

"INFLUÊNCIA DE TENSÕES PRESENTES NA
REGIÃO ATIVA DE LASERS SEMICONDUTORES
DE GaAs HOMO E DUPLA-HETEROESTRUTURA"

Autor: Francisco Carlos Prince

Orientador: Navin B. Patel

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA
BIBLIOTECA

Tese apresentada ao
Instituto de Física
Gleb Wataghin para a
obtenção do Título
de Mestre em Ciências

AGRADECIMENTOS

A N. B. Patel, pela orientação

A C. J. Hwang pelos lasers de dupla-heteroestrutura

Aos amigos Fred, Bull, Xinha, Beny e Xaxu.

A Fapesp e Telebrás pelo apoio financeiro.

A Mariza pela datilografia.

A Tere, pelo incentivo.

A todos enfim que tornaram possível este trabalho.

INTRODUÇÃO

Na fase que estamos do desenvolvimento dos lasers semicondutores, torna-se viável pensar em aplicação tecnológica. A longa vida ativa do dispositivo é exigida nestes casos.

Podemos ligar a degradação do dispositivo a certas tensões que em certos casos são introduzidas na região ativa de um laser. (Ref.10).

Neste trabalho mostramos que num método não destrutivo, que é a medida ótica das propriedades radiativas tais como: espectros da emissão espontânea e corrente limiar, é possível detectar e estimar as tensões introduzidas quando soldamos um laser / de homoestrutura, para deixa-lo pronto para operar continuamente. É construído com base na teoria de pressões em lasers, um modelo teórico plenamente consistente com os resultados experimentais / observados.

A possibilidade de aplicação deste método à medida da pressão interna introduzidas pelas camadas de (Ga,Al)As num laser dupla-heteroestrutura é discutida e considerada inviável, até que se resolva uma certa anomalia na emissão espontânea que é característica nestes dispositivos.

Índice

Capítulo I.....	1
-----------------	---

Laser semiconductor, princípios de operação.

- 1a) laser de homoestrutura
- 1b) laser de (Ga,Al)As dupla-heteroestrutura
- 1c) a necessidade da solda
- 1d) processo de solda

Capítulo II.....	13
------------------	----

Mudança nas propriedades radiativas dos lasers homoestrutura de GaAs, provocadas por tensões induzidas na região ativa pela solda.

- 2a) descrição da montagem experimental
- 2b) resultados experimentais
- 2c) modelo teórico

Capítulo III.....	39
-------------------	----

Propriedades radiativas dos lasers de GaAlAs dupla-heteroestrutura.

- 3a) pressão interna, anomalia TE TM.
- 3b) fatos que poderiam explicar a anomalia TE TM

Capítulo IV.....	49
------------------	----

Conclusão

Apendice 1	50
------------------	----

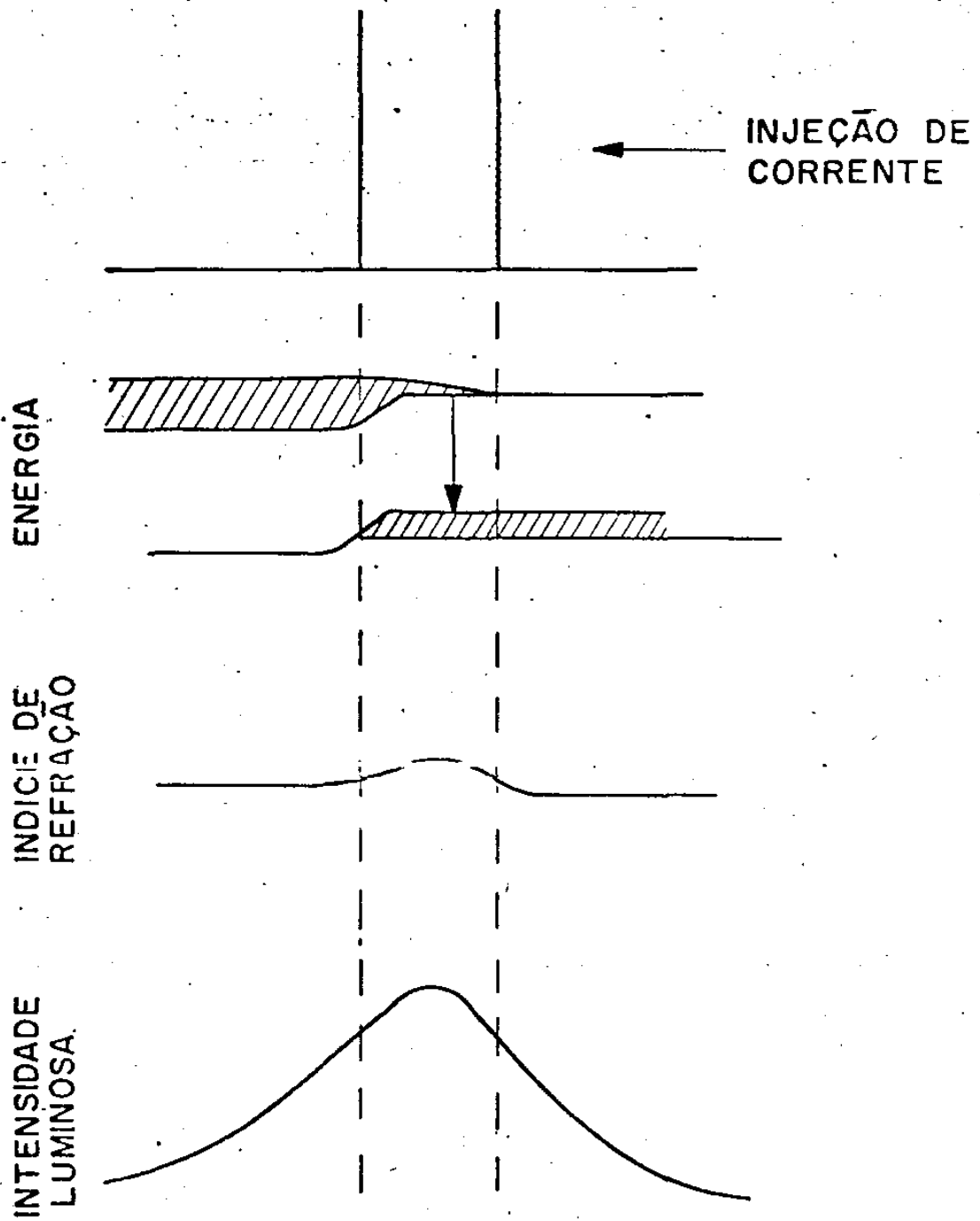
Referências	A-14
-------------------	------

CAPÍTULO 1.

Laser semiconductor, princípios gerais de operação.

1.a) Lasers de Homoestrutura.

Os primeiros lasers de injeção, foram fabricados em 1962 por Hall (1), Nathan (2), e Quist(3) e co-autores. Foram obtidos através da difusão de zinco em um substrato tipo n de Arseneto de Gálio(GaAs), formando uma junção p-n através da qual conseguiam recombinação radiativa por meio da injeção de eletrons na região de recombinação ou região ativa como é chamada mais frequentemente. A injeção de eletrons nos lasers de homoestrutura é muitas vezes maior que a de buracos, parte devido à mobilidade dos eletrons ser bem maior do que a dos buracos e parte devido à diferença da banda proibida efetiva. Na figura 1, na página seguinte esquematizamos a estrutura física de um laser homoestrutura polarizado no sentido direto, o diagrama de energia, o índice de refração, a distribuição de intensidade luminosa, num diagrama muito ilustrativo. O GaAs é um dos cristais cujo processo de recombinações radiativas é muito eficiente. Os eletrons injetados na região ativa rapidamente recombina-se emitindo fotons de energia próxima à faixa de energia proibida do semiconductor que é 1,4eV. A radiação estimulada ou laser, é obtida quando o ganho ou amplificação de luz ao atravessar o material superar todas as perdas sofridas nessa travessia. Bernard e Durafor (4) mostraram que a condição necessária para que isto aconteça é que a diferença dos quase-níveis da banda de condução e valência $F_c - F_v$ tenha valor maior ou igual ao valor da banda proibida do material. Praticamente, no laser de homoestrutura isto significa que devemos ter uma dopagem suficiente para que os níveis de Fermi estejam dentro das bandas de condução e valência. Nestas condições, ao injetarmos eletrons na banda de condução do lado p, satisfazemos a condição de Bernard-Durafor e criamos condições para termos ganho. Quando o ganho obtido for maior que as perdas totais, atingimos um limiar acima do qual teremos emissão estimulada ou laser. A corrente que estamos injetando cha



temos corrente limiar, abaixo da qual temos a emissão espontânea.

Na figura 2, abaixo, vemos um desenho ilustrativo de um laser homoestrutura simples, e na figura 3, o comportamento típico da intensidade luminosa emitida pelo dispositivo em função da corrente injetada. Nesse esquema, muito semelhante a um resultado experimental, podemos distinguir bem a corrente limiar.

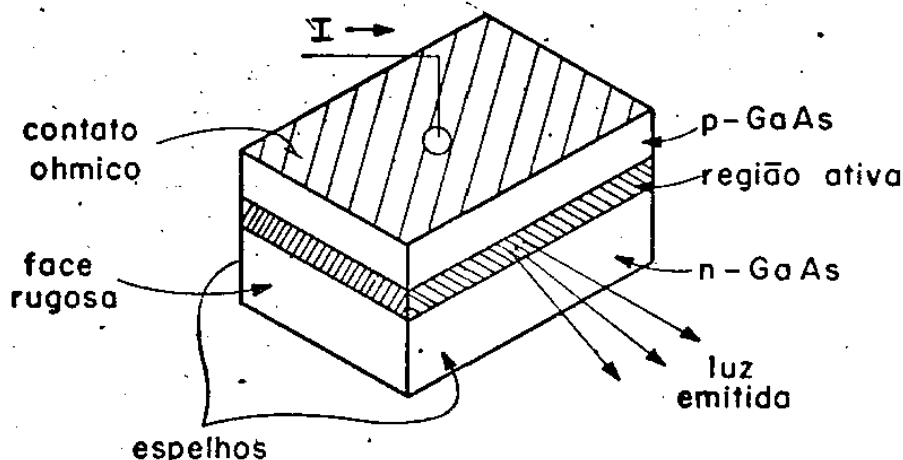


FIG. 2 - Desenho ilustrativo de um laser semicondutor homoestrutura de GaAs.

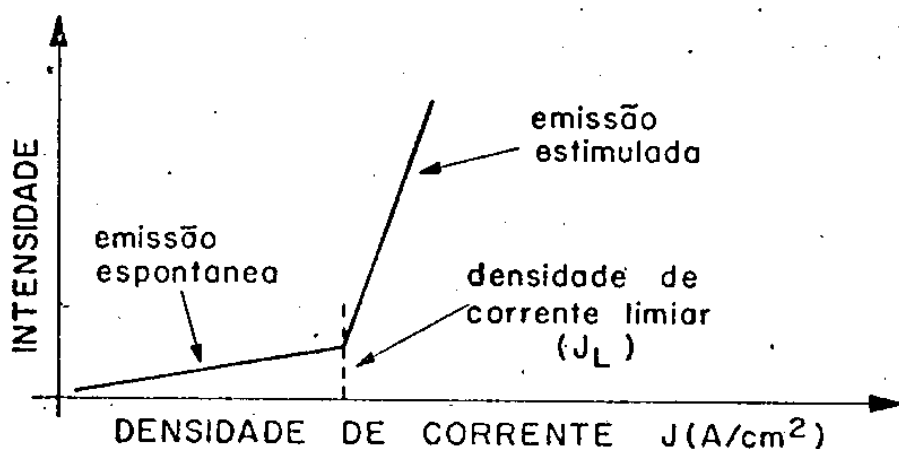


FIG. 3 - Comportamento típico da intensidade de luz emitida pelo dispositivo em função da densidade de corrente injetada.

Os valores típicos de corrente limiar dividido pela área do dispositivo usada para a temperatura ambiente, são da ordem de 100 KA/cm^2 . A temperatura de 77°K porém, este valor cai para a ordem de 1 KA/cm^2 .

A alta densidade de corrente limiar torna difícil a operação dos lasers de homojunção na temperatura ambiente, sendo estes operados normalmente em temperaturas de 77°K ou abaixo. Este grande aumento da corrente limiar de 1 KA/cm^2 a 77°K para 100 KA/cm^2 a 300°K é atribuída principalmente a dois fatores:

- 1) Baixo confinamento dos elétrons injetados na região ativa.
- 2) confinamento ótico pobre na região de ganho.

Além disso a medida que a temperatura aumenta, mais e mais elétrons são jogados a maiores energias, tornando a distribuição de elétrons mais achatada e longa como mostra a figura 4. Acima do quase nível temos um número de estados ocupados menor que o número de estados vazios, o que torna a probabilidade de absorção de um elétron da banda de valência forte para estas energias, efetivamente aumentando a absorção da região ativa, diminuindo o ganho proporcionado, o que é mais uma dificuldade imposta pela natureza do processo para que o dispositivo atinja a corrente limiar em temperaturas próximas à temperatura ambiente.

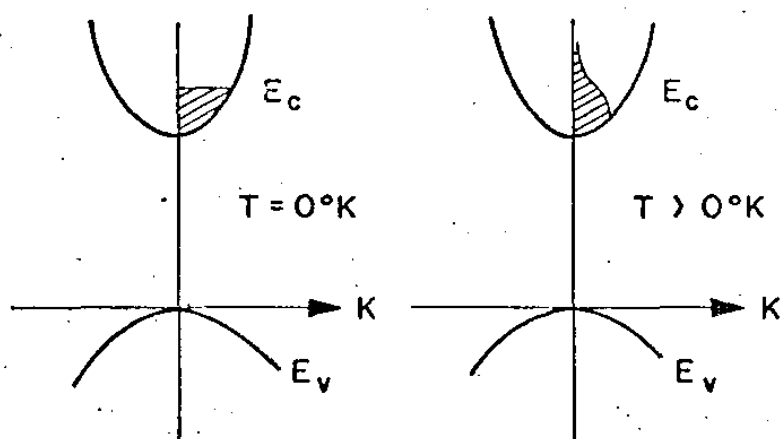


FIG.4 - Influência da temperatura na ocupação dos estados da banda de condução.

1.b) Lasers de GaAs - $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ Dupla-Heteroestrutura (DH).

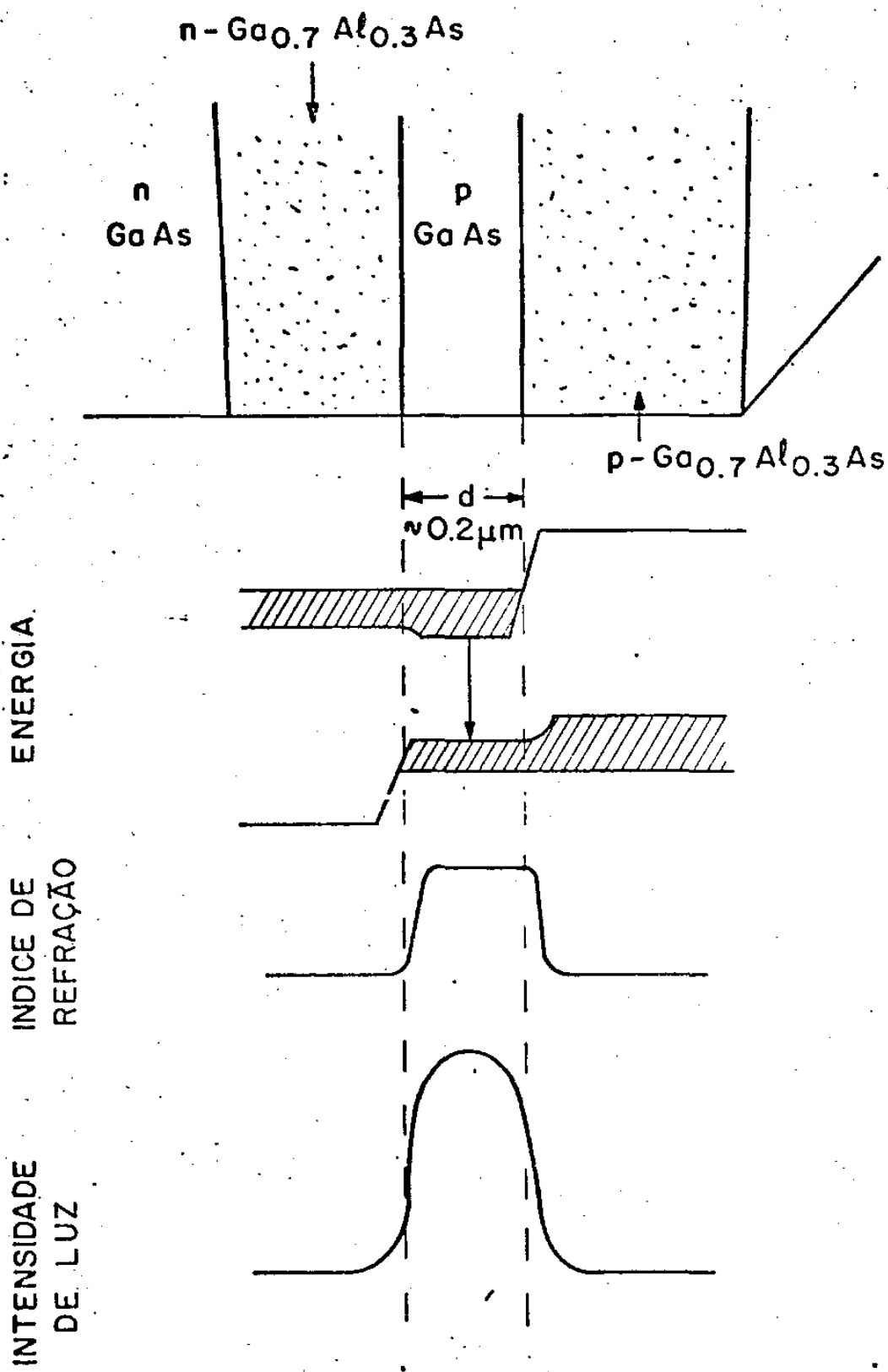
A idéia dos lasers dupla-heteroestrutura surgiram para eliminar os mecanismos de perdas 1 e 2 citados anteriormente. Já em 1963 foi sugerido por Kroemer (5), Kazarinov e Alfredov (6), que se introduzissemos camadas nos lados da região ativa, de banda de energia proibida pouco maior que a banda proibida da região ativa, poderíamos além de aumentarmos o confinamento ótico - aumentarmos eficientemente, o confinamento dos elétrons injetados, na região ativa. Reduziríamos assim as perdas em ordem de grandeza, e possibilitando a operação destes dispositivos como lasers operando na temperatura ambiente.

Em 1967 Ruprecht e co-autores (7) conseguiram o crescimento epitaxial a partir da fase líquida de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ sobre GaAs. Devido a maior banda proibida e a quase coincidência dos parâmetros de rede o que permite o crescimento sem defeitos na interface a liga GaAlAs foi escolhida com sucesso para se fazer as camadas confinadoras nos lados da região ativa do semiconductor. Na figura 5 fazemos um esquema semelhante ao feito anteriormente para o caso do laser de homoeestrutura (fig.1), agora porém, para o laser dupla-heteroestrutura.

A ordem da densidade de corrente limiar para um laser dupla-heteroestrutura é em torno de 1 KA/cm^2 na temperatura ambiente.

Antes de surgir o laser duplaheteroestrutura, devido às dificuldade de fabricação houve o laser heteroestrutura simples constituído apenas de uma barreira confinadora. Para este laser o confinamento dos elétrons era bom, porém, o confinamento ótico continuava pobre, tendo ainda este laser, alta corrente limiar para a temperatura ambiente.

A física básica, bem como os processos que ocorrem, são comum nos três lasers discutidos. Assim a teoria que aplicamos para um, levando-se em considerações restrições para cada dispositivo, podemos aplicar a qualquer um deles.



1.c) A necessidade da solda para a operação em regime contínuo do laser

Apesar da grande eficiência das recombinações radiativas do GaAs, quando tentamos operar um laser semicondutor de GaAs em regime contínuo geramos na região ativa uma grande quantidade de calor. O aumento de temperatura da região ativa por ampère injetado é da ordem de 20 - 30°K (8). Como a corrente limiar depende fortemente da temperatura como já discutimos, não conseguimos nem operar continuamente o laser dupla-heteroestrutura, que depende mais suavemente da temperatura (fig.6), se não fazemos este calor gerado escoar / rapidamente da região ativa do dispositivo. Essa é basicamente a causa que torna necessária e imprescindível a soldagem do laser.

A dependência da corrente limiar para lasers de dupla-hetero e homoes - trutura está mostrada na figura abaixo. A dependência é bem mais suave para o laser de dupla-heteroestrutura porque o confinamento ótico e eletrônico não muda de maneira sensível com a temperatura, enquanto para o laser de homoes - trutura este fator é bastante ponderável.

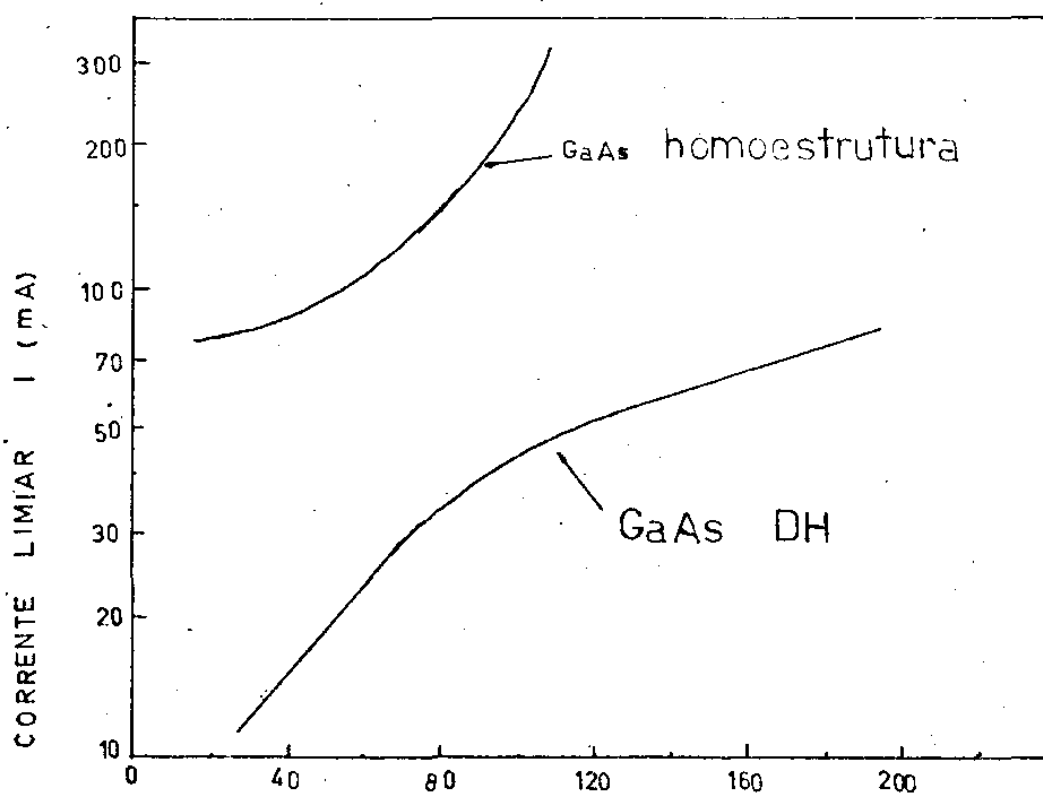


FIG. 6. COMPORTAMENTO TÍPICO DA CORRENTE LIMIAR COM A TEMPERATURA DOS LASERS DE GaAs.

