

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

**EFEITOS DE NÃO-PARABOLICIDADE
DAS TAXAS DE TRANSIÇÃO INTRA E
INTERSUB-BANDA EM POÇOS QUÂNTICOS
VIA EMISSÃO DE FÔNONS ÓTICOS**

Augusto Miguel Alcalde Milla

Orientador: Prof. Dr. Gerald Weber

Dissertação apresentada no Instituto de
Física "Gleb Wataghin" da Unicamp para
a obtenção do título de Mestre em Física.

*Este exemplar corresponde a versão final da tese de Mestrado
defendida pelo Sr. Augusto Miguel Alcalde Milla e aprovada
pela banca examinadora.*

Campinas

27 de fevereiro de 1996

31 de Janeiro de 1996

Gerald Weber

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

AL16e Alcalde Milla, Augusto Miguel
Efeitos de não-parabolicidade das taxas
de transição intra e intersub-banda em poços
quânticos via emissão de fônons óticos /
Augusto Miguel Alcalde Milla. -- Campinas, SP
: [s.n.], 1996.

Orientador: Gerald Weber.

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

1. Semicondutores. 2. Interação elétron-
-fônon. 3. Poços quânticos. I. Weber,
Gerald. II. Universidade Estadual de Campi-
nas. Instituto de Física "Gleb Wataghin".
III. Título.



INSTITUTO DE FÍSICA
GLEB WATAGHIN

PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE MESTRADO DE
AUGUSTO MIGUEL ALCALDE MILLA

DATA: 31 / 01 / 96

BANCA EXAMINADORA:

- Prof. Dr. Gerald Weber (Orientador)

- Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima

- Prof. Dr. Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira

A María, siempre...

...está cerca el tiempo victorioso.

*Que sirva el odio para que no tiemblen
las manos del castigo,*

que la hora

*llegue a su horario en el instante puro,
y el pueblo llene las calles vacías
con sus frescas y firmes dimensiones.*

El pueblo victorioso

Pablo Neruda (Canto General)

Agradecimentos

- Ao Gerald Weber pela orientação e a amizade.
- Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Esta tese discute a influência da não-parabolicidade da banda de condução na interação elétron-fônon em poços quânticos de GaAs-AlGaAs. Calculamos as taxas de transição elétron-fônon devido a fônons confinados e de interface em poços quânticos de GaAs-AlGaAs considerando a influência da não-parabolicidade das bandas de energia. Um modelo da camada dielétrica reformulado é usado para descrever os fônons confinados e assume-se um modelo simples para levar em conta os efeitos da não-parabolicidade. Foram obtidas expressões analíticas no limite quântico extremo para as taxas de transição intra e intersub-banda. Apresentamos também resultados para taxas parabólicas com o propósito de fazer comparações e mostrar que ocorrem importantes diferenças quantitativas, desta forma podemos determinar as situações onde a não-parabolicidade pode ou não ser desprezada. Foi encontrado que nas transições intra e intersub-banda devido a fônons confinados, as taxas de transição são significativamente incrementadas, enquanto para fônons de interface as taxas de transição decrescem. A taxa de transição total é consideravelmente afetada pela não parabolicidade das sub-bandas.

Abstract

This thesis discusses the influence of the nonparabolicity of the conduction band on the electron-phonon interaction in GaAs-AlGaAs quantum wells. We calculate the electron-LO-confined and interface-phonon scattering rates in GaAs-AlGaAs quantum wells considering the influence of nonparabolicity on the energy bands. A reformulated slab model is employed to describe the confined phonon and a simple model is assumed to take these nonparabolicity effects into account. Analytic expressions for the intra and intersubband scattering rates in the extreme quantum limit were obtained. We show also results of scattering rates in the parabolic approximation in order to make comparisons and show that important quantitative differences occur, in this way we are able to determine for which situations the subband nonparabolicity can be neglected or not. It is found that for intra and intersubband transitions due to emission of confined phonons the scattering rates are significantly increased, while for interface phonons the scattering rates are decreased. The total scattering rate is considerably affected by the subband nonparabolicity.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Fônons óticos em heteroestruturas semicondutoras	7
2.1	Introdução	7
2.2	Modelo de Continuidade Dielétrica	8
2.3	Equações de movimento e modos normais	9
2.3.1	Fônons confinados	11
2.3.2	Fônons de interface	12
2.4	Modelo da camada dielétrica reformulado	13
3	Não-parabolicidade e condições de contorno	16
3.1	Introdução	16
3.2	Não-parabolicidade nas bandas de condução	17
3.3	Condições de contorno e níveis de energia em poços quânticos	19
4	Interação elétron-fônon	26
4.1	Introdução	26
4.2	Interação Fröhlich em heteroestruturas	27
4.3	Taxas de espalhamento elétron-fônon	28
5	Cálculo de taxas de transição	31
5.1	Introdução	31
5.2	Transições intrasub-banda e intersub-banda via fônons confinados	31
5.3	Transições intrasub-banda e intersub-banda via fônons de interface	40
6	Conclusões	46
A	Modelo de continuidade dielétrica	47
A.1	Equações de movimento	47

A.2	Equivalências entre $\mathbf{P}_{\parallel}$, $\mathbf{u}_{\parallel}$ e $\phi(z)$	48
B	Taxas de transição elétron-fônon	50
B.1	Fônons confinados	50
B.1.1	Bandas Parabólicas	51
B.1.2	Bandas Não-Parabólicas	53
B.2	Fônons de interface	55
B.2.1	Bandas parabólicas	55
B.2.2	Bandas não-parabólicas	55
C	Integrais de overlap	57
C.1	Fônons confinados	57
C.2	Fônons de interface	58

