

"ESTUDO DE HETERO-ESTRUTURAS DE CAMADAS TENSIONADAS
DE INGAAs/GAAs"

FERNANDO IKAWA

ORIENTADOR

PROF. DR. PAULO MOTISUKE

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

CAMPINAS - SÃO PAULO

1988

*Este exemplar corresponde a redação
final da tese defendida pelo a-
luno Fernando Ikawa e aprova-
do pela comissão julgadora.*



Paulo Motisuke
9/12/88

AGRADECIMENTOS

Quero deixar meus agradecimentos às pessoas que, de uma forma ou de outra, me prestaram inestimável ajuda no preparo desta tese: ao Prof. Paulo Motisuke, pela orientação e incentivo; ao Prof. Fernando Cerdeira, pelas proveitosas discussões e sugestões; ao Prof. Marco Antonio Saciloti, pelo crescimento e tratamento térmico das amostras; ao Prof. José Antonio Brum, pela iniciação aos cálculos computacionais; à Profa. Vólia Lemos Crivelanti, pelo auxílio nas medidas de espectroscopia Raman e aos amigos dos laboratórios do Grupo de Propriedades Ópticas, pelo incentivo e amizade.

Agradeço à FAPESP, TELEBRAS, CNPq e FINEP, pelo suporte financeiro.

ABSTRACT

We present a detailed study of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ strained-layer single quantum well and superlattices. The strain in each type of layer in the superlattices was determined from the Raman measurements. We determined the energy difference between the confined states of electrons in the conduction band and the strain-split heavy and light holes in the valence band from photoluminescence and transmission spectra. From this difference we obtain $0.5 < Q_0 < 0.6$ for the band off-set at the $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ hetero-junction. We also studied the effects of thermal annealing on the confined electronic states of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ strained-layer quantum well and superlattices. The samples were annealed under $\text{AsH}_3 + \text{H}_2$ atmosphere at different temperatures in the range 750 to 900°C. The shift to high energy of the photoluminescence and absorption peaks are quantitatively interpreted in terms of changes in the potential profile due to both, the In and Ga interdiffusion and strain release. We determined the interdiffusion coefficient at 850°C to be $3 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg}$, with an activation energy of 2.07 eV.

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo detalhado de poços quânticos e super-redes de camadas tensionadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. A deformação de cada camada das super-redes foi determinada por medida de espalhamento Raman a 300K. As energias dos estados confinados de elétron na banda de condução e dos buracos na banda de valência foram obtidas por medida de fotoluminescência e absorção a 2K. A partir destas medidas foi obtido o fator Q_c da descontinuidade da banda de condução da junção $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}/\text{GaAs}$, como sendo $0,5 < Q_c < 0,6$. Apresenta também um estudo do efeito de tratamento térmico em poços quânticos e super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. As amostras foram recozidas em uma atmosfera de $\text{AsH}_3 + \text{H}_2$ com temperaturas variando entre 750 e 900°C. Os deslocamentos na posição de pico da banda de luminescência e da absorção foram interpretados, quantitativamente, em termos da mudança do perfil de potencial, devido ao efeito de interdifusão de In e Ga e da relaxação da tensão. Os valores obtidos para o coeficiente de interdifusão de In e Ga a 850°C e a energia de ativação foram, respectivamente, de $3 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg}$ e 2,07 eV.

ÍNDICE

- AGRADECIMENTOS	pag. 11
- ABSTRACT	111
- RESUMO	iv
- ÍNDICE	v
- LISTA DE SÍMBOLOS	vi
 CAP I - INTRODUÇÃO	 pag. 01
CAP II - PREPARAÇÃO DAS AMOSTRAS	04
A. Crescimento	04
B. Tratamento térmico	05
CAP III - MEDIDAS EXPERIMENTAIS	06
A. Fotoluminescência a 2K	06
B. Transmissão a 2K	08
C. Espalhamento Raman	08
CAP IV - MODELOS TEÓRICOS	10
A. Estrutura de bandas de energia em Semicondutores sob pressão biaxial	10
B. Modos de vibração em super-redes de $\text{In}_{\text{x}}\text{Ga}_{1-\text{x}}\text{As}/\text{GaAs}$ sujeitos a pressão biaxial	15
C. Estados eletrônicos em poços quânticos e super-redes de interfaces abruptas	23
D. Estados eletrônicos em poços quânticos e super-redes submetidos a tratamentos térmicos	26
D1 - Poços quânticos com $d_B < d_B^C$	28
D2 - Super-redes com $d_{sr} \geq d_{sr}^C$	30
CAP V - ANÁLISE DOS DADOS EXPERIMENTAIS	33
A. Super-redes	33
B. Poços quânticos submetidos a tratamentos térmicos	42
C. Super-redes submetidas a tratamentos térmicos	46
CAP VI - CONCLUSÃO	49
 - TABELAS	 52
- REFERÊNCIAS	61
- FIGURAS	66

LISTA DE SÍMBOLOS

- a - parâmetro de rede
- a_{gr} - parâmetro de rede da super-rede
- $\langle a_{gr} \rangle$ - valor médio de a_{gr}
- σ - potencial de deformação hidrostática
- b - potencial de deformação uniaxial apropriada à simetria tetragonal
- d - potencial de deformação uniaxial apropriada à simetria romboédrica
- d - espessura da camada
- d_{gr} - espessura total da super-rede
- d^C - espessura crítica de uma camada
- d_{gr}^C - espessura crítica da super-rede
- D - coeficiente de interdifusão
- E_g - energia do "gap"
- E_a - energia de ativação
- h - constante de Planck
- $\hbar$ - constante de Planck / 2π
- k - vetor de onda
- L_D - comprimento de difusão
- m_e - massa efetiva do elétron
- m_{hh} - massa efetiva do buraco pesado
- m_{lh} - massa efetiva do buraco leve
- ρ - parâmetro fenomenológico (pag. 16)
- q - parâmetro fenomenológico (pag. 16)
- $Q_e = \Delta E_c / \Delta E_g$ ("band offset")
- r - parâmetro fenomenológico (pag. 16)

S_{ij} - constante elástica

t - tempo de recozimento

T - período da super-rede

x - composição de In em $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

X_{ij} - pressão

y - composição de Al em $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$

$$\alpha = -2S_{12}/(S_{11} + S_{12}) \quad (\text{pag. 12})$$

$$\beta = (\alpha p - 2q)/(2\omega_0^2) \quad (\text{pag. 18})$$

Δ_0 - diferença de energia entre os pontos Γ_7 e Γ_8

γ_0 - largura da linha Raman

Γ - centro da zona de Brillouin

ϵ - deformação

$$\theta = (\omega_0^A - \omega_0^B)/(\alpha_0 \omega_0^A) \quad (\text{pag. 19})$$

λ - autovalor da equação de Schrödinger (energia)

ν - frequência do fóton

$$\rho = (a(x_0) - a_A)/(x_0 a_A) \quad (\text{pag. 20})$$

σ - desvio quadrático médio de α_{gr}

τ - coeficiente de expansão térmica

ϕ - função de onda

ψ - função de onda

ω - frequência do fônon

CAPITULO I

- INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, tem sido dada muita ênfase ao estudo de hetero-estruturas de camadas tensionadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, devido a sua potencialidade na utilização em dispositivos opto-eletrônicos. Na fabricação destes dispositivos, é importante levar em conta alguns parâmetros da hetero-estrutura que influenciam, diretamente, o seu desempenho, tais como: i) espessura crítica das camadas; ii) descasamento da banda de energia ("band offset"); iii) coeficiente de interdifusão de In e Ga; etc. A diferença dos parâmetros de rede entre $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e GaAs varia, linearmente, com a composição x de In e é de 7% para x = 1. Apesar desta diferença, quando camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ são crescidas sobre substrato de GaAs, cresce, inicialmente, com o mesmo parâmetro de rede do substrato e a camada fica sujeita a uma pressão (ou tensão) biaxial, onde toda a sua energia elástica é armazenada na rede [1]. Entretanto, quando a espessura desta camada ultrapassa um certo valor crítico, d^c , esta energia começa a ser liberada (relaxação da pressão), criando deslocamentos (ou defeitos) na interface entre a camada e o substrato [1] e, neste caso, o parâmetro de rede da camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ se torna maior que a do GaAs. Esta espessura crítica depende da diferença dos parâmetros de rede ou da composição de In [2-6]. No caso de hetero-estruturas feitas de camadas alternadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (ou super-redes), ainda que a espessura de cada camada seja menor que a espessura crítica, poderá ocorrer também a relaxação da

tensão, alterando o parâmetro de rede da super-rede, a_{gr} , [7]. Neste caso, a camada de $In_xGa_{1-x}As$ estará comprimida e a camada de GaAs dilatada. Esta relaxação ocorre quando a espessura total da super-rede, d_{gr} , é maior que a espessura crítica da super-rede, d_{gr}^C , a qual também depende da composição de In nas camadas.

O efeito da tensão sobre a estrutura de banda de energia de um semiconductor é bastante conhecido [8,9] e nas hetero-estruturas de $In_xGa_{1-x}As/GaAs$, as camadas, tanto de GaAs como de $In_xGa_{1-x}As$, apresentam a energia do "gap" fundamental modificada. Por exemplo, no ponto Γ da zona de Brillouin a degenerescência entre as bandas de buraco pesado e de buraco leve é levantada devido à tensão [8,9]. Isto faz com que o buraco pesado e o buraco leve fiquem confinados em poços de potenciais diferentes [10-12], podendo, inclusive, existir casos em que o buraco leve fique confinado na região da barreira (ou GaAs) [10]. A fração Q_0 ($=\Delta E_C/\Delta E_g$) da diferença de energia do "gap", ΔE_g , entre GaAs e $In_xGa_{1-x}As$, que é atribuída a banda de condução ΔE_C , é conhecida como descasamento da banda ou "band offset". Os valores experimentais de Q_0 encontrados na literatura variam desde 0,4 a 0,7 [10-12]. Tendo em vista esta grande variação dos valores encontrados de Q_0 , medidas experimentais cuidadosas para obtenção de valores mais confiáveis são de grande importância no atual estágio de conhecimento de hetero-estruturas de $In_xGa_{1-x}As/GaAs$.

Um dos fatores limitantes na fabricação de dispositivos feitos de hetero-estruturas é a interdifusão de materiais, que ocorre nas interfaces durante o processo de tratamento térmico [13,14]. Esta interdifusão por indução térmica tem sido bastante estudada em hetero-estruturas de $Al_yGa_{1-y}As/GaAs$, onde os

parâmetros de rede dos dois materiais são, praticamente, iguais [13-19]. O coeficiente de interdifusão de Al e Ga foi obtido, experimentalmente, por diferentes técnicas de medidas [13 a 19] e varia entre 10^{-18} a 10^{-19} cm^2/seg , dependendo da composição de Al. Durante o tratamento térmico de hetero-estruturas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ pode ocorrer, além da interdifusão de In e Ga, também a relaxação da tensão, criando deslocamentos na interface. O aparecimento destas deslocamentos pode ser outro fator limitante na fabricação de dispositivos feitos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Não foi encontrado na literatura dados sobre a interdifusão de In e Ga em hetero-estruturas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Este trabalho consiste em determinar o parâmetro Q_e e o coeficiente de interdifusão de In e Ga na interface $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ em amostras de poços quânticos e super-redes. Para tanto, foi utilizado a espectroscopia Raman para determinar as deformações das camadas e a espectroscopia de fotoluminescência e de absorção para determinar os níveis de energia dos portadores confinados. A preparação das amostras está descrita no capítulo II e no capítulo III está a descrição da parte experimental das medidas. Os modelos teóricos, para analisar estes dados experimentais, estão apresentados no capítulo IV e as discussões e os resultados de análises estão apresentados no capítulo V.

CAPITULO II

- PREPARAÇÃO DAS AMOSTRAS

A. CRESCIMENTO

As amostras foram crescidas por LPMOVPE ("Low Pressure Metalorganic Vapor Phase Epitaxy") no laboratório da NRC, Ottawa, Canadá L201, sobre substratos de GaAs com orientação na direção (001) e à temperatura de 625°C. Foi utilizada uma razão AsH_3/TMGa de 80 com a pressão parcial de AsH_3 de $6,5 \times 10^{-4}$ atm, obtendo-se com isto uma taxa de crescimento da ordem de 5Å/seg. As amostras utilizadas neste trabalho estão listadas na tabela I. O poço quântico (H63) é constituído de uma camada "buffer" de GaAs com 1µm de espessura, seguida por uma camada de $\text{In}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{As}$ com 80Å e de uma última camada de 500Å de GaAs. As super-redes são constituídas também de uma camada "buffer" de GaAs de 1µm, seguida por camadas alternadas com 20 períodos de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (camada B) e GaAs (camada A) com espessuras d_B e d_A , respectivamente. As espessuras d_B/d_A são de 50/50Å, 100/100Å e 200/100Å, respectivamente, nas amostras H27, G53 e G54. As camadas de GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ são do tipo-n sem dopagem intencional e com uma concentração de portadores livres à temperatura ambiente de $\sim 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

As superfícies das amostras H63 e H27, quando observadas através de um microscópio Nomarski, são completamente espelhadas sem defeitos visíveis. Nas super-redes G53 e G54, foram observadas algumas estrias em duas direções perpendiculares ("cross-hatch"),

devido a uma pequena relaxação da tensão. No caso da camada espessa de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (amostra H23), a densidade destas estrias é muito grande.

B. TRATAMENTO TÉRMICO

Os poços quânticos e as super-redes foram submetidos a tratamentos térmicos, à diversas temperaturas entre 750 e 900°C, em um reator horizontal de MOVPE, no laboratório do CPqD-Telebrás, numa atmosfera de $\text{AsH}_3 + \text{H}_2$. A pressão parcial de arsina utilizada foi 5×10^{-3} atm. Nesta pressão, a taxa líquida de evaporação do arsênico das camadas de GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ pode ser considerada muito reduzida. Isto vem do fato de que a pressão de vapor no equilíbrio devido evaporação de As_2 do GaAs, à temperatura de 900°C, é de $\sim 8 \times 10^{-6}$ atm, enquanto que do InAs é de $\sim 1 \times 10^{-3}$ atm [21]. No caso do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com $x = 0,12$ e 0,23 e supondo que a sua pressão de vapor esteja entre os valores limites do GaAs e InAs, esta será certamente menor que 5×10^{-3} atm. As temperaturas e os tempos de tratamento térmico utilizados para cada amostra estão listados na tabela II.

As superfícies das amostras de poços quânticos com diferentes tratamentos térmicos continuaram a mesma, sem defeitos ou estrias, o que é uma indicação de que a camada de $\text{In}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{As}$ manteve comensurada com o substrato de GaAs. Por outro lado, nas amostras de super-redes submetidas a tratamentos térmicos, foram observados um aparecimento de estrias na amostra H27 e um aumento na densidade destas na amostra 853, indicando a ocorrência da relaxação da tensão.

CAPITULO III

- MEDIDAS EXPERIMENTAIS

A. FOTOLUMINESCÊNCIA A 2K

As medidas de fotoluminescência foram realizadas com as amostras imersas em He super-fluido a 2K, dentro de um criostato super - Varitamp (Janis Research Company, modelo DT). Como fonte de excitação foi utilizada a linha 5145Å do laser de Ar^+ ou 6328Å do laser de He-Ne, com densidade de potência de excitação entre 10mW/cm^2 e 1W/cm^2 . A radiação de luminescência foi analisada com um espectrômetro simples com grade de difração de 1200 linhas/mm e detectado com uma fotomultiplicadora tipo S-1, refrigerada com vapor de nitrogênio líquido. A amplificação do sinal foi feita com um eletrômetro (Keithley, modelo 610C), acoplado a um microcomputador do tipo IBM PC-XT (ITAUTEC - 1700 PCXT). As figuras 1, 2 e 3 mostram alguns espectros típicos de fotoluminescência de poços quânticos e super-redes, antes e depois do tratamento térmico.

Para a verificação da qualidade da interface, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, foram obtidos espectros de fotoluminescência a 2K do poço quântico H63 em função da densidade da potência de excitação, I_{exc} , como está mostrado na Figura 1. Com o decréscimo da densidade da potência de excitação, de 1W/cm^2 para 10mW/cm^2 , a largura da banda a meia altura diminuiu de 4,5 meV para 3,8 meV, e a posição do pico deslocou de $\sim 1\text{meV}$ para a região de menor energia. Para densidades de potência menores que 10mW/cm^2 não

foram observadas mudanças na largura da banda de fotoluminescência. As formas destas bandas de emissão são, praticamente, simétricas. Todos estes comportamentos são bastante semelhantes aos casos observados em poços quânticos de $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ com interfaces bastante abruptas [22,23]. Tanto a forma simétrica da banda de fotoluminescência, como a sua largura finita são atribuídas às flutuações aleatórias na largura do poço quântico, formando estruturas tipo ilhas com dimensões muito menores que o raio de Bohr do exciton bidimensional. As espessuras destas ilhas podem ser estimadas em unidades de monocamadas atômicas (ou metade do parâmetro de rede). Por exemplo, partindo de um modelo simples de um poço quântico com barreira infinita, os níveis de energia são dados por [22,23]:

$$E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \frac{n^2}{d_B^2} \quad (\text{III.A.1})$$

onde m^* é a massa efetiva do portador considerado e n é um número inteiro. A largura da banda de emissão, $\Delta h\nu$, pode ser aproximada como sendo devido a variação em d_B , ou seja:

$$\Delta h\nu = \Delta E = \frac{2 E \Delta d_B}{d_B} \quad (\text{III.A.2})$$

onde E é agora a soma das energias de confinamento dos elétrons e dos buracos e quando m^* é substituído por $(1/m_e + 1/m_h)^{-1}$. Neste caso,

$$E \approx h\nu_{\text{exp}} - E_g \quad (\text{III.A.3})$$

onde $h\nu_{\text{exp}}$ é a posição do pico da banda de fotoluminescência do poço quântico e E_g é a energia do "gap" da camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Para valores de Δd_B iguais a a e $a/2$, onde a é o valor do parâmetro de rede de InGaAs [21], da Eq. (III.A.2), temos que os valores de $\Delta h\nu$ são iguais a 5 meV e 2,5 meV, respectivamente. Como

mostrado na figura 1, a largura da banda obtida, experimentalmente, é de 3,8 meV e está entre os valores correspondentes de $\Delta h\nu$ para Δd_B entre $\frac{a}{2}$ e a . Isto significa, que a flutuação de d_B é da ordem de uma ou duas monocamadas atômicas [20]. Assim, a qualidade das amostras aqui utilizadas é comparável a das melhores amostras produzidas por outros sistemas de crescimento [20,24] com interfaces bastante abruptas.

B. TRANSMISSÃO A 2K

As medidas de transmissão foram realizadas com os mesmos equipamentos e montagem experimental, utilizados na medida de fotoluminescência, exceto pela fonte de radiação, que foi substituída por uma lâmpada de 75 W com filamento de tungstênio. Foi possível observar bandas de absorção somente com as amostras de super-redes, antes e depois do recozimento, cujos espectros estão apresentados nas figuras 4 e 5.

C. ESPALHAMENTO RAMAN

A medida de espalhamento Raman foi realizada à temperatura ambiente numa configuração de retro-espalhamento ("back scattering") na face (001), utilizando como fonte de excitação a linha 5145Å do laser de argônio. A potência de excitação foi de ~ 100 mW e o feixe foi focalizado com uma lente cilíndrica para evitar o aquecimento da amostra. A radiação espalhada (Stokes) foi analisada com um espectrômetro duplo (SPEX,

1401) e detectada com fotomultiplicadora tipo S-20 acoplada a um sistema de contador de fótons.

Na configuração de retro-espalhamento, pela regra de seleção de espalhamento em cristais do tipo "zinc-blenda" na face (001), a radiação espalhada é devido a vibração do fônon LO [25]. A figura 6 mostra os espectros típicos de espalhamento Raman das super-redes H27, G53, G54 e das duas amostras de GaAs e $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$, utilizadas como referência.

- MODELOS TEÓRICOS

A. ESTRUTURAS DE BANDAS DE ENERGIA EM SEMICONDUTORES SOB PRESSÃO BIAXIAL.

A aplicação de uma pressão uniaxial sobre um semiconductor produz uma deformação, que modifica o parâmetro de rede e a simetria do material, resultando em uma mudança significativa na estrutura da banda de energia [8,9]. Esta mudança se reflete nas propriedades ópticas do material. Como está mostrado na figura 7, na ausência da interação spin-órbita e, também da pressão, a banda de valência no centro da zona de Brillouin em $\vec{k} = 0$, num material do tipo "Zinc-blende" (que é o caso do GaAs, InAs,...), é um multipletto de orbitais do tipo "p", 6 vezes degenerado com simetria orbital J_{15} [26]. A interação spin-órbita quebra esta degenerescência em multiplettos $p_{3/2}$, 4 vezes degenerados ($J=3/2$; $m_J = \pm 3/2, \pm 1/2$, em notação dos harmônicos esféricos, onde J é o momento angular total e m_J é a sua componente na direção z) e um multipletto $p_{1/2}$, duplamente degenerado ($J=1/2$; $m_J=\pm 1/2$). Com a presença de tensão uniaxial a banda $p_{3/2}$ se separa em ($J=3/2$, $m_J=\pm 1/2$) e ($J=3/2$, $m_J=\pm 3/2$) [8,9]. A primeira banda é denotada por v_1 (buraco leve), a segunda por v_2 (buraco pesado), a banda ($J=1/2$, $m_J=\pm 1/2$) por v_3 e o mínimo da banda de condução, BC ou (Γ_c), por c_1 .