* Agradecemos à M. Sacilotti por esta figura.

Para tornar o processo de solda eficiente, o laser deve ser fabricado com uma geometria bem especial, pois caso contrário mesmo com a solda - seria difícil operá-lo em regime contínuo .

A junção p-n no caso do laser homoestrutura obtida por difusão, ou no caso do laser dupla-heteroestrutura obtida por crescimento epitaxial, deve - ser o mais próxima possível da superfície a ser soldada, visto que o cristal, não é um bom condutor de calor . Assim , para lasers que queremos operar con - tinuamente, a região ativa deve estar apenas de 2 a 3 μm abaixo da super - fície externa , a qual após os respectivos contatos ôhmicos soldaremos sobre um bloco de maior massa e bom condutor de calor.

O mais comum é termos a junção bem próxima ao lado p, o que é obtido com uma difusão bem controlada, ou por um crescimento bem feito. Atualmente o problema do crescimento já é bem controlado , sendo obtido lasers de alta qualidade com regiões ativas muito finas, e próximas à superfície, o que per - mite a fácil operação destes dispositivos em regime contínuo. Na figura abai - xo um desenho bem realista de como é um laser dupla-heteroestrutura que - pode ser operado em regime contínuo. O contato é feito apenas na região cen - tral para que consigamos uma alta densidade de corrente com uma pequena cor - rente, devido a área ser bem pequena.

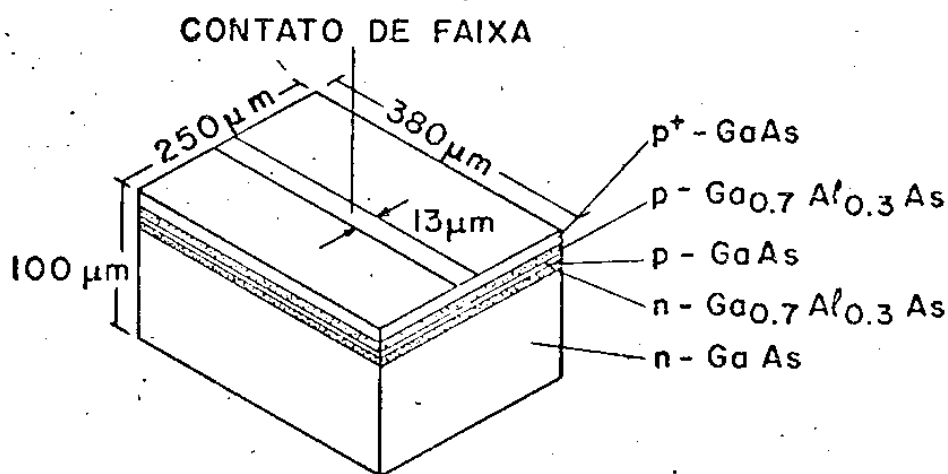


FIG. 7 - Laser dupla - heteroestrutura.

1.d) Processo experimental para a soldagem dos dispositivos.

Trataremos neste item da descrição de dois processos. Um da solda usando o estanho, o outro processo usando índio.

Solda com estanho

O processo de solda usando o estanho era usado geralmente na preparação de lasers homoestrutura. Estes eram soldados geralmente em blocos grandes de cobre eletrolítico, sobre os quais era depositado por um processo químico, uma fina camada de estanho. Essa fina camada tinha uma espessura entre 4 e 10 μm . Antes do processo de estanhagem os blocos eram limpos e lixados com lixas de água, e pouco antes de iniciar o processo eram rapidamente mergulhados numa solução de ácido nítrico 50%.

Depois de estanhados e secos, os blocos eram colocados na caixa de soldagem esquematizada na figura 8, na página seguinte. Colocávamos então um líquido que facilita a soldagem (flux), e colocamos o laser numa das extremidades do bloco e aquecíamos o conjunto até que, através do microscópio pudessemos ver o estanho fundir. Ai então parávamos de aquecer. Todo processo era feito numa atmosfera de nitrogênio, ou nitrogênio mais hidrogênio 9:1 (mistura verde).

O conjunto de soldar se compõem da caixa de solda, resistência aquecedora variac, amperímetro, um microscópio e gas inerte. (fig.8)

Dévido ao polimento não muito adequado da superfície do bloco de cobre, o escoamento térmico era muito irregular, criando na junção do dispositivo pontos mais quentes que outros, o que introduziam defeitos nos cristais diminuindo a vida ativa dos lasers. Lasers soldados desta maneira viviam entre 20 a 30 horas. Tornou-se necessário então um aperfeiçoamento no processo.

Solda com índio.

Com o intuito de melhorar o processo de solda tornando-o mais eficiente e melhorando grandemente a confiabilidade dos lasers usamos atualmente para a solda dos lasers dupla-heteroestrutura, um processo pouco mais sofisticado.

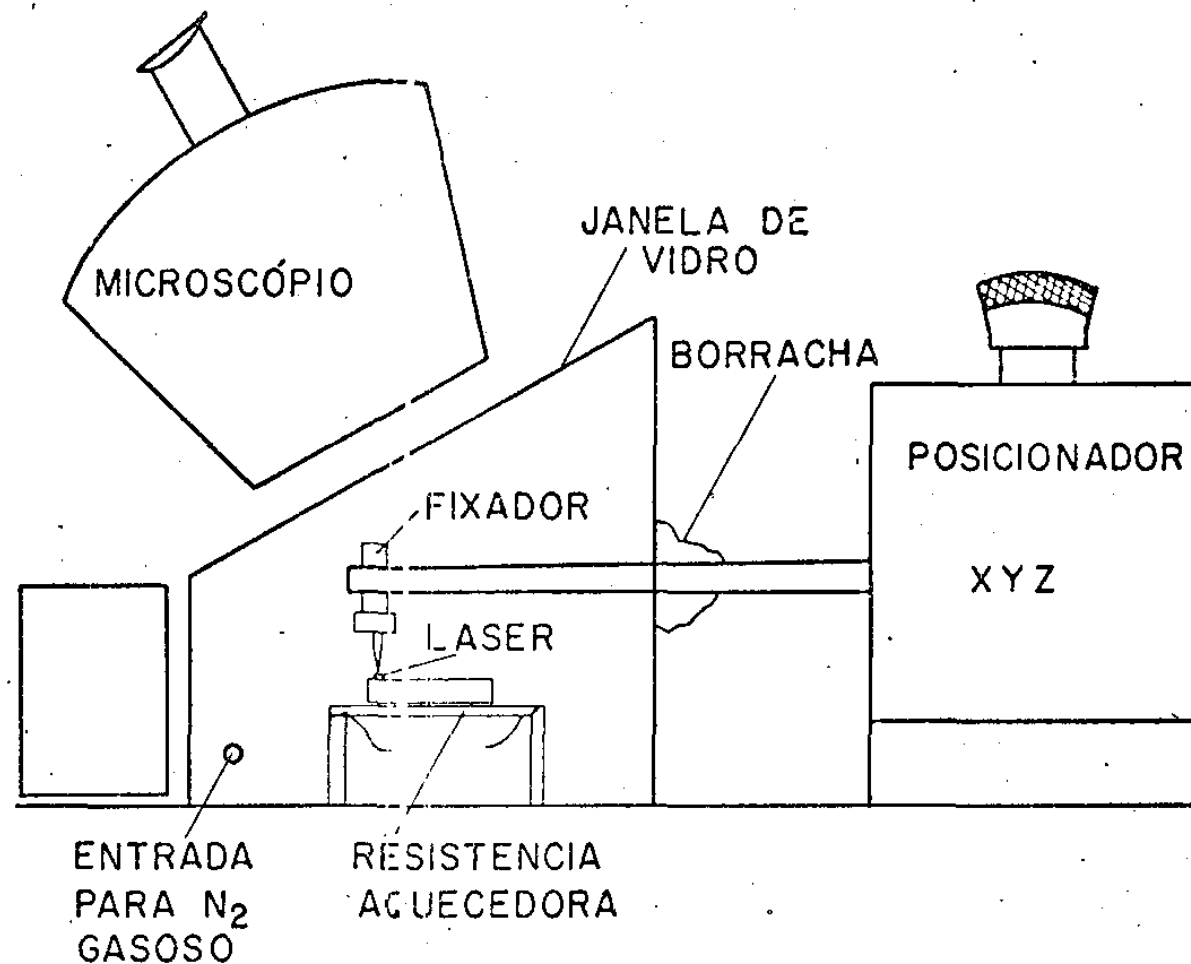


FIG.8 - Perfil esquemático da caixa de soldar.

Um pequeno bloco é soldado sobre o bloco suporte de cobre mecânico. Este pequeno bloco é de cobre livre de oxigênio, que possui alta condutividade térmica. Já em cima do bloco suporte através de um conjunto de limas e lixas apropriadas lhe é dada a forma de um paralelepípedo de dimensões $1 \times 0,4 \times 1$ mm.

Após este processo, todo o conjunto é passado por um banho de ouro para evitar oxidação. Depois passamos à fase de polimento.

Para obter bons resultados o polimento deve ser feito de maneira muito cuidadosa. Como a superfície que queremos polir é muito pequena ($1 \text{ mm} \times 400 \mu\text{m}$), facilmente podemos conseguir arredondamento das bordas, o que é prejudicial à solda. Para evitarmos isso fazemos duas coisas:

1- O bloco é colocado num bloco maior de cobre mecânico, para que tenhamos uma superfície de polimento maior.

2- O pano que usamos é sem "pelos", o que evita o processo de arredondamento das bordas.

O polimento geralmente é feito numa politriz automática com controle de pressão e velocidade, usando como abrasivo a pasta de diamante. Terminamos o polimento com pasta de diamante de $1 \mu\text{m}$.

Feito o polimento, temos que fazer a deposição sobre a superfície polida de uma camada de índio com a espessura exigida, que é entre 5 a $10 \mu\text{m}$. Essa deposição pode ser feita por evaporação ou por eletrodeposição. Preferimos a última, pela rapidez e uniformidade da camada depositada.

A deposição é feita usando-se uma solução de In-cyanin, adquirida comercialmente da companhia "Indim Corporation", dissolvida 50% em água destilada ou D.I., com uma corrente de 20 mA/cm^2 durante 1 minuto. Terminando este processo, os blocos estão preparados para a solda, e são guardados em metanol P.A., para se evitar oxidações na superfície, que poderá trazer problemas durante a operação em regime contínuo do laser, diminuindo a vida ativa do mesmo. O processo de solda é o mesmo descrito anteriormente para o estanho.

Comentários:

A escolha do material usado na solda é feita usando-se o critério,

de que, da temperatura do ponto de fusão ao ponto de operação, a diferença de tamanho percentual do material é menor.

Quando operamos à 77°K, o material preferido na solda deve ser o estanho, enquanto que quando operamos a 300°K o material preferido deve ser o índio. A justificação está clara no gráfico na fig. 9. O material que tiver menor área sob a curva $\Delta L/L$ versus T, do ponto de fusão, ao ponto de operação, é o que causará menos tensões no cristal após a solda do mesmo.

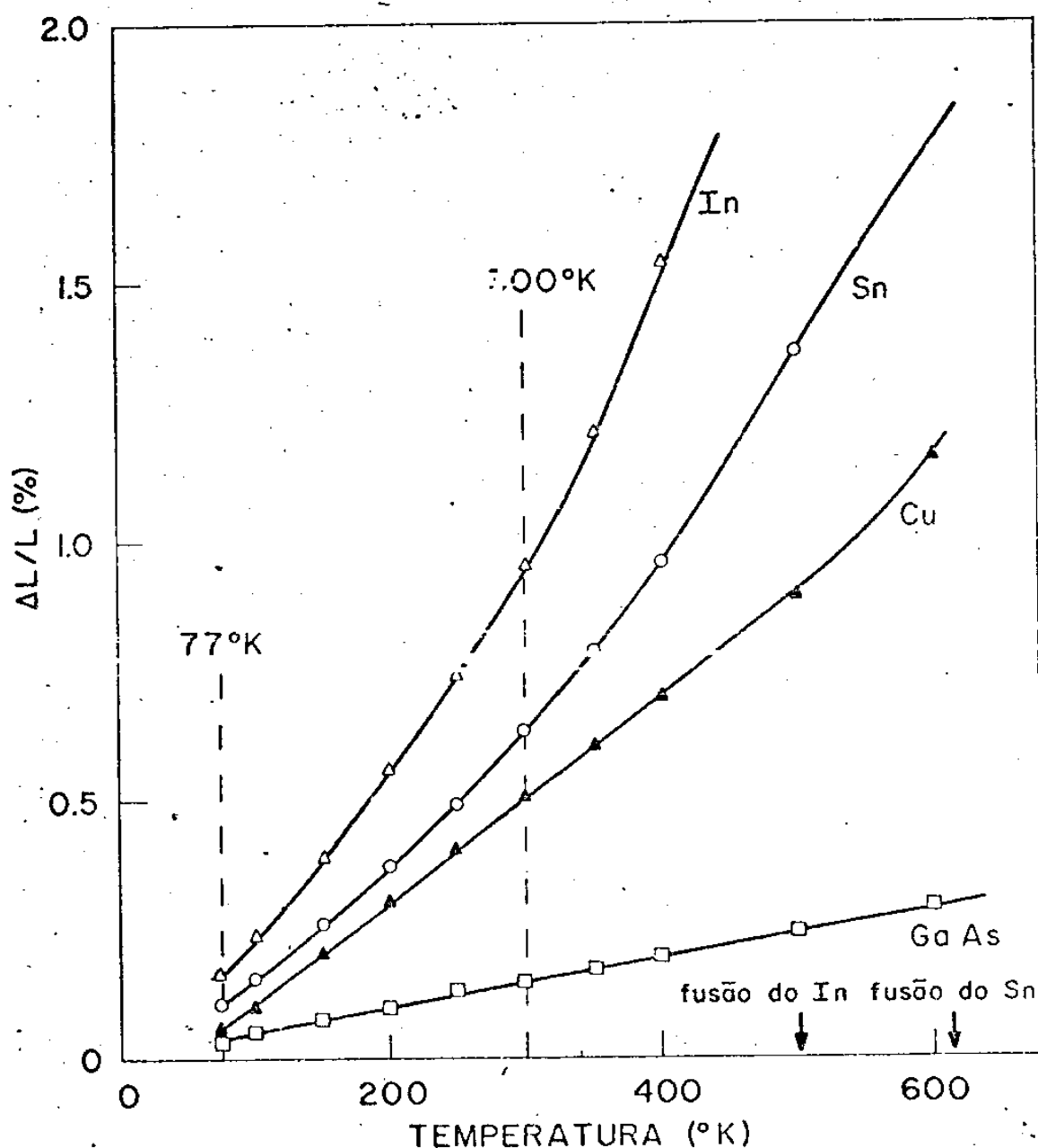


FIG. 9 Expansão dos materiais envolvidos na solda. (Handbook of Physics.)

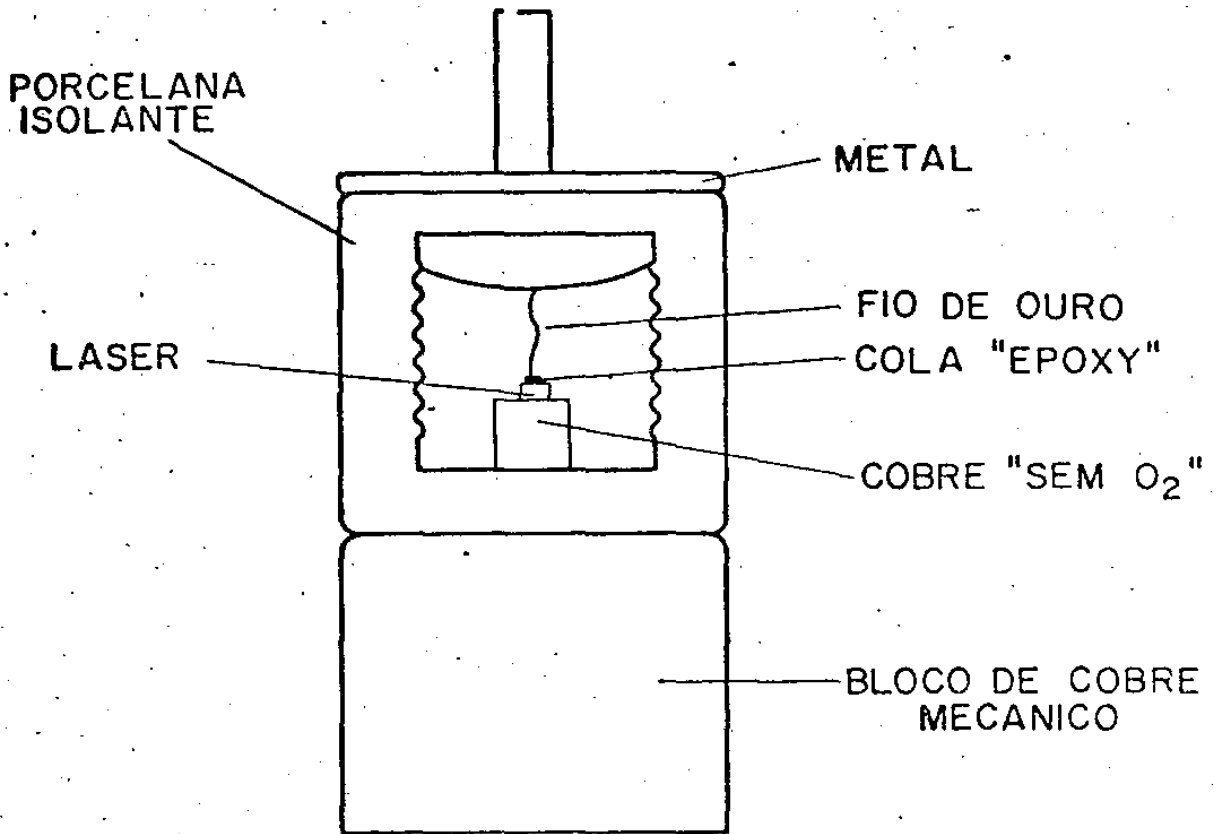


FIG. 10a - Conjunto de montagem do laser para a operação em regime contínuo.

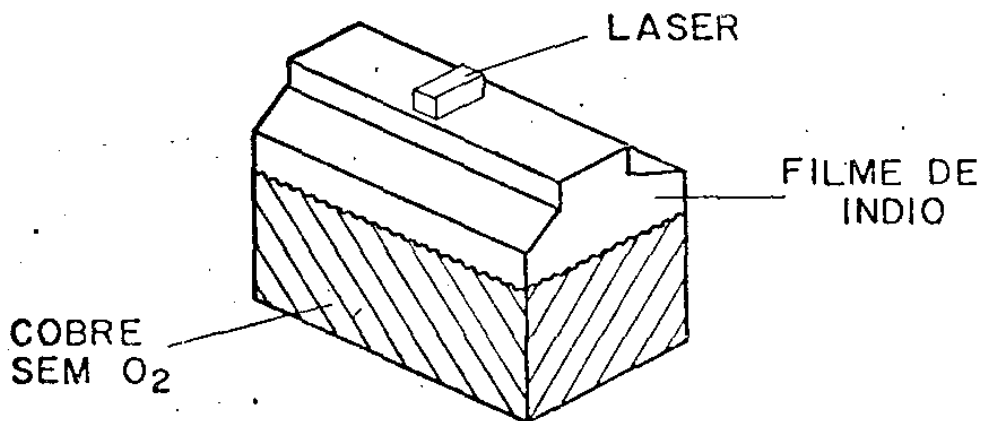


FIG. 10b - Bloco de cobre sem oxigenio em mais detalhe.

Capítulo II.

Mudança nas propriedades radiativas dos lasers de homoestrutura de GaAs, provocadas por tensões na região ativa induzidas pela solda.

Como já discutimos no capítulo anterior, a solda dos dispositivos é necessária visando a aplicação tecnológica do mesmo. Como já vimos também, no processo de solda, tanto no filme de estanho quanto no de Índio, são introduzidas tensões na região ativa do dispositivo, que lhe é prejudicial. Essas tensões provocam mudanças em suas propriedades radiativas tais como:

- 1) Mudança na corrente limiar.
- 2) Mudança da energia de pico da emissão espontânea TE e também TM.
- 3) Em certos casos mudança de polarização da emissão estimulada.
- 4) Mudança na energia da emissão estimulada.

Onde, com emissão espontânea TE e TM, queremos dizer emissão abaixo da corrente limiar de luz, cujo campo elétrico ou magnético respectivamente, é paralelo à junção do dispositivo. Iniciamos com uma breve descrição da montagem experimental usada, depois mostramos alguns resultados experimentais obtidos com as medidas realizadas. A seguir faremos uma discussão do efeito da tensão uniaxial aplicada ao dispositivo e depois um método com base no modelo proposto, para se estimar a ordem de grandeza da tensão introduzida no dispositivo pela solda.

f a). Descrição da montagem experimental.

Os lasers por nós usados na execução deste trabalho, foram fabricados por difusão de Zn num substrato tipo n de GaAs. A junção localiza-se cerca de 2 a 3 μm de profundidade paralela ao plano (100) ou (111) tendo contato de faixa feito por bombardeamento de prótons de 13 μm de largura e 380 μm de comprimento. A área total do dispositivo era de 625x380 μm . Um desenho que explica melhor pode ser visto na fig. II.

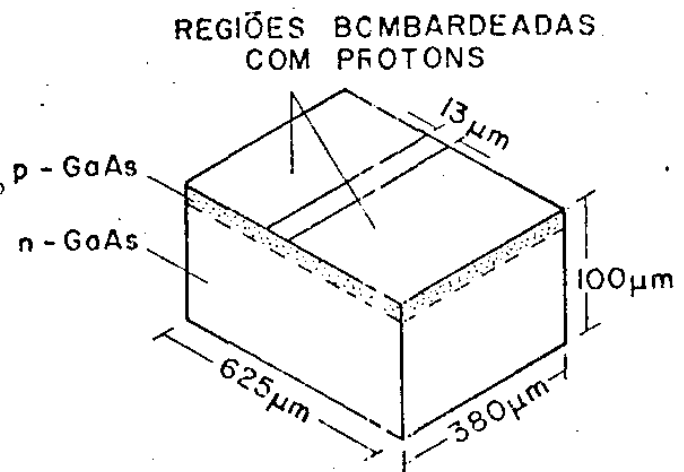


FIG. II - Laser de homoestrutura com contato de faixa.

