$$

A continuação, Thompson calcula o valor de $\delta(f_c - f_v)$ para 3 possíveis situações das bandas com caudas, e também para transições entre as partes parabólicas dessas bandas. As três situações são: (a) injeção na banda com a cauda maior, (b) injeção na banda com cauda menor, e (c) dupla injeção. Os resultados obtidos para $\delta(f_c - f_v)$ são os seguintes:

$$(a) \quad \delta(f_c - f_v) \approx \exp \left[\frac{F_c + E_g - E}{kT} \right] \quad (D.7)$$

$$(b) \quad \delta(f_c - f_v) \approx \exp \left[\frac{F_c}{kT} \right] \quad (D.8)$$

$$(c) \quad \delta(f_c - f_v) \approx \exp \left[\frac{F_c}{kT} - \left| \begin{matrix} 3 \\ 0 \end{matrix} \right| \right] + \exp \left[\frac{F_c + E_g - E}{kT} - \left| \begin{matrix} 0 \\ 3 \end{matrix} \right| \right] \quad (D.9)$$

Na eq.(D.9), usam-se as quantidades na parte superior dos pares se a banda de condução tem a cauda maior, e as quantidades na parte inferior se a banda de valência tem a cauda maior.

Para o caso de recombinações entre estados nas partes parabólicas das bandas, com injeção na banda de condução, o resultado é:

$$\delta(f_c - f_v) \approx \exp \left[\frac{F_c + \left(\frac{m_v}{m_c + m_v} \right) (E_g - E)}{k T} \right] \quad (D.10)$$

Se a injeção é na banda de valência, então o resultado será:

$$\delta(f_c - f_v) \approx \exp \left[\frac{F_v + \left(\frac{m_c}{m_c + m_v} \right) (E_g - E)}{k T} \right] \quad (D.11)$$

Para dupla injeção, obtém-se:

$$\delta(f_c - f_v) \approx \exp \left(\frac{F_c}{kT} \right) \left[\exp \left\{ \left(\frac{m_v}{m_c + m_v} \right) \frac{(E_g - E)}{kT} \right\} + \exp \left\{ \frac{m_c}{m_c + m_v} \frac{(E_g - E)}{kT} - 3 \right\} \right] \quad (D.12)$$

Neste caso de recombinações entre as partes parabólicas das bandas foi suposto que existia uma estrita conservação do momento cristalino $\vec{k}$.

No que diz respeito à extremidade da absorção, encontra-se, na prática, que consiste numa parte que cresce de forma aproximadamente exponencial, seguida por uma parte quase constante. Quando for preciso, deve-se usar uma aproximação simples sugerida por Moss⁽⁶⁶⁾, que é da forma:

$$\alpha_0(h\nu) \approx \alpha'_0 \left\{ \tanh \left[(E-E_g)/2E_0 \right] + 1 \right\} / 2 \quad (D.13)$$

que tem uma forma exponencial com energia característica E_0 .

Kramers e Kronig⁽⁶⁵⁾ dão a seguinte relação válida para qualquer material, entre a parte real $\epsilon_a(\omega)$ e a parte imaginária $\epsilon_b(x)$ da constante dielétrica para uma frequência angular constante x :

$$\epsilon_a(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{x \epsilon_b(x)}{(x^2 - \omega^2)} dx \quad (D.14)$$

Anderson⁽⁶⁷⁾ mostrou que $\epsilon_b(x)$ pode ser expressa em termos do coeficiente de absorção $\alpha(x)$. Usando sua expressão, se tem, após mudar variável e diferenciar na eq.(D.14), que:

$$\delta \epsilon_a \left[\frac{E-E_g}{2E_0} \right] \approx \frac{\lambda \epsilon^{1/2}}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta \alpha(y)}{y - \frac{E-E_g}{2E_0}} dy \quad (D.15)$$

Com esta relação, Thompson obteve a perturbação da constante dielétrica em termos da concentração dos portadores injetados, substituindo-se $\delta \alpha$ na eq.(D.15) por algum dos vários valores de $\delta(f_c - f_v)$ dados para diferentes casos nas eqs.(D.7) até (D.12), junto com a aproximação para $\alpha_0(E)$ dada na eq.(D.13).

Os resultados de Thompson foram obtidos para a situação onde a injeção é feita na banda com a cauda menor, já que este é o caso mais simples. Supoes que a corrente de bombeamento não fosse suficiente para fazer a separação dos quasi-níveis de Fermi maior do que E_g , podendo assim usar as aproximações para $\delta(f_c - f_v)$ dadas nas eqs. (D.8) e (D.10), aplicando a primeira no caso $E < E_g$ e a última para $E > E_g$. Substituindo estas expressões na eq. (D.5) e depois na eq. (D.15) obteve:

$$\delta\epsilon_a \left[\frac{E - E_g}{2E_0} \right] = - \frac{\lambda\epsilon^{1/2}}{\pi^2} \exp\left(\frac{F_c}{kT}\right) \left[\int_{-\infty}^0 \frac{\alpha_0(y) dy}{y - \frac{E - E_g}{2E_0}} + \int_0^{\infty} \frac{\alpha_0(y) \exp(-2E_0\theta y/kT) dy}{y - \frac{E - E_g}{2E_0}} \right] \quad (D.16)$$

onde: $\theta = \frac{m_v}{m_c + m_v}$ tratando-se da banda de condução, e

$\theta = \frac{m_c}{m_c + m_v}$ tratando-se da banda de valência.