O Hamiltoniano H_{ϵ} , devido a pressão (deformação ϵ), agindo sobre a banda de condução e nas bandas de valências, é

escrito como (8,9)

$$H_{\epsilon}^{(i)} = - \sigma^{(i)} \left[\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz} \right] - 3 b^{(i)} \left[\left[L_x^2 - \frac{1}{3} L^2 \right] \epsilon_{xx} + \text{p.c.} \right]$$

$$- \frac{6 d^{(i)}}{3^{1/3}} \left[\left\{ L_x L_y \right\} \epsilon_{xy} + \text{p.c.} \right], \quad (a)$$

onde

(IV.A.1)

$$\left\{ L_x L_y \right\} = \frac{1}{2} \left[L_x L_y + L_y L_x \right], \quad (b)$$

$\epsilon_{m,n}$ são componentes do tensor de deformação $\underline{\epsilon}$, $\hat{L}$ é o operador momento angular, p.c. significa permutações cíclicas com respeito a x, y e z, e o índice i representa a banda de condução ou de valência. O parâmetro σ é o potencial de deformação hidrostática e b e d são, respectivamente, os potenciais de deformações uniaxiais apropriados às simetrias tetragonal e romboédrica. Num cristal com simetria cúbica, os elementos dos tensores de deformação (ϵ_{ij}) e pressão (X_{ij}) estão relacionados entre si através da transformação [27]

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{xy} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_{xx} \\ X_{yy} \\ X_{zz} \\ X_{xy} \\ X_{yz} \\ X_{zx} \end{bmatrix} \quad (IV.A.2)$$

onde S_{ij} são constantes elásticas. Em situações, onde o cristal está sob pressão biaxial nas direções perpendiculares à de crescimento das camadas (001), os elementos do tensor de pressão são dadas por

$$X_{xx} = X_{yy} = X \quad (a)$$

e os outros elementos X_{ij} são nulos, onde $i, j = x, y$ e z . Neste caso, utilizando a equação (IV.A.2), obtém-se

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = (S_{11} + S_{12})X = \varepsilon, \quad (b)$$

$$\varepsilon_{zz} = 2S_{12}X = -\alpha\varepsilon, \quad (c) \quad (IV.A.3)$$

onde

$$\alpha = -\frac{2S_{12}}{S_{11} + S_{12}} \quad (d)$$

O Hamiltoniano, dado pela equação (IV.A.1), pode ser escrito também na forma matricial na representação $|J, m_J\rangle$ [8,9]. Estes vetores são escritos em função dos vetores da base, que é formada por autoestados dos operadores L^2 , S^2 , L_z e S_z , onde $\hat{L}$, $\hat{S}$ e $\hat{J}$ são, respectivamente, os momentos angulares orbitais, do spin e total [28]. Para a banda de valência (orbitais p), esta base é formada pelos vetores $|1, 1/2, m, \pm\rangle$, onde $m = 1, 0, -1$ e para a banda de condução (orbitais s), $|0, 1/2, 0, \pm\rangle_c$ [28]. Os vetores $|J, m_J\rangle$ são escritos como

$$\begin{aligned} |3/2, 3/2\rangle &= |1, 1/2, 1, +\rangle \\ |3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1/2, 0, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1/2, 1, -\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1/2, -1, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1/2, 0, -\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle &= |1, 1/2, -1, -\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1/2, 1, -\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1/2, 0, +\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1/2, 0, -\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1/2, -1, +\rangle, \end{aligned} \quad (IV.A.4)$$

para a banda de valência e para a banda de condução,

$$\begin{aligned} |1/2, 1/2\rangle_c &= |0, 1/2, 0, -\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle_c &= |0, 1/2, 0, +\rangle. \end{aligned} \quad (IV.A.5)$$

Os elementos de matriz de H_c são obtidos desenvolvendo o cálculo

de operadores de momento angular, aplicados sobre os vetores das Eqs. (IV.A.4-5) [28]. Assim, obtém-se que

$$H_{\varepsilon} = \begin{bmatrix} |1/2, 1/2\rangle_c & |3/2, 3/2\rangle & |3/2, 1/2\rangle & |1/2, 1/2\rangle \\ E_{\varepsilon}^0 + \Delta_0/\sqrt{3} - \eta_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_0/\sqrt{3} - \eta_v - \delta E_v/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_0/\sqrt{3} - \eta_v + \eta & \sqrt{2} \eta \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \eta & -2\Delta_0/\sqrt{3} - \eta_v \end{bmatrix} \quad (a)$$

onde (IV.A.6)

$$\begin{aligned} \eta_c &= \sigma^{(c)} (2 - \alpha) \varepsilon, \\ \eta_v &= \sigma^{(v)} (2 - \alpha) \varepsilon, \\ \eta &= b (1 + \alpha) \varepsilon, \end{aligned} \quad (b)$$

Δ_0 é a separação das bandas de valência no ponto Γ , devido a interação spin-órbita e E_{ε}^0 é a energia do "gap" do material não tensionado. Para o efeito de medidas ópticas, onde são medidas as diferenças de energia entre as bandas de condução e de valência, os potenciais de deformações relevantes são dados pela diferença $\sigma = \sigma^{(v)} - \sigma^{(c)}$. Com a diagonalização da matriz dada pela equação (IV.A.6), obtém-se

$$\begin{aligned} E_c &= E_{\varepsilon}^0 + \Delta_0/\sqrt{3} - \eta_c && \text{(banda de condução),} \\ E_2 &= \Delta_0/\sqrt{3} - \eta_v + \eta && \text{(buraco pesado),} \\ E_1 &= \Delta_0/\sqrt{3} - \eta_v - \eta + 2\eta^2/\Delta_0 + \dots && \text{(buraco leve),} \\ E_3 &= -2\Delta_0/\sqrt{3} - \eta_v - 2\eta^2/\Delta_0 + \dots && \text{(spin-órbita).} \end{aligned} \quad (IV.A.7)$$

Na presença de pressão biaxial, obtém-se diferentes valores da energia do "gap" para cada banda de valência, ou seja, $E_{\varepsilon}^{(hh)}$ para

a banda do buraco pesado, $E_{\frac{c}{2}}(lh)$ para a banda do buraco leve e $E_{\frac{c}{2}}(so)$ para a banda do buraco separada por interação spin-órbita. Escrevendo, explicitamente, obtém-se

$$\begin{aligned} E_{\frac{c}{2}}(hh) &= E_c - E_2 = E_{\frac{c}{2}}^0 + \delta E_c - \delta E_{v2} , \\ E_{\frac{c}{2}}(lh) &= E_c - E_1 = E_{\frac{c}{2}}^0 + \delta E_c - \delta E_{v1} , \\ E_{\frac{c}{2}}(so) &= E_c - E_3 = E_{\frac{c}{2}}^0 + \Delta_0 + \delta E_c - \delta E_{v3} , \end{aligned} \quad (IV.A.8)$$

onde

$$\begin{aligned} \delta E_c &= \alpha (2 - \alpha) \epsilon , \\ \delta E_{v2} &= \eta , \\ \delta E_{v1} &= -\eta + \frac{2\eta^2}{\Delta_0} , \\ \delta E_{v3} &= -\frac{2\eta^2}{\Delta_0} . \end{aligned} \quad (IV.A.9)$$

Como está mostrado na figura 7, a energia do "gap", para qualquer uma das bandas de valência, aumenta quando $\epsilon < 0$ (compressão) e diminui para $\epsilon > 0$ (dilatação). As equações (IV.A.7-9) são válidas para $\eta \ll \Delta_0$. Por exemplo, para GaAs, $\alpha = 0.902$, $b = -1.73$ eV, $\Delta_0 = 0.341$ eV e para $\epsilon = 0.8 \times 10^{-2}$ (Tabelas III e IV) $\eta = 0.026$ o $\eta/\Delta_0 \sim 0.076$. Portanto, $\eta \ll \Delta_0$ e as aproximações mostradas na equação (IV.A.7), considerando até os termos quadráticos em η , são bastante razoáveis.

B. MODOS DE VIBRAÇÃO EM SUPER-REDES DE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ SUJEITAS A PRESSÃO DIAXIAL.

No início desta parte está apresentada uma introdução, primeiro para o caso dos materiais com estrutura cristalina tipo diamante e depois para as estruturas tipo ZnS ("Zinc-blende"). Os fônons ópticos de cristais com estrutura de diamante em $\vec{k}=0$ na ausência de pressão são triplamente degenerados. Esta degenerescência é quebrada com a aplicação da pressão sobre o cristal (por exemplo, uniaxial na direção de um dos eixos cristalográficos) [29]. A equação dinâmica dos modos de vibração, na presença de pressão, é dada por [29]:

$$\bar{m} \frac{d^2}{dt^2} u_i = - \bar{m} \omega^2 u_i = - \sum_j K_{ij} u_j \quad (\text{a})$$

ou (IV.B.1)

$$\bar{m} \frac{d^2}{dt^2} u_i = - \left[K_{ii}^{(0)} u_i + \sum_{jlm} \frac{\partial}{\partial \epsilon_{lm}} K_{ij} \epsilon_{lm} u_j \right] \quad (\text{b})$$

onde ω é a frequência de vibração do cristal deformado, u_i é o i -ésimo componente do deslocamento relativo entre dois átomos da célula unitária, $\bar{m}$ é a massa reduzida dos dois átomos,

$$K_{ii}^{(0)} = \bar{m} \omega_0^2 \quad (\text{IV.B.2})$$

é a constante efetiva da mola do modo F_{2g} na ausência da pressão, i, j, l e m representam as três direções x, y e z da coordenada espacial e ω_0 é a frequência de vibração da rede não deformada. De acordo com as nomenclaturas definidas por Ganesan e outros [29], obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon_{lm}} K_{ij} \epsilon_{lm} = K_{ijlm}^{(1)} \epsilon_{lm} = K_{ijml}^{(1)} \epsilon_{ml} \quad (\text{IV.B.3})$$

Para os cristais cúbicos, estes elementos $K_{ijlm}^{(1)}$ são invariantes sob operação do grupo pontual T_d , assim o tensor $K^{(1)}$ terá somente três componentes independentes [29]:

$$\begin{aligned} K_{xxxx}^{(1)} &= K_{yyyy}^{(1)} = K_{zzzz}^{(1)} = \bar{m} \, p \\ K_{xxyy}^{(2)} &= K_{yyzz}^{(1)} = K_{zzxx}^{(1)} = \bar{m} \, q \\ K_{xyxy}^{(1)} &= K_{yzyz}^{(1)} = \bar{m} \, r \end{aligned} \quad (IV.B.4)$$

onde p, q e r são parâmetros fenomenológicos [29]. Substituindo as equações (IV.B.2-4) na equação (IV.B.1), obtém-se a seguinte equação secular [29]

$$\bar{m} \, \omega_0^2 \, u_i + \sum_{jlm} K_{ijlm}^{(1)} \, \epsilon_{lm} \, u_j = \bar{m} \, \omega^2 \, u_i \quad (IV.B.5)$$

ou na forma matricial [29-31]:

$$\begin{vmatrix} p\epsilon_{xx} + q(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + \omega_0^2 - \omega^2 & 2r\epsilon_{xy} & 2r\epsilon_{xz} \\ 2r\epsilon_{xy} & p\epsilon_{yy} + q(\epsilon_{zz} + \epsilon_{xx}) + \omega_0^2 - \omega^2 & 2r\epsilon_{yz} \\ 2r\epsilon_{xz} & 2r\epsilon_{yz} & p\epsilon_{zz} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + \omega_0^2 - \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (IV.B.6)$$

Como o interesse está numa situação, onde o material está sujeito a pressão biaxial no plano perpendicular ao eixo z , como foi explicado na seção anterior, se as equações (IV.A.4) forem substituídas na equação (IV.B.6), obtém-se três soluções: uma não degenerada e duas degeneradas [32]:

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 + [2q - \alpha p] \, \epsilon \quad (\text{não degenerado}) \quad (a)$$

$$\omega_2^2 = \omega_0^2 + \left[p + 2q(1 - \alpha) \right] \epsilon \text{ (duplamente degenerado),} \quad (b)$$

mas como

(IV.B.7)

$$\begin{aligned} (\omega^2 - \omega_0^2) &= (\omega - \omega_0)(\omega + \omega_0) \\ &\approx 2 \omega_0 \delta \omega \end{aligned} \quad (c)$$

então

$$\Delta \omega_1 = (\omega_1 - \omega_0) \approx - \left[\frac{\alpha p - 2q}{2 \omega_0} \right] \epsilon \quad \text{(singleto)} \quad (a)$$

(IV.B.8)

$$\Delta \omega_2 = (\omega_2 - \omega_0) \approx \left[\frac{p + 2q(1 - \alpha)}{2 \omega_0} \right] \epsilon \quad \text{(dubleto)} \quad (b)$$

Isto significa, que num cristal tipo diamante, sob pressão biaxial, os modos triplamente degenerados se separam em um singleto e um dubleto.

Nos semicondutores polares, tipo ZnS, na ausência de pressão, os modos ópticos longitudinais (LO) e os transversais (TO) são separados devido ao campo Coulombiano. Com a presença de pressão biaxial (eq. IV.A.3) e na configuração experimental utilizada, onde o vetor de propagação é paralelo ao eixo z (direção do crescimento), as eqs. (IV.B.8a-b) são escritas como (30,31)

$$\Delta \omega_{LO} = (\omega_{LO} - \omega_{LO}^0) \approx - \left[\frac{\alpha p - 2q}{2 \omega_{LO}^0} \right] \epsilon \quad (a)$$

(IV.B.9)

$$\Delta \omega_{TO} = (\omega_{TO} - \omega_{TO}^0) \approx \left[\frac{p + 2q(1 - \alpha)}{2 \omega_{TO}^0} \right] \epsilon \quad (b)$$

onde ω_{LO}^0 e ω_{TO}^0 são, respectivamente, as frequências de vibrações dos modos LO e TO do cristal não deformado. Nesta configuração somente o modo LO é ativo [25]. A partir da Eq. (IV.B.9a) pode-se

determinar a deformação da camada se a frequência ω_{LO} do fônon do material deformado for conhecida.

O espectro Raman de uma super-rede é uma superposição de espectros independentes, provenientes das camadas A e B. A posição do pico destes espectros Raman depende da tensão a que cada material está sujeito. O espectro Raman de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ deveria conter duas bandas distintas, devido aos dois modos de vibração do fônon LO, os quais são chamados, respectivamente, modos de vibração tipo-GaAs e do tipo-InAs [33,34]. Entretanto, para composições de In menores que 0,2, é observada somente uma banda do tipo-GaAs [33,34]. De acordo com a Eq. (IV.B.8a), a posição do pico depende da deformação da camada e ela pode ser escrita também na forma:

$$\omega = \omega_0 \left(1 - \beta \epsilon \right) \quad (\text{a})$$

onde

(IV.B.9)

$$\beta = \frac{\alpha p - 2q}{2 \omega_0^2} \dots, \quad (\text{b})$$

e daqui para frente será utilizada a notação $\omega = \omega_{LO}$ e $\omega_0 = \omega_{LO}^0$. O parâmetro β para x pequeno é, praticamente, uma constante [31,35]. Se a intensidade da luz Raman espalhada por um elemento de volume, localizado a uma profundidade z da superfície da super-rede, tem uma distribuição Lorentziana centrada em $\Omega(z)$ e largura da linha γ_0 , o espectro total é dado por uma somatória de todos os elementos de volume contidos na super-rede, ou seja,

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_0}{[\omega - \Omega(z)]^2 + (\gamma_0/2)^2} dz \quad (\text{IV.B.10})$$

Cada elemento de volume tem uma composição de In $x(z)$ e está

sujeito a uma deformação $\epsilon(z)$. A frequência de vibração $\Omega(z)$ deste elemento é dada pela Eq. (IV.B.9) e pode ser escrita também na forma:

$$\Omega(z) = \Omega[x(z), \epsilon(z)] = \Omega[x(z), 0] \left[1 - \beta \epsilon(z) \right] \quad (\text{IV.B.11})$$

onde $\Omega[x(z), 0]$ é a frequência de fonon LO do elemento de volume não deformado da liga de composição $x(z)$. Para $x(z)$ pequeno, $\Omega[x(z), 0]$ pode ser escrita como uma interpolação linear entre as frequências dos modos de vibração ω_0^A do GaAs e ω_0^B do $\text{In}_{x_0}\text{Ga}_{1-x_0}\text{As}$ não deformado, onde x_0 é pequeno com valor conhecido, ou seja,

$$\Omega[x(z), 0] = \omega_0^A \left[1 - \theta x(z) \right] \quad (\text{a})$$

onde

(IV.B.12)

$$\theta = \frac{\omega_0^A - \omega_0^B}{x_0 \omega_0^A} \quad (\text{b})$$

A deformação $\epsilon(z)$ é a variação relativa do parâmetro da rede da camada:

$$\epsilon(z) = \frac{a_{sr} - a[x(z)]}{a[x(z)]} \quad (\text{IV.B.13})$$

onde a_{sr} e $a[x(z)]$ são parâmetros da rede da super-rede e da liga de composição $x(z)$. A dependência de $a[x(z)]$ com a composição x , para x pequeno, pode ser aproximada por uma relação linear do tipo:

$$a[x(z)] = a_A \left[1 + \rho x \right] \quad (\text{a})$$

onde

(IV.B.14)

$$\rho = \frac{a(x_0) - a_A}{x_0 a_A}, \quad (b)$$

$a_A = a(x=0)$ é o parâmetro da rede do GaAs e $a(x_0)$ é o parâmetro da rede do $\text{In}_{x_0}\text{Ga}_{1-x_0}\text{As}$. Com a substituição da Eq. (IV.B.14) em (IV.B.13) e, mantendo até os termos lineares em x após a expansão em série em torno do ponto $x = 0$, obtém-se:

$$x(z) = \delta - \left[1 + \delta\right] \rho x(z) \quad (a)$$

onde

(IV.B.15)

$$\delta = \left[\frac{a_{sr}}{a_A} - 1 \right] \quad (b)$$

Finalmente, substituindo as Eqs. (IV.B.12) e (IV.B.15) na Eq. (IV.B.11), verifica-se a seguinte expressão para a frequência do fônon no elemento de volume:

$$\frac{\Omega(z)}{\omega_A} \approx 1 - \beta \delta + \left[\theta \beta \delta + (1 + \delta) \rho \beta - \theta \right] x(z) + O(x^2) + \dots \quad (IV.B.16)$$

Os dois primeiros termos do lado direito da equação acima são constantes, o terceiro termo é uma função linear em x e o quarto termo é uma função quadrática, e assim por diante. Como $x(z)$ é pequeno, pode-se aproximar a série acima considerando somente até o termo linear. Se o elemento de volume está localizado na camada de GaAs, então $x(z) = 0$, e

$$\Omega(z) = \Omega_0 = \omega_A \left[1 - \beta \delta \right] \quad (IV.B.17)$$

onde Ω_0 depende somente de a_{sr} . Se o elemento de volume está

localizado na camada de $\text{In}_{x(z)}\text{Ga}_{1-x(z)}\text{As}$, o máximo valor do termo linear da Eq. (IV.B.16) é quando $a_{\text{sr}} = a(x_0)$ e $x(z) = x_0$. Por exemplo, para $x_0 = 0,12$ e, utilizando os dados da tabela III e IV, obtém-se

$$\begin{aligned} \theta &= 1,2 \times 10^{-1}, \\ \rho &= 7,1 \times 10^{-2}, \\ \delta &= 8,6 \times 10^{-3}, \\ \beta \delta &\sim 1,4 \times 10^{-2} \quad (\text{segundo termo}) \end{aligned} \tag{IV.B.18}$$

$$\left[\quad \right] x_0 \sim 1,3 \times 10^{-3} \quad (\text{terceiro termo}).$$

O terceiro termo é da ordem de 10% do segundo e este da ordem de 1% do primeiro termo e a Eq. (IV.B.16) pode ser aproximada também por:

$$\Omega(z) = \omega_0^A \left[1 - \beta \delta \right] = \Omega_0 \tag{IV.B.19}$$

Assim, a frequência de fônon LO de qualquer elemento de volume não depende, explicitamente, da composição $x(z)$. Neste caso, a integral da Eq. (IV.B.10) será também uma Lorentziana centrada em Ω_0 , ou seja, a forma do espectro Raman de super-rede de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, para baixa composição de In, é uma Lorentziana centrada em Ω_0 . Esta posição do pico depende somente do parâmetro de rede da super-rede [36,37]. Portanto, a partir da posição do pico é possível determinar o valor de a_{sr} , utilizando a equação

(IV.B.19), ou seja:

$$a_{sr} = a_A \left[\frac{1}{\beta} \left(\frac{\omega_0}{\omega_A} - 1 \right) + 1 \right]$$

(IV.B.20)

C. ESTADOS ELETRÔNICOS EM POÇOS QUÂNTICOS E SUPER-REDES DE INTERFACES ABRUPTAS.

A equação de Schrödinger para elétrons ou buracos confinados em poços quânticos pode ser escrita como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_j(z) \right] \phi_j = \lambda_j \phi_j \quad (\text{IV.C.1})$$

onde, $V_j(z)$ é a altura da barreira de potencial, m_j^* é a massa efetiva da partícula j , λ_j é o autovalor, ϕ_j é a função de onda e z é o eixo de coordenada na direção de crescimento com a origem no centro do poço. Se a altura da barreira de potencial é muito grande, podemos utilizar o modelo clássico de um poço de potencial com barreira infinita [38]. Neste caso, a solução da equação (IV.C.1) é dada por:

$$i) \quad \phi_{n,j}^{(\text{par})} = A_{n,j} \cos\left[\frac{n\pi}{d_B} z\right] \quad (\text{a})$$

para os estados pares, e

$$ii) \quad \phi_{n,j}^{(\text{impar})} = B_{n,j} \sin\left[\frac{n\pi}{d_B} z\right] \quad (\text{b}) \quad (\text{IV.C.2})$$

para os estados ímpares, onde

$$\lambda_{n,j} = \frac{\hbar^2}{2m_j^*} \left[\frac{n\pi}{d_B} \right]^2 \quad (\text{c})$$

são os níveis de energia e d_B é a largura do poço. Para uma estrutura como $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, onde a diferença de energia de "gap" é da ordem de algumas centenas de mili-elétron-Volts, a aproximação de barreira infinita não é boa. Além disso, as massas efetivas dos portadores de carga dos dois materiais são

diferentes. Neste caso, pode-se utilizar o modelo de aproximação de função envelope [39], desde que as simetrias das bandas de energia nas interfaces não se misturem e as condições de continuidade das funções de onda e, também, do produto entre $(1/m^*)$ e a primeira derivada da função de onda, nas interfaces, sejam satisfeitas. As soluções da equação de Schrödinger, que satisfazem as duas condições de continuidade acima, são dadas pelas seguintes equações transcendentais:

$$\operatorname{tg}\left(\frac{K_j d_B}{2}\right) = D_j \quad (a)$$

para os estados pares e

$$\operatorname{cotg}\left(\frac{K_j d_B}{2}\right) = -D_j \quad (b) \quad (\text{IV.C.3})$$

para os estados ímpares, onde

$$D_j = \left[\frac{m_j^B}{m_j^A} \left(\frac{V_j}{\lambda_j} - 1 \right) \right]^{1/2} \quad (c)$$

e

$$K_j = \left[\frac{2 m_j^B}{\hbar^2} \lambda_j \right]^{1/2} \quad (d)$$

Os índices A e B se referem, respectivamente, a GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e j, pode corresponder ao elétron (e), buraco pesado (hh) ou ao buraco leve (lh). Os V_j são as barreiras de potenciais e λ_j são as energias dos níveis com relação ao fundo do poço.