Estes dispositivos eram montados num bloco suporte de cobre e operados com pulsos de 100 a 300 ns de duração, imersos no nitrogênio líquido. Antes e depois da solda as medidas eram feitas nas mesmas condições, para formarmos um quadro comparativo.

Antes e depois da solda cujo procedimento é descrito no capítulo I, Id., fazíamos as medidas de corrente limiar e polarização, espectros de emissão espontânea e estimulada.

Os aparelhos envolvidos nas medidas são os seguintes:

- 1) Gerador de Pulsos Hp modelo 214 A
- 2) Fotomultiplicadora RCA modelo C-31034 ou PIN-10-d
- 3) Espectrometro SPEX modelo 1402
- 4) Boxcar PAR modelo 160
- 5) Pré amplificador PAR modelo 115
- 6) Registrador Varian modelo F-100 ou Hp
- 7) Osciloscópio sampling Phillips modelo PM-3400 ou Tectronix modelo 7633
- 8) Osciloscópio Phillips modelo PM-3210
- 9) Eletrometro Keythey modelo 610-C

Os esquemas de montagem são mostrados a seguir nas figuras 12 e 13, nas páginas seguintes.

A seguir mostramos uma sequência de figuras, de 14 a 23, que são uma sucessão de resultados experimentais que discutiremos no próximo item.

As medidas foram tomadas obedecendo-se a seguinte sequência:

- 1) Montávamos o laser num bloco de cobre bem limpo e o prendíamos com uma lâmina de bronze fosforoso bem flexível. Depois o conjunto era preso num suporte maior e mergulhado no nitrogênio líquido.
- 2) Quando então tudo estabilizava ou seja o conjunto chegava a temperatura do nitrogênio líquido (77°K), notávamos isso facilmente pois o N_2 deixava de ferver, tomávamos a medida da corrente limiar e polarização, que eram registradas, ou posteriormente anotadas. Nos lasers de homoestrutura, a emissão espontânea não era polarizada, sendo as intensidades TE e TM quase sempre iguais. Na emissão estimulada porém o dispositivo sempre tinha um modo preferencial,

TE ou TM sendo esta escolha aleatória para os dispositivos homoeestrutura. A maioria dos lasers que trabalhamos preferiam o modo TM para a emissão estimulada antes da solda. Tudo isto era devidamente anotado para posterior comparação.

3) Após essas medidas, passávamos a montagem vista na fig. 13, para a medida dos espectros da emissão estimulada e espontanea.

Primeiro através de um eletrometro alinhavamos com ajuda de uma lente, o laser à fenda do espectrometro, de maneira que obtivéssemos o máximo sinal no eletrometro, fechando a fenda até a região de 10 a 50 μ m e colocando o laser na corrente limiar ou pouco acima (não mais que 5%), registravamos o espectros de emissão estimulada.

4) Após esta medida abríamos a fenda do espectrometro até a região de 300 a 500 μ m e colocando a corrente cerca de 20% abaixo da corrente limiar e registravamos os espectros da emissão espontanea TE e TM, o que escolhíamos através do polarizador.

Após estas medidas, o laser era retirado e soldado num outro bloco de cobre coberto com uma camada de estanho, exatamente igual ao que foram realizadas as medidas descritas. Novamente o contato através da lamina era feito e todas as medidas descritas eram tomadas nas mesmas condições, somente agora com o laser soldado.

Algumas destas medidas são mostradas a seguir na sequência de figuras de 14 a 23. Nestes resultados é importante notar que:

- 1) A corrente limiar do dispositivo após a solda é menor do que antes.
- 2) Os picos da emissão espontanea antes na mesma energia passam a ter energias diferentes sendo o pico TM o de maior energia.
- 3) Os dispositivos cuja emissão estimulada era antes da solda TM passam a ser TE após a solda. Os dispositivos TE ficam ainda com modos polarizados TE após a solda.
- 4) O pico da emissão estimulada muda-se para uma região de maior energia.

Esses resultados podem ser entendidos veremos em mais detalhes posteriormente, supondo que a tensão introduzida na região ativa é devido às diferenças de expansão térmica dos materiais envolvidos no processo de soldagem e em termos teóricos pode ser entendidas como uma pressão hidrostática mais uma tensão uniaxial perpendicular à junção do dispositivo.

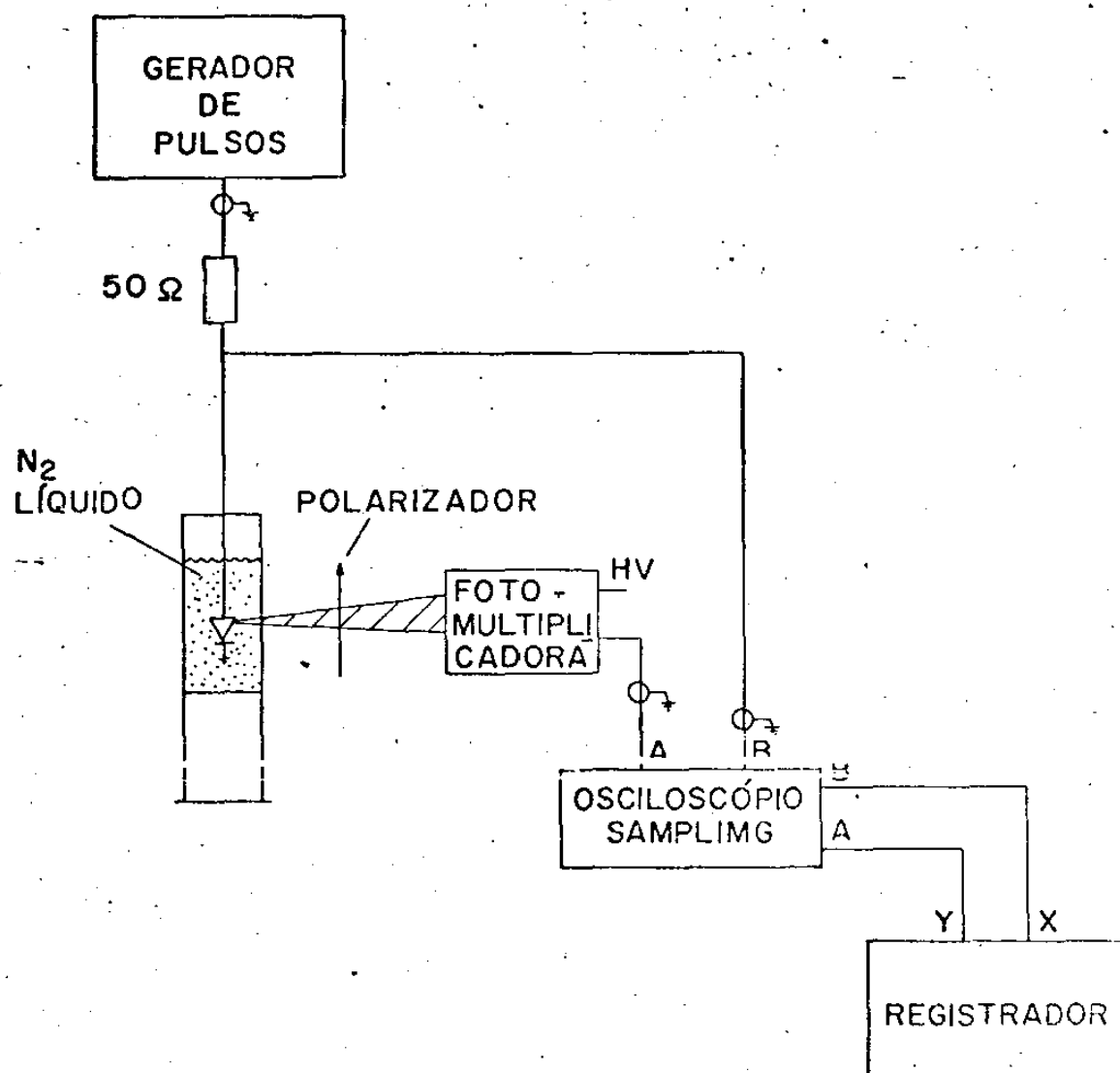


FIG.12 - Montagem para a determinação da corrente limiar e polarização do laser.

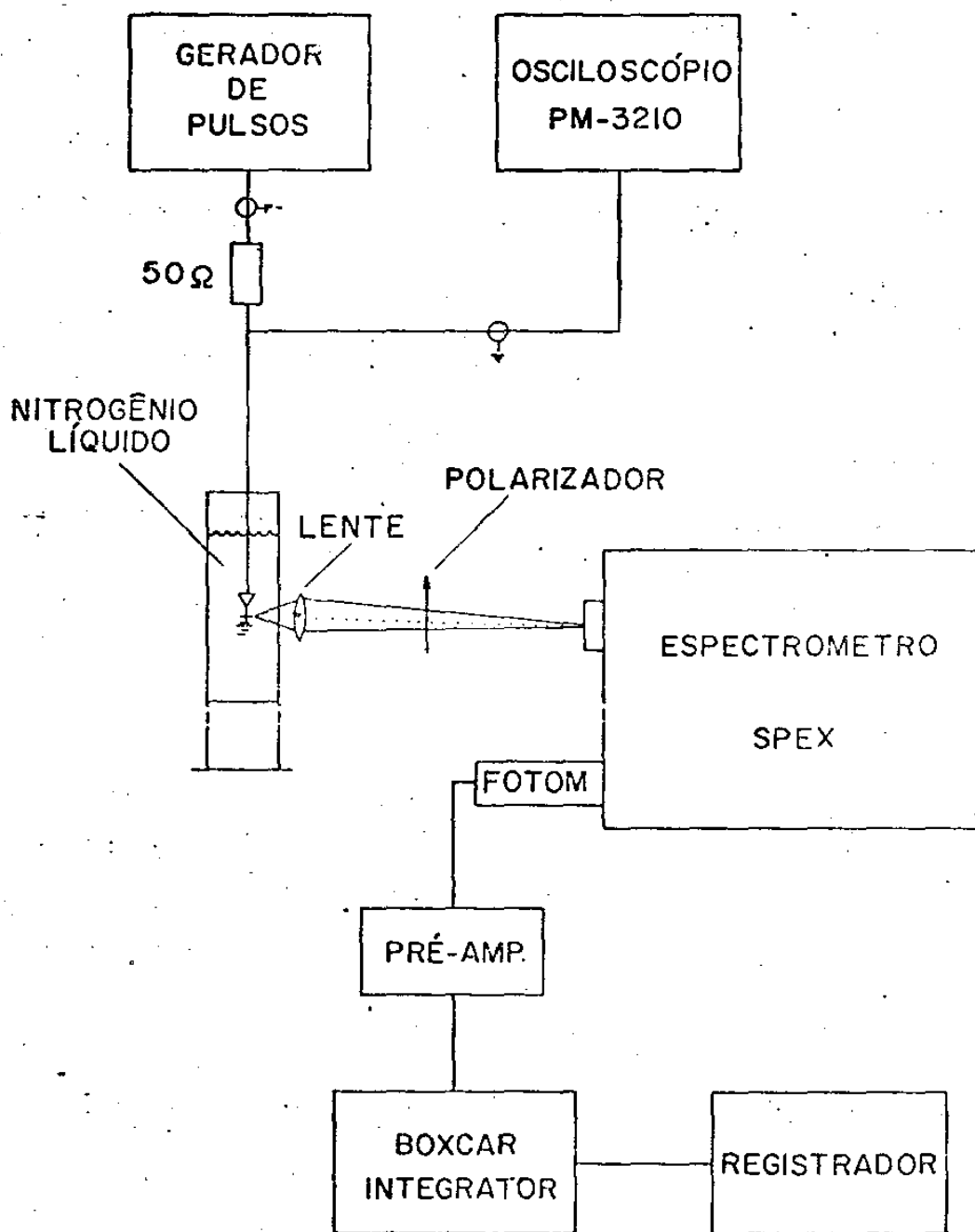


FIG.13 - Montagem usada nas medidas dos espectros da emissão espontânea e estimulada.

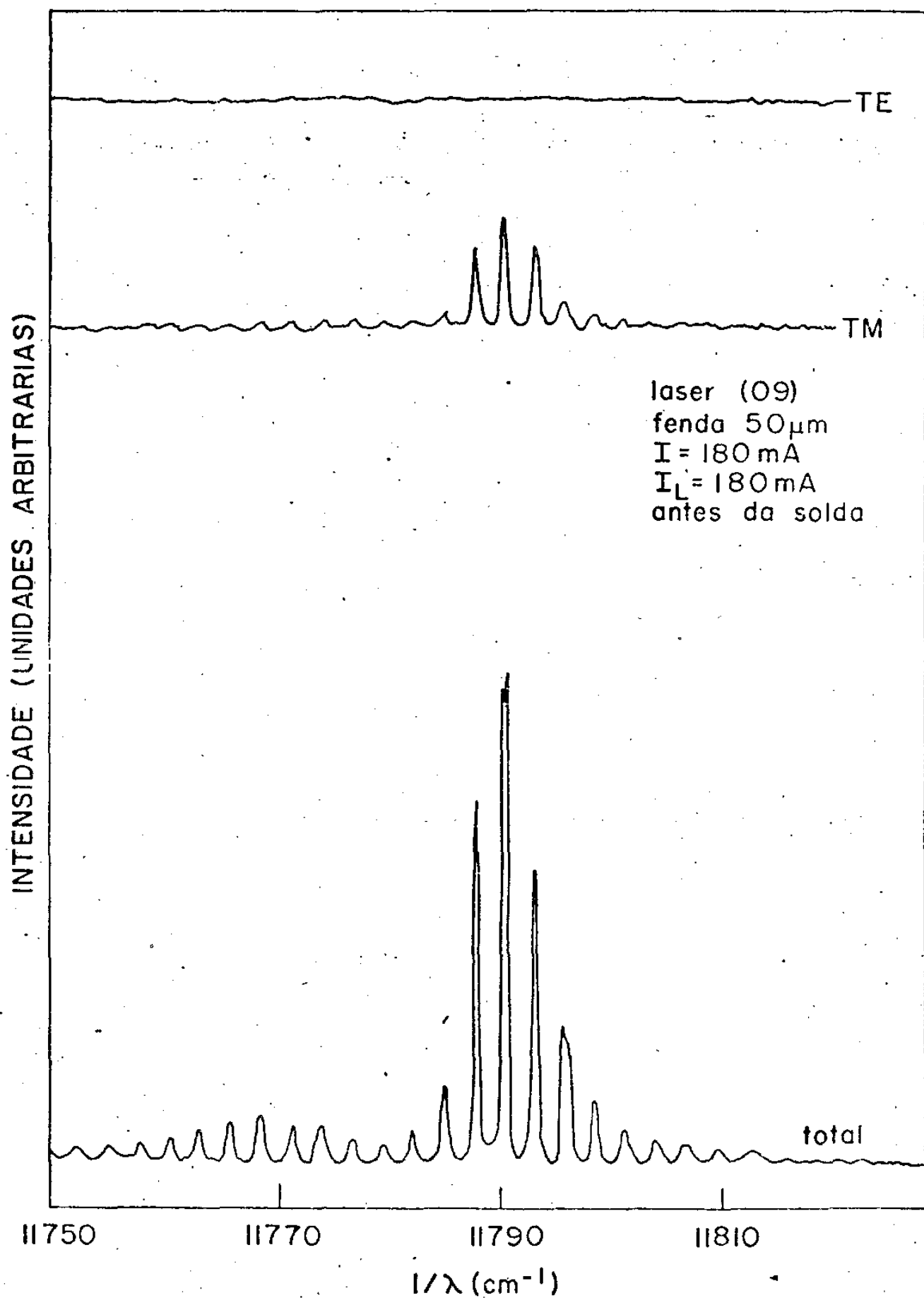


FIG. 14 . Espectros de emissão estimulada antes da solda. Laser (09).

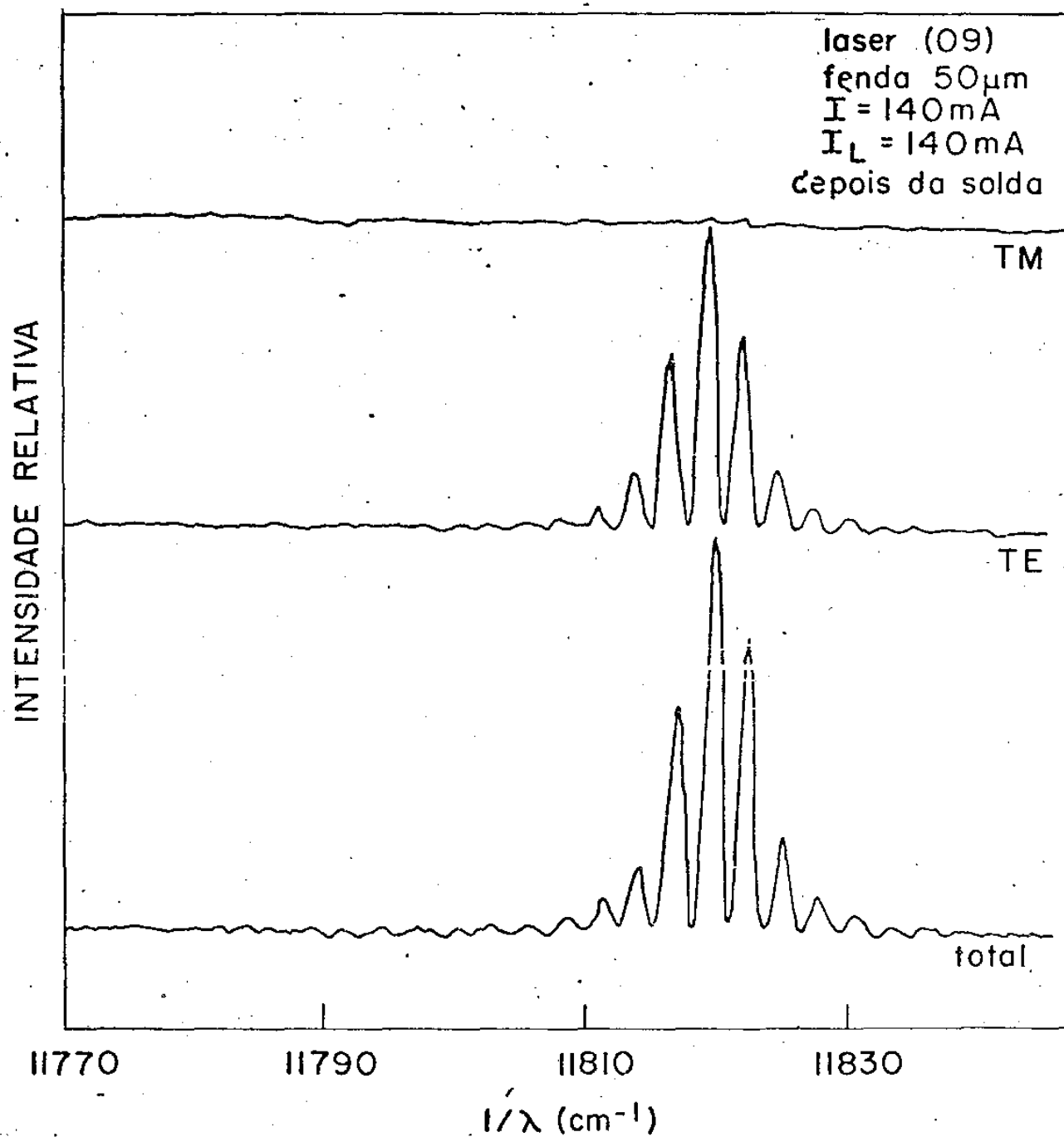


FIG. 15 . Espectros de emissão estimulada apos a solda. Laser (09).

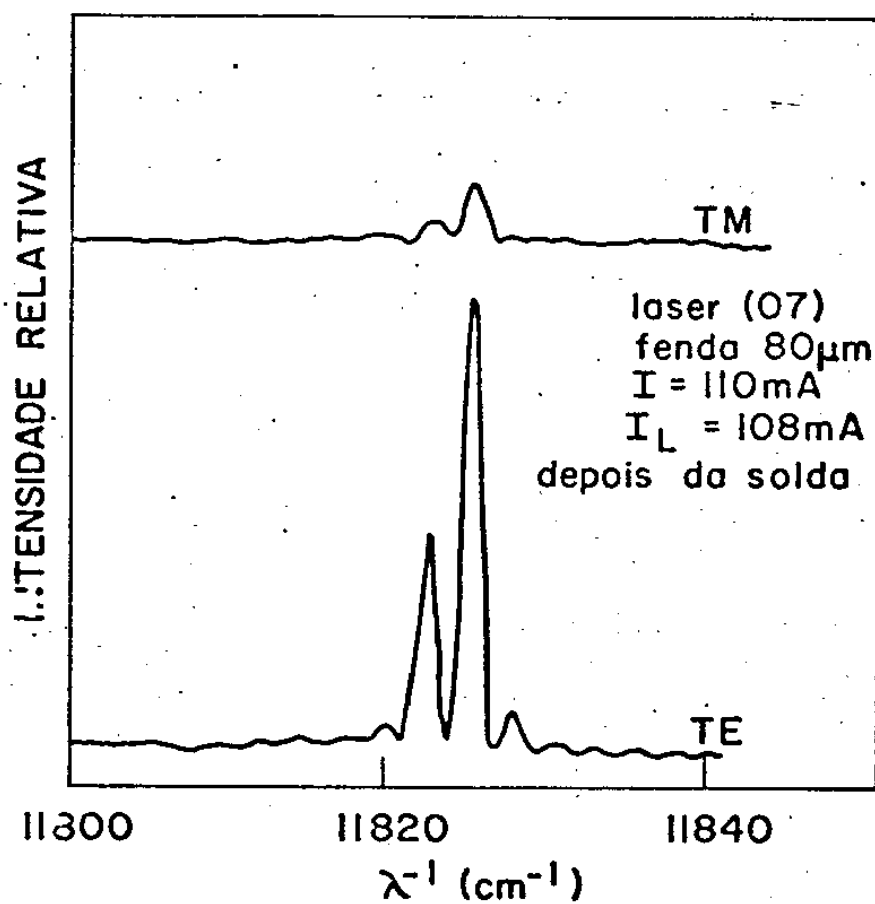
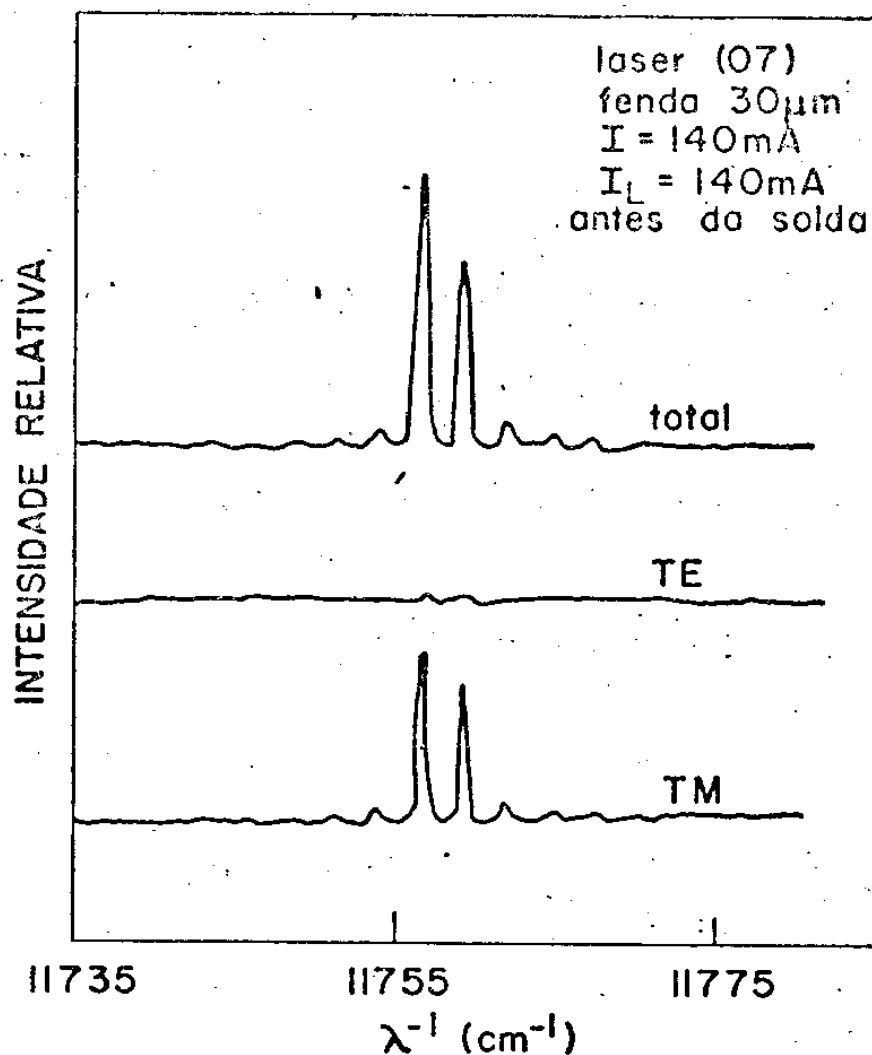


FIG. 16 . Espectros da emissão estimulada antes e depois da solda. Laser (07).