Note-se que a eq. (D.16) está separada no produto dum termo dependente do bombeamento, $\exp(F_c/kT)$, e uma parte dependente da energia do fóton E , que contém as duas integrais com a característica da extremidade das bandas $\alpha_0(y)$. A fim de obter a distribuição espectral, Thompson teve de substituir o valor apropriado para $\alpha_0(y)$ nas integrais, e fazer a integração.

Com o objetivo de ilustrar as características gerais do comportamento, e, para obter uma estimativa da magnitude da perturbação da constante dielétrica, Thompson fez no seu artigo, um tratamento quantitativo de um dos modelos já apresentados, usando a aproximação para a extremidade das bandas dada na eq. (D.13). O modelo escolhido é aquele no qual se tem injeção de elétrons, numa situação onde a banda de condução tem a cauda maior.

Nas seguintes figuras mostram-se os resultados obtidos por Thompson para a variação da constante dielétrica com a injeção de elétrons, para diferentes valores das variáveis $u=E_0/kT$, e $\psi_c=F_c/2E_0$ e para diferentes temperaturas.

Nas figs. D.3 (a), (b), (c) e (d), mostramos a relação entre $\delta\epsilon_a/\lambda\epsilon^{1/2}_a$ e a concentração de portadores numa escala logarítmica. No caso de $u=0.125$, 0.25 e 0.50 , a inclinação das curvas é aproximadamente igual a 1, o qual significa que $\delta\epsilon_a$ é aproximadamente proporcional à concentração de elétrons n . A variação na energia do fóton E , praticamente não afeta esta relação de proporcionalidade. Os valores de $u=0.125$, 0.25 e 0.5 correspondem a temperaturas no intervalo de 150 a 400 0K . O caso $u=1$ corresponde a uma temperatura aproximada de 80 0K , e da fig.D.3(d), obtém-se que a relação entre $\delta\epsilon_a$ e n , está menos perto da linearidade, e também, que a energia do fóton E tem já influência sobre a variação $\delta\epsilon_a$.

A região de interesse das curvas na fig.D.3 é aquela região onde o ganho é positivo. Esta região é mostrada com linha grossa, e em geral, a relação linear entre $\delta\epsilon_a$ e n é satisfatória nesta região.

Portanto, desta análise feita, obtém-se como resultado que a variação da constante dielétrica, causada pela densidade de portadores injetados, sucede através de uma relação aproximadamente linear da forma:

$$\delta\epsilon_a = - A' n \quad (D.17)$$

Os valores aproximados obtidos para A' com $u=0.125, 0.25$ e 0.5 referidos à temperatura ambiente, são de $6.5 \cdot 10^{-20}$, $4 \cdot 10^{-20}$ e $2.5 \cdot 10^{-20}$ cm^3 respectivamente. Para achar a variação correspondente do índice de refração N , temos que: $\epsilon_a = N^2$, e portanto:

$$\delta\epsilon_a = 2 N \delta N \quad (D.18)$$

substituindo-se a eq.(D.17) na eq.(D.18), e definindo $A=A'/2N$, ob-

teremos:

$$\delta N = - A n \quad (D.19)$$

com A na faixa de: $3.5 \cdot 10^{-21}$ a $9 \cdot 10^{-21}$.

COMENTÁRIOS.- Neste cálculo desenvolvido por Thompson são muitas as aproximações envolvidas, deixando assim um pouco confusa a sua possível utilização de um modo geral. O resultado numérico dado no seu artigo é deduzido supondo que a banda de condução tem a cauda maior do que a da banda de valência, o que é oposto ao que mostrou Hwang⁽¹⁹⁾, isto é, que a cauda da banda de valência é maior do que a cauda da banda de condução. Um outro detalhe muito importante é o de que, no seu cálculo, Thompson não levou em conta a redução na energia da banda proibida provocada pelos portadores, assim como também não considerou o efeito sobre a absorção, devido à variação nas caudas das bandas e no elemento de matriz provocada pelos portadores injetados.