As super-redes são sistemas um pouco mais complicados que um poço quântico onde a energia potencial da equação de Schrödinger é uma função periódica com o período $T = d_A + d_B$, onde d_A e d_B são, respectivamente, as espessuras das camadas de GaAs e

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Os níveis de energia dos portadores de carga, com massas efetivas iguais em toda a região do potencial periódico, podem ser obtidos a partir do modelo de Kronig-Penney [40]. No caso em que as massas efetivas são diferentes nos dois materiais, pode-se utilizar o modelo de aproximação de função envelope, cuja solução é dada por [39]:

$$\cos(k_A d_A) \cos(k_B d_B) - \frac{1}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right) \sin(k_A d_A) \sin(k_B d_B) = 1 \quad (\text{a})$$

com

$$k_A^2 = 2 m_J^A \lambda_J / \hbar^2 \quad (\text{b})$$

$$k_B^2 = 2 m_J^B (\lambda_J - V_J) / \hbar^2 \quad (\text{c}) \quad (\text{IV.C.4})$$

o

$$x = m_J^A k_A / m_J^B k_B \quad (\text{d})$$

Para $m_J^A = m_J^B$, a equação (IV.C.4) será igual a do modelo do Kronig-Penney [40].

D. ESTADOS ELETRÔNICOS EM POÇOS QUÂNTICOS E SUPER-REDES SUBMETIDOS A TRATAMENTOS TÉRMICOS.

O perfil de potencial de poços quânticos e super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, submetidos a tratamentos térmicos, pode sofrer modificações devido aos efeitos, tanto da interdifusão de In e Ga através das suas interfaces, como também da relaxação das tensões nas camadas, criando deslocamentos (ou defeitos) na interface. Como este último efeito é observado somente nas camadas que excedem as espessuras críticas (d_B^C ou d_{gr}^C), pode-se separar os estudos das duas contribuições escolhendo, convenientemente, as amostras.

D1 - POÇOS QUÂNTICOS COM $d_B < d_B^C$.

Durante o tratamento térmico de poços quânticos com $d_B < d_B^C$, a camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ mantém-se comensurada com o substrato e somente o efeito de interdifusão de In e Ga é responsável pela mudança no perfil de potencial. O processo de interdifusão é bastante conhecido e pode ser descrito pela segunda Lei de Fick de difusão [13-19,41]. Se o coeficiente de interdifusão, D , para In e Ga, é independente da composição x de In, a equação de interdifusão pode ser escrita como [41]:

$$\frac{\partial}{\partial t} x(z,t) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} x(z,t) \quad (\text{IV.D.1})$$

onde z é a coordenada do eixo ao longo da direção de crescimento com a origem no centro do poço e t é o tempo de tratamento

térmico. A solução da equação diferencial (IV.D.1) pode ser determinada pelo método de transformada de Laplace [41] com as seguintes condições de contorno: a continuidade de $x(z,t)$,
 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x(z,t) = 0$ e

$$x(z,0) = \begin{cases} x_0, & \text{se } |z| \leq d_B/2 \\ 0, & \text{se } |z| > d_B/2 \end{cases} \quad \text{(IV.D.2)}$$

onde d_B é a largura do poço e x_0 é a composição do In. no $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ antes do tratamento térmico. A solução é dada por [42]:

$$x(z,t) = \frac{x_0}{2} \left\{ \text{erf}(\xi_+) - \text{erf}(\xi_-) \right\} \quad \text{(a)}$$

com (IV.D.3)

$$\xi_{\pm} = \frac{|z| \pm d_B/2}{[4Dt]^{1/2}}, \quad \text{(b)}$$

e $\text{erf}(\xi_{\pm})$ são as funções erro. A energia do "gap" do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ em equilíbrio, sem tensão, é dada por:

$$E_g^0 = 0,26 + 0,629 (1-x) + 0,436 (1-x)^2 \quad (300\text{K}) \quad [43] \quad \text{(a)}$$

$$E_g^0 = 0,413 + 0,720 (1-x) + 0,375 (1-x)^2 \quad (77\text{K}) \quad [44] \quad \text{(b)}$$

$$E_g^0 = 0,4103 + 0,634 (1-x) + 0,475 (1-x)^2 \quad \text{(IV.D.4)}$$

$$= 1,519 - 1,594 x + 0,485 x^2, \quad (2\text{K}) \quad [45] \quad \text{(c)}$$

Se a camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é comensurada com o substrato, em cada posição z (ou seja, cada composição $x(z,t)$) a deformação ϵ da camada é dada pela equação:

$$\epsilon(z) = \epsilon[x(z,t)] = \frac{a_A - a[x(z,t)]}{a[x(z,t)]} \quad \text{(IV.D.5)}$$

A energia do "gap" do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ depende da composição $x(z,t)$ e da deformação $\epsilon(z,t)$ e é uma função contínua em z . Em cada posição z a energia do "gap", devido a banda do buraco pesado (hh) e do buraco leve (lh), pode ser escrita de acordo com as Eqs. (IV.A.8-9):

$$E_{\epsilon}^{hh}(z) = E_{\epsilon}^0 + \delta E_c(z) - \delta E_{v2}(z) \quad (a) \quad (IV.D.6)$$

$$E_{\epsilon}^{lh}(z) = E_{\epsilon}^0 + \delta E_c(z) - \delta E_{v1}(z) \quad (b)$$

Os perfis de potencial da banda de condução ($V_c(z)$), da banda do buraco pesado ($V_{hh}(z)$) e da banda do buraco leve ($V_{lh}(z)$) são dados por:

$$V_c(z) = Q_e \Delta E_{\epsilon}(z) \quad (a)$$

$$V_{hh}(z) = (1 - Q_e) \Delta E_{\epsilon}(z) \quad (b)$$

$$e \quad (IV.D.7)$$

$$V_{lh}(z) = \left[E_{\epsilon}^{lh}(z) - E_{\epsilon}^{lh}(z=0) \right] - V_c(z) \quad (c)$$

onde

$$\Delta E_{\epsilon}(z) = \left[E_{\epsilon}^{hh}(z) - E_{\epsilon}^{hh}(z=0) \right] \quad (d)$$

Como já foi discutido nos capítulos anteriores, o fator Q_e é o parâmetro que define o deslocamento da banda de condução. Um desenho esquemático do perfil de potencial do poço quântico, antes e depois do tratamento térmico está mostrado na Fig. 8.

Os níveis de energia do poço quântico submetido a tratamento térmico podem ser obtidos através da solução da equação (IV.C.1), calculados, numericamente. A equação (IV.C.1) pode ser escrita também na forma:

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi_1 = f_1(z) \phi_1 \quad (a)$$

onde

$$f_1(z) = \frac{2m_i^*}{\hbar^2} \left[V(z) - \lambda_1 \right] \quad (b) \quad \text{IV.D.8)} \quad \text{IV.D.9)}$$

A equação (IV.D.8a) é uma equação diferencial do tipo:

$$y'' = f(z) y, \text{ onde } y'' = \frac{d^2}{dz^2} y, \quad \text{IV.D.9)}$$

a qual pode ser calculada, numericamente, pelo método Numerov [46]. Para este cálculo, a massa efetiva foi considerada constante e igual a do GaAs em toda a região. Para outros parâmetros como: σ , b , ..., foi feita uma interpolação linear entre os dados do GaAs e InAs.

D2 - SUPER-REDE COM $d_{sr} \geq d_{sr}^c$

No cálculo do perfil de composição de In em super-redes submetidas a tratamento térmico, foi utilizado o método de separação de variáveis para resolver a equação de difusão (equação IV.D.1) [18,37]:

$$\frac{\partial}{\partial t} x(z,t) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} x(z,t) .$$

É necessário satisfazer duas condições de contorno:

i) $x(z,0)$ é uma função periódica com período $T = d_A + d_B$, dada por:

$$x(z,0) = \begin{cases} x_0 & , \quad |z| \leq d_B/2 \\ 0 & , \quad d_B/2 < |z| < T/2 \end{cases} \quad (a)$$

(IV.D.10)

$$ii) \quad x(z,t) = x(z + nT,t) \quad (b)$$

onde n é um número inteiro. A solução que satisfaz estas condições pode ser escrita na forma:

$$x(z,t) = \frac{x_0 d_B}{T} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2 x_n}{n} \sin\left[\frac{n\pi d_B}{T}\right] \cos\left[\frac{2n\pi}{T} z\right] \exp\left\{-\left(\frac{2n\pi}{T}\right)^2 Dt\right\}$$

(IV.D.11)

onde x_0 é a composição inicial de In. A convergência da série acima é muito rápida, assim o truncamento em $n = 10$ na somatória é suficiente, como mostrado na figura 9.

A partir do perfil de composição, dada pela equação (IV.D.11), obtém-se o perfil de potencial, utilizando as mesmas expressões de energia do "gap" apresentadas na seção anterior (equações IV.D.4-7), onde o parâmetro de rede utilizado na equação (IV.D.5) é o da super-rede (a_{sr}). Este valor pode ser

determinado a partir da medida de espalhamento Raman. Um desenho esquemático do perfil de potencial de uma super-rede, antes e depois do tratamento térmico, está apresentado na Figura 10.

Utilizando o método de transformada de Fourier, foram calculados os níveis de energia das super-redes submetidas a tratamento térmico [18], onde, para facilitar, foi considerado que as funções de onda dos estados pares são combinações lineares de $\cos(kx)$ e que as funções ímpares são combinações lineares de $\sin(kx)$, ou seja,

$$\psi_{\text{par}}(z) = \sum_k b_k \cos(kx) \quad (a)$$

$$\psi_{\text{ímpar}}(z) = \sum_k c_k \sin(kx) \quad (b) \quad \text{(IV.D.12)}$$

Substituindo estas funções de onda na equação de Schrödinger, análoga à equação (IV.C.1), onde $V_j(z)$ é o perfil de potencial da super-rede j , aplicando as condições de contorno, obtêm-se as seguintes equações seculares [18]:

i) para estados pares

$$\sum_{n=0} R_n b_n I_{m,n} + \sum_{n=0} b_n J_{m,n} = \sum_{n=0} \lambda b_n I_{m,n} \quad (a)$$

onde

$$J_{m,n} = -\frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi m}{T} z\right) V(z) \cos\left(\frac{2\pi n}{T} z\right) dz, \quad (b)$$

(IV.D.13)

$$I_{m,n} = -\frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \cos\left(\frac{2\pi m}{T} z\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T} z\right) dz \quad (c)$$

e

$$R_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi n}{T}\right)^2 \quad (d)$$

ii) para estados ímpares

$$\sum_{n=0} R_n c_n I'_{m,n} + \sum_{n=0} c_n J'_{m,n} = \sum_{n=0} \lambda c_n I'_{m,n} \quad (a)$$

onde

$$J'_{m,n} = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi m}{T} z\right) V(z) \sin\left(\frac{2\pi n}{T} z\right) dz, \quad (b)$$

(IV.D.14)

$$I'_{m,n} = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \sin\left(\frac{2\pi m}{T} z\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{T} z\right) dz. \quad (c)$$

As equações (IV.D.13a) e (IV.D.14a) podem ser escritas na forma matricial:

i) Estados pares

$$\begin{bmatrix} J_{00}/2 & J_{01}/2 & J_{02}/2 & \dots \\ J_{10} & R_1 + J_{11} & J_{12} & \dots \\ J_{20} & J_{21} & R_2 + J_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (IV.D.15)$$

ii) Estados ímpares

$$\begin{bmatrix} R_1 + J'_{11} & J'_{12} & J'_{13} & \dots \\ J'_{21} & R_2 + J'_{22} & J'_{23} & \dots \\ J'_{31} & J'_{32} & R_3 + J'_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (IV.D.16)$$

A partir do cálculo de autovalores das matrizes acima pode-se determinar os valores de λ . Devido a rápida convergência, a utilização de uma matriz de dimensão 10 x 10 foi suficiente para os objetivos propostos.

- ANALISE DOS DADOS EXPERIMENTAIS

A. SUPER-REDES

No capítulo anterior, foi visto que, das medidas de espalhamento Raman em super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ de baixa composição de In, pode-se determinar tanto o valor do parâmetro de rede da super-rede, como também as deformações em cada camada. Conhecendo as deformações, pode-se determinar as energias do "gap" do material deformado e, a partir disto, calcular os níveis de energia dos elétrons e dos buracos e compará-los com os dados experimentais de fotoluminescência e de absorção. Nesta comparação, o único parâmetro em aberto (ou ajustável) é o fator Q_e , definido por

$$Q_e = \Delta E_c / \Delta E_g \quad (\text{V.A.1})$$

onde ΔE_c é a descontinuidade da banda de condução quando passa da camada A (GaAs) para a camada B ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), e

$$\Delta E_g = E_g^A - E_g^B, \quad (\text{V.A.2})$$

com E_g^A e E_g^B , respectivamente, as energias do "gap" das camadas A e B tensionadas.

Os espectros típicos de espalhamento Raman a 300K das super-redes de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}/\text{GaAs}$ e das amostras referências, de GaAs e da camada espessa de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (R23), estão apresentados na Figura 6 [36]. As posições dos picos de cada espectro estão listados na tabela III. Estes são valores médios de várias medidas obtidas em diferentes pontos da amostra. A posição

do pico do espectro Raman da super-rede de 50/50 Å (H27) é, praticamente, a mesma que a da amostra de GaAs. Isto significa que, de acordo com a equação (IV.B.20), o parâmetro de rede da super-rede está casado com o do substrato de GaAs e somente a camada de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ está deformada [36]. Para as outras duas super-redes, 653 e 654, as posições dos picos dos espectros Raman estão entre os de GaAs e da amostra espessa de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (H23). Nestes casos, os parâmetros de rede das super-redes (a_{sr}) são diferentes dos parâmetros do substrato de GaAs e os dois tipos de camadas estão deformadas [36]. As deformações e os parâmetros de rede das super-redes estão listados na tabela III. Tais valores foram determinados a partir das equações (IV.B.8-9) e (IV.B.20), mais os valores dos parâmetros listados na tabela IV. As super-redes mais espessas, 653 e 654, apresentam uma relaxação da tensão, pois são observadas uma pequena quantidade de estrias ("cross-hatch") nas superfícies das amostras, como foi discutido no capítulo II. Esta relaxação da tensão é observada, apesar das espessuras das camadas que compõem as super-redes serem menores que as espessuras críticas. Para explicar este resultado, pode-se considerar que a super-rede como um todo é uma única camada com espessura d_{sr} e composição média dada por [36]:

$$x_m = \left[d_B / (d_A + d_B) \right] x \quad (\text{V.A.3})$$

Se esta espessura d_{sr} for menor que d_{sr}^c determinada, baseando-se nos dados experimentais de Orders e Usher [4], figura 11, para cada composição x_m , a super-rede estará comensurada com o substrato. Os valores de d_{sr}^c determinados, como descrito acima,

estão listados na tabela I. O valor de d_{gr} da super-rede de 50/50A é, praticamente, igual ao valor da espessura crítica, enquanto que nas outras duas super-redes, Q53 e G54, as suas espessuras totais são maiores que a espessura crítica, o que explica a ocorrência da relaxação da tensão.

Os espectros típicos de fotoluminescência e transmissão (ou absorção) a 2K das amostras de super-redes de $In_{0,12}Ga_{0,88}As/GaAs$ estão apresentados nas figuras 2 e 4 [47]. Considerando, que a superfície livre da camada espessa de $In_{0,12}Ga_{0,88}As$ na amostra H23 não esteja tensionada e que a sua banda de fotoluminescência, a 2K e na condição de fotoexcitação fraca, seja devido à recombinação radiativa de excitons ligados a impurezas rasas, pode-se determinar o valor do "gap" de energia de $In_{0,12}Ga_{0,88}As$ sem deformação, a partir desta posição do pico [48]:

$$h\nu_{pico} = E_g + \Delta E \quad (V.A.4)$$

onde ΔE é a energia de ligação do exciton ligado a impureza rasa, que é considerada como sendo de $\sim 6meV$ [48].

As posições das bandas de fotoluminescência das super-redes, H27, Q53 e G54, apresentam-se deslocadas para o lado de maior energia, em relação a banda da amostra H23. Este deslocamento é devido aos efeitos da tensão nas camadas e do confinamento quântico de portadores de carga. Estas bandas são atribuídas a aniquilação radiativa de excitons formados por elétrons e buracos pesados no primeiro nível confinado ligados a impurezas rasas. Nos espectros de transmissão da fig. 4, são observadas outras transições além daquelas referentes aos estados fundamentais. Na amostra G54, a segunda banda de absorção tem a

intensidade comparável a da primeira, enquanto que nas outras duas amostras, a segunda banda tem a intensidade relativa bem menor. As posições dos picos das bandas de luminescência e de absorção estão listadas na tabela V. Todos os dados desta tabela são valores médios com seus respectivos desvios quadráticos médios, calculados de uma série de medidas, obtidas em diferentes pontos da amostra. Existe uma pequena diferença entre as posições dos picos de absorção e de fotoluminescência, posições estas correspondentes às transições dos estados fundamentais, tabela V. Esta diferença é de $\sim 4\text{meV}$ e é independente das amostras. Como na fotoluminescência observa-se a radiação emitida, devido a aniquilação de excitons ligados e na absorção, a formação de excitons livres, esta diferença foi considerada como sendo a energia de ligação do exciton a impurezas rasas.

As energias de transição foram calculadas a partir da solução da equação (IV.C.4), com as barreiras de potenciais dadas por:

$$V_j = Q_j \frac{\Delta E_g}{\epsilon} \quad (\text{V.A.5})$$

onde $j = n, hh$ ou lh . A energia do "gap" para cada camada foi obtida através das equações (IV.D.4) e (IV.A.8-9). Os parâmetros a , b , α e β , foram considerados constantes e iguais a do GaAs, pois, devido a baixa composição de In, isto é uma boa aproximação. As massas efetivas foram interpoladas, linearmente, entre os dados de GaAs e InAs (veja tabela IV), e as deformações das camadas listadas na tabela III, foram obtidas por espalhamento Raman a temperatura ambiente. Estes mesmos valores de ϵ ainda são válidos à temperatura de 2K, pois apesar dos parâmetros de rede variarem, consideravelmente, com a temperatura, tanto o GaAs como o

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ têm os coeficientes de expansão térmica, τ , bem próximos. Por exemplo, τ_A do GaAs é $\sim 6,8 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ e de InAs, $\sim 4,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [21], então, para a liga de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$, fazendo a interpolação linear, obtém-se $\tau_B \sim 6,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Para estes valores de τ pode-se estimar $\Delta\epsilon/\epsilon$, onde

$$\epsilon = \frac{a_A - a_B}{a_B} = \frac{a_A}{a_B} - 1 \quad (\text{V.A.6})$$

e a variação de ϵ é dada por

$$\Delta\epsilon = \frac{1}{a_B} \Delta a_A - \frac{a_A}{a_B^2} \Delta a_B \quad (\text{V.A.7})$$

Considerando que Δa_A e Δa_B variam, linearmente, com a temperatura na forma:

$$\Delta a_A = a_A \tau_A \Delta T \quad (\text{V.A.8})$$

$$\Delta a_B = a_B \tau_B \Delta T,$$

onde ΔT é a variação de temperatura, e substituindo estas equações na Eq. (V.A.7), obtém-se que

$$\Delta\epsilon = \frac{a_A}{a_B} \Delta T (\tau_A - \tau_B) \quad (\text{V.A.9})$$

e

$$\frac{\Delta\epsilon}{\epsilon} = \frac{\Delta T (\tau_A - \tau_B)}{(1 - a_B/a_A)} \quad (\text{V.A.10})$$

Com a substituição dos valores de τ_A , τ_B e os dados da tabela IV, considerando $\Delta T \sim 300\text{K}$, obtém-se que

$$\frac{\Delta\epsilon}{\epsilon} \sim 1 \times 10^{-2}$$

A variação da energia do "gap" com a deformação ϵ , de acordo com a Eq. (IV.A.8-9), é dada por:

$$\delta E_g = (\delta E_c - \delta E_{v2}) = R \epsilon \quad (\text{V.A.11})$$

onde

$$R = [a (2 - \alpha) - b (1 + \alpha)] \quad (\text{V.A.12})$$

não depende de ϵ e

$$\frac{\Delta \langle \delta E \rangle}{\delta E} = \frac{\Delta c}{c} \sim 10^{-2} \quad (V.A.13)$$

Assim, o erro que se comete no cálculo da energia do "gap" a 2K, utilizando a deformação medida à temperatura ambiente, é da ordem de 1%.