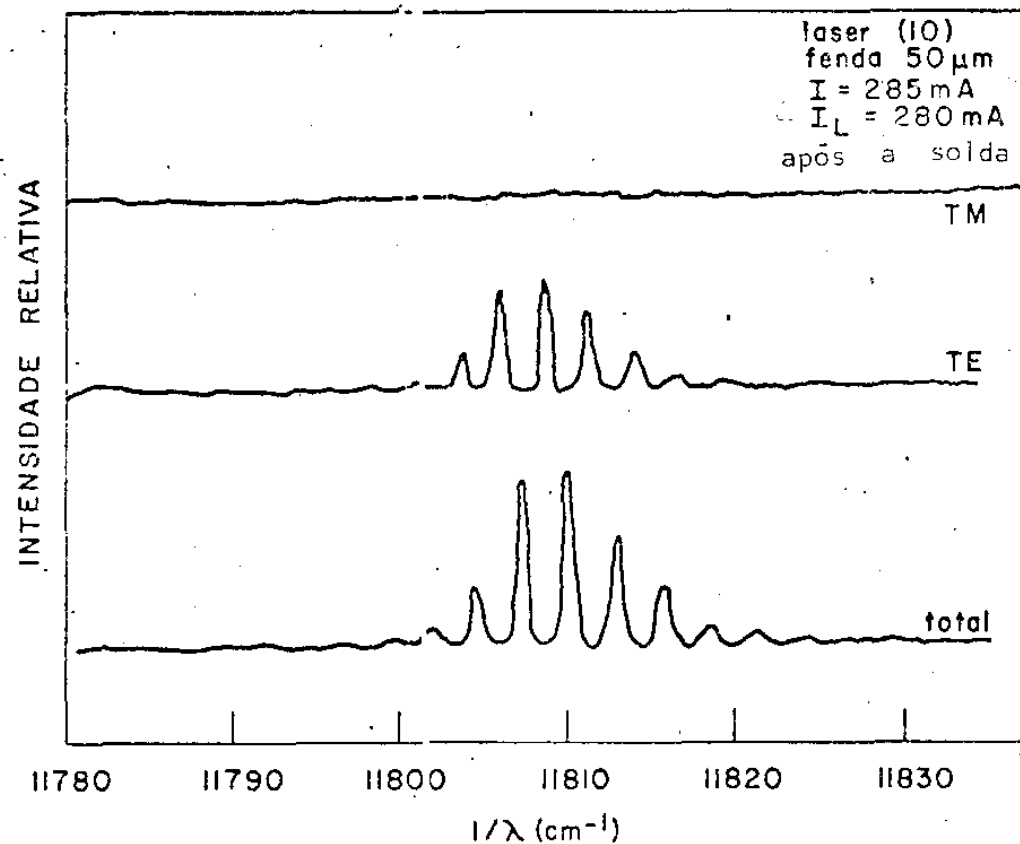


FIG. 17 . Espectros da emissão estimulada. Laser (10).

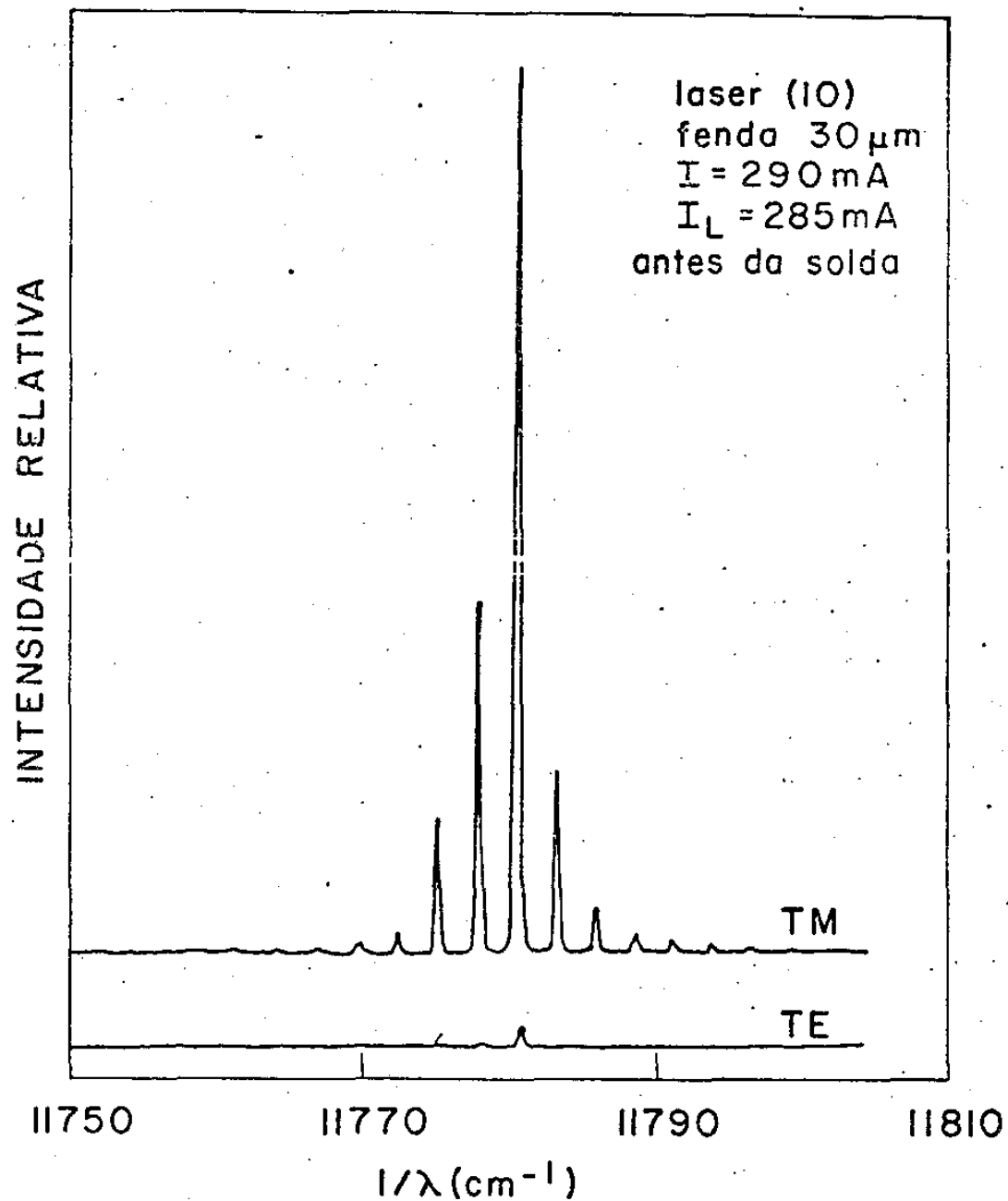


FIG. 18. Laser (10). antes da solda

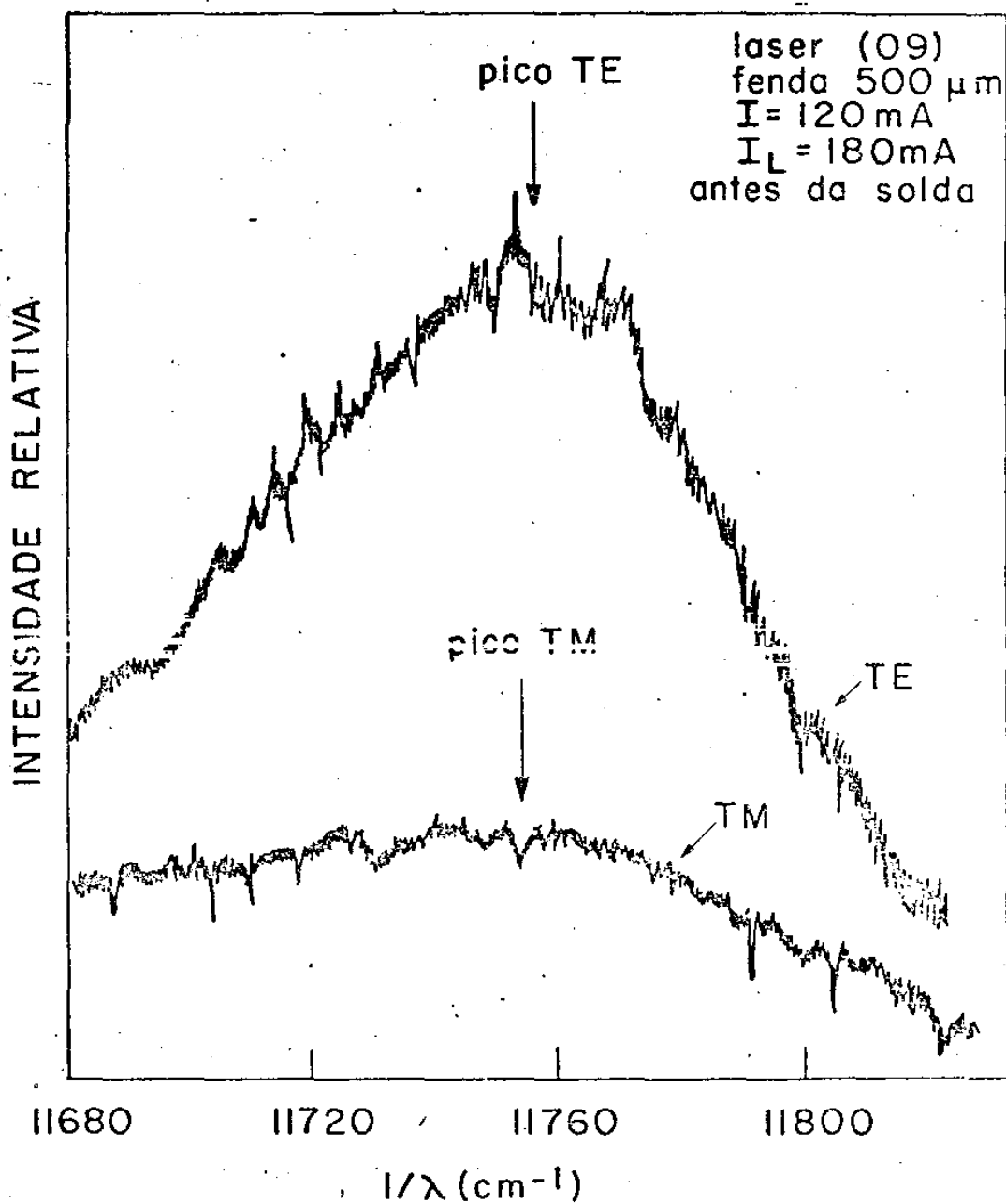


FIG. 19 . Espectros da emissão espontânea TE e TM .
laser (09) .

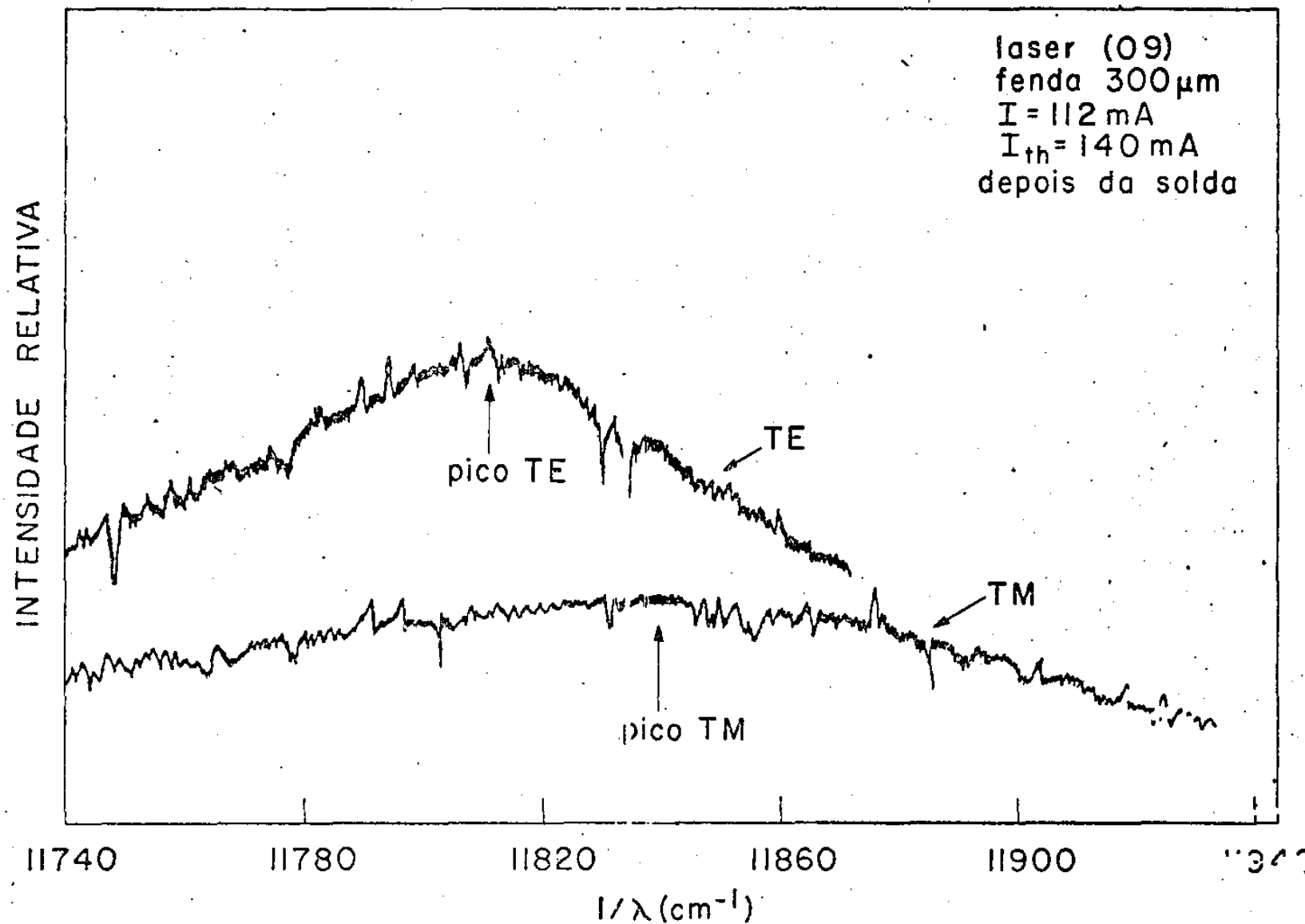


FIG. 20. Diferença nos picos de energia da emissão espontânea TE e TM, induzidas pela solda.

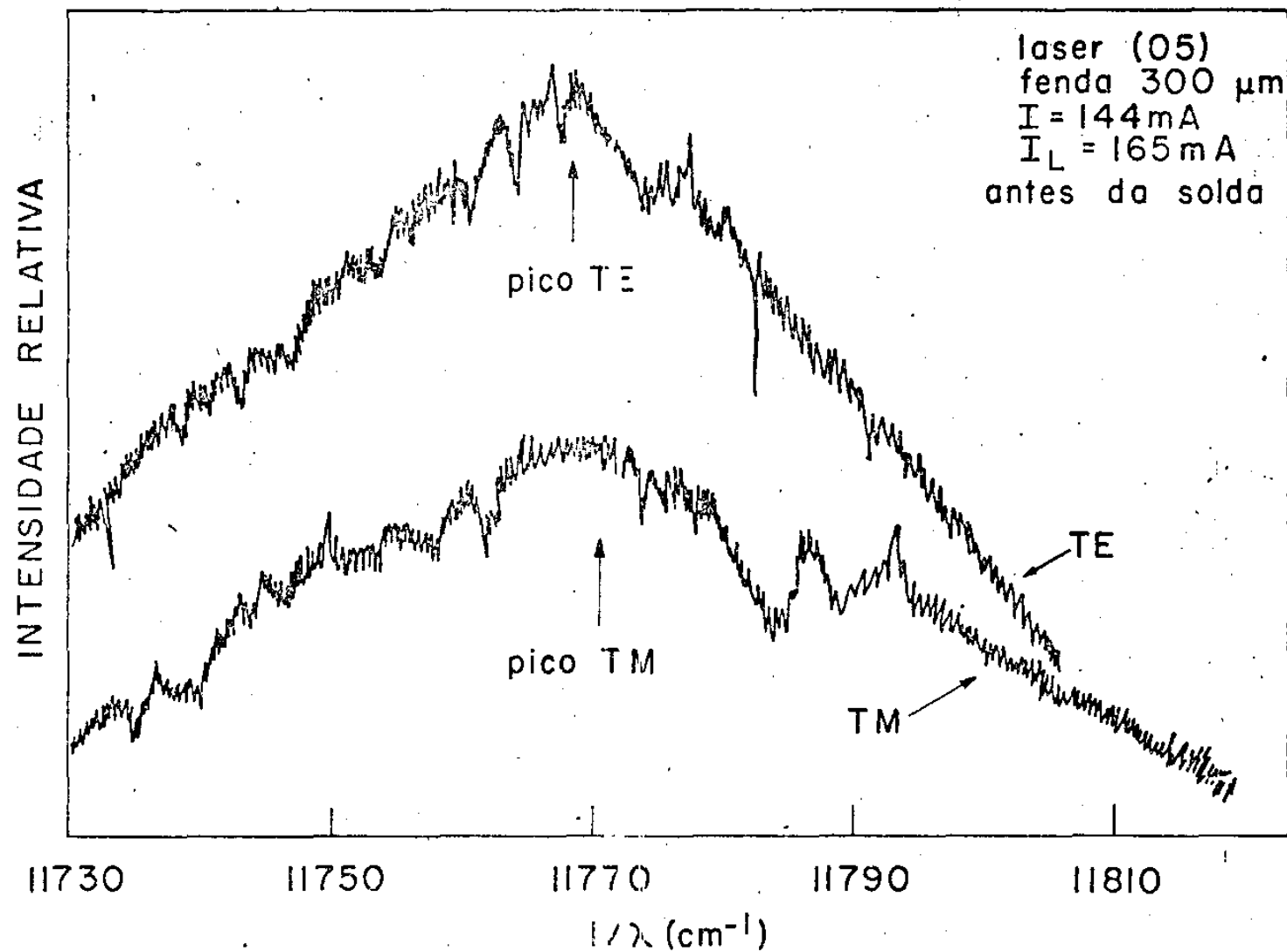


FIG. 21 . Espectros da emissão espontânea TE e TM. Laser (05).

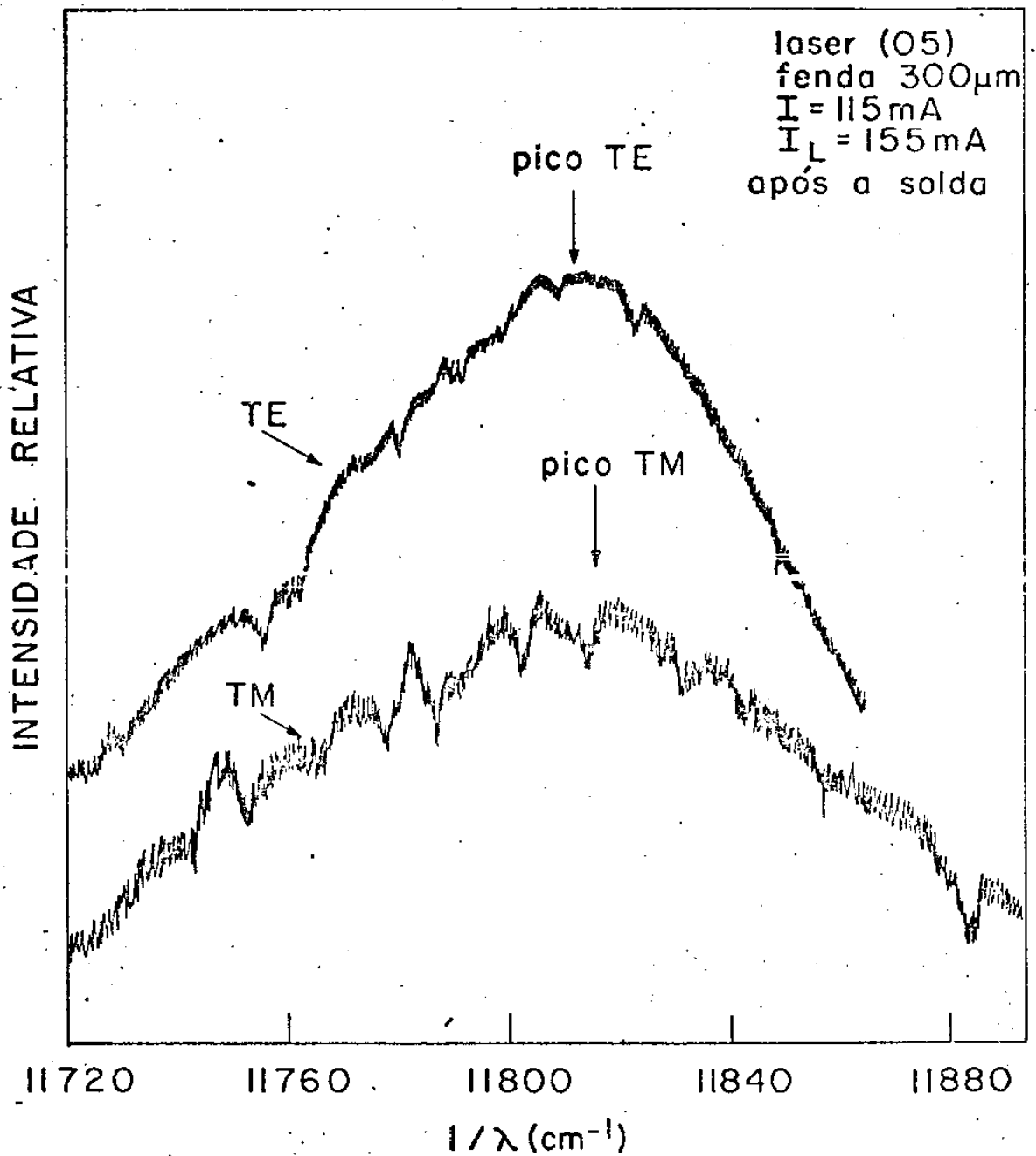


FIG.22 - Diferença entre os picos TE e TM da emissão espontânea.
Notar que o pico TM é o de maior energia. Laser (05).