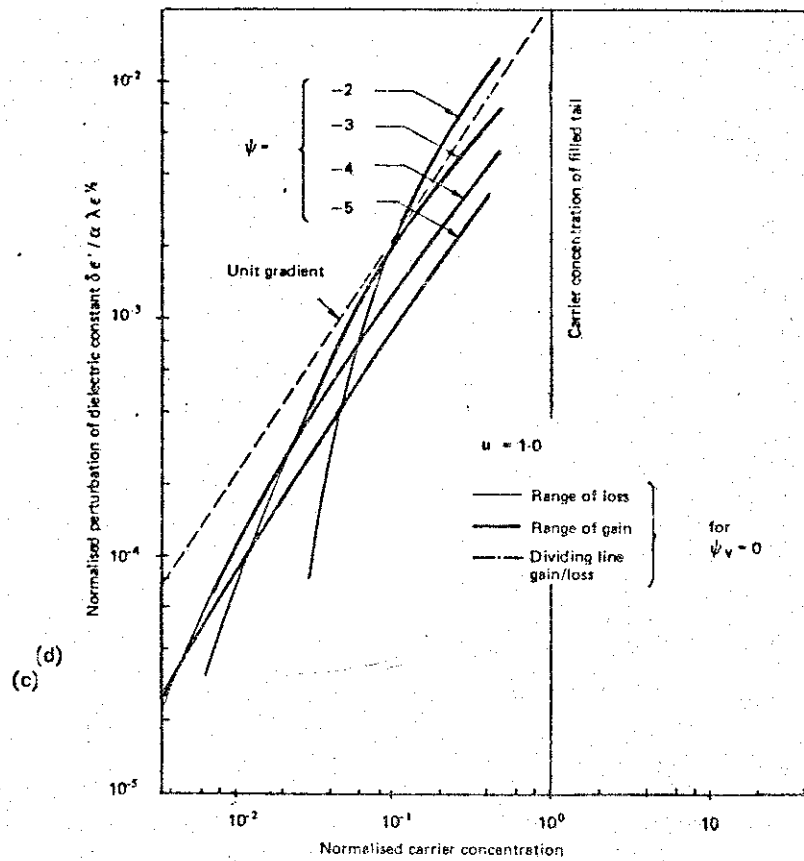
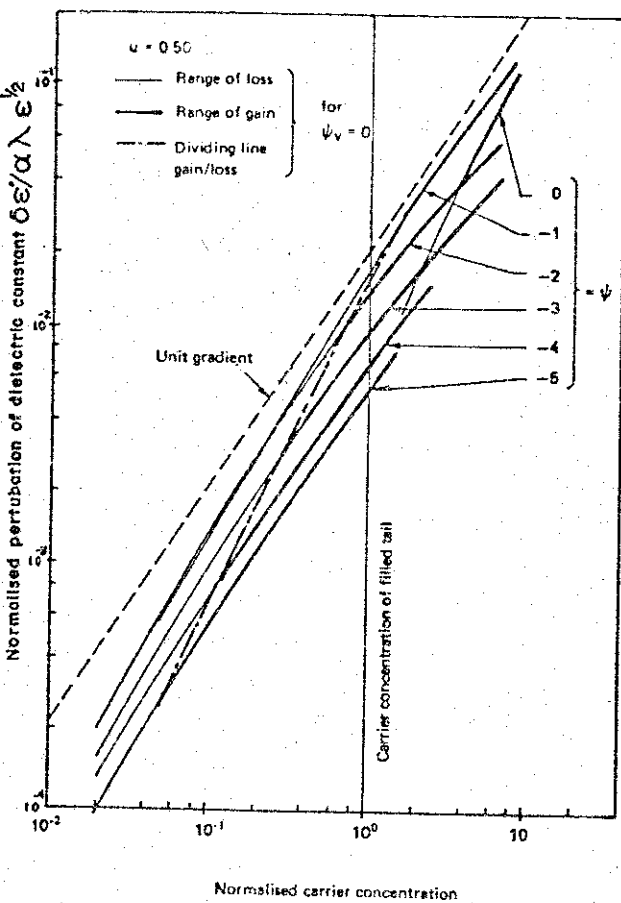
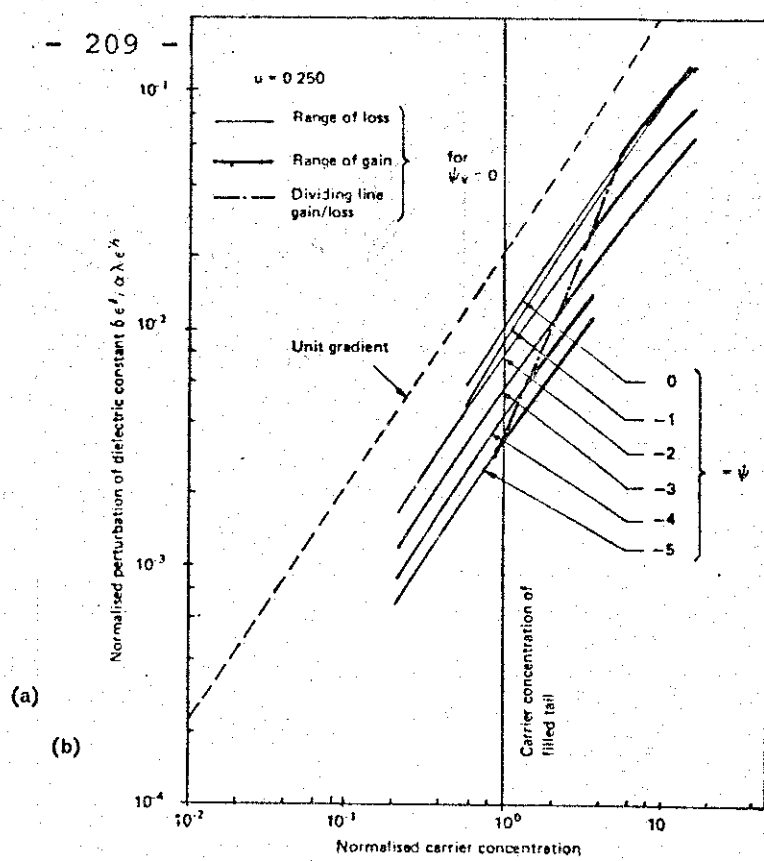
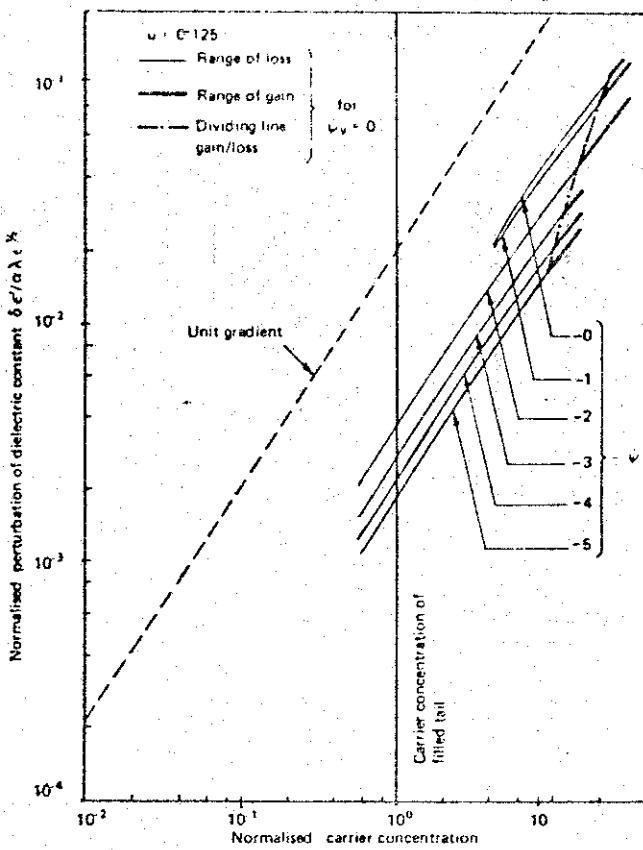