O cálculo dos níveis de energia da super-rede de 50/50 Å (HZ7), utilizando os dados de a_{sr} da tabela III e $0,4 < Q_e < 0,7$, apresenta um só nível confinado na banda de condução. Isto significa que, pela regra de seleção, é possível observar somente duas transições envolvendo cada tipo de buraco da banda do valência (buracos pesado e leve). Na figura 12 está mostrando o gráfico de $(E_{oo}^{hh} - E_g^o)$ (curvas a_1 e b_1), o de $(E_{oo}^{lh} - E_{oo}^{hh})$ (curvas a_2 e b_2), em função de Q_e , onde E_{ij}^{hh} (ou E_{ij}^{lh}) é a energia de transição do nível i da banda do buraco pesado (ou buraco leve) para o nível j da banda de condução ($i, j = 0, 1, 2, \dots$) e E_g^o é a energia do "gap" do $In_{0,12}Ga_{0,88}As$ não deformado. As curvas (a_1 , a_2) e (b_1 , b_2) correspondem, respectivamente, aos valores calculados com $a_{sr} = \langle a_{sr} \rangle$ e $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$, onde $\langle a_{sr} \rangle$ e σ são, respectivamente, o valor médio e o seu desvio quadrático médio (veja tabela III), e as retas, c_1 e c_2 , correspondem aos dados experimentais obtidos das duas bandas de absorção $(h\nu_1 - E_g^o)$ e $(h\nu_2 - h\nu_1)$, mostradas na fig. 4. Na reta c_1 , já está incluída a energia de ligação do exciton livre de ~ 8 meV, obtida a partir da fig. 13, de acordo com Greene e outros [49]. Para valores de Q_e menores que $\sim 0,55$, o buraco leve fica confinado na região do poço (ou camada de $In_xGa_{1-x}As$) e para Q_e maiores que 0,6, ele fica confinado na região da barreira (ou camada de GaAs). No primeiro caso, espera-se obter uma absorção bastante forte envolvendo o buraco leve, e no segundo caso a absorção é proibida. No espectro

experimental de absorção da amostra H27, mostrado na figura 4, a segunda banda é bastante fraca, quando comparada com a primeira. Assim, o buraco leve deve estar fracamente confinado ou não confinado e o valor de Q_0 , que satisfaz esta condição, está entre 0,55 e 0,6. Neste intervalo, a energia de confinamento do buraco leve é menor que 5 meV e a mudança de região de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ para GaAs ocorre em $Q_0 \sim 0,57$. As curvas teóricas de $\langle E_{\infty}^{hh} - E_{\infty}^o \rangle$ e $\langle E_{\infty}^{lh} - E_{\infty}^{hh} \rangle$ se aproximam, simultaneamente, das retas experimentais, c_1 e c_2 , quando a_{sr} aumenta de $\langle a_{sr} \rangle$ para $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$. As curvas teóricas, que estão mais próximas das retas c_1 e c_2 , são as curvas b_1 e b_2 , para Q_0 bastante próximo de 0,57. O valor de $a_{sr} = \langle a_{sr} \rangle + \sigma$, correspondente a esta curva, está dentro da precisão da medida experimental. Dessa forma, a primeira e a segunda banda de absorção da amostra H27 foram atribuídas às transições $(h0 \rightarrow e0)$ e $(10 \rightarrow e0)$, respectivamente, [47] onde $(h0 \rightarrow e0)$ e $(10 \rightarrow e0)$ é a transição do primeiro nível da banda do buraco pesado (buraco leve) para o primeiro nível da banda de condução.

A super-rede de 100/100 Å para $0,4 < Q_0 < 0,7$, também apresenta um só nível eletrônico na banda de condução e, portanto, somente duas transições são permitidas. Desta forma, foi feito o gráfico semelhante ao da fig. 12, relativo a estas duas transições, como mostrado na fig. 14. As curvas $(a_1, b_1 \text{ e } c_1)$ e $(a_2, b_2 \text{ e } c_2)$ da figura 14 correspondem, respectivamente, aos valores calculados de $\langle E_{\infty}^{hh} - E_{\infty}^o \rangle$ e $\langle E_{\infty}^{lh} - E_{\infty}^{hh} \rangle$, com $a_{sr} = \langle a_{sr} \rangle - \sigma$ (curvas a_1 e a_2), $\langle a_{sr} \rangle$ (curvas b_1 e b_2) e $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$ (curvas c_1 e c_2) (veja tabela III) e as retas d_1 e d_2 aos dados experimentais. Aqui também a energia de ligação do exciton livre já está considerada na reta experimental e é de ~ 7 meV. Nesta super-rede

também é esperado uma transição forte, envolvendo o buraco leve, quando $Q_0 < 0,5$, sendo esta transição proibida quando $Q_0 > 0,6$. Para ser consistente com a intensidade relativa fraca da segunda banda do espectro experimental de absorção da amostra G53, mostrado na figura 4, é necessário que Q_0 esteja no intervalo entre 0,5 e 0,6, onde o buraco leve ficaria fracamente confinado ou não confinado e a transição correspondente seria fraca. Em termos de energia de transição, neste intervalo de Q_0 as curvas de $\langle E_{00}^{hh} - E_g^o \rangle$ se aproximam da reta experimental d_1 , quando a_{sr} cresce de $\langle a_{sr} \rangle$ (curva b_1) para $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$ (curva c_1), enquanto que a curva de $\langle E_{00}^{lh} - E_{00}^{hh} \rangle$ se afasta da reta d_2 . As curvas calculadas estão mais próximas das retas d_1 e d_2 para $Q_0 \sim 0,5$. Isto significa que o valor de a_{sr} deve estar entre $\langle a_{sr} \rangle$ e $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$, o qual está dentro do desvio experimental na determinação de a_{sr} . Dessa forma, as primeiras duas bandas de absorção da amostra G53 não atribuídas às transições $(h0 + e0)$ e $(l0 + e0)$, respectivamente, com $0,5 < Q_0 < 0,6$ [47]. Com relação a terceira banda de absorção, não foi possível identificar a sua origem.

A super-rede de 200/100 Å (G34) apresenta dois níveis confinados na banda de condução, quando $0,4 < Q_0 < 0,7$, assim, pode ocorrer duas transições envolvendo buraco pesado e duas envolvendo buraco leve. No gráfico da Fig. 15 estão apresentadas as curvas (a_1, b_1, c_1) , (a_2, b_2, c_2) e (e) correspondentes a $\langle E_{00}^{hh} - E_g^o \rangle$, $\langle E_{11}^{hh} - E_{00}^{hh} \rangle$ e $\langle E_{00}^{lh} - E_{00}^{hh} \rangle$, calculadas em função de Q_0 . A energia de ligação do exciton livre para esta super-rede é da ordem de 6 meV e já está considerada na posição da reta d_1 . Para a_{sr} em torno de $\langle a_{sr} \rangle$ e $Q_0 \sim 0,5$, as energias de transições calculadas $(h1 + e1)$ e $(l0 + e0)$ estão bastante próximas e estão

afastadas de 33 meV da primeira transição ($h0 \rightarrow e0$). Assim, espera-se obter uma segunda banda de absorção bastante forte, envolvendo o primeiro nível do buraco leve e o segundo nível do buraco pesado. Este resultado teórico concorda com os dados experimentais de absorção, mostrados na figura 4, onde a segunda banda é bastante forte e está separada 37 meV da primeira (veja tabela V). Portanto, as duas bandas de absorção da amostra Q54 são atribuídas, respectivamente, às transições ($h0 \rightarrow e0$) e à superposição de ($h1 \rightarrow e1$) e ($h0 \rightarrow e0$) [47], com $0,5 < Q_e < 0,6$.

Os valores de Q_e , determinados aqui a partir da análise de dados de espalhamento Raman, fotoluminescência e absorção das três super-redes, estão no intervalo 0,5 a 0,6. Todos os valores de Q_e encontrados na literatura, tanto experimentais [10-12] como teóricos [50,51], estão listados na tabela VI. Como os resultados teóricos das referências 50 e 51 foram calculados para a junção InAs/GaAs com o parâmetro de rede casado com o GaAs, os valores listados na tabela VI foram obtidos por interpolação linear da banda de valência média para $x = 0,12$, tendo em vista que esta não depende da deformação do material [51]. Pelos dados da tabela VI, parece que o fator Q_e tende a aumentar com a composição x de In. Entretanto, serão necessários estudos sistemáticos para verificar tal dependência.

B. POÇOS QUÂNTICOS SUBMETIDOS A TRATAMENTO TÉRMICO.

Na figura 3 estão apresentados os espectros de fotoluminescência de poços quânticos, antes (H63) e depois (A1 a A4) do tratamento térmico [42]. As posições dos picos das bandas de fotoluminescência estão listados na tabela VII, estes são valores médios com seus respectivos desvios quadráticos médios, obtidos de uma série de medidas feitas em diferentes pontos da amostra. As bandas de fotoluminescência das amostras A1 a A4 estão deslocadas para região de maior energia e alargadas, devido ao tratamento térmico. Nestas amostras observamos também uma segunda banda no lado de menor energia, a qual atribuímos a recombinação, devido as impurezas rasas difundidas durante o tratamento térmico. Elas são provenientes, provavelmente, do ambiente externo ou do substrato.

A energia de transição E_{00}^{hh} de um poço quadrado, antes do tratamento térmico, pode ser calculada a partir das Eqs. (IV.A.8-9), (IV.C.3) e (IV.D.4c) juntamente com os dados da tabela VIII. O valor da deformação da camada de $\text{In}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{As}$ é dado por

$$\epsilon = \frac{a_A - a_B}{a_B} = -1,6 \times 10^{-2}, \quad (\text{V.B.1})$$

onde a_A e a_B são, respectivamente, os parâmetros de rede do GaAs e do $\text{In}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{As}$, (veja tabela VIII). O valor utilizado do fator $Q_e = \Delta E_c / \Delta E_g$ foi de 0,57. A escolha deste valor foi baseado nos dados da super-rede de 50/50Å, pois, apesar da composição de In ser diferente, estas amostras foram crescidas no mesmo sistema e as camadas estão comensuradas com o substrato de GaAs, o que

conforme a mesma qualidade das interfaces. Para este valor de Q_e , foi calculado $E_{oo}^{hh} = 1,317$ eV. O valor da energia do exciton ligado foi estimado a partir do gráfico da Fig. 13 [49]. Para o poço com largura de 80Å, a energia de ligação do exciton livre é da ordem de $E_{FX} \sim 8$ meV. A energia de ligação de um exciton a uma impureza doadora rasa, de acordo com a regra de Haynes [48], é dada por:

$$E_{BX} = E_{FX} + 0,1 E_D \quad (V.B.2)$$

onde E_D é a energia de ligação do doador rasa. Na maioria das impurezas raras em GaAs esta energia é da ordem de 6 meV [51]. Como a composição de In no $In_xGa_{1-x}As$ é baixa, foi utilizado $E_{BX} = 9$ meV. Com isto, a energia de emissão esperada é dada por

$$(E_{oo}^{hh} - E_{BX}) = 1,308 \text{ eV} \quad (V.B.3)$$

Este valor é muito próximo do valor experimental de 1,302 eV, listado na tabela VII.

Na análise de dados de fotoluminescência de poços submetidos a tratamentos térmicos, o coeficiente de interdifusão D foi deixado como parâmetro em aberto para cada temperatura de tratamento térmico. Foi calculada a energia de transição em função de D para cada amostra, como está mostrado na Fig. 16. Este cálculo foi feito utilizando as Eqs. (IV.D.4-8) e (IV.A.8-9) juntamente com os valores dos parâmetros listados na tabela VIII. A energia do exciton ligado no poço recozido foi estimada a partir da largura média do poço dada por

$$\langle d_B \rangle = 2 L_D + d_B, \quad (V.B.4)$$

onde $L_D = \sqrt{Dt}$ é o comprimento de difusão e d_B é a largura do poço quadrado. Os valores de L_D variam desde 15 a 40Å, para os tempos de tratamento térmico utilizados (veja tabela III). Isto

resulta em larguras médias $\langle d_B \rangle$ entre 110 e 160Å. Para estas larguras a energia do exciton ligado, de acordo com os dados do Greene e outros [49] (veja fig. 13) e a Eq. (V.B.2), é da ordem de 7 meV. Para todas as posições dos picos das bandas de fotoluminescência de poços quânticos submetidos a tratamento térmico, listados na tabela VII, foram adicionados 7meV para serem comparados com os valores calculados. As retas horizontais, mostradas na Fig. 16, correspondem aos dados experimentais. Dos pontos de cruzamento entre estas retas e as curvas teóricas (a, b e c) obtêm-se os valores de D. Os valores, assim obtidos para cada amostra, estão listados na tabela IX [42]. A variação de D com a temperatura de tratamento térmico, geralmente, obedece a expressão modificada de Arrhenius [41] dada por

$$D = D_0 \exp \left[-E_a / k T \right], \quad (V.B.5)$$

onde E_a é a energia de ativação, k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura de recozimento. O gráfico de D em função da temperatura está mostrado na Fig. 17, onde as bolinhas representam os pontos experimentais obtidos da figura 16 e a linha cheia é dada pela expressão (V.B.5) com $D_0 = 4,27 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{seg}$ e $E_a = 2,07 \text{ eV}$ [42], obtidos por cálculo de mínimos quadráticos.

Como ainda não existem na literatura valores do coeficiente de interdifusão de In e Ga, a comparação com o coeficiente de interdifusão de Al e Ga no sistema $\text{AlGa}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$, é uma boa referência [13-19]. O sistema $\text{AlGa}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ é bastante estudado e os valores de coeficiente de interdifusão de Al e Ga obtidos por diferentes métodos, dependendo da composição de Al, para a temperatura de tratamento térmico de 850°C , variam entre 10^{-19} a $10^{-18} \text{ cm}^2/\text{seg}$. Sendo isto mais que uma ordem de grandeza

menor que os dados obtidos aqui no sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Além disso a energia de ativação no sistema $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ varia de 4,0 a 6,0 eV, o que é de duas a três vezes maior do que no sistema aqui estudado. Isto mostra que, num tratamento térmico, as estruturas feitas de $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ são mais estáveis do que aquelas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Tal instabilidade do sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ deve estar, provavelmente, relacionada com o ponto de fusão da rede do tipo InAs , que é menor que o de AlAs . Por outro lado, os valores de coeficiente de interdifusão de Al e Ga em sistema $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, obtidos por Seo e outros [52], utilizando o método de recozimento rápido, são quase duas ordens de grandeza maiores que os dados obtidos aqui no sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. A energia de ativação nos dois sistemas, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ e $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, são praticamente iguais. Por exemplo, a 850°C o valor de D é de $\sim 3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{seg}$ em $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [52] e de $\sim 2 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg}$ em $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ obtidos da figura 17. O valor do coeficiente de interdifusão pode depender do método ou da condição de tratamento térmico, entretanto para a sua verificação será necessário um estudo sistemático utilizando amostras bastante conhecidas.

C. SUPER-REDES SUBMETIDAS A TRATAMENTO TÉRMICO.

As duas super-redes de 50/50Å e 100/100Å, foram submetidas a tratamentos térmicos a temperaturas de 850°C por 30 e 90 minutos, respectivamente, ver tabela II. Durante o tratamento térmico destas super-redes de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}/\text{GaAs}$ pode ocorrer, tanto a interdifusão de In e Ga nas interfaces, como também a relaxação das tensões nas camadas [37]. Estes dois efeitos modificam o perfil de potencial ao longo da direção de crescimento. O parâmetro de rede da super-rede recozida, a_{sr} , foi medido por espalhamento Raman e as energias de transição dos portadores confinados, por espectroscopia de absorção.

Os espectros típicos de absorção de super-redes estão apresentados na Fig. 5, antes e depois do tratamento térmico. As posições dos picos de absorção destes espectros estão listados na tabela V e os dados de medidas de espalhamento Raman das duas super-redes, submetidas a tratamento térmico, estão listados na tabela III. Nas duas amostras houve a relaxação da tensão, o que aumenta o valor do parâmetro de rede da super-rede. As aproximações feitas na determinação do a_{sr} , discutidas na seção B do capítulo IV, ainda são válidas aqui, pois a composição de In em qualquer região da super-rede é sempre menor ou igual a 0,12. O deslocamento do pico de absorção, como mostrado na Fig. 5 é atribuído, tanto ao efeito de interdifusão, como também a relaxação da tensão. No espectro de absorção da super-rede de 50/50Å, a primeira banda não mudou de posição com o tratamento térmico, enquanto que a diferença de energia entre as posições dos picos da segunda e da primeira banda diminuiu bastante (veja

tabela IV). Os valores da energia de transição foram calculados a partir das equações (IV.A.8-9) e (IV.D.4-6,13-15). Na figura 18 são mostrados os gráficos da energia de transição E_{00}^{hh} e $\langle E_{00}^{lh} - E_{00}^{hh} \rangle$, calculadas em função do coeficiente de interdifusão de In e Ga para três valores de Q_e . E_{00}^{hh} e E_{00}^{lh} são as energias de transição de $(h0 + e0)$ e $(10 + e0)$, respectivamente. As retas de a até c, correspondem aos valores calculados com os parâmetros de rede da super-rede iguais a: $\langle a_{sr} \rangle - \sigma$, $\langle a_{sr} \rangle$ e $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$, respectivamente, onde $\langle a_{sr} \rangle$ e σ são os valores médios de a_{sr} e o seu desvio quadrático médio, como estão mostrados na tabela III. As retas horizontais, d, correspondem aos dados experimentais da Fig. 5a, onde já estão incluídas as correções devido a energia de ligação do exciton livre. O comprimento de difusão no recozimento da amostra H27 é da ordem de 9 Å (veja a tabela IX), o que dá uma largura média do poço (Eq. (V.B.4)) de 68 Å e uma energia de ligação do exciton livre da ordem de 7 meV (veja Fig. 13). Para $Q_e > 0,60$, os buracos leves ficam confinados na região da barreira, o que implica na proibição da transição $(10 + e0)$. Se $Q_e < 0,50$, os buracos leves ficam confinados na região do poço, e com isto deveria observar uma banda de absorção bastante forte para $(10 + e0)$. Para os valores intermediários de Q_e os buracos leves ficam fracamente confinados. A mudança da região de confinamento (poço/barreira) ocorre em $Q_e \sim 0,57$. Assim para $0,50 < Q_e < 0,60$ seria esperada uma banda de absorção fraca. Esta previsão teórica concorda com os dados experimentais, mostrados na figura 5a, com uma banda de absorção forte e outra fraca. Para $Q_e = 0,57$, a reta calculada c se ajusta muito bem com os dados experimentais (reta d). O ponto de cruzamento entre estas retas ocorre em $D \sim 0,5 \times$

$$10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg} \text{ e } a_{\text{sr}} = \langle a_{\text{sr}} \rangle + \sigma \text{ [37]}.$$

Como mostrado na figura 5b, a super-rede de 100/100 Å submetida a tratamento térmico, apresenta os picos das bandas de absorção deslocados para a região de maior energia e, também, as distâncias entre elas diminuídas. Para analisar estes dados, foram construídos os gráficos da energia de transição calculada em função de D para três valores de Q_0 , como estão mostrados na Fig. 19. Como no caso anterior, os dois extremos de valores de Q_0 não concordam com os nossos dados experimentais, pois a segunda banda de absorção experimental é fraca comparada com a primeira. Somente os valores intermediários satisfazem estas condições. Para $Q_0 = 0,58$, as curvas calculadas b ajustam, razoavelmente bem, com os dados experimentais (reta d). O ponto de cruzamento ocorre em $D \sim 2,5 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg}$ e $a_{\text{sr}} = \langle a_{\text{sr}} \rangle$.

Os valores de D obtidos, tanto para as duas super-redes, como também para poços quânticos submetidos a tratamentos térmicos, são bem semelhantes (veja tabela IX). As variações no valor de D poderiam estar relacionadas com a densidade de defeitos ou modificações das tensões que são induzidas pelo tratamento térmico. Sua verificação exigirá um estudo minucioso em amostras, convenientemente, preparadas.