INTENSIDADE RELATIVA

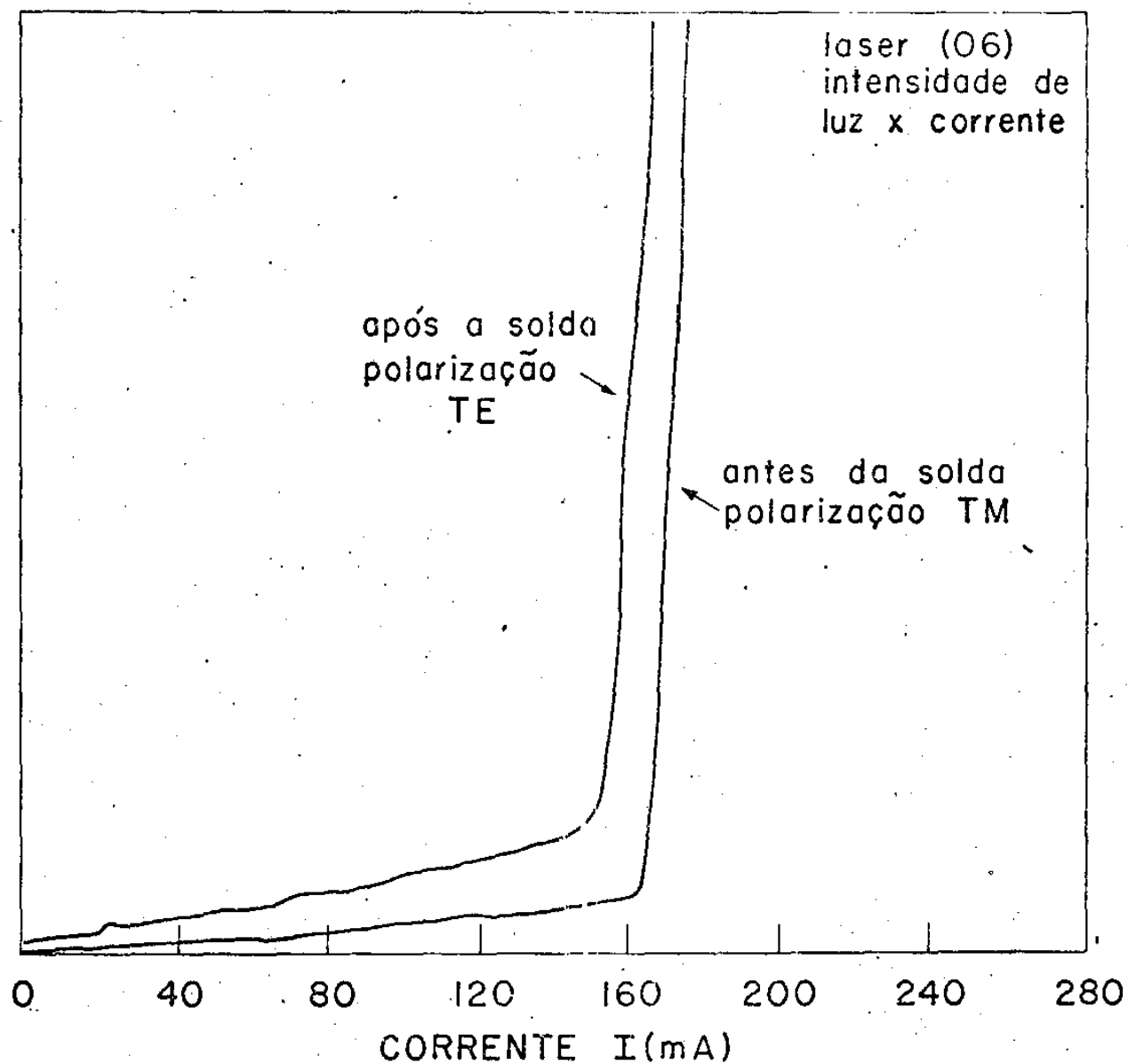


FIG. 23 . Corrente limiar antes e após a solda. Laser (06)

1.c) Modelo Teórico

O GaAs possui duas bandas de valência, a de buracos leves e a de buracos pesados, cada uma duas vezes degenerada (degenerescência do spin) para $K \neq 0$ e em $K=0$ são ainda coincidentes, ou seja na ausência de perturbações externas que não mudem a simetria cúbica do cristal, teremos em $K=0$ um ponto quatro vezes degenerado das bandas de valência.

Quando dopamos o cristal, introduzimos na estrutura de bandas um conjunto / de níveis de energia. Níveis aceitadores perto da banda de valência, e níveis / doadores perto de banda de condução. Neste modelo, faremos apenas uma análise / qualitativa do comportamento da emissão espontânea do laser, supondo que as re - combinações são tipo banda a banda, e além disso reteremos nossas discussões a - penas para recombinações em $K=0$. Mesmo com todas essas aproximações veremos que o modelo explica qualitativamente bem os resultados experimentais obtidos.

Devido a diferença dos coeficientes de expansão térmica dos materiais envolvidos na solda, depois de soldado o laser fica submetido a uma compressão planar paralela ao plano da junção. No modelo vamos decompor esta compressão planar em uma soma cujos termos são uma compressão hidrostática mais uma tensão uniaxial perpendicular ao plano da junção. A figura 24 mostra de maneira ilustrativa o / que estamos querendo dizer.

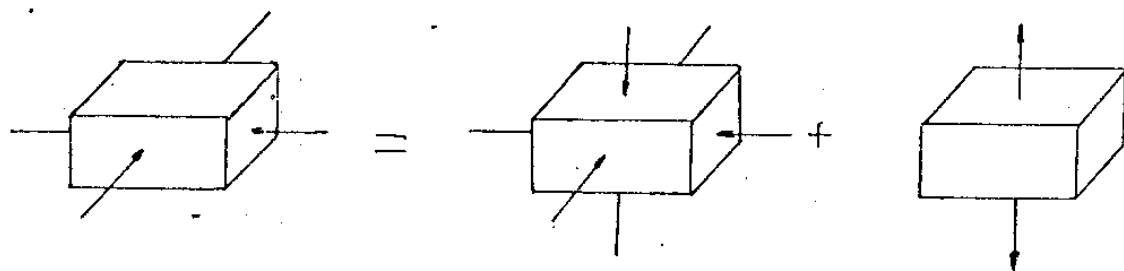


FIG.-24- DECOMPOSIÇÃO DA COMPRESSÃO PLANAR EM PRESSÃO HIDROSTÁTICA MAIS UMA TENSÃO UNIAXIAL

1.a) Efeitos da solda nos picos de emissão espontânea e estimulada

Quando submetemos um cristal a algum tipo de pressão ou tensão, podemos traduzir este efeito em termos teóricos com a Hamiltoniana / obtida em termos dos momentos angulares (12) (14) (15) (16).

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

Onde com p.c. dizemos permutações cíclicas, a^i o potencial de deformação hidrostática, b^i e d^i os potenciais de deformação tetragonal e trigonal respectivamente.

Podemos dividir esta Hamiltoniana em duas partes. Uma escalar, responsável pela descrição da parte hidrostática:

$$H_h = - a^i (E_{xx} + E_{yy} + E_{zz}) \quad \{2\}$$

e outra responsável pelos efeitos da pressão uniaxial:

$$H_p' = -3b^i (L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) E_{xx} + p.c. - \frac{6d^i}{\sqrt{3}} \{ [L_x, L_y] E_{xx} + p.c. \} \quad \{3\}$$

Usando como base as auto-funções de J^2 e J_z (ver apendice 1) podemos escrever a Hamiltoniana $H' = H_p + H_{so}$ (pressão + spin/orbita) como a matriz:

$$H' = \begin{matrix} & |V_2+\rangle & |V_1+\rangle & |V_1-\rangle & |V_2-\rangle & |V_3+\rangle & |V_3-\rangle \\ \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \\ \end{matrix} & \begin{bmatrix} -R & S & T & 0 & -S/\sqrt{2} & -\sqrt{2}T \\ S^* & R & 0 & T & -\sqrt{2}R & \sqrt{3}/2S \\ T^* & 0 & R & -S & \sqrt{3}/2S^* & \sqrt{2}R \\ 0 & T^* & -S & -R & \sqrt{2}T^* & -S^*/\sqrt{2} \\ -S^*/\sqrt{2} & -\sqrt{2}R & \sqrt{3}/2S & \sqrt{2}T & -\Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2}T & \sqrt{3}/2S^* & \sqrt{2}R & -S/\sqrt{2} & 0 & -\Delta_0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad \{ 4 \}$$

onde:

$$R = \frac{b^i}{2} (2 E_{zz} - E_{xx} - E_{yy})$$

$$S = -d^i (E_{xz} - iE_{yz})$$

$$T = -\frac{\sqrt{3}}{2} b^i (E_{xx} - E_{yy}) + id^i E_{xy} \quad \{ 5 \}$$

Considerando $\Delta_0 \gg R, S$ ou T , e usando teoria de perturbação de / primeira ordem encontramos para auto valores de $\{4\}$

$$E_1' = (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$E_2' = - (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{\frac{1}{2}} \quad \{ 6 \}$$

* Maiores detalhes dos cálculos podem ser vistos no apendice A-1

$$E_3^i = -\Delta_0$$

Seja X uma tensão ou pressão na direção (001) do cristal.

Então (12):

$$R = b^i (s_{11} - s_{12}) X = \frac{-\delta_{\mu 001}}{2} X \quad \{ 7 \}$$

$$S^i = 0$$

$$T = 0$$

$$\text{onde } \delta_{\mu 001} = -2b^i (s_{11} - s_{12})$$

Usando as novas definições escrevemos então os auto-valores de {4} como:

$$E_1^i = \frac{\delta_{\mu 001}}{2} |X|$$

$$E_2^i = \frac{-\delta_{\mu 001}}{2} |X| \quad \{ 8 \}$$

$$E_3^i = -\Delta_0$$

No caso de uma tensão colocamos então X positivo e os auto-valores serão:

$$E_1^i = + \frac{\delta_{\mu 001} X}{2} = -R$$

$$E_2^i = - \frac{\delta_{\mu 001} X}{2} = +R \quad \{ 9 \}$$

$$E_3^i = -\Delta_0$$

Neste caso podemos escolher as auto-funções que serão:

$$| \varphi_{E_1 \pm} \rangle = | V_{2 \pm} \rangle$$

$$| \varphi_{E_2 \pm} \rangle = | V_{1 \pm} \rangle \pm \frac{\delta_{\mu 001} P}{\sqrt{2} \Delta_0} | V_{3 \pm} \rangle \quad \{A-29\}$$

{10 }

$$| \varphi_{E_3 \pm} \rangle = | V_{3 \pm} \rangle \pm \frac{\delta_{\mu 001}}{\sqrt{2} \Delta_0} | V_{1 \pm} \rangle$$

Notamos que se ao invés de tensão, tivéssemos pressão, os níveis não seriam alterados porém as auto-funções seriam trocadas: A do nível E_1 seria $| \varphi_{E_2} \rangle$ e vice-versa.

Pensando na estrutura de bandas de cristal teríamos o seguinte esquema:

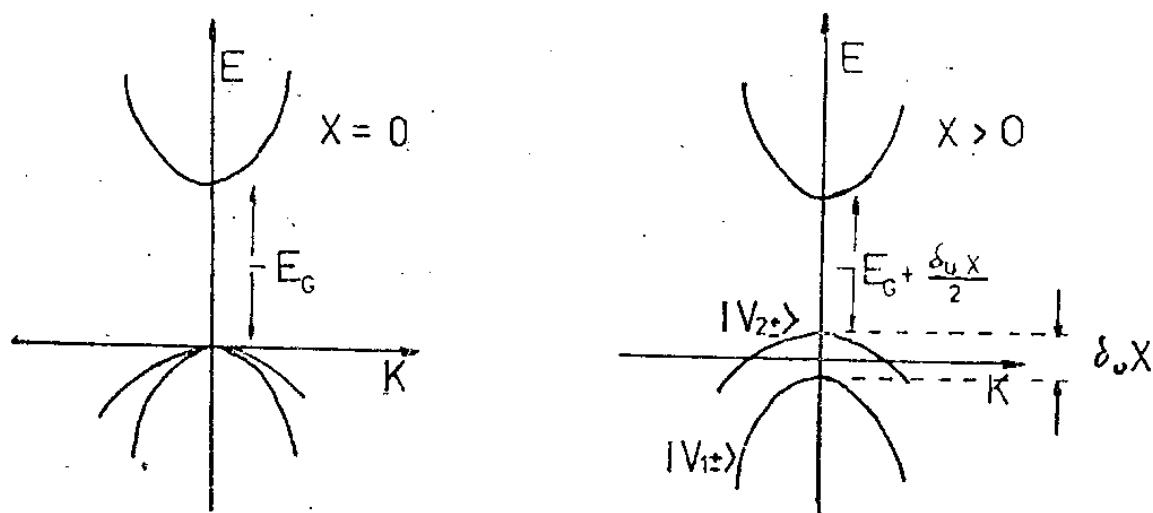


FIG-25 - ESTRUTURA DE BANDAS DO GaAs
SUBMETIDO A UMA TENSÃO UNI-
AXIAL NA DIREÇÃO (001)

De acordo com os cálculos de probabilidade de transição feitas em (12) vemos que transições dipolares cujo campo elétrico é paralelo a tensão são proibidas para o nível E_1 ; sendo então para este nível permitidos somente transições polarizadas paralela à jun-

ção do dispositivo pois a tensão é perpendicular a esta. Assim para a banda de buracos pesados* cuja auto-função neste caso é $|V2_{\pm}\rangle$ são permitidas transições que geram luz TE. Ainda de acordo com / (12); para a banda de buracos leves*, ou seja o nível E_2^1 (de maior energia com relação à banda de condução) teremos transições TM de intensidade três vezes maiores que as transições TE.

Isto concorda plenamente com os resultados experimentais apresentados nas figuras 19, 20, 21, 22. Antes da solda dos lasers, a emissão espontânea TE e TM tinham praticamente o mesmo pico em energia. No entanto após a solda, a localização em energia do pico TM é uma energia maior do que o pico TE.

A parte hidrostática da Hamiltoniana $\{1\}$, H_h é a responsável / pelo deslocamento de ambos os picos das referidas figuras para uma situação de energia maior. Apenas uma tensão uniaxial perpendicular à junção reduziria a banda proibida, deslocando as bandas de buracos leves e pesados para uma energia menor.

O que temos porém, é uma pressão hidrostática mais uma tensão / uniaxial (fig.24). A ação da pressão hidrostática nos níveis é apenas seu deslocamento em energia, não havendo quebra de degenerescência pois é um escalar($\{2\}$), e esse deslocamento se dá para energias maiores, superando a redução feita pela parte hidrostática da tensão considerada.

Considerando então o efeito hidrostático, podemos escrever os / auto-valores de $\{4\}$ como:

* A massa efetiva das bandas depende apenas da derivada segunda do auto-valor dependente de K com relação a K, e esse, depende do módulo da tensão, independente desta ser positiva ou negativa, no / nosso caso porém estamos tratando apenas em $K=0$, e usamos este tipo de definição devido a ser extremamente comum.

$$E_1 = \delta_H X + \delta_{\mu 001} |X| - 3\delta_H X$$

$$E_2 = \delta_H X - \delta_{\mu 001} |X| - 3\delta_H X$$

{ 11 }

$$E_3 = -\Delta_0 + \delta_H X - 3\delta_H X$$

Ou finalmente:

$$E_1 = (\delta_{\mu 001} - 2\delta_H) X$$

$$E_2 = (-\delta_{\mu 001} - 2\delta_H) X$$

{ 12 }

$$E_3 = (-\Delta_0 - 2\delta_H) X$$

Esquemáticamente a estrutura de bandas do cristal submetido às tensões induzidas pela solda é:

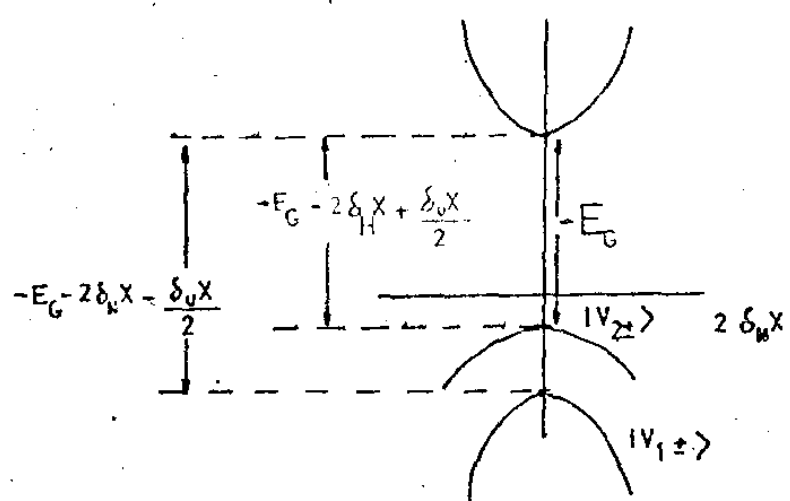


FIG. 26- ESTRUTURA DE BANDAS DO GaAs SUBMETIDO A COMPRESSÃO PLANAR.

Para tensões na direção (111) podemos reescrever da mesma forma os auto-valores. As auto-funções são de forma um pouco diferente, porém valem todas as hipóteses que discutimos para a direção (100).

No apêndice podemos ver alguns resultados para a direção (111) que fundamentalmente são os mesmos.

No conjunto de resultados experimentais mostrados, também pode/ser explicado pelo efeito hidrostático, o deslocamento do conjunto/ de modos do laser para energias maiores depois que o dispositivo é soldado.

É importante distinguir que as injeções de corrente são diferentes havendo efeito devido a interação multi-corpos que provoca mudança na banda proibida. Como mostra os cálculos feitos em (18), podemos desprezar este efeito comparado com o efeito da pressão.

1.b) Efeito da solda na corrente limiar e polarização da emissão estimulada.

De acordo com (17) e (18) para pressão uniaxial perpendicular/ à junção, no limite de pequenas pressões, podemos escrever o ganho para uma injeção para os modos TE e TM como:

$$G_{TE}(I) = Y_1 - Y_2 P - L_{TE}$$

{ 13 }

$$G_{TM}(I) = Y_1 + 2Y_2 P - L_{TM}$$

Onde Y_1 e Y_2 são constantes que dependem do elemento de matriz entre as funções de onda da banda de condução e valência do operador/momento e L seria as perdas TE e TM, por transmissão dos espelhos. A emissão estimulada passa a ocorrer quando o ganho igualar e superar as perdas. A densidade de corrente que isto ocorre chamamos densidade de corrente limiar. Podemos relacioná-la qualitativamente com o ganho pela aproximação:

$$I_L = \beta^{-1} \quad G_L = \beta^{-1} \alpha$$

{ 21 }

A emissão estimulada ocorre no modo de ganho maior.

A zero de pressão externa, nos lasers de homoestrutura, não existe regra definida para a operação do laser, sendo a escolha TE ou TM aleatória. Nos dispositivos dupla-heteroestrutura porém, devido às perdas do modo TE nos espelhos serem menores(19) este é, com raras exceções o modo preferido para a emissão estimulada.

Se a emissão estimulada ocorre inicialmente no modo TE, a aplicação de pressão uniaxial aumentará a corrente limiar até que o ganho TM torne-se maior. A emissão estimulada passa a ocorrer com a polarização TM e a corrente limiar passa a diminuir com o aumento da pressão. Se a emissão estimulada inicialmente é TM, apenas ocorre a redução da corrente limiar com o aumento da pressão uniaxial. A pressão hidrostática não altera de maneira sensível a corrente limiar / no limite de baixas pressões.

Quando soldamos o laser, induzimos na região ativa uma tensão / uniaxial mais uma pressão hidrostática, de acordo com o modelo que estamos considerando.

A tensão uniaxial então, é a responsável pela mudança de polarização, se o dispositivo, inicialmente é TM, e a redução da corrente limiar.

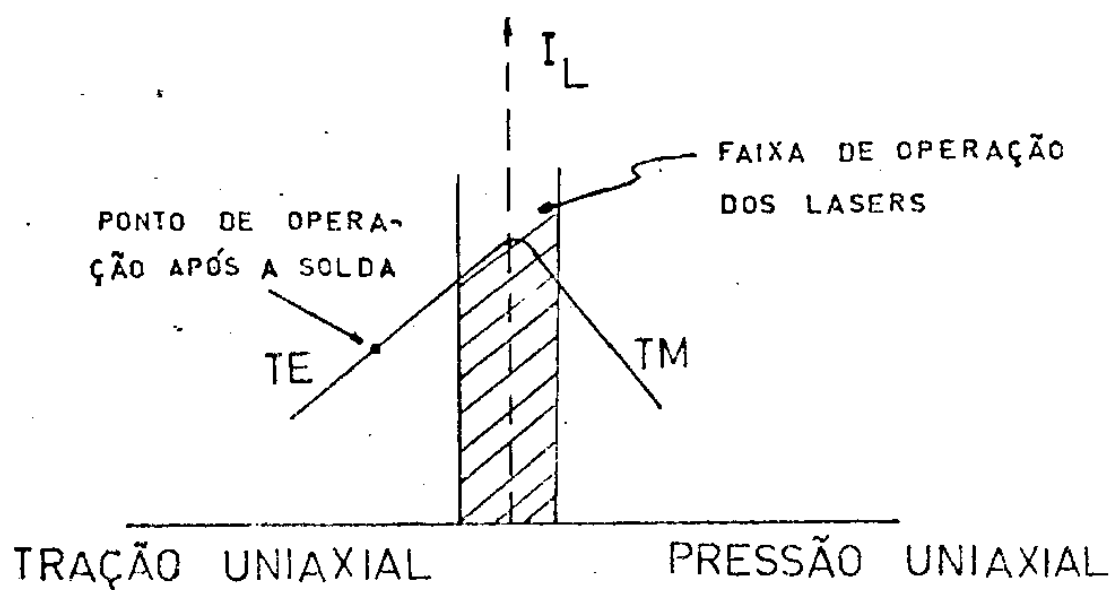


FIG. 27 - CORRENTE LIMAR VERSUS PRESSÃO
E TRAÇÃO UNIAXIAL

Se o dispositivo já opera inicialmente no modo TE, observamos após a solda apenas a redução da corrente limiar.