Fig. D.3 (a), (b), (c) e (d) . Dependência da perturbação da constante dielétrica com a concentração de portadores injetados, para diferentes temperaturas no intervalo: 80 - 400 °K; calculada por Thompson.

A P Ê N D I C E E

E.1 FREQUÊNCIAS DOS MODOS GUIADOS.

Neste apêndice, nós vamos deduzir a eq.(10.1.16) a partir da solução da equação de onda escalar, para os modos ressonantes eletromagnéticos.

Na eq.(10.1.8), obtivemos que a constante de propagação γ era da forma:

$$\gamma^2 = N_0^2 - 2N_0\delta - \gamma_x^2 - \gamma_y^2 \quad (E.1.1)$$

onde γ_x^2 e γ_y^2 são constantes que entram nas eqs.(10.1.7.b) e (10.1.7.c) :

$$\frac{d^2x}{dx^2} + \left[\gamma_x^2 k^2 - \alpha^2 - \frac{N_0^2 k^2}{x_0^2} x^2 \right] x = 0 \quad (E.1.2)$$

$$\frac{d^2y}{dy^2} + \left[\gamma_y^2 k^2 + \alpha^2 + 2N_0\delta k^2 \operatorname{sech}^2(y/y') \right] y = 0 \quad (E.1.3)$$

A eq.(E.1.2), é da forma:

$$\frac{d^2x}{dx^2} + (\epsilon - \theta^2 x^2) x = 0 \quad (E.1.4)$$

que possui autovalores dados por:

$$\epsilon_m \equiv \epsilon = (2m+1) \theta \quad (E.1.5)$$

Comparando as eqs.(E.1.4) e (E.1.2), teremos:

$$\epsilon = \gamma_x^2 k^2 - \alpha^2 \quad e \quad \theta = \frac{N_0 k}{x_0}$$

agora, substituindo-se estes valores de ϵ e θ na eq.(E.1.5), chega-se à expressão:

$$\gamma_x^2 k^2 - \alpha^2 = (2m + 1) \frac{N_0 k}{x_0} \quad (E.1.6)$$

A eq.(E.1.3) é da forma:

$$\frac{d^2 y}{dy^2} + \left[\frac{2m_0 U_0}{\hbar^2 \cosh^2(\beta y)} + \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \right] y = 0 \quad (E.1.7)$$

cuja solução dá os autovalores⁽⁵⁸⁾:

$$E_n = - \frac{\hbar^2 \beta^2}{8m_0} \left[-(2n+1) + \sqrt{1 + \frac{8m_0 U_0}{\beta^2 \hbar^2}} \right]^2 \quad (E.1.8)$$

Comparando-se as eqs.(E.1.7) e (E.1.3), obteremos as relações:

$$\gamma_y^2 k^2 + \alpha^2 = - \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad 2N_0 \delta k^2 = \frac{2m_0 U_0}{\hbar^2}$$

assim, substituindo estas últimas na eq.(E.1.8), temos:

$$\gamma_y^2 k^2 + \alpha^2 = - \frac{1}{4y'^2} \left[-(2n+1) + \sqrt{1 + 8N_0 \delta k^2 y'^2} \right]^2 \quad (E.1.9)$$

Somando-se as eqs.(E.1.6) e (E.1.9), teremos:

$$(\gamma_x^2 + \gamma_y^2) k^2 = (2m+1) \frac{N_0 k}{x_0} - \frac{1}{4y'^2} \left[-(2n+1) + \sqrt{1 + 8N_0 \delta k^2 y'^2} \right]^2 \quad (E.1.10)$$

Substituindo-se este valor de $\gamma_x^2 + \gamma_y^2$ na eq.(E.1.1), obtemos:

$$\gamma^2 = N_0^2 - 2N_0 \delta - (2m+1) \frac{N_0}{x_0 k} + \frac{1}{(2ky')^2} \left[-(2n+1) + \sqrt{1 + 8N_0 \delta k^2 y'^2} \right]^2 \quad (E.1.11)$$