CAPÍTULO VI

- CONCLUSÃO

Neste trabalho é apresentado um estudo de poços quânticos e super-redes de camadas tensionadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, crescidas por LPMOYPE. Os parâmetros de rede das super-redes e a distribuição das tensões nas camadas foram determinados por medidas de espalhamento Raman [36]. As energias de transição entre os estados confinados foram medidas por fotoluminescência e absorção. Os níveis de energia dos portadores confinados foram calculados dentro do formalismo da aproximação de função envelope [39], onde o fator Q_e foi utilizado como um parâmetro de ajuste na comparação com os valores experimentais de absorção. Os valores de Q_e obtidos desta comparação estão entre 0,5 a 0,6 [47]. Este intervalo define muito melhor o valor de Q_e para a hetero-junção de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ do que os diversos valores espalhados que são encontrados na literatura. Por exemplo, os autores das referências 10 e 11, por medidas de absorção obtiveram, respectivamente, $Q_e = 0,67$ e $Q_e = 0,70$, enquanto que os autores da referência 12 usando técnicas de espalhamento de luz obtiveram $Q_e = 0,40$. Cálculos teóricos obtidos pelos autores das referências 50 e 51 apresentam valores de Q_e iguais a 0,59 e 0,42, respectivamente. Estes valores foram convenientemente adaptados para a composição de 12% de In, já que os cálculos foram realizados para a interface InAs/GaAs. Levando em consideração que o valor de $Q_e = 0,40$ da referência 12 foi obtido em amostras com $x = 0,05$ e que o valor de $Q_e = 0,67$ e 0,70, das referências 10 e 11, em amostras, respectivamente, com x

$\alpha = 0,15$ e $0,13 \leq \alpha \leq 0,19$, parece que existe uma certa tendência de que Q_0 aumenta com a composição de In. A verificação da existência ou não de tal dependência é um trabalho que merece um estudo sistemático em amostras muito bem preparadas, onde a composição de In e as espessuras das camadas sejam conhecidas. Poços quânticos e super-redes, submetidas a tratamentos térmicos, também foram caracterizadas pelas técnicas de fotoluminescência e de absorção a 2K e de espalhamento Raman à temperatura ambiente. Dos deslocamentos da linha Raman foram determinadas as novas tensões em cada camada da super-rede e a partir do deslocamento da banda de fotoluminescência e de absorção, foi possível determinar o coeficiente de interdifusão de In e Ga para cada amostra. Estes valores de coeficiente de interdifusão de In e Ga, por exemplo a 850°C , são duas ordens de grandeza maiores do que os dados, encontrados na literatura, para a interdifusão de Al e Ga no sistema $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$. A energia de ativação para a interdifusão de In e Ga em $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ foi determinada como sendo de 2,07 eV, o que é de duas a três vezes menor do que no sistema $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$. Isto significa que, num tratamento térmico, as estruturas feitas de $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ com energia de ativação entre 4,0 e 6,0 eV, são mais estáveis do que as de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ [13-19, 37, 42]. Com o tratamento térmico das super-redes foi observado também um aumento significativo de defeitos (deslocações) nas interfaces devido a relaxação da tensão [37]. Este aumento de defeitos na interface é um fator que degrada a qualidade ou o desempenho de muitos dispositivos feitos de super-redes tensionadas. Como em todas as amostras, submetidas e não submetidas ao tratamento térmico, os valores de Q_0 que melhor

descrevem os dados experimentais de absorção e espalhamento Raman estão no intervalo 0,50 a 0,60, se existir alguma relação de Q_0 com a tensão nas camadas, esta será uma dependência fraca. Por outro lado, o valor $D = 2,5 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg}$ determinado para a amostra G53 é cinco vezes maior que o valor de D encontrado para a amostra H27. Isto poderia ser atribuído a maior densidade de defeitos na super-rede de G53. Entretanto, para uma comprovação definitiva de tal dependência seria necessário um estudo sistemático em maior número de amostras com medidas quantitativas da densidade de deslocamentos. O valor de $D = 3,0 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{seg}$ encontrado para a amostra A3 (H63 submetida a tratamento térmico) é o maior valor a 850°C obtido neste trabalho. Isto poderia ser atribuído a maior tensão que a camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ficou submetida durante todo o processo, pois a mesma manteve-se comensurada com o substrato. Entretanto, para verificar tal dependência é desejável um estudo sistemático com diversas amostras de poços quânticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, com $0 < x < 1$ e espessuras das camadas menores que a espessura crítica. Isto evitaria o aparecimento de defeitos na interface, mas as camadas estariam submetidas a diferentes tensões.

TABELA 1 - Amostras de poços quânticos e super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ utilizadas neste trabalho. Todas as amostras contêm uma camada "buffer" de $\sim 1 \mu\text{m}$ de GaAs sobre o substrato. d_A é a espessura da camada de GaAs e d_B é de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Os valores críticos das espessuras do poço quântico d^c e das super-redes d_{sr}^c foram obtidos a partir da Fig. 11 [4].

Amostra	tipo	d_B	x	d^c (Å)
H63	poço quântico	80 Å	0,23	~ 200
H23	camada espessa	2 μm	0,12	~ 1000
GaAs	camada espessa	---	0,00	∞

Amostra	tipo	$20 \times d_B/d_A$ (Å)	x	x_{ef}	d_{sr} (Å)	d_{sr}^c (Å)
H27	super-rede	50/50	0,12	0,06	2000	~ 2000
G33	super-rede	100/100	0,12	0,06	4000	~ 2000
G34	super-rede	200/100	0,12	0,08	6000	< 2000

TABELA II - Condições do recozimento da poça quântica (A1 - A4) e super rede (H27R e G53R) de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Amostra	temperatura ($^{\circ}\text{C}$)	tempo (min.)
A1	750	180
A2	800	170
A3	850	90
A4	900	30
H27R	850	30
G53R	850	90

TABELA III - Posições dos picos do espectro Raman das amostras de super-redes listadas na tabela I e II. A quinta e sexta coluna contém os valores da deformação de cada camada A e B, e na última coluna contém os valores do parâmetro de rede da super-rede (a_{sr}).

Amostra	ω (cm^{-1})	$\delta\omega$ (cm^{-1})		$10^2 \epsilon$		a_{sr} (Å)
		A	B	A	B	
GaAs	$291,2 \pm 0,1$					$5,6533^*$
H23	$287,0 \pm 0,2$					$5,7019^*$
H27	$291,2 \pm 0,2$	0	4,3	0,0	-0,87	$5,633 \pm 0,002$
G53	$290,8 \pm 0,4$	-0,4	3,9	0,08	-0,79	$5,658 \pm 0,005$
G54	$289,6 \pm 0,5$	-1,6	2,6	0,33	-0,54	$5,672 \pm 0,006$
H27R	$290,5 \pm 0,2$					$5,661 \pm 0,002$
G53R	$290,4 \pm 0,4$					$5,663 \pm 0,005$

* obtidos da ref. 21.

TABELA IV - Parâmetros de GaAs e InAs utilizados em nosso cálculo. Os dados listados para InGaAs foram obtidos por interpolação linear ou, diretamente, como está indicado no texto.

Material	a (Å)	α	β	α	b (eV)	Δ_o	m_e	m_{hh} (m_o)	m_{lh}
GaAs	5,6533	0,004	1,67	-8,93	-1,73	0,341	0,067	0,45	0,087
InAs	6,0333	1,083	1,57	-6	-1,8	0,38	0,024	0,41	0,026
In _{0,12} Ga _{0,88} As	5,7010	0,904	1,67	-8,93	-1,73	0,316	0,062	0,45	0,080

TABELA V - Posições dos picos das bandas de luminescência ($h\nu_f$) (Fig. 2) e da absorção ($h\nu_i$, $i=1, 2$ e 3) (Fig. 4 e 5) das super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, antes e depois do recozimento

Amostra	$h\nu_f$ (eV)	$h\nu_1$ (eV)	$(h\nu_2 - h\nu_1)$ (meV)	$(h\nu_3 - h\nu_1)$ (meV)
B27	1,422 $\pm 0,002$	1,425 $\pm 0,002$	35 ± 2	-----
G53	1,391 $\pm 0,002$	1,395 $\pm 0,002$	45 ± 2	72 ± 2
G54	1,375 $\pm 0,004$	1,379 $\pm 0,005$	37 ± 1	----
B23	1,332 $\pm 0,001$	-----	-----	-----
GaAs	1,513	-----	-----	----
B27R	----	1,423 $\pm 0,003$	21 ± 2	----
G53R	---	1,426 $\pm 0,003$	22 ± 2	43 ± 4

TABELA VI - Valores de Q_e da junção $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ obtidos por diferentes autores.

Autores	x	Q_e	tipo de medida
Ref. 11	0,13 - 0,17	0,70	Absorção
Ref. 10	0,15	0,67	Absorção
nosso trabalho	0,12	0,5 - 0,6	Absorção/luminescência
Ref. 50	0,12*	0,59	Teoria
Ref. 51	0,12*	0,42	Teoria
Ref. 12	0,05	0,40	Espalhamento de luz

* obtidos por interpolação linear.

TABELA VII - Posições dos picos e larguras da meia altura das bandas de fotoluminescência de poços quânticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, antes e depois do recozimento (Fig. 3). Estes valores representam um valor médio e o seu desvio quadrático médio de uma série de medidas efetuadas em diversos pontos da amostra.

Amostra	$h\nu$ (eV)	$\Delta h\nu$ (meV)
H63	$1,302 \pm 0,003$	4
A1	$1,344 \pm 0,004$	6
A2	$1,401 \pm 0,004$	8
A3	$1,403 \pm 0,005$	7
A4	$1,369 \pm 0,004$	8

TABELA VIII - Parâmetros do GaAs e InAs utilizados no nosso cálculo. Para a liga de InGaAs, eles foram obtidos por interpolação linear.

Material	a (Å)	S_{11-12} $(\times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn})$	σ	b (eV)	Λ_0	m_e (m_0)	m_{hh} (m_0)
GaAs	5,6533	11,5	-8,93	-1,76	0,341	0,067	0,45
InAs	6,0503	19,5	-6	-1,8	0,38	0,024	0,41
In _{0,23} Ga _{0,77} As	5,7465	13,34	-8,26	-1,77	0,35	0,057	0,44

TABELA IX - Coeficiente de interdifusão de In e Ga obtidos para poço quânticos [42] e super-redes [37] recozidos. A coluna quatro, contém os valores de comprimento de difusão, $L_D = \sqrt{D t}$.

Amonstra	T (°C)	t (min)	D (cm ² /seg)	L _D (Å)
A1	750	180	2×10^{-18}	15
A2	800	170	$1,2 \times 10^{-17}$	35
A3	850	90	3×10^{-17}	40
A4	900	30	4×10^{-17}	27
B27R	850	30	$0,5 \times 10^{-17}$	9
G53R	870	90	$2,5 \times 10^{-17}$	37

REFERENCIAS:

- [1] - J. W. Matthews, and A. E. Blakeslee, J. Cryst. Growth, 27, 118 (1974)
- [2] - R. People and J. C. Bean, Appl. Phys. Lett., 47,322(1985), and Ibid 49, 229 (1986).
- [3] - L. J. Fritz, S. T. Picraus, L. R. Dawson, T. J. Drummond, W. D. Laidig and N. g. Anderson, Appl. Phys. Lett., 46, 967 (1985).
- [4] - P. J. Orders and B. F. Usher, Appl. Phys. Lett., 50, 980 (1987).
- [5] - T. J. Anderson, Z. G. Chen, V. D. Kulakovskii, A. Uddin and J. T. Valim, Appl. Phys. Lett. 51, 752 (1987).
- [6] - M. Gal, P. C. Taylor, B. F. Usher, and P. J. Orders, J. Appl. Phys. 62, 3898 (1987).
- [7] - R. Hull, J. C. Bean, F. Cerdeira, A. T. Fiory and J. M. Gibson, Appl. Phys. Lett., 49, 56 (1986).
- [8] - F. H. Pollak and M. Gardona, Phys. Rev. 172, 816 (1968).
- [9] - M. Chandrasekahr and F. H. Pollak, Phys. Rev. B 15, 2127 (1977).
- [10] - J. Y. Marzin, M. H. Charasse and B. Sermage, Phys. Rev B 31, 8298 (1985).
- [11] - G. Ji, D. Huang, U. K. Roddy, T. S. Henderson, R. Houdre, and H. Mockog, J. Appl. Phys. 62, 3366(1987).
- [12] - J. Menendez, A. Pinzuk, D. J. Wendor, S. K. Sputz, R. C. Miller, D. L. Sivco and Y. Cho, Phys. Rev. B36, 8165 (1987).
- [13] - K. Meehan, J. M. Brown, P. Gavrilovic, N. Holunjak Jr., R. D. Burham, T. L. Paoli, and W. Strifer, J. Appl. Phys.,

55, 2672 (1984).

- [114] - M. D. Camras, N. Holonyak Jr., R. D. Burnham, W. Streifer, D. R. Scifus, T. L. Pauli, and C. Lindström, J. App. Phys. 54, 5637 (1983).
- [115] - L.L. Chang, and A. Koma, Appl. Phys. Lett., 29,138 (1976).
- [116] - R. M. Fleming, D. B. Mowhan, A. C. Gossard, W. Wiegmann, and R. A. Logan, J. Appl. Phys., 51, 357 (1980).
- [117] - T. E. Scholesinger and T. F. Kuech, Appl. Phys. Lett., 49, 519 (1986).
- [118] - J.-C. Lee, T. E. Scholesinger, and T. F. Kuech, J. Vac. Sci. Technol. B3, 1167 (1987).
- [119] - L. J. Guido, N. Holonyak, Jr., K. G. Hsieh, R. W. Kaliski, W. E. Plano, R. D. Burnham, R. L. Thornton, J. E. Spier, and T. L. Pauli, J. Appl. Phys., 61, 1372 (1987).
- [120] -a) A. P. Roth, M. A. Sacilotti, A. A. Masul, P. J. D'Arcy, B. Watt, G. I. Sproule and D. F. Mitchell, Appl. Phys. Lett. 48,1452(1986), and J. Cryst. Growth, 77, 571 (1986).
- b) A. P. Roth, M. A. Sacilotti, R. A. Masul, A. Machado, and P. J. D'Arcy, J. Appl. Phys. 60, 2003 (1986).
- c) A. P. Roth, R. A. Masul, M. A. Sacilotti, I. Sproule, D. F. Mitchell and Y. Le Page, Can. Jour. Phys. 65, 909 (1987).
- [121] - Landolt-Börnstein, "Numerical Data and Functional Relationships in Science and technology" (Springer- Verlag, Berlin, 1962) New Series, vol. III/17a, pag. 218 and 297, edited by O. Madelung.
- [122] D. Blumberg, D. Mars, J. N. Miller, R. Bauer, and D. Oertel, J. Vac. Sci. Technol. B4, 1014 (1986).
- [123] B. Deveaul, A. Rugreny, J.-Y. Emery, and A. Chomette, J.

Appl. Phys. 59, 1633 (1986).

[24] R. L. S. Devine and W. T. Moore, J. Appl. Phys. 62, 3999 (1987).

[25] - W. Raynor and R. Loudon - "Scattering of light by crystals" (John Wiley & Sons, N.Y., 1978), 1a. edição, cap. 4, 147.

[26] - F. Bassani - "Method of band calculation applicable to III-V compounds", Semiconductors and Semimetals, Physics of III-V Compounds, edited by R. K. Willardson and A. G. Beer, (Academic Press, N.Y., 1966) vol 1, pag. 21.

[27] - S. G. Lekhnitskii - "Theory of elasticity of an anisotropic elastic body" - (Holden-Day Inc., S. Francisco, 1968) 1a edição.

[28] - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe - "Quantum Mechanics", (John Wiley & Sons, N.Y., 1977) vol. 2, 997.

[29] - S. Ganesan, A. A. Maradudin, and J. Gilman, Annals of Physics, 56, 556 (1970).

[30] - E. Anastassakis, A. Pinczuk, E. Burstein, P. H. Pollak, and M. Cardona, Solid State Commun., 9, 133 (1970)

[31] - F. Cerdeira, C. J. Buchenauer, P. H. Pollak and M. Cardona, Phys. Rev. B 5, 580 (1972).

[32] - F. Cerdeira, A. Pinczuk, J. C. Bean, D. Batlogg and R. A. Wilson, Appl. Phys. Lett. 45, 1138 (1984).

[33] - M. H. Brodsky and G. Lucovsky, Phys. Rev. Lett. 21, 990 (1968).

[34] - S. Yamazaki, A. Ushirokawa and T. Katada, J. Appl. Phys., 51, 3722 (1980).

[35] - P. Wickboldt, E. Anastassakis, R. Sauer and M. Cardona, Phys. Rev. B 35, 1362 (1987).

- [36] - F. Iikawa, F. Cerdeira, C. Vazquez-Lopez, P. Motisuke, M. A. Sacilotti, R. A. Masut, and A. P. Roth, Solid State Communication, in press.
- [37] - F. Iikawa, F. Cerdeira, P. Motisuke, M. A. Sacilotti, R. A. Masut, and A. P. Roth, J. of Superlattices and Microstructure, in press.
- [38] - R. Dingle, in Festkörperprobleme, edited by H. J. Quesser, Advanced in Solid State Physics, (Pergamon, N. Y., 1975) vol. 15, 21-48.
- [39] - G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 5693(1981) and ibid B25, 7584 (1982).
- [40] - N. V. Ashcroft and N. D. Mermin - "Solid State Physics" (Holt, Rinehart and Winston, N.Y., 1976), pag. 140.
- [41] - J. Crank, "The Mathematic of Diffusion", (Clarendon Press, Oxford, 1975) 2a. edição, pag 1 e 10.
- [42] - F. Iikawa, P. Motisuke, J. A. Brum, M. A. Sacilotti, A. P. Roth, and R. A. Masut, J. Cryst. Growth , in press.
- [43] - R. E. Nahory, M. A. Pollak, W. D. Johnston, and R. L. Burns Appl. Phys. Lett., 33, 659 (1978).
- [44] - Y.-T. Lau, F. A. Thiel, H. Scheiber, Jr., J. J. Rubin, B. I. Miller, and K. J. Bachmann, J. of Electronic Materials, 8, 663 (1979).
- [45] - K.-H. Goetz, D. Bimberg, H. Jørgensen, J. Selders, A. V. Solomonyov, G. F. Glinskii, and M. Razeghi, J. Appl. Phys., 54, 4543 (1983).
- [46] - D. R. Hartree - "Numerical Analysis", (Clarendon Press, Oxford, 1958), 2a. edição, pag.

- [47] - F. Ikawa, F. Gerdaira, G. Vazquez-Lopes, P. Motizuke, M. A. Sacilotti, R. A. Masut, and A. P. Roth, Phys. Rev. B., in press.
- [48] - H. B. Debb and E. W. Williams, Semiconductors and Semimetals, Physics of III-V Compounds, (Academic Press, N. Y., 1972), edited by R. K. Willardson and A. C. Beer, vol 8, pag. 181.
- [49] - R. L. Greene, K. K. Bajaj and D. E. Phelps, Phys. Rev. B 29, 1807 (1984).
- [50] - M. Cardona and N. E. Christensen, Phys. Rev. B 35, 6182 (1987).
- [51] - C. G. Van der Walle and R. M. Martin, Phys. Rev. B 34, 5621 (1986). C. G. Van der Walle, PhD. Thesis, Department of Electrical Engineering, Stanford University, 1986.
- [52] - K. S. Seo, P. K. Bhattacharyya, G. P. Kothiyal and S. Hong, Appl. Phys. Lett. 49, 966 (1986).

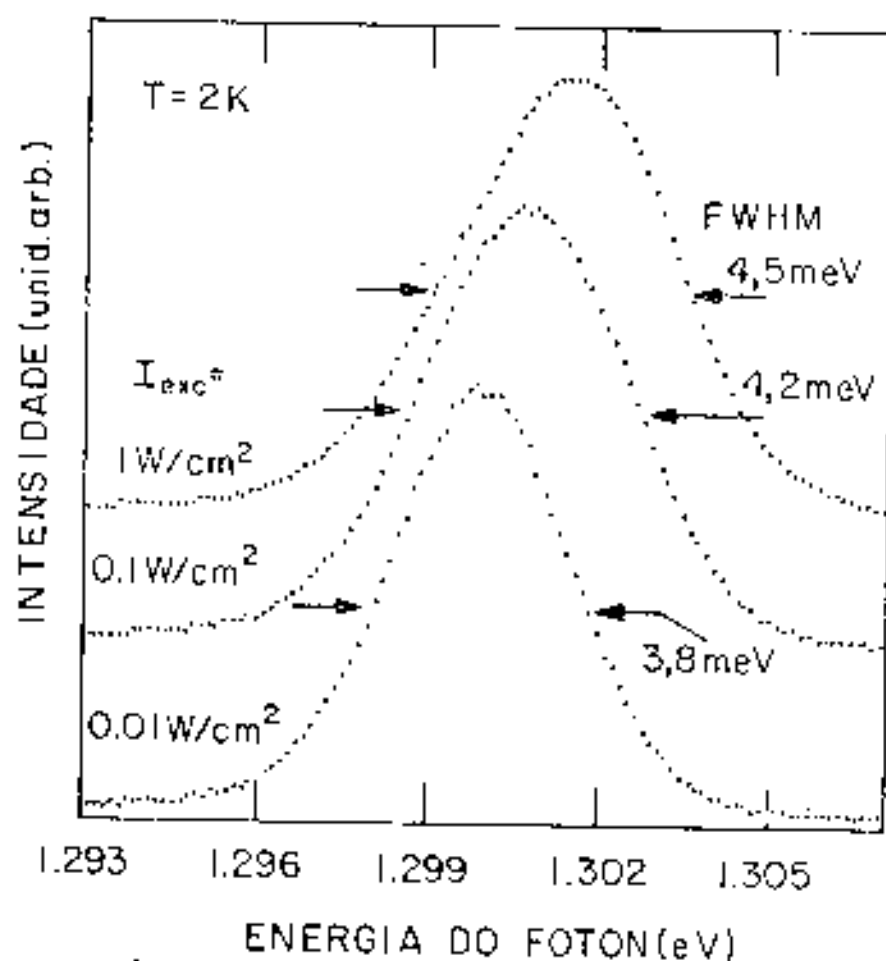


Figura 1 - Espectros de fotoluminescência de um poço quântico de $\text{In}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{As}/\text{GaAs}$ a 2K em função da intensidade de excitação (I_{exc}). As larguras a meia altura (FWHM) estão indicadas.