Na tabela I onde mostramos o resumo dos resultados experimentais vemos que praticamente todos os dispositivos TM antes da solda passam a ter polarização TE após a solda, e uma redução de 20-30 % na corrente limiar.

TABELA I

laser nº	corrente limiar		polarização	
	antes da solda	depois da solda	antes da solda	depois da solda
	$(I_L \pm 5) \text{ mA}$			
01	188	150	TM	TE
02	148	160	TM	TE
03	146	114	TM	TE
04	142	136	TM-TE	TE
05	132	100	TM	TE
06	160	140	TM	TE
07	180	156	TM	TE
08	260	248	TM	TE
09	180	240	TM	TM-TE
10	210	200	TM	TE

Com o intuito de testarmos o modelo proposto, foi medida o comportamento da corrente limiar em função da temperatura para um mesmo laser antes e após a solda. O resultado foi um sucesso. Podemos examinar na fig. 28 onde apresentamos o resultado, que após a solda; a corrente limiar cresce mais rapidamente devido ao relaxamento da tensão induzida pela solda. Finalmente na figura 29 temos um teste, em que um laser de homoestrutura foi submetido a todos os processos os quais passaria, se fosse soldado. Porém, o bloco suporte que usamos não tinha o filme de estanho onde o laser foi colocado. Após esta solda simulada vemos um ligeiro acréscimo na corrente limiar (foto aleatório) e a polarização permaneceu a mesma. Esta ultima foto apoia muito bem o modelo proposto, ou seja que o responsável pela mudança da corrente limiar é a tensão imposta pelo filme, pois sempre se acompanha da mudança de polarização, e não o aquecimento que o laser é submetido durante o processo de solda.

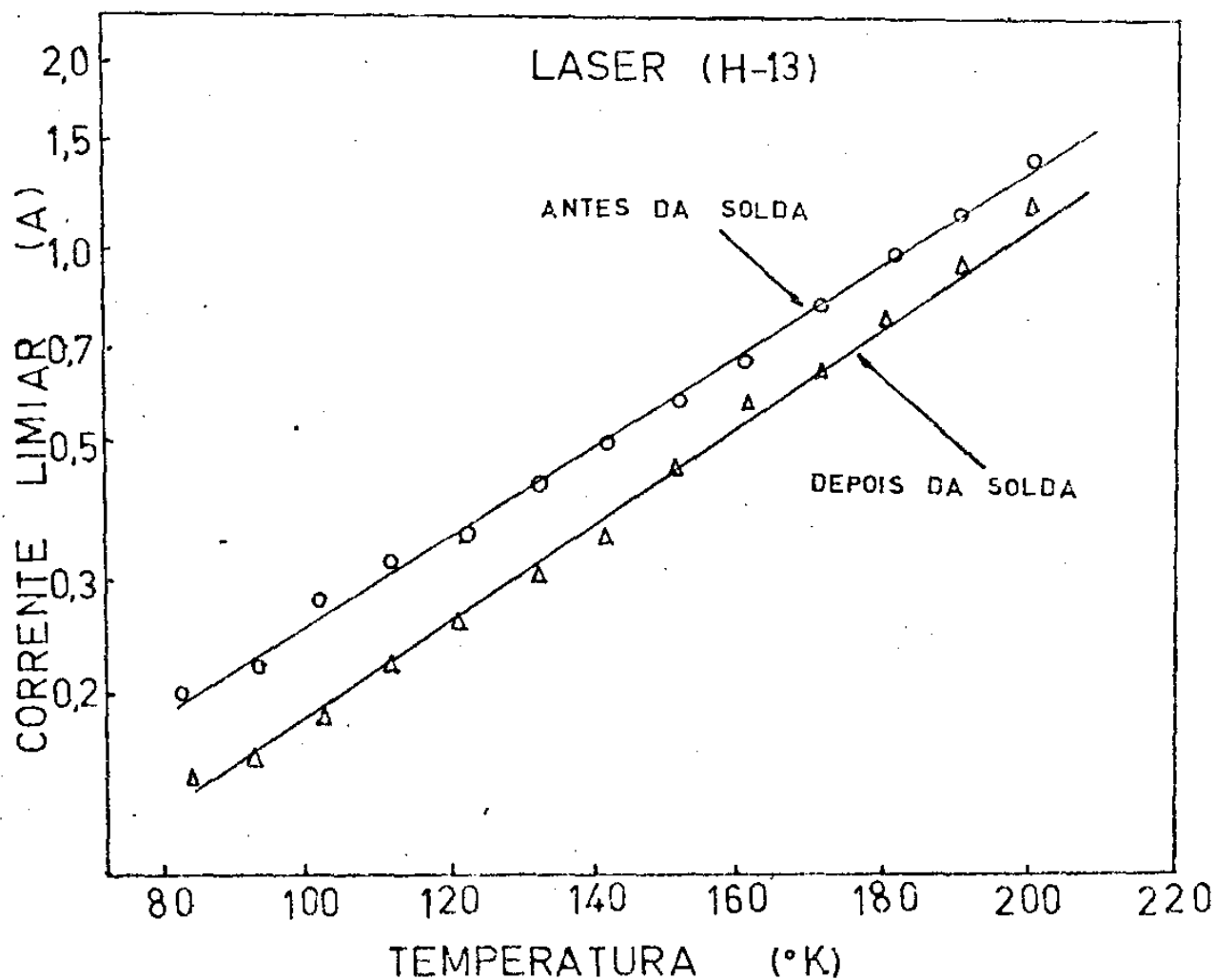


FIG-28 - CORRENTE LIMIAR VERSUS TEMPERATURA

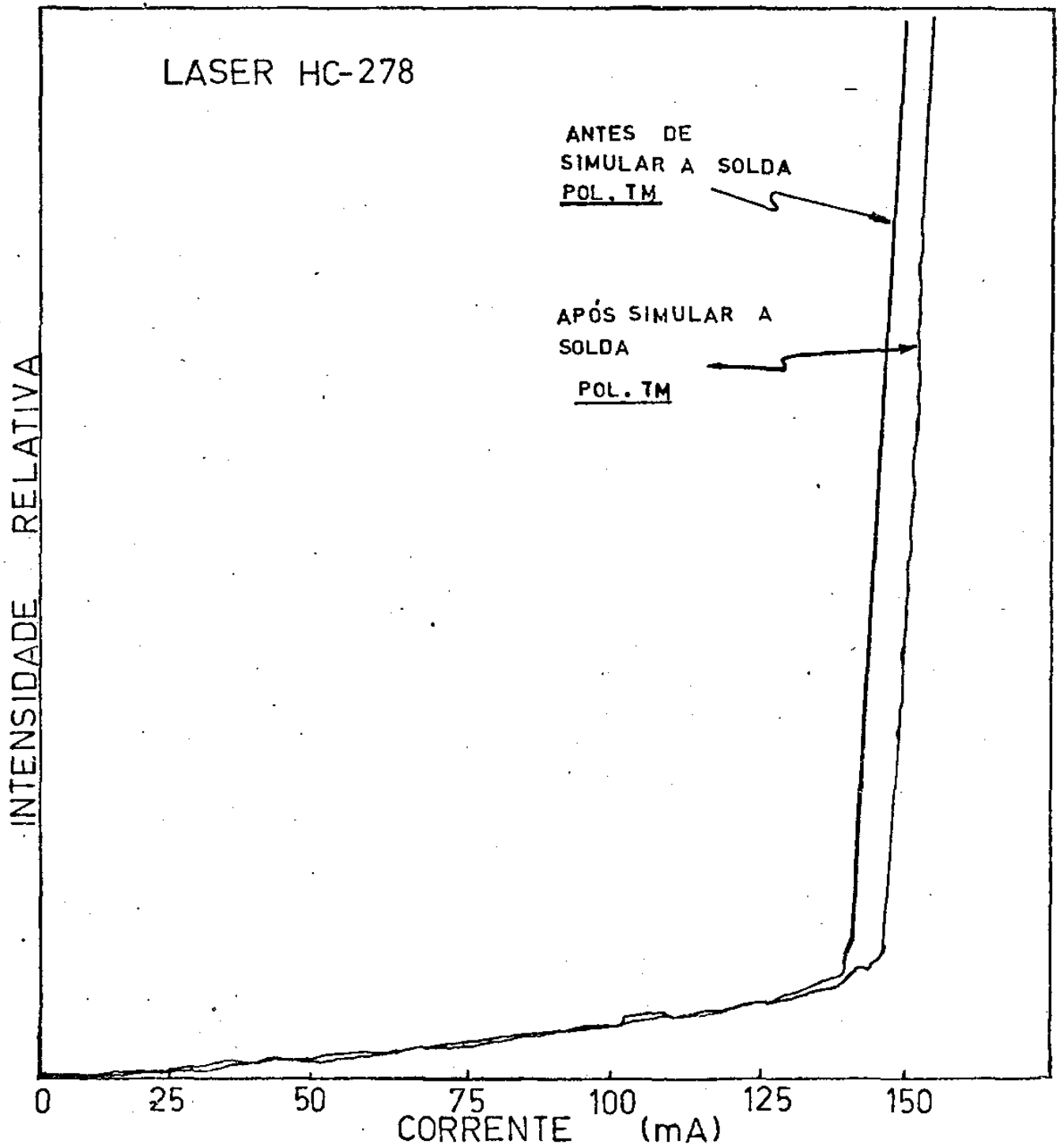


FIG-29 SIMULAÇÃO DA SOLDA

Capítulo III

Propriedades radiativas dos lasers de (Ga,Al)As.

III.a) Pressão interna

No intuito de melhorar o confinamento ótico e eletrônico e, conseqüentemente reduzir a corrente limiar dos lasers semicondutores de GaAs, permitindo a operação destes dispositivos na temperatura ambiente; cresce-se camadas de GaAlAs em torno da região ativa.

A introdução de átomos de alumínio na rede do GaAs torna diferente o parâmetro de rede do cristal. Ettemberg e Paff (20) mediram experimentalmente o parâmetro de rede do AlAs entre 20 e 800°C. Na região de 800°C onde geralmente se inicia o crescimento da camada de (Ga,Al)As o casamento dos parâmetros de rede é perfeito. Na temperatura ambiente porém o parâmetro de rede do AlAs é 5.6610 Å enquanto o do GaAs é 5.653 Å. Eles sugeriram então, a possibilidade de pressões serem introduzidas na região ativa do laser. Mais tarde Reinhart e Logan (21) apenas com uma interface de GaAlAs-GaAs mediram a distribuição de pressão existente no GaAs e no GaAlAs. Concluíram que níveis de pressão da ordem de 10^8 dyn/cm² (cerca de 100 atm) existe para um laser típico de dupla-heteroestrutura.

Com a intenção de obter baixa corrente limiar, os dispositivos atuais de dupla-heteroestrutura são fabricados com uma região ativa da ordem de 0,2 µm de espessura.

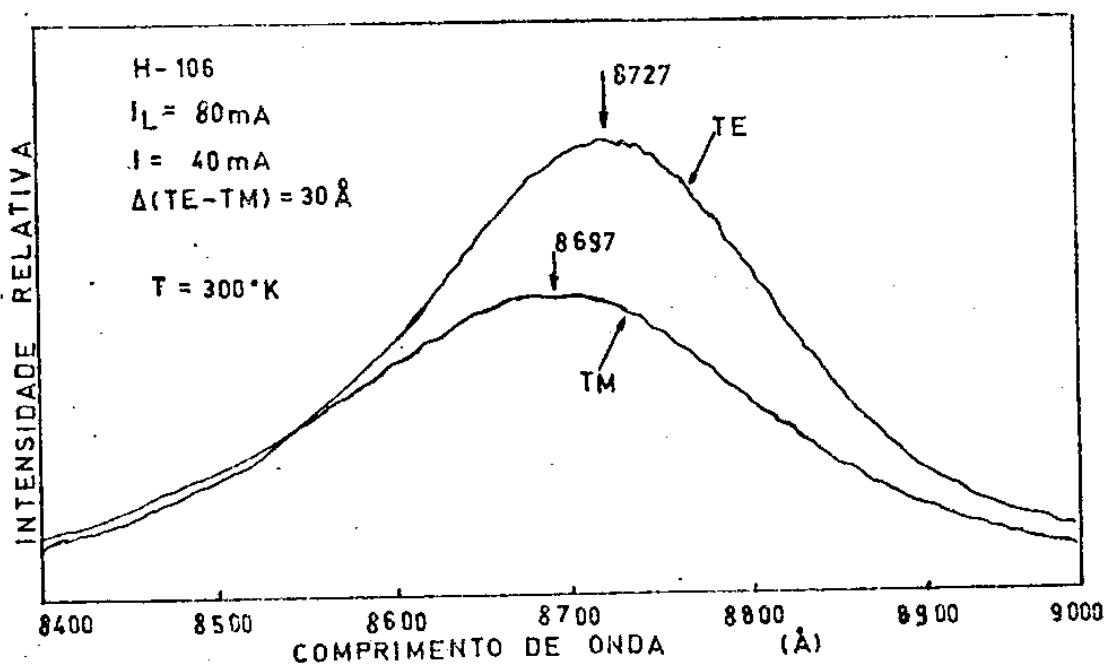
Com a justificativa de tal pequena espessura, além do envolvimento de ambos os lados por GaAlAs, podemos considerar a pressão induzida pelas interfaces constante e uniforme. Baseado nisto, poderíamos decompô-la numa descompressão hidrostática mais uma pressão / uniaxial perpendicular à junção; um modelo semelhante ao que usamos quando tratamos das tensões induzidas pela solda. De acordo com as / discussões anteriores (Cap. II) esta pressão causaria a redução da banda proibida; e quebra da degenerescência das bandas de buracos pe

sados e leves, gerando uma diferença nos picos TE e TM da emissão espontânea, sendo que o TE seria de maior energia. Além disso tornaria o modo TM favorecido para a emissão estimulada.

Sobre o aspecto de emissão estimulada, Reinhart e outros (22) discutem sobre a refletividade dos espelhos dos lasers dupla-heteroestrutura concluindo que, a ocorrência da emissão estimulada no modo TE de alta ordem é mais favorável sempre nesse tipo de dispositivo devido a maior refletividade, e conseqüente menor perda para este tipo de modo. Nessa discussão ele atribui a ocorrência de emissão estimulada do modo TM em alguns dispositivos à pressão interna. Esse resultado é um apoio ao modelo de pressão referido.

A medida dos picos de emissão espontânea TE e TM, dão porém um resultado que nos surpreende. Ao invés do pico TE ser o de maior energia, encontramos que o pico TM é o de maior energia (Figuras 30, 31).

FIG. 30 - LASER H-106. REGIÃO ATIVA TIPO N
($N_D = 0$, $N_A = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$)



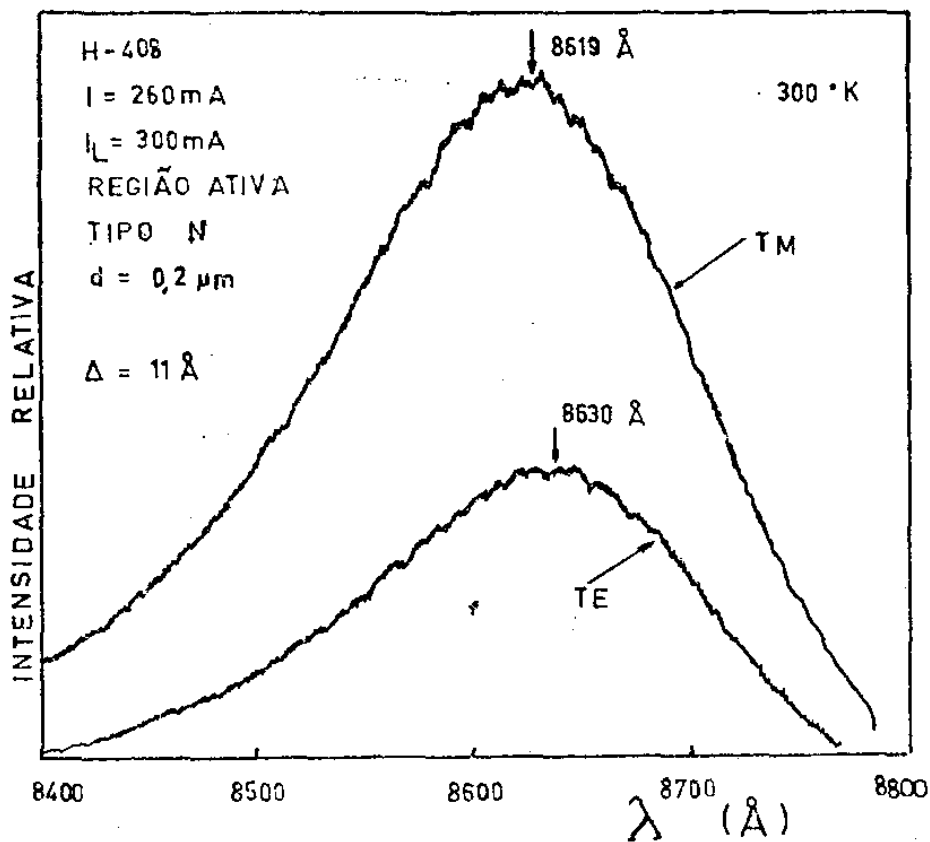


FIG. 30a EMISSÃO ESPONTANEA. LASER H-408

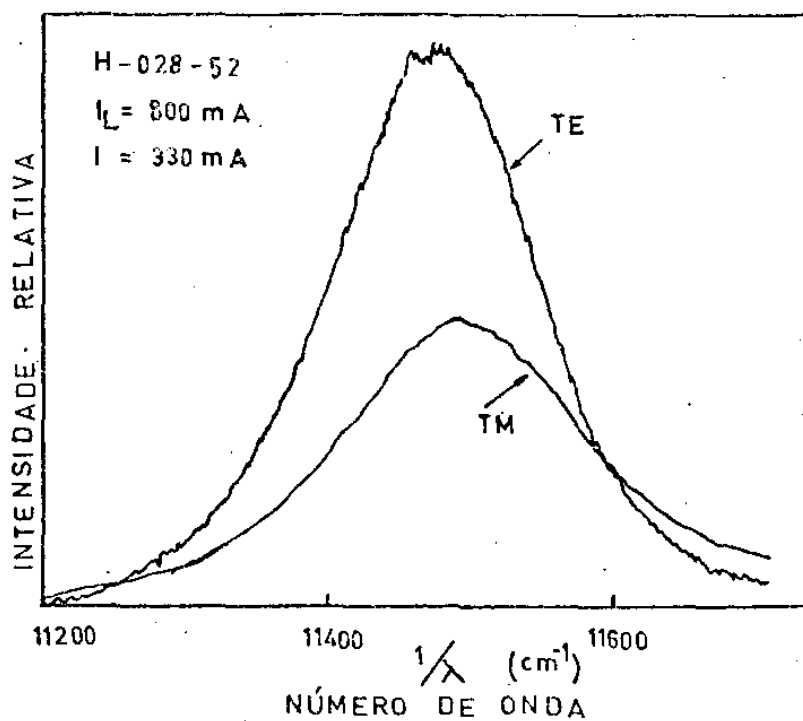
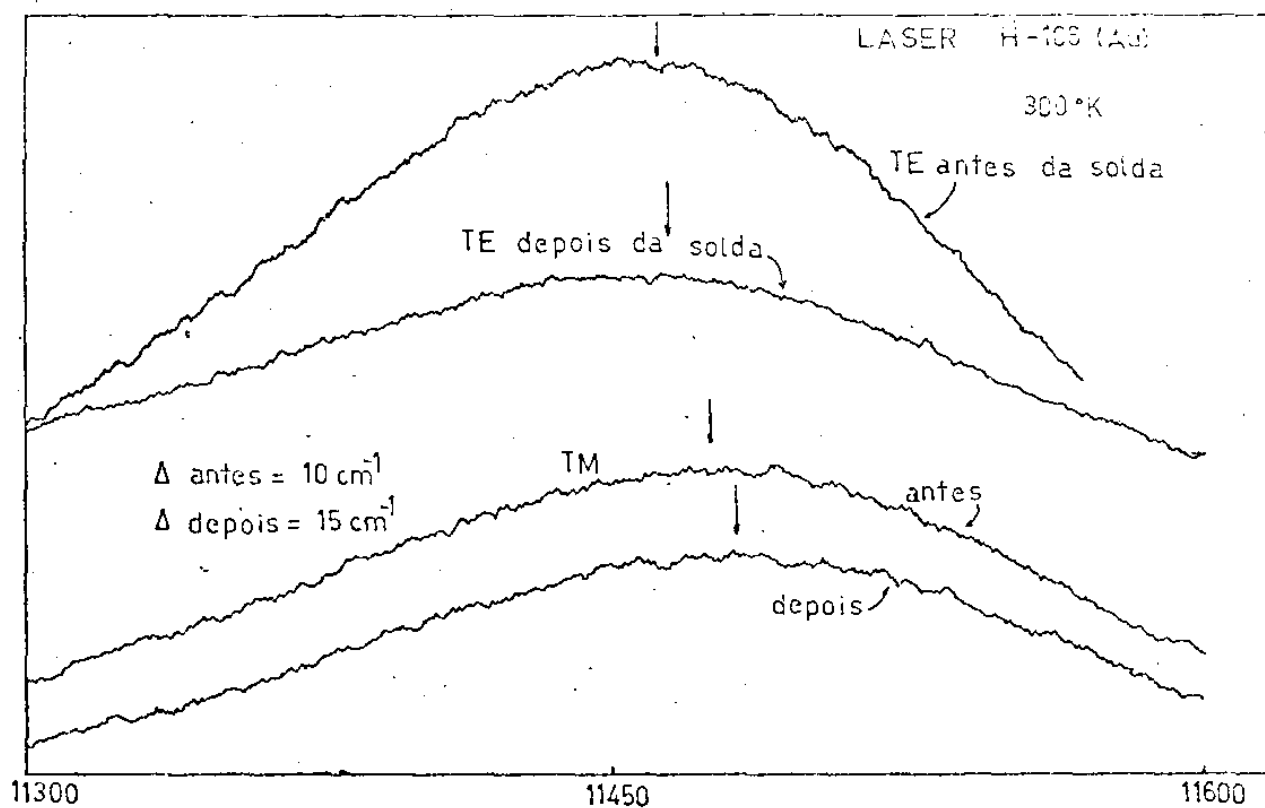
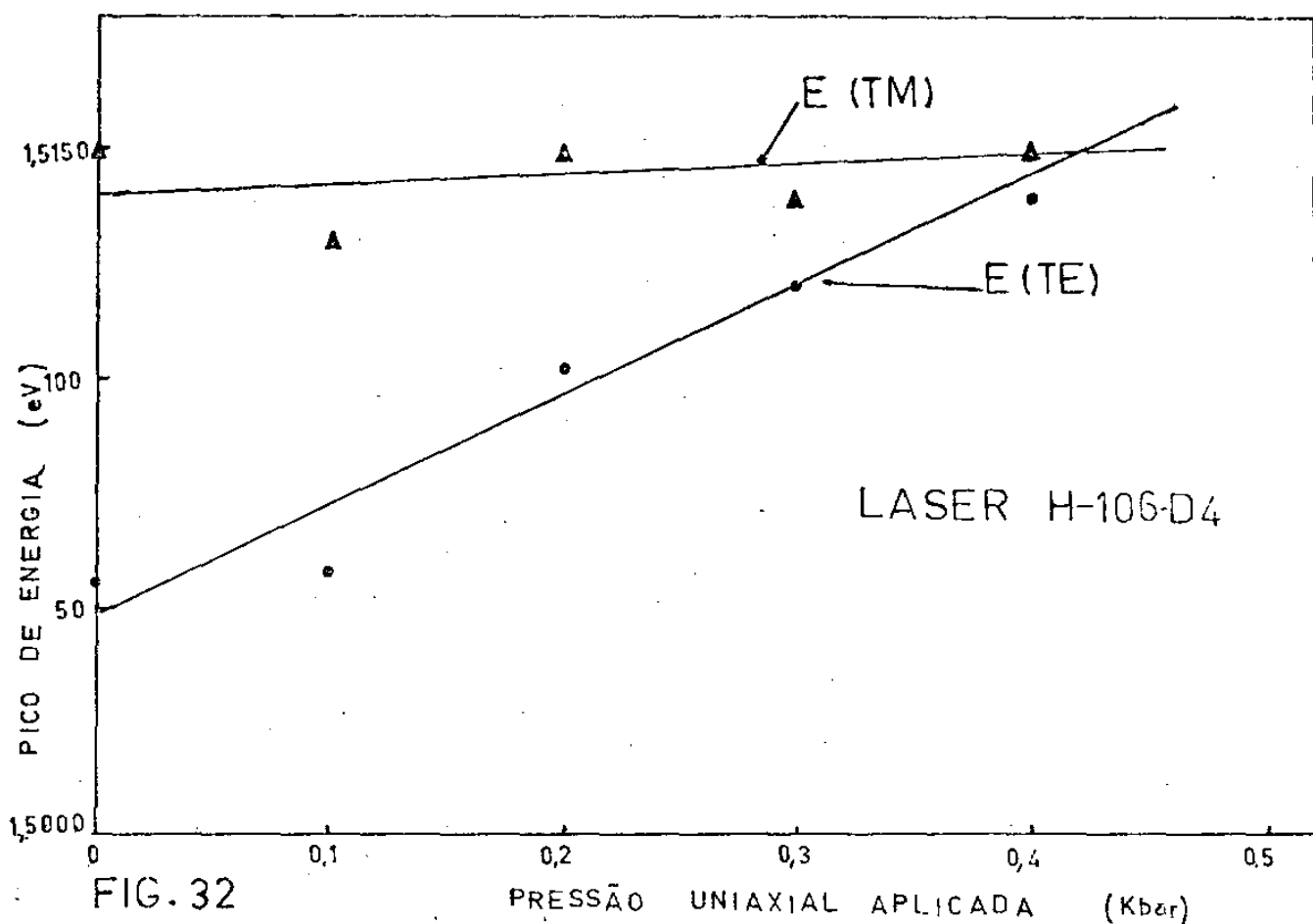