O γ deve satisfazer às condições de contorno periódicas na função Z dada na eq.(10.9), isto corresponde a impor a condição de ter um número inteiro de meios-comprimentos de onda entre os espelhos do laser na cavidade ressonante. Assim:

$$Z(0) = Z(L) \quad (E.1.12)$$

sendo L , o comprimento da cavidade Fabry-Perot do laser. A função Z é:

$$Z = Z_0 \exp(\pm i k \gamma z) \quad (E.1.13)$$

portanto a condição de contorno toma a forma:

$$\gamma k L = q \pi \quad q \text{ inteiro} \quad (\text{E.1.14})$$

então:

$$\gamma = \frac{q\pi}{kL} \quad (\text{E.1.15})$$

usando este valor para γ na eq.(E.1.11), e multiplicando por k^2 obteremos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} (N_0^2 - 2N_0\delta)k^2 - \frac{(2m+1)N_0}{x_0}k - \frac{q^2\pi^2}{L^2} + \\ + \frac{1}{(2y')^2} \left[-(2n+1) + \sqrt{1+8N_0\delta(ky')^2} \right]^2 = 0 \end{aligned} \quad (\text{E.1.16})$$

Agora, faremos algumas aproximações baseadas em valores típicos dos parâmetros: $N_0=3.6$, $\delta \approx 10^{-3}$, $\lambda=0.89\mu$, $y'=10\mu$, com isto teremos que:

$$8 N_0 \delta (ky')^2 \sim 145 \quad (\text{E.1.17})$$

então:

$$1 + 8N_0\delta(ky')^2 \approx 8N_0\delta(ky')^2 \quad (\text{E.1.18})$$

usando a aproximação dada na eq.(E.1.18) na eq.(E.1.16):

$$N_0^2 k^2 - \left[(2m+1)\frac{N_0}{x_0} + (2n+1)\frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right] k + \left[\frac{2n+1}{2y'} \right]^2 - \left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 = 0 \quad (\text{E.1.19})$$

resolvendo esta equação de segundo grau em k , teremos:

$$\begin{aligned} 2N_0^2 k = \left[(2m+1)\frac{N_0}{x_0} + (2n+1)\frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right] + \left\{ \left[(2m+1)\frac{N_0}{x_0} + (2n+1)\frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right]^2 - \right. \\ \left. - 4N_0^2 \left[\left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 - \left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 \right] \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{E.1.20})$$

Para os valores: $q \approx 3260$, $x_0 \approx 17\mu$, $L=380\mu$, teremos:

$$\left[(2m+1)\frac{N_0}{x_0} + (2n+1)\frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right]^2 \sim 5.87 \quad m=n=5 \quad (\text{E.1.21})$$

$$e \quad -4 N_0^2 \left[\left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 - \left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 \right] \quad \overbrace{m=n=5} \quad 3.76 \cdot 10^4 \quad (E.1.22)$$

portanto, das eqs. (E.1.21) e (E.1.22) notamos que:

$$4N_0^2 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right] >> \left[(2m+1) \frac{N_0}{x_0} + (2n+1) \frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right]^2 \quad (E.1.23)$$

então, usando a aproximação da eq. (E.1.23):

$$\left\{ \left[(2m+1) \frac{N_0}{x_0} + (2n+1) \frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right]^2 + 4N_0^2 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right] \right\}^{1/2} \approx$$

$$2N_0 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} \left\{ 1 + \frac{\left[(2m+1) \frac{N_0}{x_0} + (2n+1) \frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right]^2}{8N_0^2 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]} \right\} \quad (E.1.24)$$

Porém, levando em conta de novo a aproximação dada na eq. (E.1.23), a eq. (E.1.24) vai ficar:

$$\left\{ \left[(2m+1) \frac{N_0}{x_0} + (2n+1) \frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right]^2 + 4N_0^2 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right] \right\}^{1/2} \approx$$

$$2N_0 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (E.1.25)$$

Substituindo-se esta aproximação na eq. (E.1.20), temos:

$$2N_0^2 k = \left[(2m+1) \frac{N_0}{x_0} + (2n+1) \frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right] + 2N_0 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (E.1.26)$$

mas, já que $k=2\pi/\lambda$, a eq. (E.1.26) transforma-se em:

$$\frac{4\pi N_0^2}{\lambda} = \left[(2m+1) \frac{N_0}{x_0} + (2n+1) \frac{\sqrt{2N_0\delta}}{y'} \right] + 2N_0 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (E.1.27)$$

já que $\lambda=c/v$, a eq. (E.1.27) vai nos dar as frequências dos modos guiados na cavidade, quantizadas pelos numeros m, n e q . Isto corresponde à equação (10.1.8).

Diferenciando-se esta equação e lembrando que N_0 , m , n e q são variáveis com λ , teremos:

$$\begin{aligned} \frac{8\pi N_0}{\lambda} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \delta \lambda - 4\pi N_0^2 \frac{\delta \lambda}{\lambda^2} &= \frac{2N_0}{x_0} \delta m + \frac{(2m+1)}{x_0} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \delta \lambda + 2 \frac{\sqrt{2N_0 \delta}}{y'} \delta n + \\ + (2n+1) \frac{\sqrt{2\delta/N_0}}{y'} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \delta \lambda + 2 \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \delta \lambda &\left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} + \\ + \frac{N_0}{\left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2}} &\left\{ \frac{2\pi^2}{L^2} q \delta q - \frac{2n+1}{y'^2} \delta n \right\} \quad (E.1.28) \end{aligned}$$

obtendo-se portanto:

$$\begin{aligned} -\frac{4\pi N_0^2}{\lambda^2} \left\{ 1 - \frac{2\lambda}{N_0} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} + \frac{(2m+1)\lambda^2}{4\pi x_0 N_0^2} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} + (2n+1) \sqrt{\frac{\delta}{2N_0}} \frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2 y'} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} + \right. \\ \left. + \frac{\lambda^2}{2\pi N_0^2} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} \right\} \delta \lambda &= \frac{2N_0}{x_0} \delta m + \left\{ \frac{2\sqrt{2N_0 \delta}}{y'} - \right. \\ \left. - \frac{(2n+1) N_0}{y'^2 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2}} \right\} \delta n + \frac{2\pi^2 N_0 q}{L^2 \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2}} \delta q \quad (E.1.29) \end{aligned}$$