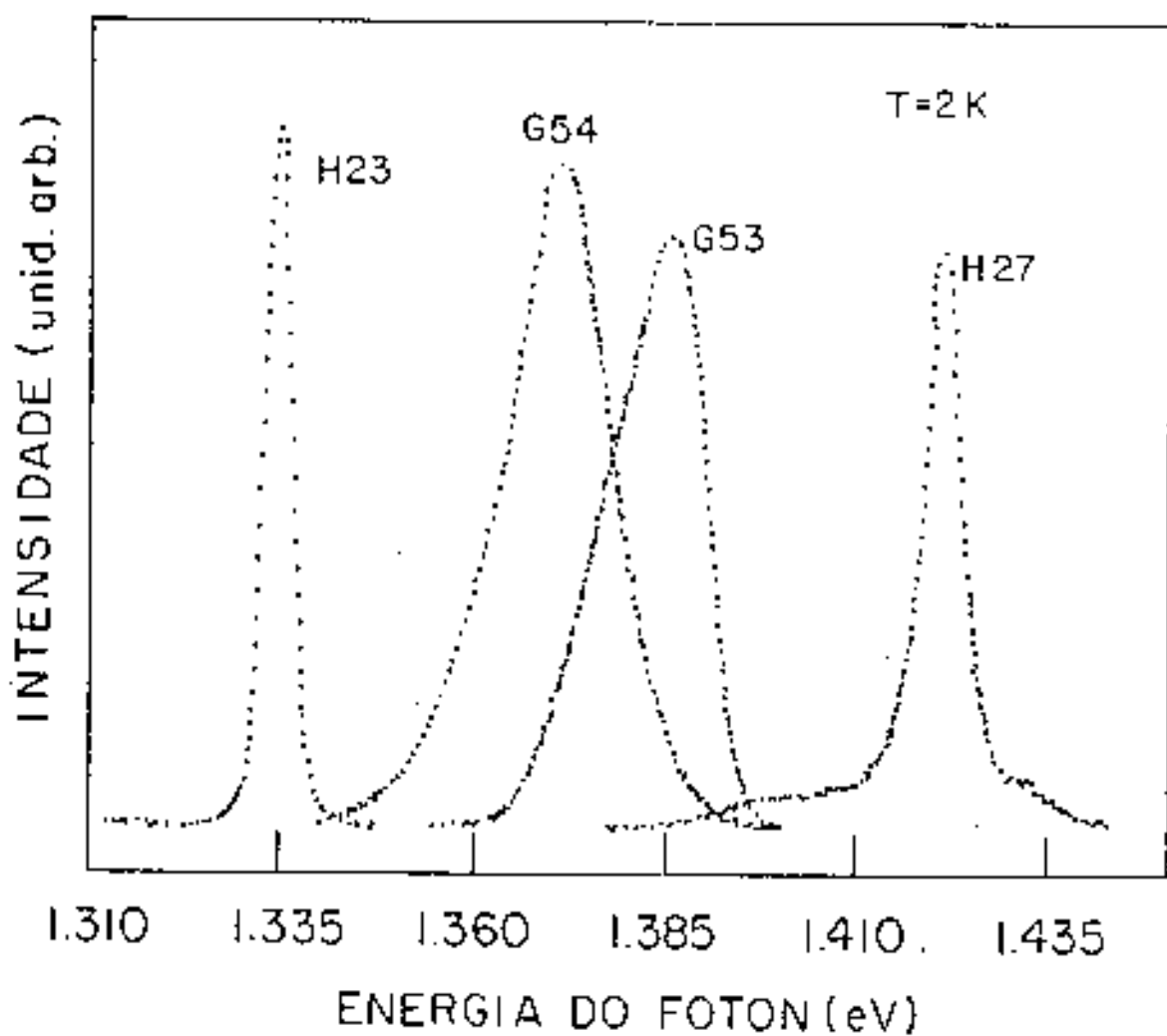


Figura 2 - Espectros típicos de fotoluminescência a 2K de super-redes de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}/\text{GaAs}$ e da camada grossa de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ sobre o GaAs (H23).

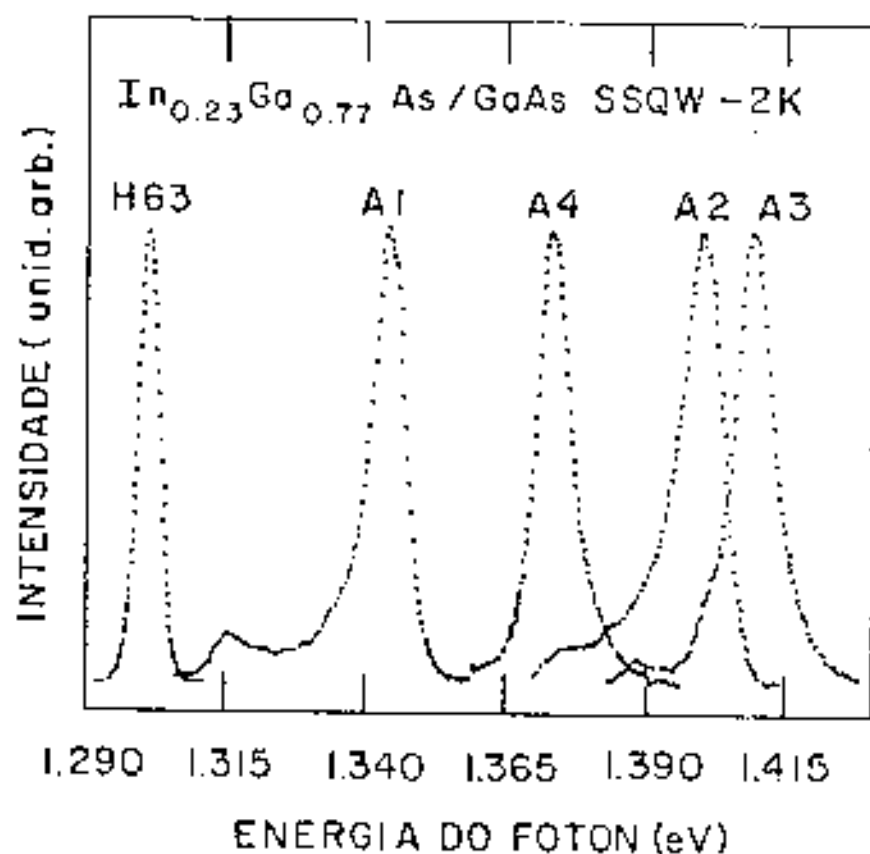


Figura 3 - Espectros de fotoluminescência a 2K de poços quânticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, antes (H63) e depois (A1 - A4) do recozimento, de acordo com as condições de recozimento apresentadas na tabela II.

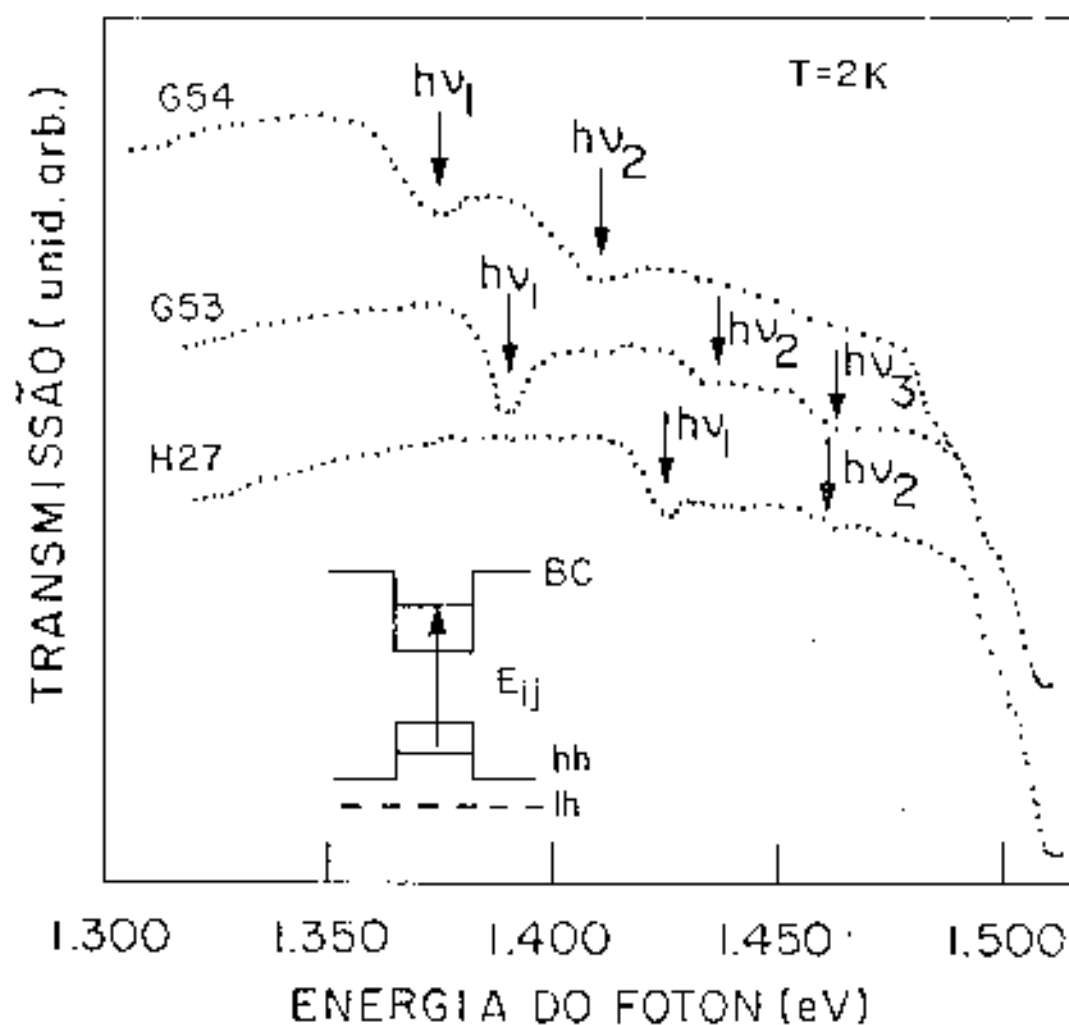


Figura 4 - Espectros típicos de transmissão a 2K do super-redeor do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. E_{ij} é a energia de transição do nível i da banda de valência (hh ou lh) para o nível j da banda de condução.

TRANSMISSÃO (un. arb.)

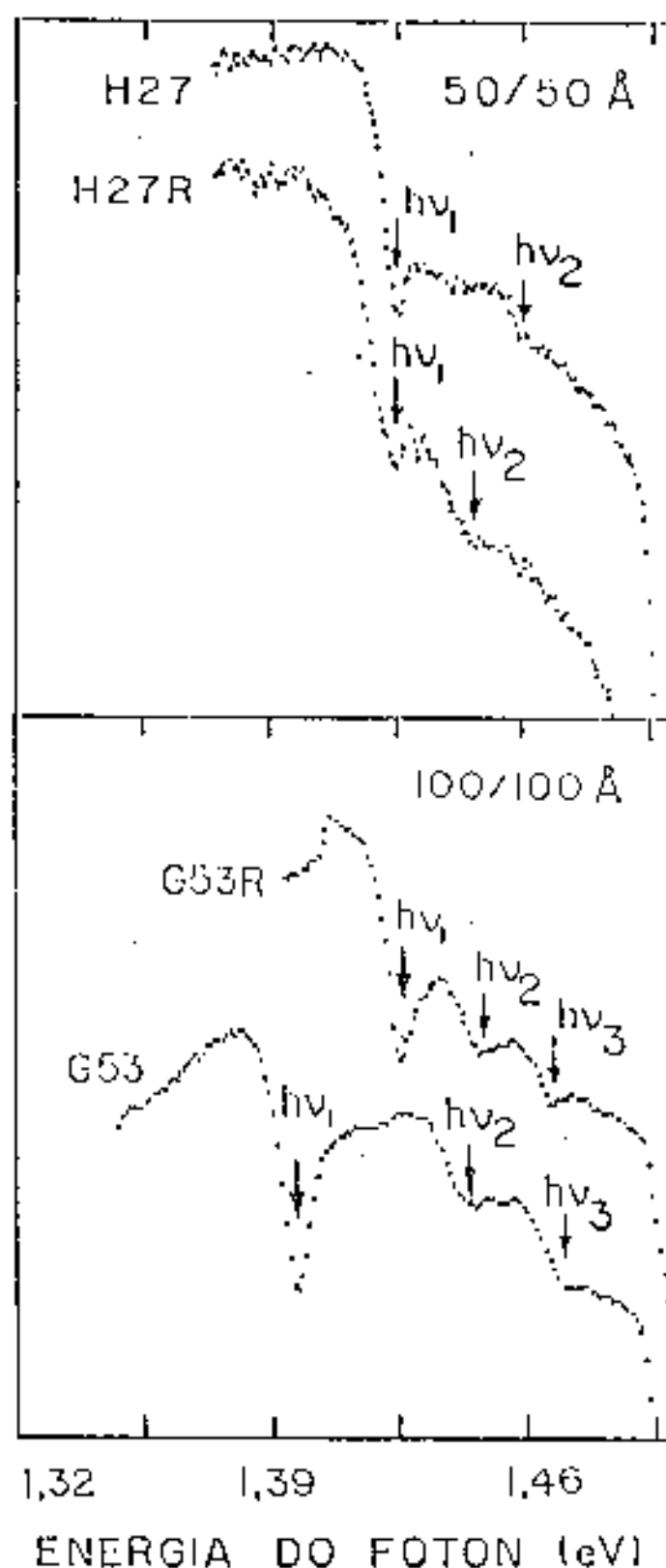


Figura 5 - Espectros de transmissão a 2K de super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, antes e depois do recozimento. (a) super-rede de 50/50 Å (H27 e H27R), (b) super-rede de 100/100 Å (G53 e G53R) (tabela II) .

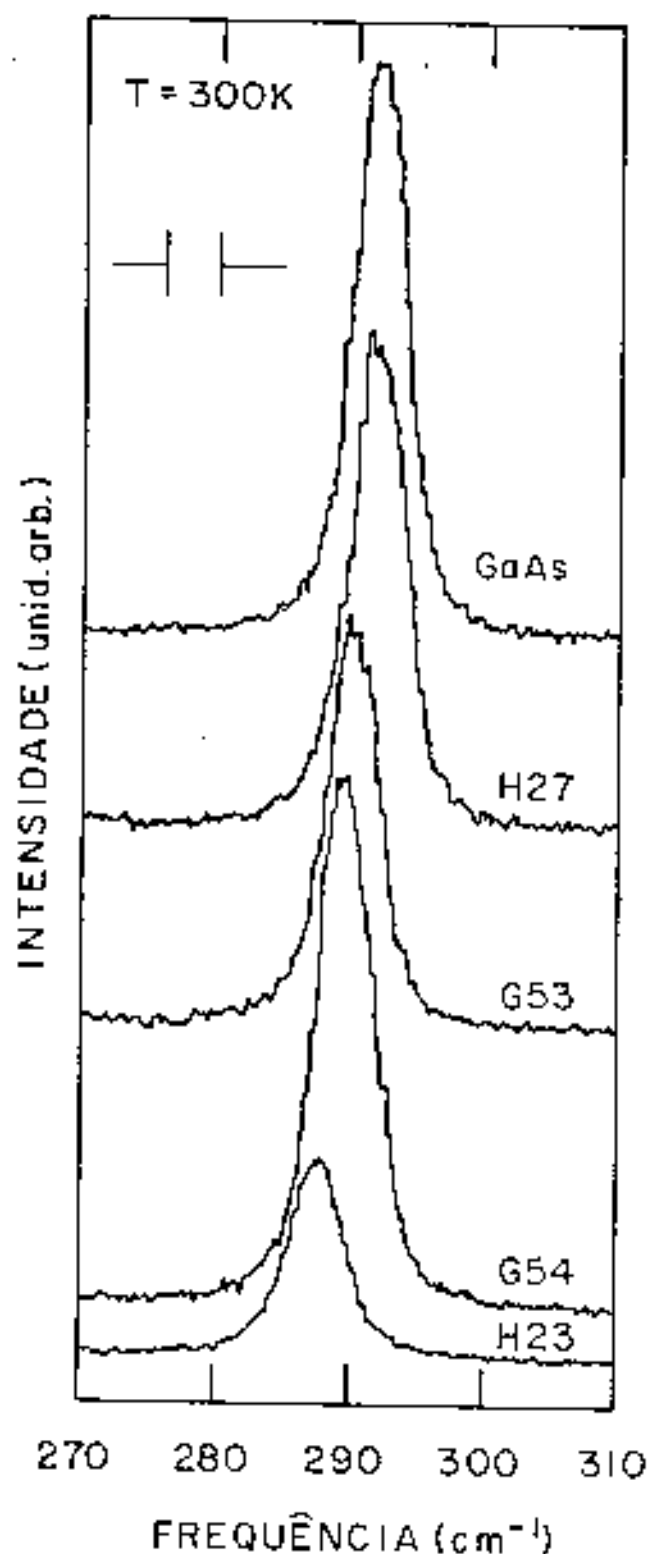


Figura 6 - Espectros típicos de espalhamento Raman de super-redes de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (H27, G53 e G54) e das amostras referências de GaAs e de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (H23).

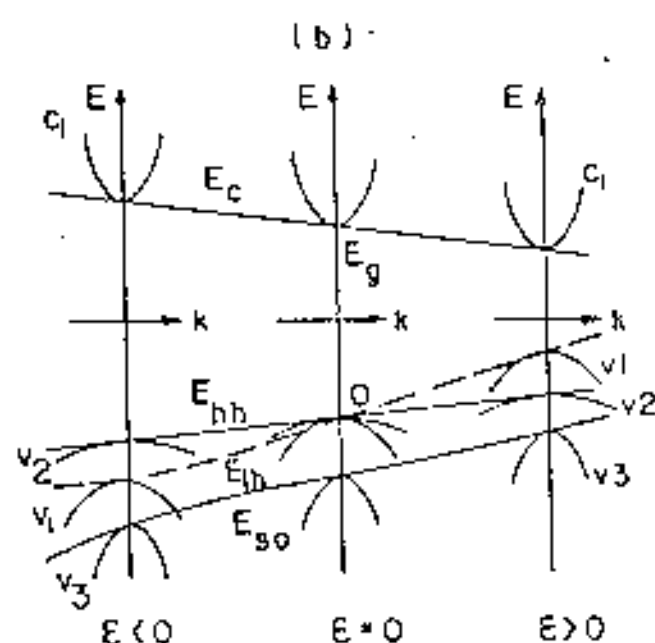
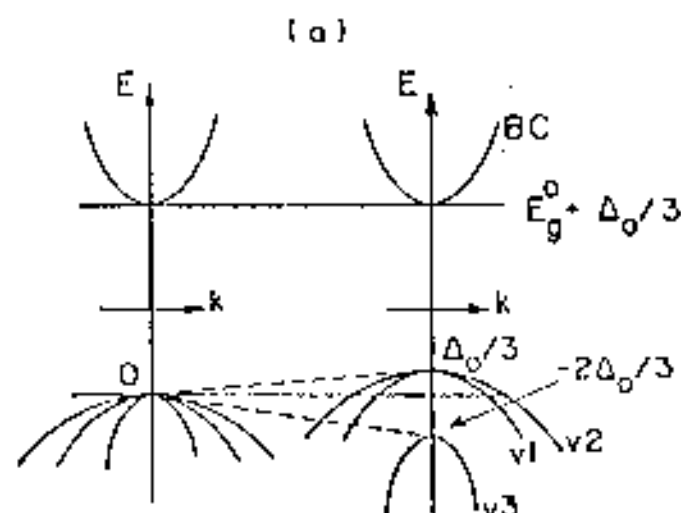


Figura 7 - Estruturas da banda de energia de um semiconductor tipo "zinc-blend". (a) estrutura da banda sem (esquerda) e com (direita) a interação spin-orbita; e (b) variação da estrutura de banda com a pressão (deformação ϵ). Para $\epsilon < 0$, o material fica comprimida e para $\epsilon > 0$, dilatada.