FIG. 31- LASER H- 028-52. CONTATO DE

FAIXA SEM BOMBARDEAMENTO DE PROTONS



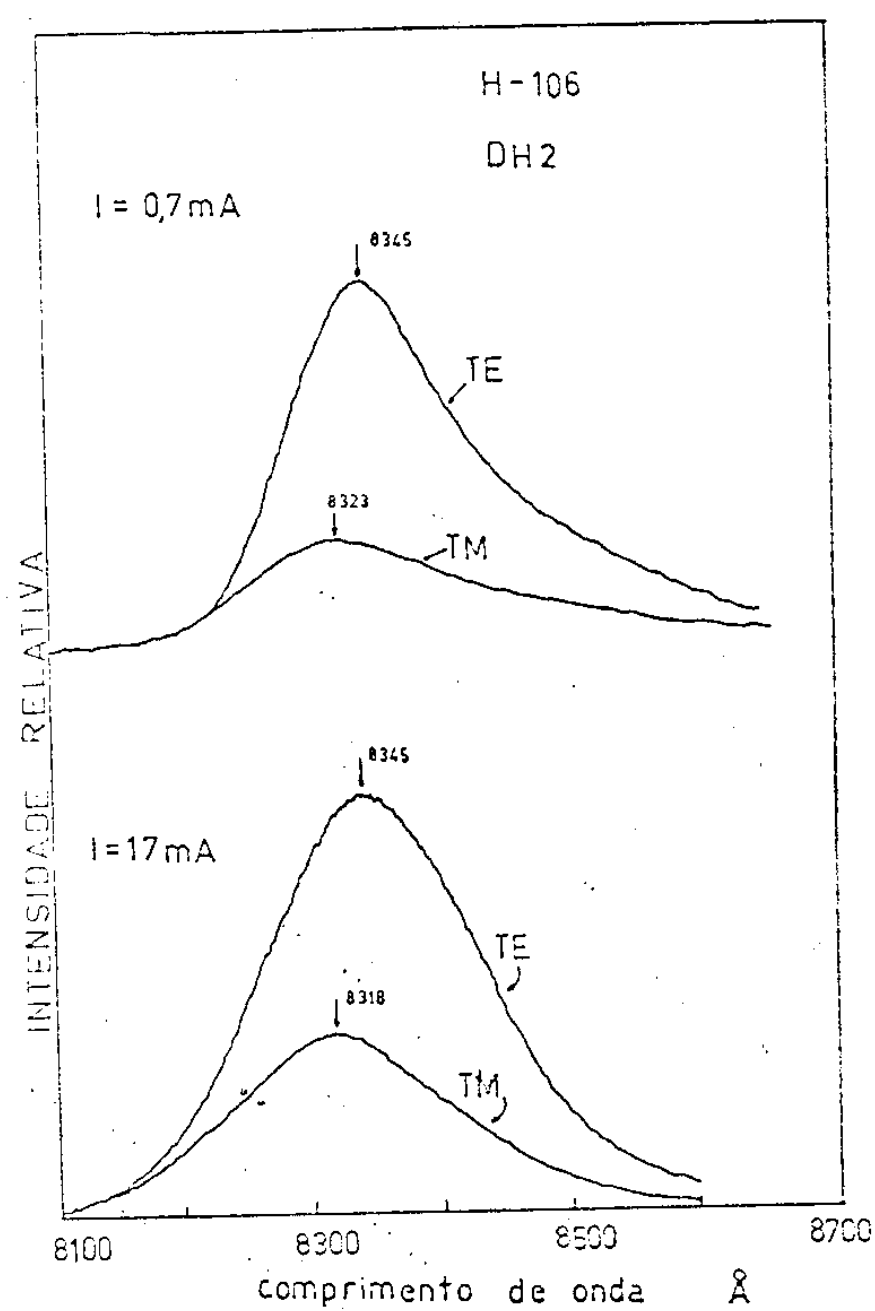
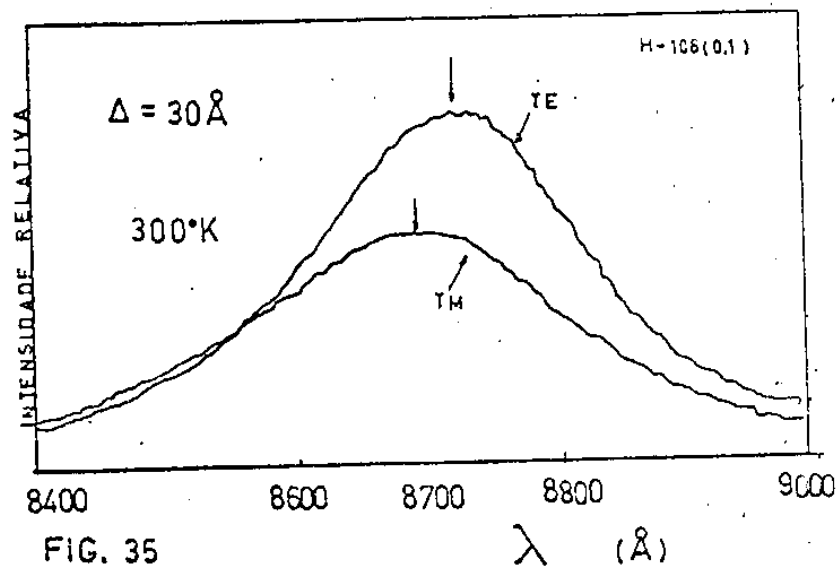
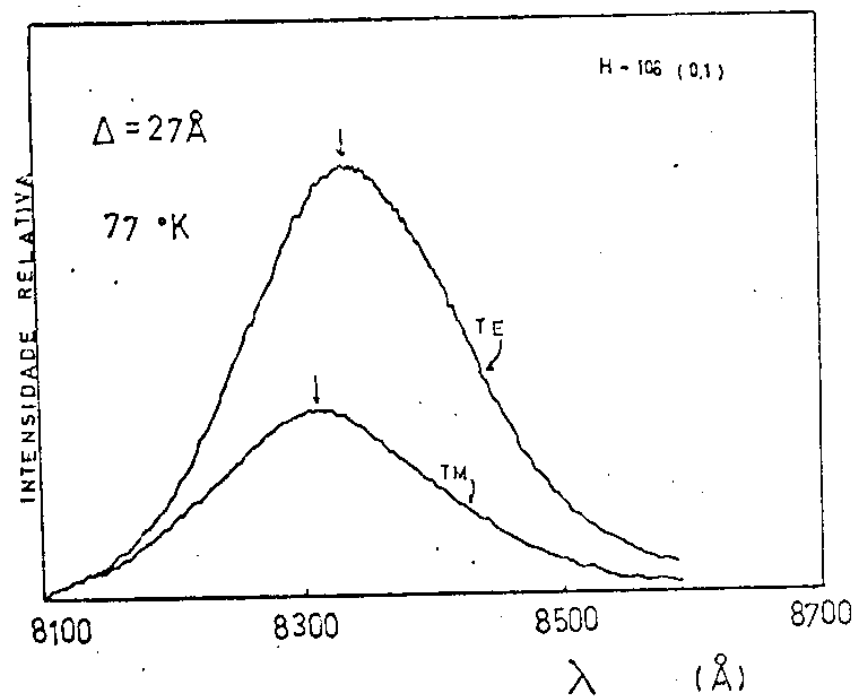


FIG 34

Com a intenção de descobrirmos a origem da diferença dos picos, várias medidas foram feitas na tentativa de obtermos alguma informação, porém até o momento foram sem êxito. A primeira tentativa foi examinar o efeito da pressão uniaxial externa. O resultado que temos é no entanto normal, exceto que a diferença inicial é contrária à esperada (Fig.32). A influência da solda, agora será três vezes menor (pois o laser agora é operado na temperatura ambiente), vai também no sentido correto, como podemos comparar na fig.33. A solda tende a aumentar ainda mais a diferença inicial enquanto a pressão uniaxial tende a reduzi-la.

A conclusão é que essa diferença inicial não pode ser atribuída a algum tipo de tensão existente na região ativa, pelo menos, tensões do tipo que discutimos.

Na figura 34 é mostrado o comportamento dos picos TE e TM para vários níveis de injeção de corrente, e na figura 35 para diferentes temperaturas. Nenhuma mudança significativa pudemos notar na separação dos picos, o que nos sugere a hipótese que esta separação está ligada à própria estrutura do laser, ou seja, à existência das camadas de GaAlAs ao redor da região ativa, um efeito semelhante ao que reduz as perdas do modo TE nos espelhos. Essa hipótese é discutida com detalhes a seguir.

III.b) Fatos que poderiam ser responsáveis pela diferença inicial dos picos TE e TM.

1) Ripper (23) sugeriu, a possibilidade de que o bombardeamento de prótons poderia ser responsável por essa anomalia da seguinte maneira: quando um material é bombardeado com prótons ele dilata-se. No caso do laser DH, a camada bombardeada tem um grau de liberdade possível de dilatar-se que é o perpendicular à junção. Como existe uma região que não foi bombardeada, que é justamente a região ativa, esta ficaria submetida a uma tensão que seria perpendicular à junção.

Essa hipótese foi testada experimentalmente em lasers DH. A figura 31 trás um espectro da emissão espontânea TE e TM, para um laser DH com contato de faixa de SiO_2 sem bombardeamento de protons. Esse espectro como podemos ver na mesma figura tem as mesmas características do laser com bombardeamento de protons.

2) Ainda Ripper (23) sugeriu, baseado no fato de que a região ativa é de apenas $2000 \text{ \AA}$ ($0,2 \mu\text{m}$), as funções de ondas eletromagnéticas e as bandas de energia seriam alteradas devido a quebra de periodicidade do cristal na direção perpendicular à junção. Essa hipótese não é de fácil verificação, e seria necessário um cálculo teórico muito demorado e longo, por esse fato esta hipótese não foi verificada.

3) Inspirado no modelo de refletividade discutido por Reinhardt e companheiros (22), fizemos uma tentativa de explicar a diferença inicial dos picos TE e TM, que discutimos a seguir.

Qualitativamente a refletividade poderia ser responsável pela anomalia da emissão espontânea por duas razões básicas:

1) Devido a existencia das camadas de $(\text{GaAl})\text{As}$ em torno da região ativa, grande parte da luz gerada dentro dela, chega aos espelhos fora de incidência normal (com angulo diferente de 90°). A figura 36 mostra a refletividade dos espelhos em função dos vários angulos de incidência para as duas polarizações.

2) A refletividade depende do comprimento de onda através do índice de refração.

Com estes dois fatos,

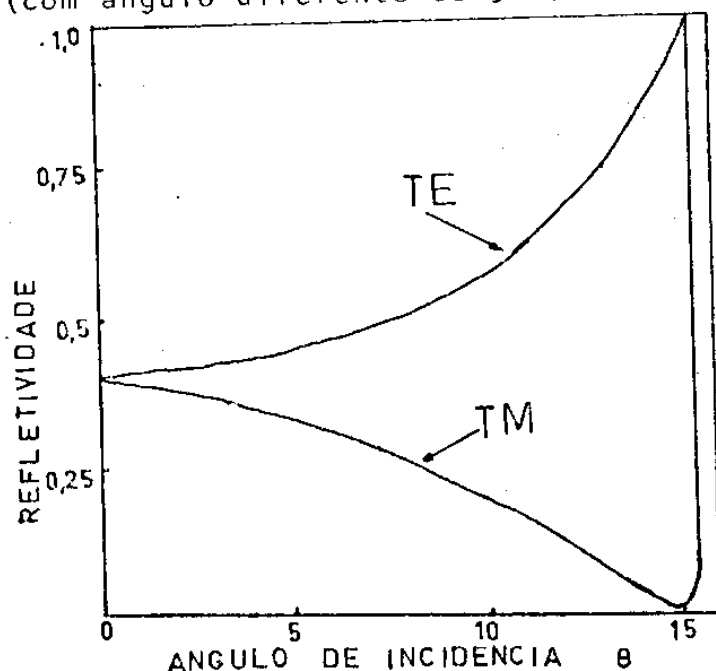


FIG. 36

apesar de que a luz gerada dentro do laser não tivesse distinção de polarização, a medida desta luz fora do dispositivo iria aparecer / deformada.

Um cálculo semi-quantitativo foi feito baseado no modelo de Reinhart (22), aproximando a emissão espontânea a um modo gaussiano. Com essa aproximação podemos escrever a refletividade como (22):

$$R_{TE} = R (1 + 1/K_1 K_2 \sigma^2) \quad \{22\}$$

$$R_{TM} = R (1 - 1/K_1 K_2 \sigma^2)$$

onde:

R - coeficiente de incidência normal

$K_1 = 2 \pi n_1 / \lambda$

$K_2 = 2 \pi n_2 / \lambda$

n_1 - índice de refração do GaAs (3.5)

n_2 - índice de refração do ar (1.0)

σ - parametro de confinamento ótico ($\approx 0.2 \mu m$ - ref.22)

Podemos dizer que a intensidade que medimos fora do dispositivo seria a integral do angulo limite negativo ao positivo de partes diferenciais de intensidade multiplicada pela transmissão da interface. Supondo que as intensidades geradas no dispositivo são iguais para ambas as polarizações e, para todos os angulos, podemos escrever que a intensidade medida fora é dada pelas expressões:

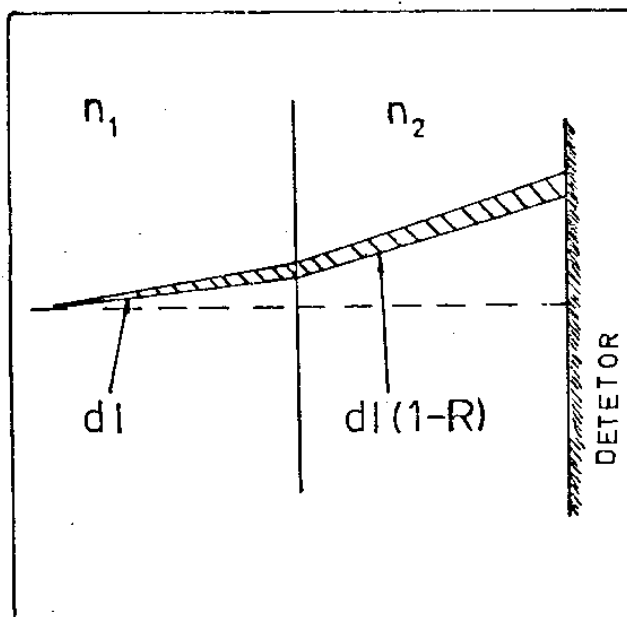


FIG-37- INTENSIDADE MEDIDA
FORA DO LASER

$$I_{TE} = \int_{-\theta_l}^{\theta_l} dI |1 - R_{TE}(\lambda, \theta)| \quad \{23\}$$

$$I_{TM} = \int_{-\theta_l}^{\theta_l} dI |1 - R_{TM}(\lambda, \theta)|$$

Onde R_{TE} e R_{TM} é dado pelas equações {22}.

Associando tudo isso ao índice de refração dado por

Frederico Dias Nunes:

$$N^2 = 21.953 + \frac{73.811}{-8.080 - (h\nu)^2 + (1.506)^2}$$

Todos os parâmetros usados nessa equação são para a temperatura de 103°K, porém poderíamos obter com facilidade dados para esta temperatura, e como já verificamos (Fig.35) a diferença dos picos não muda sensivelmente com a temperatura.

Um programa no computador foi feito, de tal maneira que ao entrarmos com um comprimento de onda, ele calculava o índice de refração, as refletividades e fazia a integração {23}; e saía com as intensidades de interesse.

Os resultados, não foram os esperados, são mostrados na / figura 38. Os picos estão praticamente no mesmo lugar em energia ; apenas a intensidade relativa é ligeiramente diferente para as diferentes polarizações. Isso conclui que alguma de nossas hipóteses base estão erradas ou realmente não é a refletividade a responsável pela anomalia TE ou TM.

Portanto, a conclusão é que a explicação de porque o laser de dupla-heteroestrutura tem os picos da emissão espontânea em diferentes energias e, o pico TM é o de maior energia é um assunto aberto, sem nenhuma justificacão clara; mesmo qualitativa.

Por esse fato, não podemos aplicar o modelo discutido, no capítulo II aplicado aos lasers de homoestrutura para discutir as pressões internas devido a existencia das camadas de GaAlAs em torno da região ativa.

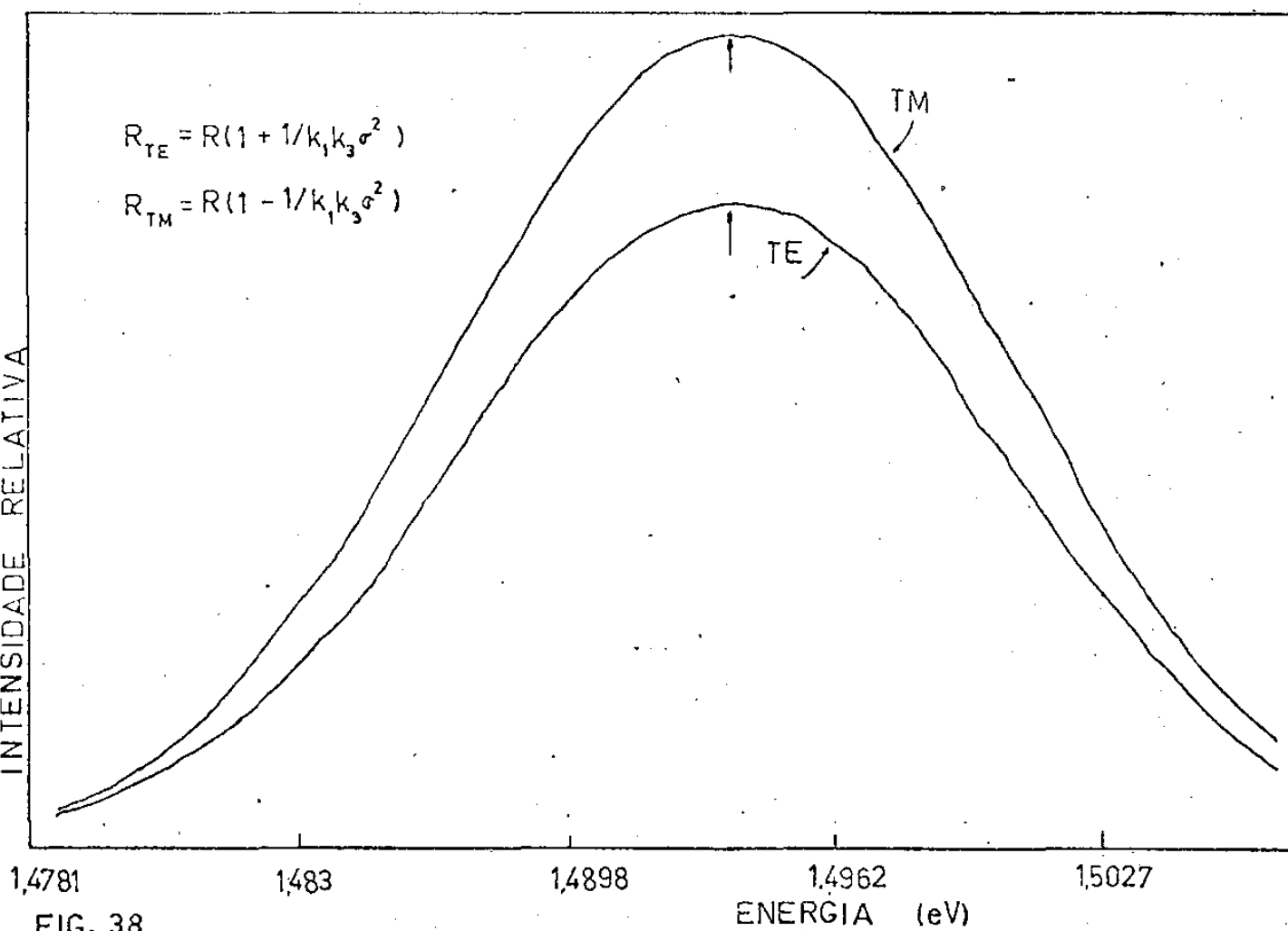


FIG. 38

CONCLUSÃO

Partindo de nossos resultados experimentais podemos propor um método eficiente e não destrutivo para estimarmos a tensão / induzida na região ativa pela solda do laser semiconductor. Da referencia 12 vemos que a diferença relativa de energia entre os picos TE e TM por atmosfera aplicada é cerca de $2,0 \times 10^{-6}$ e V. Isso leva a crer então que quando soldamos o dispositivo, podemos introduzir uma pressão da ordem de 1000 atm na região ativa, extremamente alta para o cristal. É claro que este resultado é apenas ordem de grandeza pois na determinação da diferença de energia dos picos da emissão espontânea cometemos um erro de quase 100%. Poderíamos também estimar as tensões induzidas pela solda pela variação da corrente limiar, porém nesta há muito mais fatores que influenciam, enquanto que na diferença de energia dos picos da emissão espontânea é só a pressão que influencia.