Vamos definir um índice de refração efetivo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} N_e \equiv N_0 \left\{ 1 - \left[\frac{2\lambda}{N_0} - \frac{\lambda^2}{4\pi x_0 N_0^2} (2m+1) - \frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2 y'} \sqrt{\frac{\delta}{2N_0}} (2n+1) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\lambda^2}{2\pi N_0^2} \left[\left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'} \right)^2 \right]^{1/2} \right] \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \right\} \quad (E.1.30) \end{aligned}$$

Para os valores: $q=3260$, $L=380\mu$, $y'=10\mu$ e $n=5$ teremos que:

$$\left(\frac{q\pi}{L}\right)^2 \sim 7.26 \cdot 10^2 \quad ; \quad \left(\frac{2n+1}{2y'}\right)^2 \sim 0.303 \quad (E.1.31)$$

$$\text{assim então: } \left[\left(\frac{q\pi}{L}\right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'}\right)^2 \right]^{1/2} \approx \frac{q\pi}{L} \quad (E.1.32)$$

Então, usando a aproximação dada na eq.(E.1.32), junto com a definição de N_e , a eq.(E.1.29) ficará:

$$\begin{aligned} \delta\lambda = & - \frac{\lambda^2}{2\pi x_0 N_e} \delta m - \frac{\lambda^2}{2\pi N_e y'} \left[\sqrt{\frac{2\delta}{N_0}} - \frac{L}{2\pi q y'} (2n+1) \right] \delta n - \\ & - \frac{\lambda^2}{2LN_e} \delta q \end{aligned} \quad (E.1.33)$$

que nos dá as separações em comprimento de onda dos modos híbridos guiados, tanto longitudinais, assim como dos transversais perpendiculares e paralelos ao plano da junção.

E.2 REDUÇÃO DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO EFETIVO.

Vamos considerar o índice de refração efetivo N_e definido na eq.(E.1.30). Usando os valores já dados para λ , N_0 , x_0 , y' , δ , q e L obtemos que:

$$\frac{2\lambda}{N_0} \sim 0.494 \quad ; \quad \frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2 x_0} (2m+1) \underset{m=5}{\sim} 3.15 \cdot 10^{-3}$$

$$\left(\frac{\lambda^2}{4\pi N_0^2 y'}\right) \left(\frac{\delta}{2N_0}\right)^{1/2} (2n+1) \underset{n=5}{\sim} 6.31 \cdot 10^{-5}$$

$$\left[\left(\frac{q\pi}{L}\right)^2 - \left(\frac{2n+1}{2y'}\right)^2 \right]^{1/2} \left(\frac{\lambda^2}{2\pi N_0^2}\right) \underset{n=5}{\sim} 0.262$$

então, podemos desprezar o segundo e terceiro termos, quando comparados ao primeiro e quarto. Vamos também usar a aproximação dada na eq.(E.1.32), com o que a expressão para N_e tomará a forma:

$$N_e \approx N_0 \left[1 - \frac{\lambda}{N_0} \left(2 - \frac{q\lambda}{2N_0 L} \right) \left(\frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \right) \right] \quad (E.2.1)$$

Porém, nós sabemos que, da condição de se ter um número inteiro de meios comprimentos de onda na cavidade do laser, o valor de q satisfaz à condição:

$$q \left(\frac{\lambda}{2N_0} \right) = L \quad (E.2.2)$$

usando então a eq.(E.2.2) na eq.(E.2.1), chegamos a:

$$N_e \approx N_0 \left[1 - \frac{\lambda}{N_0} \frac{\partial N_0}{\partial \lambda} \right] \quad (E.2.3)$$

que é a expressão obtida para o índice de refração efetivo, quando se usa aproximação parabólica⁽⁴⁷⁾, ou apenas o fato de que N_e é função de λ .

R E F E R Ê N C I A S .

- (1) F.D.Nunes, N.B.Patel and J.E.Ripper, " A Theory on Long Time Delays and Internal Q switching in GaAs Junction Lasers ", IEEE J. Quantum Electron. QE-13, 675 (1977).
- (2) J.M.C. Vilela, F.D.Nunes and N.B. Patel, "Transient effects in Single Heterostructure GaAs Lasers", J. Quantum Electron. QE-15, 801 (1979).
- (3) Thomas L. Paoli, "Below Threshold Waveguiding in a stripe-geometry Junction Laser ", J. Appl. Phys. 48, 1361 (1977).
- (4) J. Buus, " Detailed Field Model for DH Stripe Lasers" , Optical and Quantum Electronics 10, 459 (1978).
- (5) G.H.B. Thompson, " A Theory for Filamentation in Semiconductor Lasers including the Dependence of Dielectric Constant on Injected Carrier Density ", Opto-electronics 4, 257 (1972).
- (6) C.H. Gooch, " Gallium Arsenide Lasers ", Wiley, London, 1969.
- (7) William S.C. Chang, " Principles of Quantum Electronics ", Addison-Wesley, Massachusetts, 1969.
- (8) J.I. Pankove, " Tunneling-Assisted Photon Emission in Gallium Arsenide pn Junctions ", Phys. Rev. Lett. 9, 283 (1962).
- (9) R.J. Archer, R.C.C. Leite, A. Yariv, S.P.S. Porto and J.M. Whelan, " Electron-Hole and Electron-Impurity Band Tunneling in GaAs Luminescent Junctions ", Phys. Rev. Lett. 10, 483 (1963).
- (10) I. Kudman and T. Seidel, " Absorption Edge in Degenerate p-Type GaAs ", J. Appl. Phys. 33, 771 (1962).