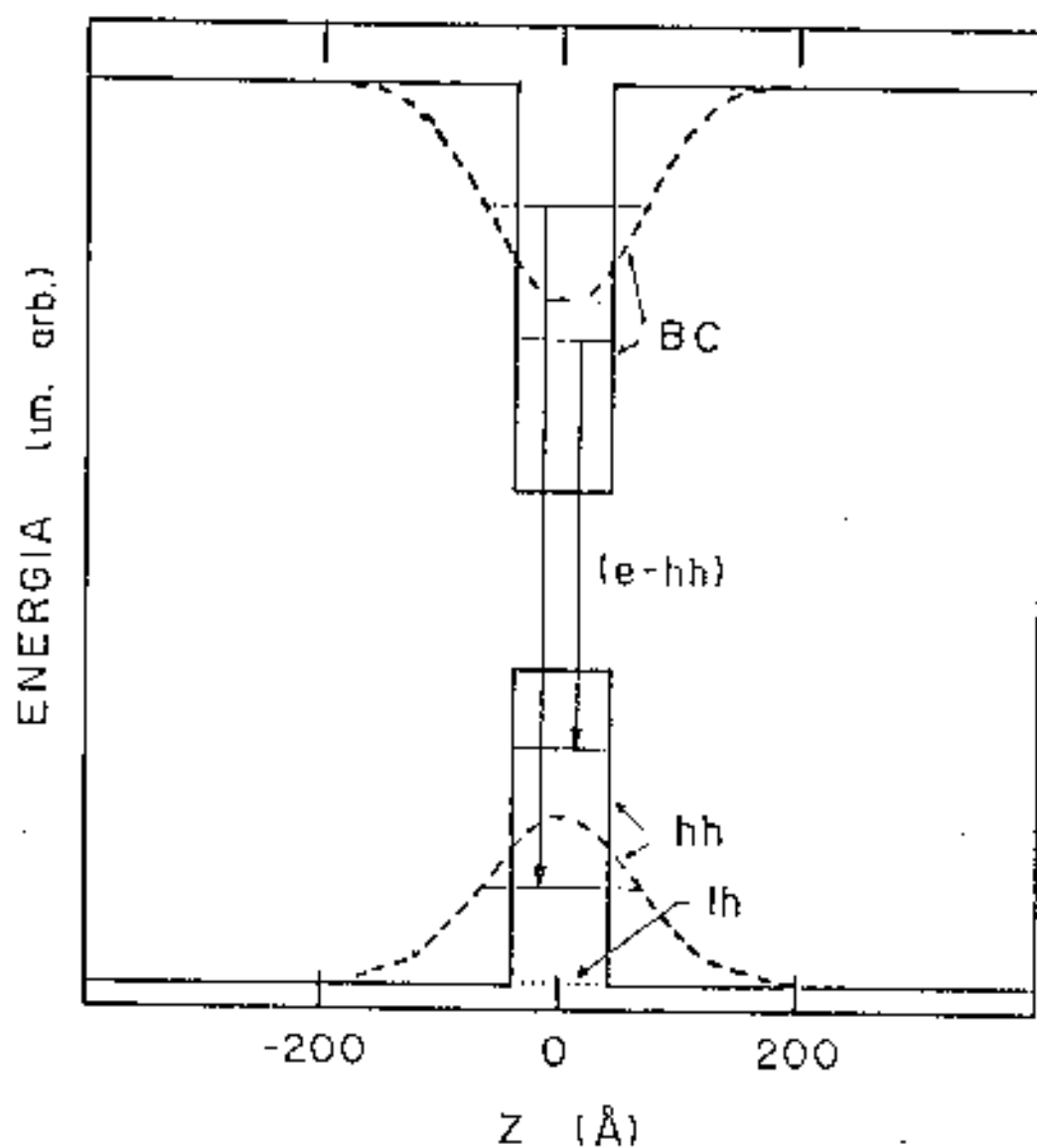


Figura 8 - Desenho esquemático do perfil de potencial antes (linha cheia) e depois (linha tracejada) do recozimento de um poço quântico de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ de 80Å de largura.

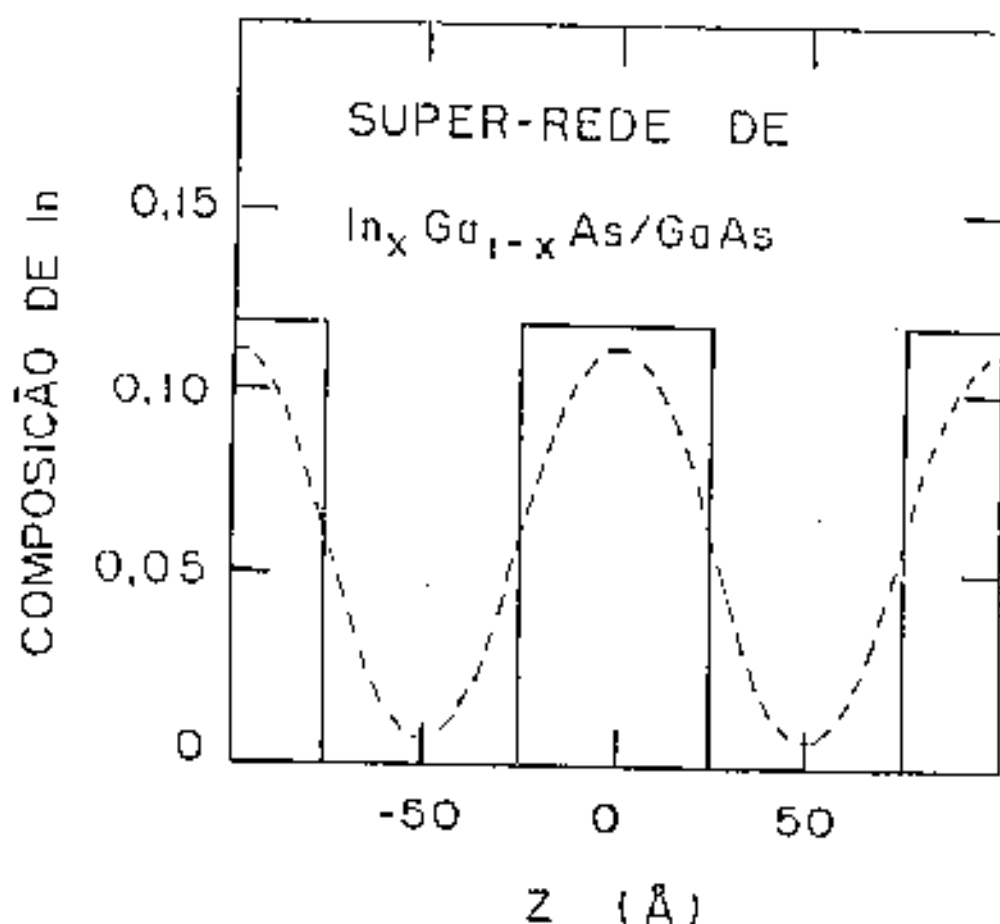


Figura 9 - Desenho esquemático do perfil de composição de In de uma super-rede de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ de 50/50Å, antes (linha cheia) e depois (linha tracejada) do recozimento. O período da super-rede é $d_A + d_B = 100 \text{ Å}$ e a composição inicial é $x = 0,12$.

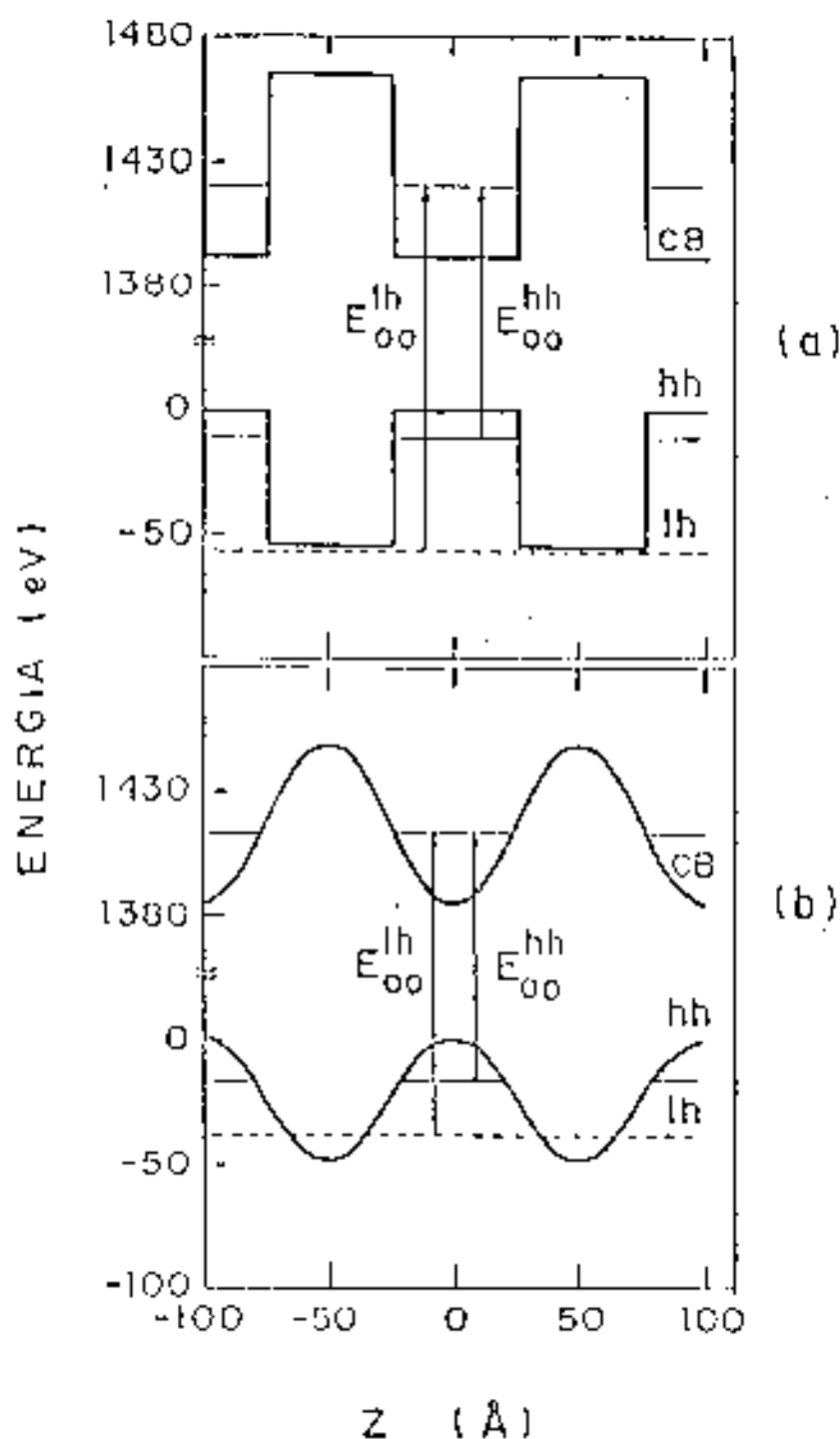


Figura 10 - Desenho esquemático do perfil de potencial de uma super-rede de $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}$ de 50/50Å, antes (a) e depois (b) do recozimento. E_{00}^{hh} e E_{00}^{lh} são energias de transições do nível fundamental da banda do buraco pesado e do nível fundamental da banda do buraco leve para o nível fundamental da banda de condução, respectivamente.

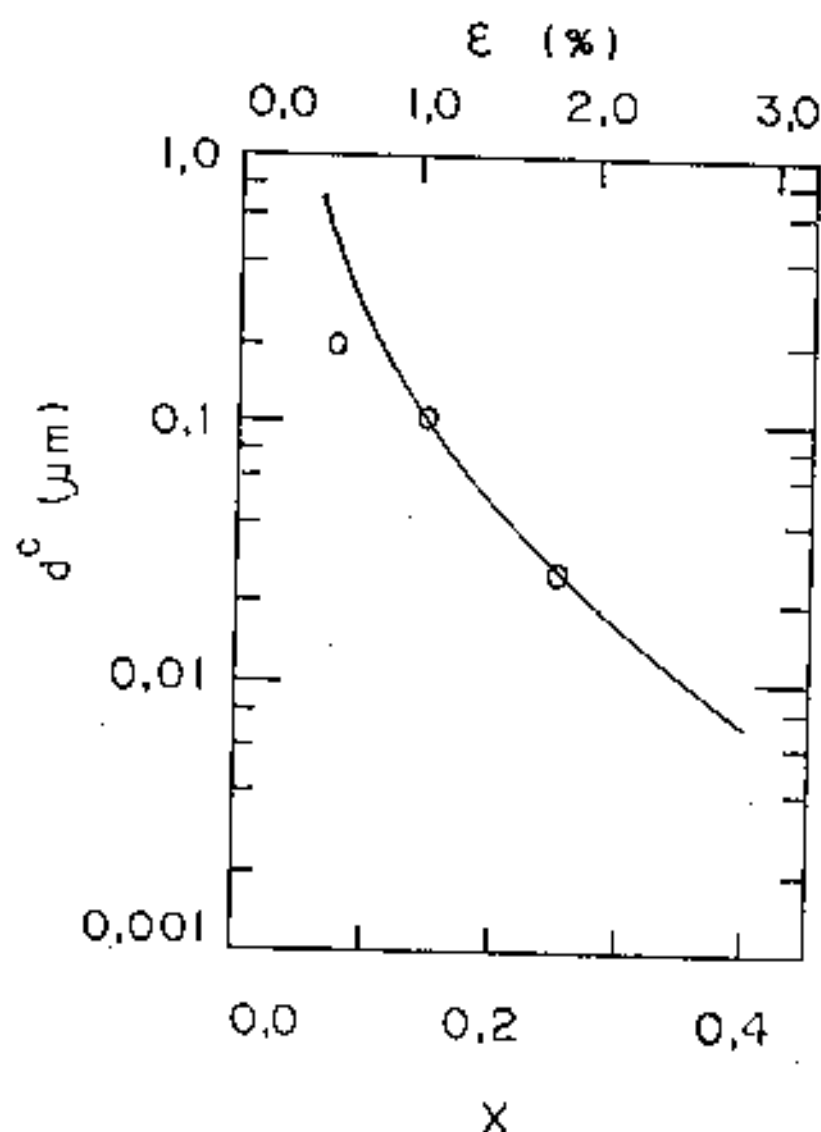


Figura 11 - Espessura crítica d^c em função da composição do $\text{In } x$ e a deformação ϵ para a camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre o substrato de GaAs. As bolinhas representam os pontos experimentais [4] e a linha cheia a curva calculada, utilizando o modelo de People and Bean [2].

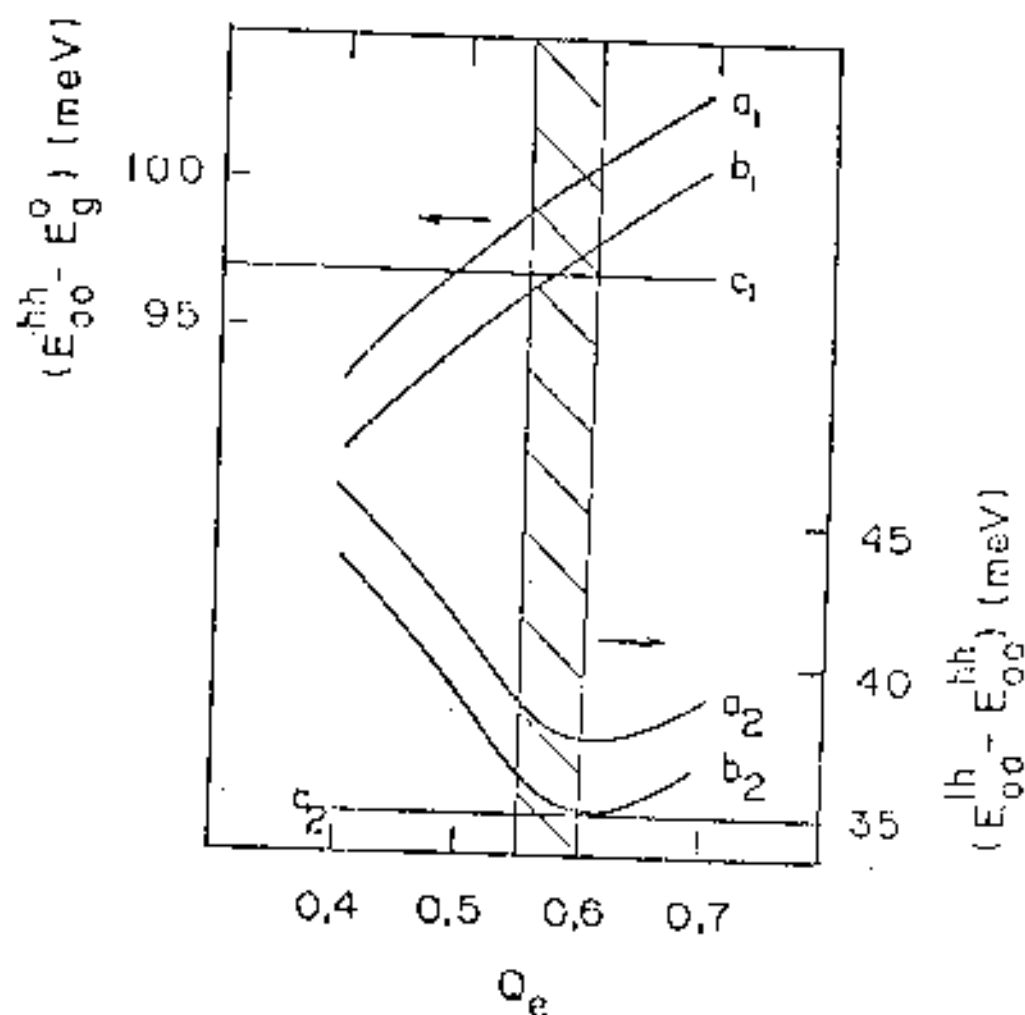


Figura 12 - Gráfico de $\langle E_{oo}^{hh} - E_g^o \rangle$ (curva a superior) e $\langle E_{oo}^{lh} - E_{oo}^{hh} \rangle$ (curva a inferior) em função de $Q_e = \Delta E_c / \Delta E_g$, cujos valores foram calculados para a super-rede de 50/50 A (CH27), onde E_{oo}^{hh} e E_{oo}^{lh} são, respectivamente, energias do transição do nível fundamental da banda do buraco pesado e do nível fundamental da banda do buraco leve para o nível fundamental do elétron na banda de condução. E_g^o é a energia do "gap" de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (tabela IV). As curvas a e b foram calculadas com $a_{gr} = \langle a_{gr} \rangle + \sigma$ e c são retas experimentais.

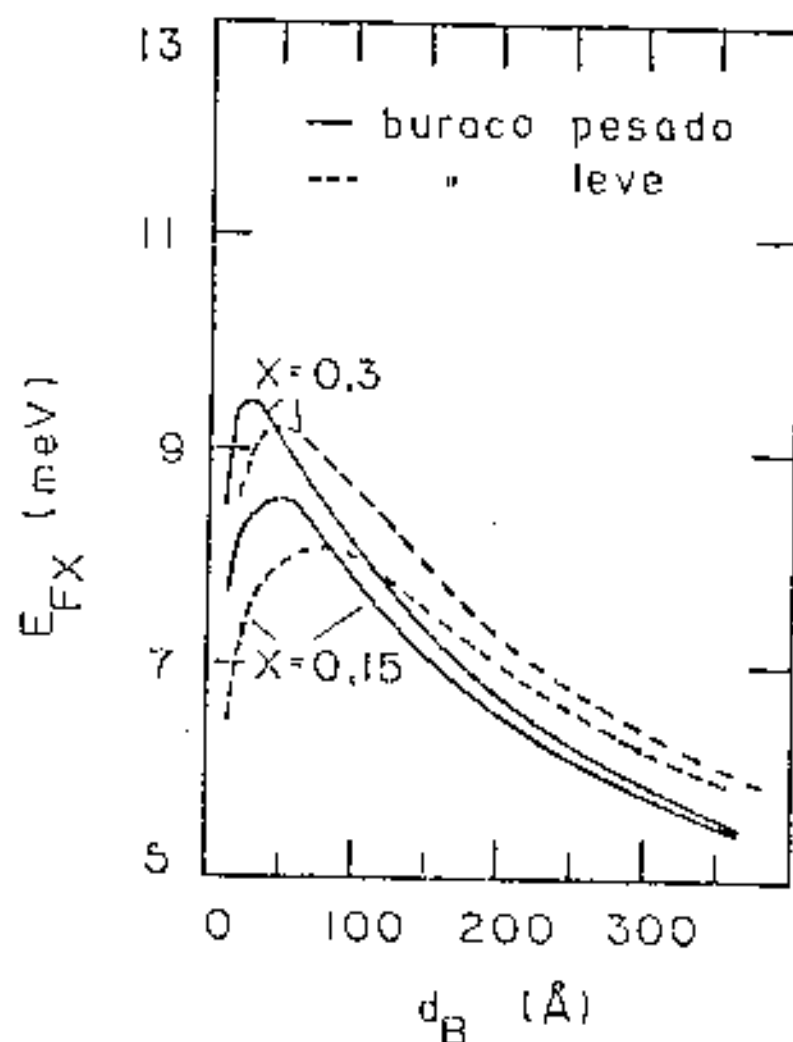


Figura 13 - Gráfico de energia de ligação do exciton livre (E_{FX}) em poço quântico em função da largura do poço (d_B). Estes dados foram calculados para o poço de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ pelos autores da ref. [49].