A possibilidade de aplicação deste método na medida da pressão interna nos lasers dupla-heteroestrutura fracassou devido / às características anômalas da emissão espontânea destes lasers. Várias tentativas foram feitas, com a intenção de entender e explicar a anomalia, porém foram sem êxito, ficando o assunto em aberto,

Apendice 1.

Efeitos da tensão uniaxial nos auto-valores e auto-funções do GaAs.

1.a) Hamiltoniana da Pressão.

A aplicação de pressão ou tensão uniaxial sobre um cristal, vai distorcer seus eixos unitários x, y, z para x', y', z' (13).

Considerando pequenas pressões, podemos considerá-la uma perturbação, assim expandir as funções de onda perturbadas como combinação linear das funções não perturbadas, satisfazendo as condições de contorno do cristal sem pressão.

A Hamiltoniana total para $K=0$, pode ser escrita como (12):

$$H = H_0 + H_{so} + H_p \quad \{A-1\}$$

onde

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

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\nabla \vec{V} \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \quad \{A-3\}$$

H_p é a perturbação em H_0 causada pela pressão.

Como em (12), (14), (15), (16) H_p pode ser escrita em termos dos momentos angulares e dos $\lambda_{\alpha\beta}$ que ligam a transformação dos eixos x, y, z aos novos eixos x', y', z' (13):

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

onde a^i , b^i e d^i são os potenciais de deformação hidrostática e uniaxial tetragonal e trigonal respectivamente.

O primeiro termo de H_p é um escalar, não contém operadores, e como estamos interessados em diferenças relativas, ele não tem uma importância relevante nos cálculos. Podemos depois de feito o cálculo adicionar, se necessário essa diferença de energia.

Definiremos então a Hamiltoniana H_p^I como:

$$H_p^I = - 3b^I \left\{ \left(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2 \right) E_{xx} + \text{permutações cíclicas} \right\} \\ - \frac{6d^I}{\sqrt{3}} \left\{ [L_x, L_y] E_{xy} + \text{permutações cíclicas} \right\} \quad \{A-4\}$$

Usando como base as auto-funções de $\vec{J}^2$ e $\vec{J}_z$, onde $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ com $j=1$ $s=1/2$ para a banda de valência. Mais explicitamente

$$\begin{aligned} |^{3/2}, ^{3/2}\rangle &= |V_{2+}\rangle = Y_{11}\uparrow \\ |^{3/2}, ^{1/2}\rangle &= |V_{1+}\rangle = 1/\sqrt{3} [\sqrt{2} Y_{10}\uparrow + Y_{11}\uparrow] \\ |^{1/2}, ^{1/2}\rangle &= |V_{3+}\rangle = 1/\sqrt{3} [-Y_{10}\uparrow + \sqrt{2} Y_{11}\uparrow] \\ |^{3/2}, ^{-3/2}\rangle &= |V_{2-}\rangle = Y_{1-1}\downarrow \\ |^{3/2}, ^{-1/2}\rangle &= |V_{1-}\rangle = 1/\sqrt{3} [\sqrt{2} Y_{10}\downarrow + Y_{1-1}\uparrow] \\ |^{1/2}, ^{1/2}\rangle &= |V_{3-}\rangle = 1/\sqrt{3} [Y_{10}\downarrow - \sqrt{2} Y_{1-1}\uparrow] \end{aligned} \quad \{A-5\}$$

Juntando a Hamiltoniana H_p^I com a interação spin orbita; podemos definir a Hamiltoniana H^I :

$$H^I = H_{so} + H_p^I \quad \{A-6\}$$

Cujos elementos de matriz na base referida $\{A-5\}$ são:

$$|H^I| = \begin{matrix} & |V_{2+}> & |V_{1+}> & |V_{1-}> & |V_{2-}> & |V_{3+}> & |V_{3-}> \\ \begin{bmatrix} -R & S & T & 0 & -1/\sqrt{2}S & -\sqrt{2}T \\ S^* & R & 0 & T & -\sqrt{2}R & \sqrt{3}/2S \\ T^* & 0 & R & -S & \sqrt{3}/2S^* & \sqrt{2}R \\ 0 & T^* & -S & -R & \sqrt{2}T^* & -1/\sqrt{2}S^* \\ -1/\sqrt{2}S^* & -\sqrt{2}R & \sqrt{3}/2S & \sqrt{2}T & -\Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2}T^* & \sqrt{3}/2S^* & \sqrt{2}R & -1/\sqrt{2}S & 0 & \Delta_0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad \{A-7\}$$

onde:

$$R = \frac{b^i}{2} (2 E_{zz} - E_{xx} - E_{yy}) \quad \{A-8\}$$

$$S = -d^i (E_{xz} - E_{yz}) \quad \{A-9\}$$

$$T = \frac{-3}{2} b^i (E_{xx} - E_{yy}) + i d^i E_{xy} \quad \{A-10\}$$

Considerando $\Delta_0 \gg R, S$ ou T , podemos usar o cálculo de perturbação em 1ª ordem teremos:

$$E_1^I = (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2}$$

$$E_2^I = -(R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \quad \{A-11\}$$

$$E_3^I = -\Delta_0$$

Incluindo a parte escalar de H_p ficamos com os auto-valores:

$$E_1 = -a^I (E_{xx} + E_{yy} + E_{zz}) + (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2}$$

$$E_2 = -a^I (E_{xx} + E_{yy} + E_{zz}) - (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} \quad \{A-12\}$$

$$E_3 = -a^I (E_{xx} + E_{yy} + E_{zz}) - \Delta_0$$

Tomando a direção (001) para aplicarmos uma tensão, podemos escrever:

$$E_{xx} = E_{yy} = S_{12} X$$

$$E_{zz} = S_{11} X \quad \{A-13\}$$

$$E_{\alpha\beta} = 0 \quad \alpha \neq \beta$$

Onde S_{ij} são as constantes elásticas e X a tensão uniaxial aplicada e os parâmetros R , S , T serão:

$$R = b^i (S_{11} - S_{12}) X = - \frac{\delta_{u001}}{2} X = - U_{001} X$$

$$S = 0 \quad \{A-14\}$$

$$T = 0$$

definindo:

$$\delta_H = a^i (S_{11} + 2S_{12})$$

$$\delta_{u001} = -2 b^i (S_{11} - S_{12})$$

Os auto-valores ficam escritos como:

$$E_1 = -a^i (S_{11} + 2S_{12}) X + |(b^i (S_{11} - S_{12}) X)^2|^{1/2} = \delta_H X + \frac{\delta_{u001}}{2} |X|$$

$$E_2 = -a^i (S_{11} + 2S_{12}) X - |(b^i)^2 (S_{11} - S_{12})^2 X^2|^{1/2} = \delta_H X - \frac{\delta_{u001}}{2} |X|$$

$$E_3 = \delta_H X - \Delta_0 \quad \{A-15\}$$

Particularmente no caso de uma tensão definimos $X = P$ onde P é positivo. Ficaremos com:

$$E_1 = \delta_H P + \frac{\delta_{\mu 001}}{2} P$$

$$E_2 = \delta_H P + \frac{\delta_{\mu 001}}{2} P \quad \{A-16\}$$

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

1.b) Auto-funções para H_p , para uma tensão na direção (001).

Para uma tensão na direção (001) de acordo com {A-14}, a matriz {A-7} fica simplesmente:

$$H_p = \begin{matrix} & |V_{2+}> & |V_{1+}> & |V_{1-}> & |V_{2-}> & |V_{3+}> & |V_{3-}> \\ \begin{bmatrix} -R & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R & 0 & 0 & -\sqrt{2} R & 0 \\ 0 & 0 & R & 0 & 0 & \sqrt{2} R \\ 0 & 0 & 0 & -R & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} R & 0 & 0 & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} R & 0 & 0 & -\Delta_0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad \{A-17\}$$

onde para pressão na (001) R é dado por:

$$R = b^I (S_{11} - S_{12}) X = \frac{-\delta_{\mu 001}}{2} X = -U_{001} X \quad \{A-18\}$$

Subtraindo novamente a parte escalar da Hamiltoniana H_p , teremos os auto-valores de {A-17}:

$$E_1 = \frac{\delta_{\mu 001}}{2} |X| = U_{\mu 001} |X|$$

$$E_2^1 = - \frac{\delta_{\mu 001}}{2} |X| = - U_{001} |X|$$

{A-19}

$$E_3^1 = - \Delta_0 = - \Delta_0$$

1.c) Auto-funções para o auto valor E_1^1

Para a parte degenerada da matriz {A-17} teremos:

$$H_P^1 = \begin{bmatrix} \frac{\delta_{\mu 001}}{2} (X - |X|) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & - \frac{\delta_{\mu 001}}{2} (X + |X|) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & - \frac{\delta_{\mu 001}}{2} (X + |X|) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\delta_{\mu 001}}{2} (X - |X|) \end{bmatrix}$$

{A-20}

e particularmente para o caso de uma tensão uniaxial paralela ao eixo (001) teremos:

$X = P$ onde $p > 0$. Assim a matriz {A-20} reduz-se a:

$$H_P^1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta_{\mu 001} P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\delta_{\mu 001} P & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

{A-21}

que gera as seguintes equações:

$$-\delta_{\mu 001} P b = 0$$

$$-\delta_{\mu 001} P c = 0 \quad \{A-22\}$$

donde concluimos que $b=c=0$, e que:

$$| \phi_{E'_{1+}} > = \frac{1}{\sqrt{2}} (|V_{2+}> + |V_{2-}>) \quad \{A-23\}$$

1.d) Auto-função para o auto valor E'_2

Novamente colocando $X = P$ com $P>0$ a matriz $\{A-20\}$ reduz-se a:

$$H'_P = \begin{bmatrix} \delta_{\mu 001} P & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta_{\mu 001} P \end{bmatrix}$$

$\{A-24\}$

que gera as equações:

$$\delta_{\mu 001} P a = 0 \quad \{A-25\}$$

$$\delta_{\mu 001} P d = 0$$

donde concluimos $a=d=0$ e também:

$$| \phi_{E'_{2+}} > = \frac{1}{\sqrt{2}} (|V_{1+}> + |V_{1-}>) \quad \{A-26\}$$

Temos porém que determinar quatro auto-funções com o requisito do ortonormalidade podemos, escolher outras duas como sendo:

$$| \varphi_{E_1^-} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|V_{2+} \rangle - |V_{2-} \rangle) \quad \{A-27\}$$

$$| \varphi_{E_2^-} \rangle = \frac{1}{2} (|V_{1+} \rangle - |V_{1-} \rangle)$$

Notamos porém que as funções:

$$| \varphi_{E_1^\pm} \rangle = |V_{2^\pm} \rangle \quad \{A-28\}$$

$$| \varphi_{E_2^\pm} \rangle = |V_{1^\pm} \rangle$$

também formam um conjunto de auto-funções da Hamiltoniana H_p . Por simplicidade, tomaremos o conjunto {A-28} como as novas auto-funções, assim, não precisamos trocar a matriz {A-17} para a nova base.

O conjunto total e final de auto-funções ficará então:

$$\begin{aligned} | \varphi_{E_1^\pm} \rangle &= |V_{2^\pm} \rangle \\ | \varphi_{E_2^\pm} \rangle &= |V_{1^\pm} \rangle \pm \frac{\delta_{11001}}{\sqrt{2} \Delta_0} P |V_{3^\pm} \rangle \\ | \varphi_{E_3^\pm} \rangle &= |V_{3^\pm} \rangle \pm \frac{\delta_{11001}}{\sqrt{2} \Delta_0} |V_{1^\pm} \rangle \end{aligned} \quad \{A-29\}$$

1.e) Tensão na direção (III)

A partir da determinação do tensor da tensão que é escrito neste caso como:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha\alpha} &= (S_{11} + 2 S_{12}) \frac{X}{3} \\ \epsilon_{\alpha\beta} &= \frac{S_{44}}{2} \frac{X}{3} \quad \alpha \neq \beta \end{aligned} \quad \{A-30\}$$

Consequentemente como auto-valores da Hamiltoniana de pressão

{A-7} os valores:

$$R = 0$$

$$S = -d^i E_{xy} (1-i) = \frac{-d^i (1-i) S_{44}}{6} \quad X$$

$$T = i d^i E_{xy} = \frac{i d^i S_{44}}{6} \quad X$$

e como auto-valores:

$$E_1' = (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2} = \left| \frac{d^i}{36} S_{44}^2 \cdot (3) \right|^{1/2} |X| = \frac{\sqrt{3} d^i S_{44}}{6} |X|$$

$$E_2' = - \frac{\sqrt{3} d^i S_{44}}{6} |X|$$

{A-31}

$$E_3' = -\Delta_0$$

Novamente somando a parte escalar e definindo novamente:

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

{A-32}

$$\delta_{\mu_{111}} = \frac{-d^i}{\sqrt{3}} S_{44}$$

Os auto-valores serão em termos dos novos valores definidos,

com $X = P$, $P > 0$:

$$E_1 = \delta_H P + \frac{1}{2} \delta_{\mu_{111}} |P|$$

$$E_2 = \delta_H P - \frac{1}{2} \delta_{\mu_{111}} P$$

{A-33}

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

1.f) Auto-função em $K = 0$ para tensão na direção (111).

A equação matricial para a parte degenerada de {A-17} escrita para o auto-valor E_n^I , onde $n = 1, 2$ vem a ser:

$$\begin{array}{cccc}
 |V_{2+}\rangle & |V_{1+}\rangle & |V_{1-}\rangle & |V_{2-}\rangle \\
 \left[\begin{array}{cccc}
 E_n^I & S & T & 0 \\
 S^* & E_n^I & 0 & T \\
 T^* & 0 & E_n^I & -S \\
 0 & T^* & -S^* & E_n^I
 \end{array} \right] \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = 0
 \end{array}$$

{A-34}

Ou o sistema:

$$E_n^I a + Sb + Tc = 0$$

$$S^* a + E_n^I b + Td = 0$$

$$T^* a + E_n^I c - Sd = 0 \quad \text{{A-35}}$$

$$T^* b - S^* c + E_n^I d = 0$$

mais a condição de normalização:

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$$

E como o sistema é degenerado, devemos ainda para determinar o conjunto completo de auto-funções a condição de ortonormalidade:

$$\langle \phi_{E_n} | \phi_{E_{n'}} \rangle = \delta_{nn'} \quad \text{{A-36}}$$

Usando todas estas condições podemos determinar as auto-funções para os respectivos auto-valores da parte degenerada da Hamiltoniana de pressão H_p^1 :

Assim podemos escrever as auto-funções como a combinação:

$$\begin{aligned} |\phi_{E_1^1+}\rangle &= \frac{S}{E_1^1} |V_{2+}\rangle + |V_{1+}\rangle + \frac{T^*}{E_1^1} |V_{2-}\rangle \\ |\phi_{E_2^1+}\rangle &= \frac{S}{E_2^1} |V_{2+}\rangle + |V_{1+}\rangle + \frac{T^*}{E_2^1} |V_{2-}\rangle \end{aligned} \quad \{A-37\}$$

Mudando a base da parte degenerada da Hamiltoniana H_p^1 ; seguindo as regras convencionais da teoria de perturbação, mudaremos a matriz para:

$$\begin{array}{c} |\phi_{E_1^1+}\rangle \quad |\phi_{E_2^1+}\rangle \quad |\phi_{E_2^1-}\rangle \quad |\phi_{E_1^1-}\rangle \quad |V_{3+}\rangle \quad |V_{3-}\rangle \\ \left[\begin{array}{cccccc} E_1^1+ & 0 & 0 & 0 & -S/\sqrt{2} & -\sqrt{2} T \\ 0 & E_2^1+ & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3/2} S \\ 0 & 0 & E_2^1- & 0 & \sqrt{3/2} S^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1^1- & \sqrt{2} T^* & -S^*/\sqrt{2} \\ -S^*/\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3/2} S & \sqrt{2} T & -\Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2} T^* & \sqrt{3/2} S^* & 0 & -S/\sqrt{2} & 0 & -\Delta_0 \end{array} \right] \end{array}$$

{A-38}

Para um maior resumo e mais clareza, vamos definir alguns parâmetros ligados às constantes elásticas:

Esses parâmetros são:

$$\alpha = \frac{d^I S_{44}}{6}$$

{A-39}

$$\beta = -\alpha (1-i)$$

Redefinindo os auto-valores e os parâmetros, ficaremos com:

$$R = 0$$

$$S = \beta X$$

{A-40}

$$T = i\alpha X$$

e os auto-valores:

$$E_1' = \sqrt{3} \alpha |X|$$

$$E_2' = -\sqrt{3} \alpha |X|$$

{A-41}

$$E_3' = -\Delta_0$$

As auto-funções {A-37} mudarão para:

$$|\phi_{E_1'\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\beta}{\alpha} \frac{X}{|X|} |V_{2\pm}\rangle + |V_{1\pm}\rangle - \frac{i}{\sqrt{3}} \frac{X}{|X|} |V_{2-}\rangle$$

$$|\phi_{E_2'\pm}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\beta}{\alpha} \frac{X}{|X|} |V_{2\pm}\rangle + |V_{1\pm}\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}} \frac{X}{|X|} |V_{2-}\rangle$$

{A-42}

onde novamente X representa tensão ou pressão aplicada na direção (111).

Vemos claramente da maneira que estão escritos as auto-funções

que, quando trocamos o sentido da pressão, de compressiva para descompressiva, as auto-funções para os respectivos auto-valores que permanecem os mesmos, são trocados.

E para conjunto de auto-função da Hamiltoniana da pressão H'_p , em primeira ordem da teoria de perturbação, serão:

$$|\phi_{E_{1+}}\rangle = |\phi_{E'_{1+}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\beta X}{(\Delta_0 + \sqrt{3}\alpha|X|)} |V_{3+}\rangle + \frac{i\sqrt{2}\alpha X}{\Delta_0 + \sqrt{3}\alpha|X|} |V_{3-}\rangle$$

$$|\phi_{E_{2+}}\rangle = |\phi_{E'_{2+}}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\beta X}{(\Delta_0 - \sqrt{3}\alpha|X|)} |V_{3-}\rangle$$

$$|\phi_{E_{2-}}\rangle = |\phi_{E'_{2-}}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\beta X}{(\Delta_0 - \sqrt{3}\alpha|X|)} |V_{3+}\rangle$$

$$|\phi_{E_{1-}}\rangle = |\phi_{E'_{1-}}\rangle + \sqrt{2} \frac{i\alpha X}{(\Delta_0 - \sqrt{3}\alpha|X|)} |V_{3+}\rangle + \frac{\beta X}{\sqrt{2}(\Delta_0 + \sqrt{3}\alpha|X|)} |V_{3-}\rangle$$

{A-43}

REFERÊNCIAS

- (1) R. N. Holl, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys and R. O. Carlson, Phys. Rev. Lett. 366 (1962).
- (2) M. I. Nathan, W. P. Dumke, G. Burus, F. H. Dill and G. J. Lasher Appl. Phys. Lett. 1, 62 (1962).
- (3) T. M. Quiot, R. H. Rediker, R. J. Keyes, W. E. Kraig, B. Lax, / A. L. Mc Whorter and H. J. Zeigler, Appl. Phys. Lett. 1,91(1962)
- (4) M. G. A. Bernard and G. Durafforg, Phys. Status Solid 1,699(1961)
- (5) H. Kroemer, Proc. IEEE 51, 1782 (1963).
- (6) Z. H. Alfredov and R. F. Kazarinov - Author's Certificate 1032155/ 26-25 (USSR) (1963) (como é citado no livro "Applied Solid State Physics" vol.4 - Heteroestructure Junction Lasers-pg.325 (1974).
- (7) H. Rupprecht, J. M. Woodall and D. G. Pettit, Appl. Phys. Lett. 11, 81 (1967).
- (8) F. E. Dymont, J. E. Ripper and T. H. Zachos, J. of App. Phys.40,4 (1969).
- (9) M. A. Sacilotti, C. J. Hwang, N. Patel, F. C. Prince and D.J.Bull, Conferência de Lasers Semicondutores, japão 1976.
- (10) R. L. Hartman and A. R. Hartman, Appl. Phys. Lett. 23, 147 (1973).
- (11) P. Petroff and R. L. Hartman, Appl. Phys. Lett. 23, 469, (1973).

- (12) Tese de Mestrado de Maria Salete Sartório - UNICAMP - IFGW-1975.
- (13) C. Kittel - Solid State Physics.
- (14) G. E. Pikus and G. L. Bir - Soviet Phys. - Solid State 1, 1502 (1960).
- (15) N. H. Kleiner, L. M. Roth - Phys. Rev. Lett., 2, 334, (1954).
- (16) F. H. Pollack and M. Cardona - Phys. Rev., 172, 816, (1968).
- (17) N. B. Patel, J. E. Ripper, P. Brosnon, IEEE Journal of Q.Elec- tron. QE-9 nº2 328-341 (1973).
- (18) Tese de Mestrado de Irajã N. Bandeira - UNICAMP (1974).
- (19) F. K. Reinhart, I. Hoyashi, M. B. Panish, J. of Appl. Phys. 42, 4466, (1971).
- (20) M. Ettenberg and R. J. Paff - J. of Appl. Phys. 41,3926 (1970).
- (21) F. K. Reinhart and R. A. Logan - J. of Appl. Phys. 44,3171 (1973).
- (22) F. K. Reinhart, I. Hoyashi and M. B. Panish - J. of Appl. Phys. 42, 4466 (1971).
- (23) J. E. Ripper - Comunicação particular.
- (24) F. D. Nunes - Tese de Mestrado - IFGW - UNICAMP - 1974.