- (11) Dale E. Hill, " Infrared Transmission and Fluorescence of Doped Gallium Arsenide ", Phys. Rev. 133, A866 (1964).
- (12) G. Lucovsky, " Absorption Edge Measurements in Compensated GaAs ", Appl. Phys. Lett. 5, 37 (1964).
- (13) J.I. Pankove, " Absorption Edge of Impure Gallium Arsenide ", Phys. Rev. 140, A2059 (1965).
- (14) M.I. Nathan, G. Burns, S.E. Blum and J.C. Marinace, " Electro-luminescence and Photoluminescence of GaAs at 77 °K ", Phys. Rev. 132, 1482 (1963).
- (15) G. Burns and M.I. Nathan, " P-N Junction Lasers ", Proc. IEEE 52, 770 (1964).
- (16) J.C. Sarace, R.H. Kaiser, J.M. Whelan and R.C.C. Leite, " Injection Luminescence in GaAs by Direct Hole-Electron Recombination", Phys. Rev. 137, A623 (1965).
- (17) T.N. Morgan, M. Pilkuhn and H. Rupprecht, " Effect of Deep Levels on the Optical and Electrical Properties of Copper-Doped GaAs p-n Junctions ", Phys. Rev. 138, A1551 (1965).
- (18) P.A. Wolff, " Theory of the Band Structure of Very Degenerate Semiconductors ", Phys. Rev. 126, 405 (1962).
- (19) C.J. Hwang, " Properties of Spontaneous and Stimulated Emission in GaAs Junction Lasers. I. Densities of States in the Active Region ", Phys. Rev. B 2, 4117 (1970).
- (20) V.L. Bonch-Bruевич and A.G. Mironov, " Influence of an Impurity on the Energy Spectrum of Current Carriers ", Soviet Phys. - Solid State 3, 2194 (1962).

- (21) Evan O. Kane, " Thomas-Fermi Approach to Impure Semiconductor Band Structure ", Phys. Rev. 131, 79 (1963).
- (22) B.I. Halperin and Melvin Lax, " Impurity-Band Tails in the High Density Limit. I. Minimum Counting Methods ", Phys. Rev. 148, 722 (1966).
- (23) T.N. Morgan, " Broadening of Impurity Bands in Heavily Doped Semiconductors ", Phys. Rev. 139, A343 (1965).
- (24) J.C. Slater, " Electrons in Perturbed Periodic Lattices ", Phys. Rev. 76, 1592 (1949).
- (25) Gordon Lasher and Frank Stern, " Spontaneous and Stimulated Recombination Radiation in Semiconductors ", Phys. Rev. 133 A553 (1964).
- (26) Frank Stern, " Band-Tail Model for Optical Absorption and for Mobility Edge in Amorphous Silicon ", Phys. Rev.B 3, 2636 (1971).
- (27) H.C. Casey, Jr. and Frank Stern, " Concentration-Dependent Absorption and Spontaneous Emission of Heavily Doped GaAs ", J. Appl. Phys. 47, 631 (1976).
- (28) Frank Stern, " Dispersion of the Index of Refraction Near the Absorption Edge of Semiconductors ", Phys. Rev. 133, A1653 (1964)
- (29) H.R. Philipp and H. Ehrenreich, " Optical Properties of Semiconductors", Phys. Rev. 129, 1550 (1963).
- (30) C.J. Hwang, " Optical Properties of n-Type GaAs. I. Determination of Hole Diffusion Length from Optical Absorption and Photoluminescence Measurements ", J. Appl. Phys. 40, 3731 (1969).

- (31) W. Cochran, S.J. Fray, F.A. Johnson, J.E. Quarrington and N. Williams, " Lattice Absorption in Gallium Arsenide ", J. Appl. Phys., Suppl. to vol. 32, 2102 (1961).
- (32) Jacques I. Pankove, " Optical Processes in Semiconductors ", Prentice-Hall, New Jersey, 1971.
- (33) W.G. Spitzer and J.M. Whelan, " Infrared Absorption and Electron Effective Mass in n-Type Gallium Arsenide ", Phys. Rev. 114, 59 (1959).
- (34) R. Braunstein and E.O. Kane, " The Valence Band Structure of the III-V Compounds ", J. Phys. Chem. Solids 23, 1423 (1962).
- (35) Y.P. Varshni, " Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors ", Physica 34, 149 (1967).
- (36) M.B. Panish and H.C. Casey, Jr., " Temperature Dependence of the Energy Gap in GaAs and GaP ", J. Appl. Phys. 40, 163 (1969).
- (37) H.C. Casey, Jr. and R.Z. Bachrach, " Electroluminescent shifting-peak Spectra in GaAs with Uniform Excitation ", J. Appl. Phys. 44, 2795 (1973).
- (38) H.C. Casey, Jr. and M.B. Panish, " Heterostructure Lasers ", Academic Press, New York, 1978.
- (39) H.C. Casey, Jr., D.D. Sell and K.W. Wecht, " Concentration Dependence of the Absorption Coefficient for n-and p-type GaAs between 1.3 and 1.6 eV ", J. Appl. Phys. 46, 250 (1975).
- (40) C.J. Hwang, " Calculation of Fermi Energy and Bandtail Parameters in Heavily Doped and Degenerate n-Type GaAs ", J. Appl. Phys. 41, 2668 (1970).