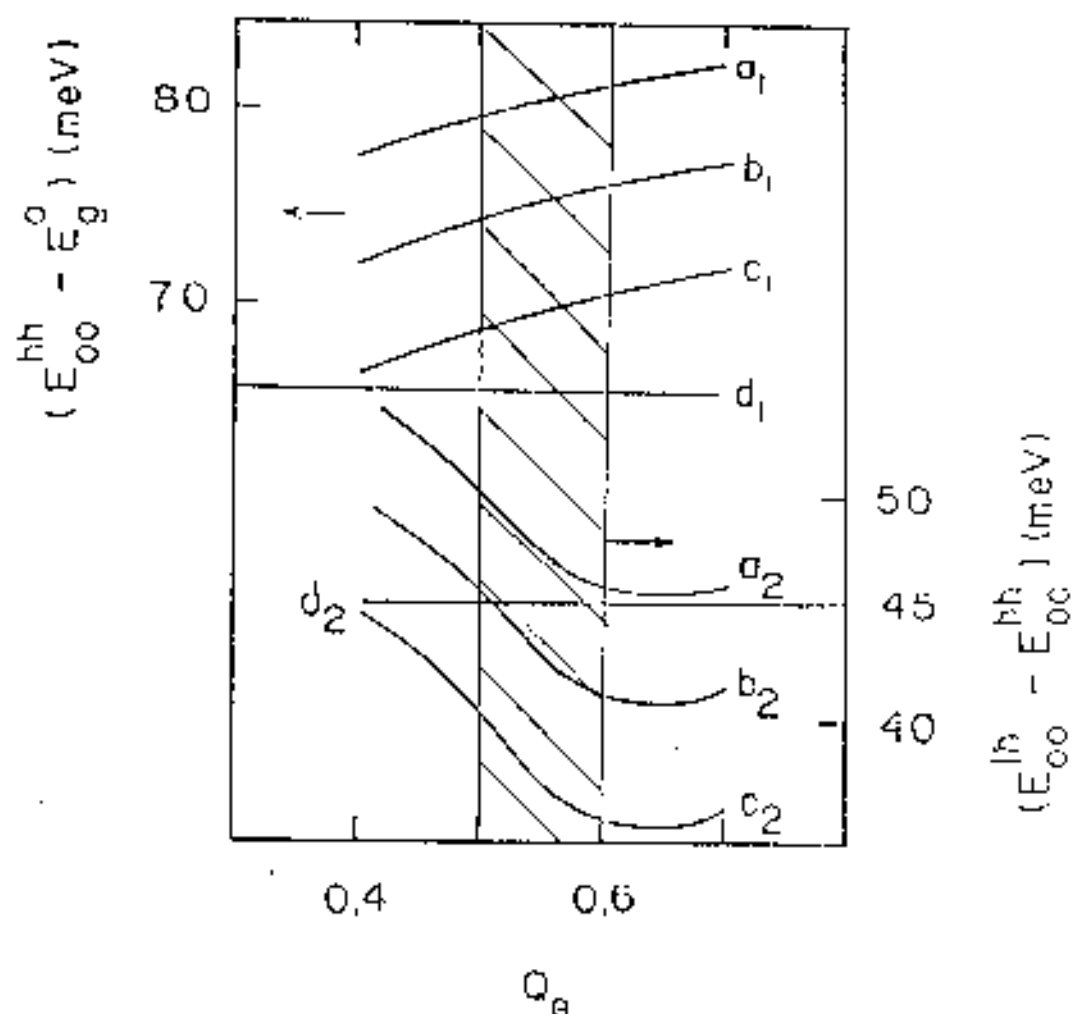


Figura 14 - Gráfico de $(E_{oo}^{hh} - E_g^o)$ (superior) e $(E_{oo}^{lh} - E_{oo}^{hh})$ (inferior) em função de $Q_0 = \Delta E_c / \Delta E_g$, cujos valores foram calculados para a super-rede de 100/100 Å (653), onde E_{oo}^{lh} e E_{oo}^{hh} são, respectivamente, as energias de transição do nível fundamental da banda do buraco pesado e do nível fundamental da banda do buraco leve para o nível fundamental da banda de condução. E_g^o é a energia do "gap" de $\text{In}_{0,12}\text{Ga}_{0,88}\text{As}$ (tabela IV). As curvas a, b e c foram calculadas com $a_{sr} = \langle a_{sr} \rangle - \sigma$, $\langle a_{sr} \rangle$ e $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$, respectivamente, (veja a discussão no texto) e d é a curva experimental.

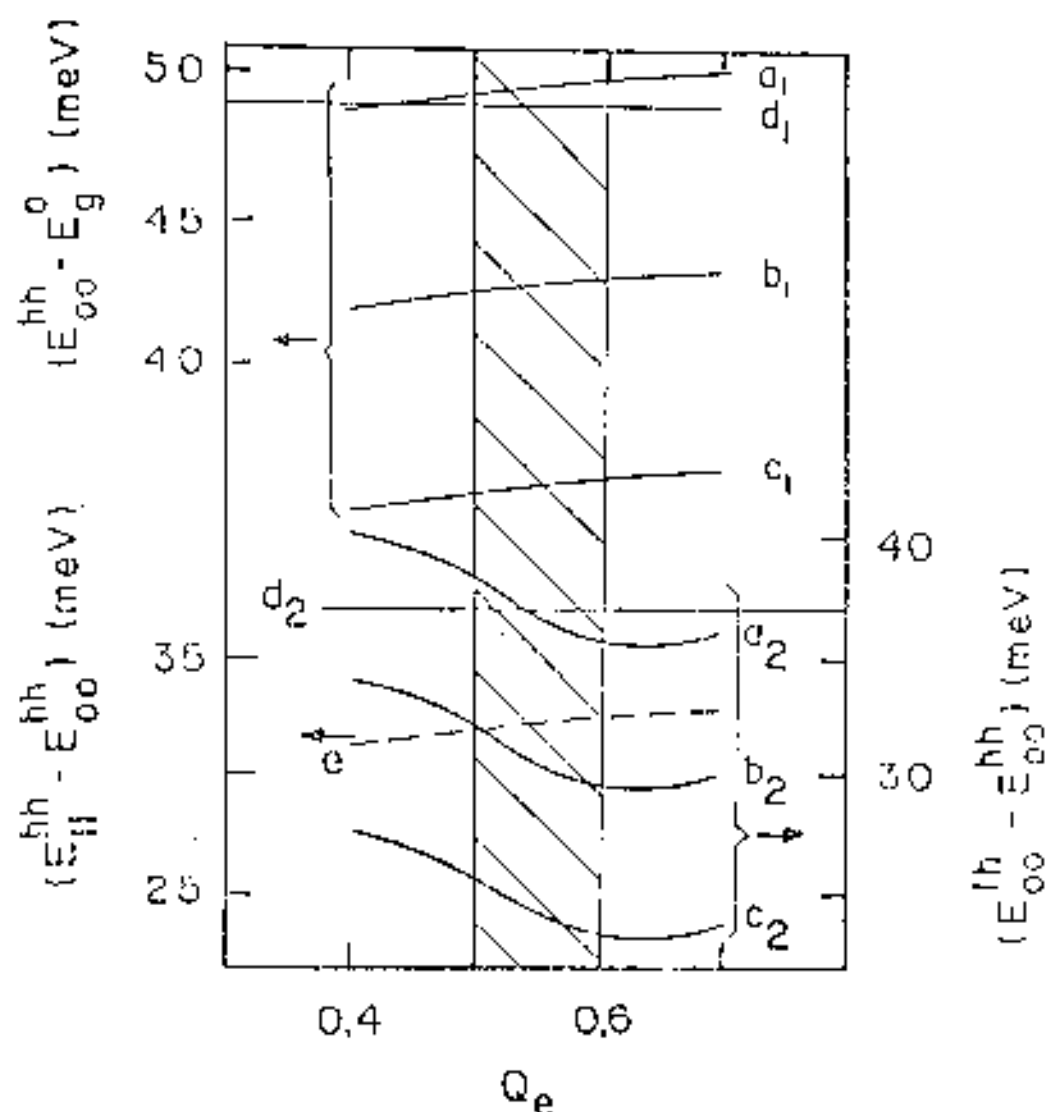


Figura 15 - Gráfico de $(E_{oo}^{hh} - E_g^o)$ (superior), $(E_{11}^{hh} - E_{00}^{hh})$ (inferior) e $(E_{oo}^{1h} - E_{oo}^{hh})$ (inferior) em função de $Q_e = \Delta E_c / \Delta E_g$, cujos valores foram calculados para a super-rede de 200/100 Å (GS4), onde E_{ij}^{hh} e E_{ij}^{1h} são, respectivamente, as energias de transição do nível i da banda do buraco pesado e do nível i da banda do buraco leve para o nível j da banda de condução. E_g^o é a energia do "gap" do $In_{0,12}Ga_{0,88}As$ (tabela IV). As curvas a, b e c foram calculadas com $a_{sr} = \langle a_{sr} \rangle - \sigma$, $\langle a_{sr} \rangle$ e $\langle a_{sr} \rangle + \sigma$, respectivamente (veja a discussão no texto) e d é a curva experimental.

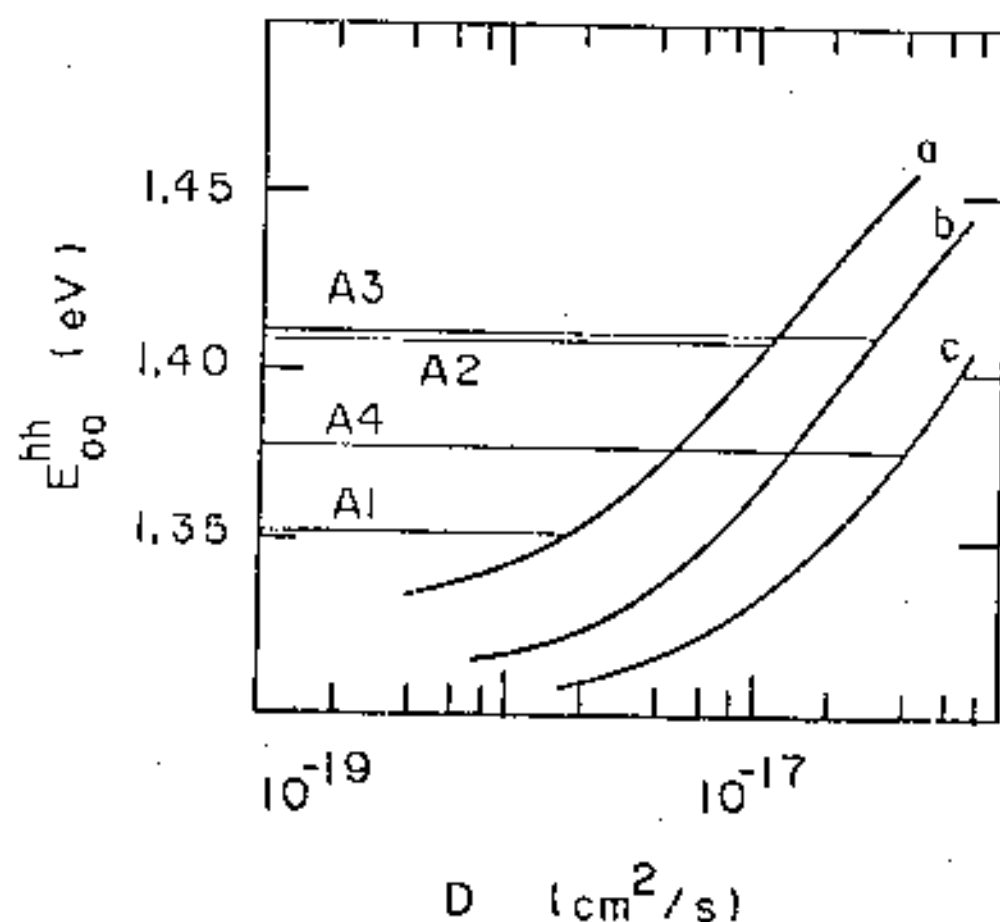


Figura 16 - Gráfico de energia de transição calculada para poço quântico de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ em função do coeficiente de interdifusão, D , para cada tempo de recozimento (curvas a, b e c correspondem a $t = 180, 90$ e 30 min., respectivamente).

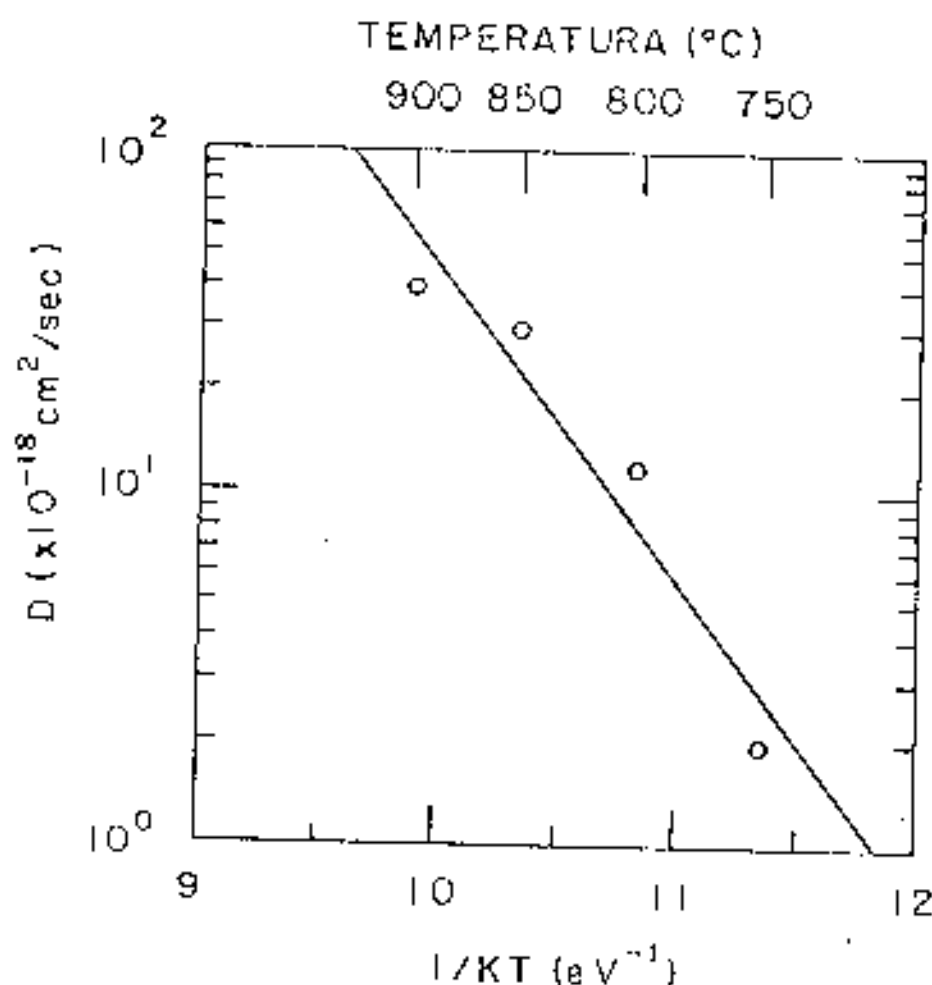


Figura 17 - Gráfico de coeficiente de interdifusão de In e Ga em função da temperatura de recozimento. As bolinhas abertas representam os pontos experimentais e a linha cheia a expressão de Arrhenius para $D_0 = 4,27 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{seg}$ e $E_a = 2,07 \text{ eV}$ (Eq. (V.B.5) [42]).

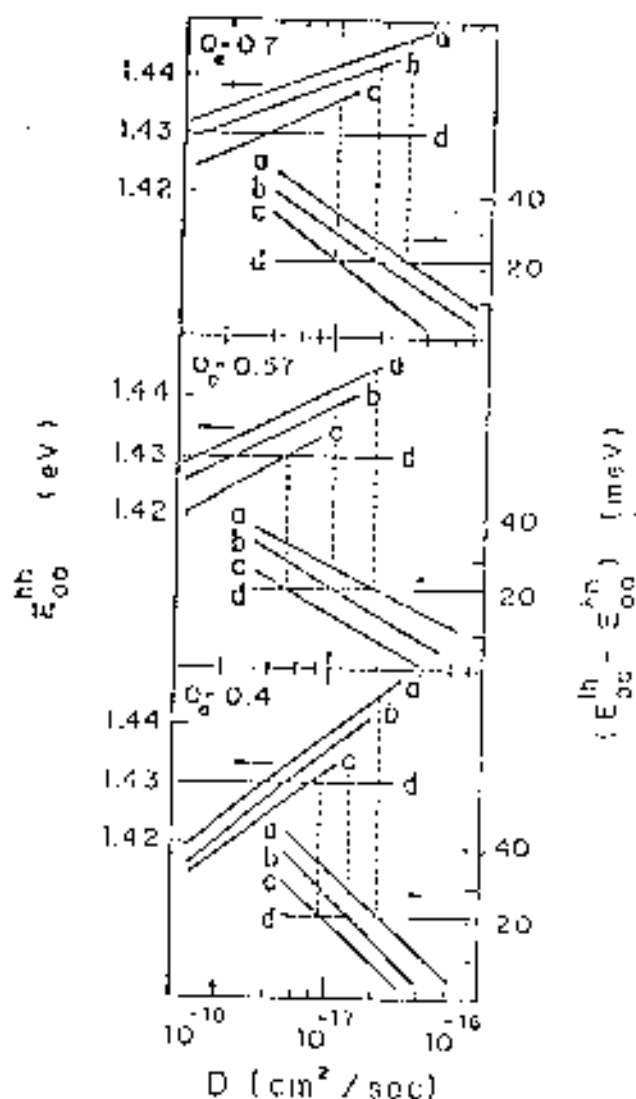


Figura 18 - Gráfico da energia de transição calculada para super-redes de 50/50 Å, recozidas em função do coeficiente de interdifusão D , para três valores de Q_c , onde E_{ij}^{lh} e E_{00}^{lh} são, respectivamente, as energias de transição do nível i da banda do buraco pesado e do nível j da banda do buraco leve para o nível j da banda de condução. As curvas a, b, c e d correspondem, respectivamente, as energias de transições para o parâmetro do rede da super-rede (a_{sr}) igual ao valor médio menos o desvio ($\langle a_{sr} \rangle - \sigma$), valor médio ($\langle a_{sr} \rangle$) e valor médio mais o desvio ($\langle a_{sr} \rangle + \sigma$), e a última, o dado experimental.

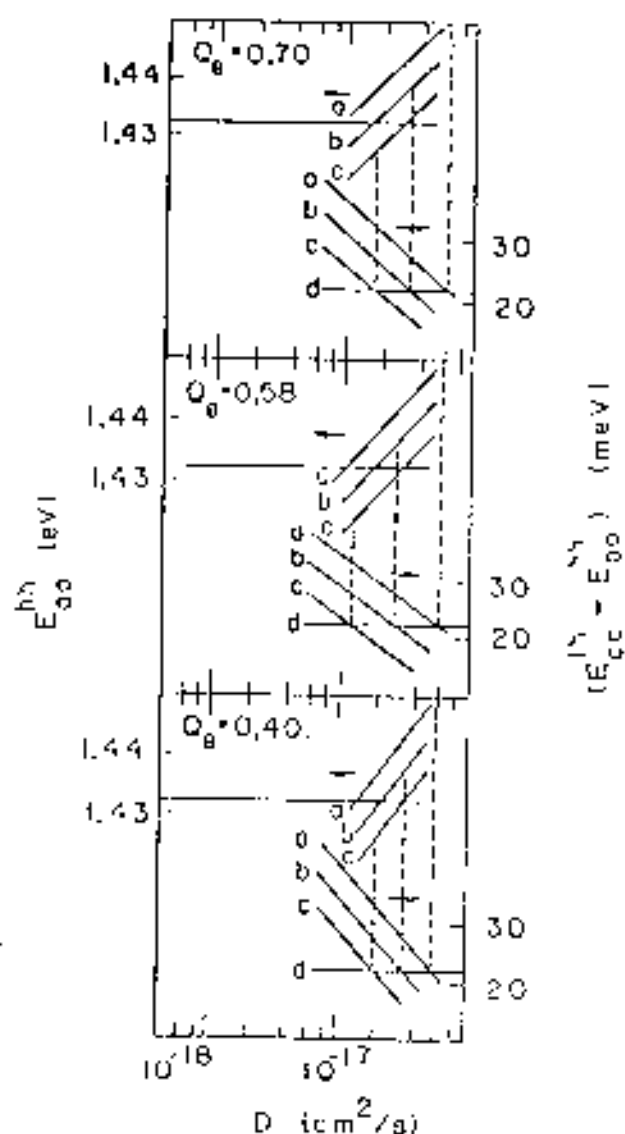


Figura 19 - Gráfico da energia de transição calculada para super-redes de 100/100 Å, recozidas em função do coeficiente de interdifusão D , para três valores de Q_0 , onde E_{ij}^{bh} e E_{ij}^{lh} são, respectivamente, as energias de transição do nível i da banda do buraco pesado e do nível i da banda do buraco leve para o nível j da banda de condução. As curvas a, b, c e d correspondem, respectivamente, as energias de transições para o parâmetro de rede da super-rede (a_{sr}) igual ao valor médio menos o desvio ($\langle a_{sr} \rangle - \sigma$), valor médio ($\langle a_{sr} \rangle$) e valor médio mais o desvio ($\langle a_{sr} \rangle + \sigma$), e a última, o dado experimental.