- (41) M.G.A. Bernard and G. Duraffourg, " Laser Conditions in Semiconductors ", Phys. Stat. Sol. 1, 699 (1961).
- (42) F. Ermanis and K. Wolfstirn, " Hall Effect and Resistivity of Zn-doped GaAs ", J. Appl. Phys. 37, 1963 (1966).
- (43) Earnest J. Johnson, " Absorption Near the Fundamental Edge ", Semiconductors and Semimetals, vol. 3, Academic Press, New York, 1967.
- (44) D.D. Sell, H.C. Casey, Jr., and K.W. Wecht, " Concentration Dependence of the Refractive Index for n-and p-type GaAs between 1.2 and 1.8 eV ", J. Appl. Phys. 45, 2650 (1974).
- (45) S. Somekh and A. Yariv, " Components for Integrated Optics ", California Institute of Technology, Pasadena, 1973.
- (46) F.D. Nunes, N.B. Patel, J.G. Mendoza-Alvarez and J.E. Ripper, " Refractive-Index Profile and Resonant Modes in GaAs Lasers ", J. Appl. Phys. 50, 3852 (1979).
- (47) Thomas H. Zachos and José E. Ripper, " Resonant Modes of GaAs Junction Lasers ", IEEE J. Quantum Electron. QE-5, 29 (1969).
- (48) R.N. Hall, G.E. Fenner, J.D. Kingsley, T.J. Soltys and R.O. Carlson, " Coherent Light Emission from GaAs Junctions ", Phys. Rev. Lett. 9, 366 (1962).
- (49) G. Burns, R.A. Laff, S.E. Blum, F.H. Dill, Jr. and M.I. Nathan, " Directionality Effects of GaAs Light-Emitting diodes ", IBM J. Research and Develop. 7, 62 (1963).
- (50) G.E. Fenner and J.D. Kingsley, " Spatial Distribution of Radiation from GaAs Lasers ", J. Appl. Phys. 34, 3204 (1963).

- (51) J.C. Dymont, " Hermite-Gaussian Mode Patterns in GaAs Junction Lasers ", Appl. Phys. Lett. 10, 84 (1967).
- (52) J.C. Dymont and T.H. Zachos, " Injection Laser Far Field Patterns with Gaussian Profiles in the Junction Plane ", J. Appl. Phys. 39, 2923 (1968).
- (53) F.D. Nunes, J.E. Ripper and N.B. Patel, Sixth International Semiconductor Laser Conference, Atlanta, 1974.
- (54) D.D. Cook and F.R. Nash, " Gain-Induced Guiding and Astigmatic Output of GaAs Lasers ", J. Appl. Phys. 46, 1660 (1975).
- (55) A.K. Jonscher and M.H. Boyle, Symposium on GaAs (Institute of Physics and Physical Society, London, 1966), p.78.
- (56) F.R. Nash, " Mode Guidance Parallel to the Junction Plane of Double-Heterostructure GaAs Lasers ", J. Appl. Phys. 44, 4696 (1973)
- (57) Resultados Preliminares dos cálculos de T.J. Serra, F.D. Nunes e N.B. Patel.
- (58) Landau and Lifchitz, " Mécanique Quantique ", Editions Mir, Moscow, 1966.
- (59) Milton Abramovitz and Irene A. Segun, " Handbook of Mathematical Functions ", Dover, New York, 1968.
- (60) Hiroo Yonezu, Isamu Sakuma, Kohroh Kobayashi, Taibun Kamejima, Masayasu Ueno and Yasuo Nannichi, " A GaAs-Al_xGa_{1-x}As Double Heterostructure Planar Stripe Laser ", Jap. J. Appl. Phys. 12, 1585 (1973).

- (61) Thomas L. Paoli, " Waveguiding in a Stripe-Geometry Junction Laser ", IEEE J. Quantum Electron. QE-13, 662 (1977).
- (62) Navin B. Patel, F.D. Nunes, J.M. Vilela, " Theory of Spontaneous Emission Reduction at Lasing with Long Delays in GaAs Junction Lasers ", Solid State Commun. 30, 51 (1979).
- (63) F.D. Nunes, " Uma Teoria para Atrasos Longos, Q-switching e Fenômenos Correlatos ", Tese de Doutorado, UNICAMP, 1976.
- (64) Perfil de portadores injetados obtido dentro do trabalho de Tese de Doutorado de T.J. Serra - UNICAMP.
- (65) L.D. Landau and E.M. Lifchitz, " Electrodynamics of continuous media ", Pergamon Press, 1960.
- (66) T.S. Moss, " Optical Properties of Semicónductors ", London, Butterworth, 1961.
- (67) W.W. Anderson, " Mode Confinement and Gain in Junction Lasers ", IEEE J. Quantum Electron. QE-1, 228 (1965).