Figuras

1.1	Algumas configurações usadas para obter confinamento eletrônico.	2
1.2	Diversas categorias de heteroestruturas de acordo com o alinhamento de suas bandas.	3
1.3	Comparação do cálculo das taxas de transição obtidas pelos modelos contínuos e aproximação microscópica	5
2.1	Geometria da heteroestrutura dupla.	9
2.2	Componente z do potencial escalar do fônon para modos confinados LO dentro do modelo da camada dielétrica.	11
2.3	Componente z do potencial escalar de fônon para modos de interface simétricos e anti-simétricos.	13
2.4	Frequências dos modos de interface simétricos e anti-simétricos como uma função de $q_{\parallel}L$ para um poço quântico de GaAs-AlAs.	14
2.5	Componente z do potencial do fônon para o modelo da camada dielétrica reformulado.	15
3.1	Variação da energia em função do vetor de onda para o GaAs.	17
3.2	Uma aproximação para a energia com k^2 ao redor do centro da zona de Brillouin.	19
3.3	Geometria do poço quântico	20
3.4	Energia de confinamento em função da largura do poço para um poço quântico de GaAs- $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	25
3.5	Densidade de estados para sub-bandas parabólicas e não- parabólicas.	25
4.1	Transições intra e intersub-banda com emissão ou absorção de fônons óticos.	30
5.1	Diagrama esquemático das transições intra e inter-subbanda com emissão de fônons óticos em poços quânticos.	32

5.2	Taxas de espalhamento para transições intrasub-banda em poços quânticos de GaAs-Al _{0,3} Ga _{0,7} As em função da largura do poço.	36
5.3	Taxas de espalhamento para transições intersub-banda em poços quânticos de GaAs-Al _{0,3} Ga _{0,7} As em função da largura do poço.	36
5.4	Razão das taxas não-parabólicas e parabólicas, W_{np}/W_p para transições intra e intersub-banda.	38
5.5	Transições intra e intersub-banda como uma função da concentração x de Al para um poço de largura fixa de 100 Å.	38
5.6	Funções de onda para o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados para um poço quântico de GaAs-AlGaAs de 120 Å. As funções de onda não-parabólicas são mostradas em linhas sólidas e as parabólicas em linhas tracejadas.	39
5.7	Integrais de overlap para o primeiro modo confinado em termos da largura do poço. As linhas sólidas são para bandas não-parabólicas e as tracejadas para bandas parabólicas.	39
5.8	Transições intrasub-banda com emissão de fônons de interface em função da largura do poço.	42
5.9	Transições intersub-banda com emissão de fônons de interface em função da largura do poço.	42
5.10	Integrais de overlap para modos de interface em termos da largura do poço. As linhas sólidas são para bandas não-parabólicas e as tracejadas para bandas parabólicas.	43
5.11	Taxas de transição totais para transições $1 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 1, 3 \rightarrow 1$ e $3 \rightarrow 3$ em função da largura do poço.	45
B.1	Diagrama ilustrativo da conservação do momento na direção (x, y)	52

Tabelas

3.1	Massas efetivas e coeficientes de não-parabolicidade para o cálculo de energia de confinamento em poços quânticos.	23
5.1	Parâmetros materiais para poço quântico de GaAs-Al _x Ga _{1-x} As com $x = 0.3$	35
5.2	Tempos de relaxação calculados e experimental para a transição $1 \rightarrow 1$ para um poço de 78 Å.	44
5.3	Tempos de relaxação calculados e experimental para a transição $2 \rightarrow 1$ para um poço de 146 Å.	44

Capítulo 1

Introdução

Uma heteroestrutura semicondutora é uma estrutura constituída por dois ou mais semicondutores diferentes ou ligas de composições diferentes. As diversas camadas dos materiais geram uma variação de potencial, que consiste de barreiras e poços ao longo da direção perpendicular aos planos das camadas. Se a largura característica do poço é comparável com o comprimento de onda dos elétrons, cria-se uma série de estados quânticos nas camadas onde os elétrons são confinados. Este confinamento restringe parcialmente o movimento dos elétrons aos planos das camadas que constituem o poço; o sistema portanto comporta-se como um sistema eletrônico de quase duas dimensões.

Na figura 1.1 se mostram as três configurações básicas chamadas coletivamente de heteroestruturas: a heterojunção simples, o poço quântico com duas interfaces e o poço quântico múltiplo ou super-rede se a estrutura é espacialmente periódica. As heterointerfaces semicondutoras apresentam descontinuidades abruptas no perfil das bandas de valência e condução devido à diferença dos *gaps* de energia entre os materiais constituintes da heteroestrutura. De acordo com o caráter de tais descontinuidades podem surgir configurações diversas como ilustra a figura 1.2. Altas mobilidades obtidas em amostras dopadas por modulação assim como altas eficiências em transições radiativas de importância em tecnologia de dispositivos, tais como lasers de semicondutor, são algumas das novas propriedades que apresentam estes sistemas, devido ao confinamento quântico característico. Particularmente, os processos de relaxação de portadores fotoexcitados em poços quânticos e super-redes são atualmente objeto de interesse devido às importantes implicações na dinâmica de elétrons e buracos, tanto como na compreensão dos processos de espalhamento elétron-elétron e elétron-fônon, os quais são responsáveis pela relaxação dos portadores. Estes fenômenos são de interesse tanto na física fundamental como do ponto de vista da aplicação a dispositivos ultra-rápidos.

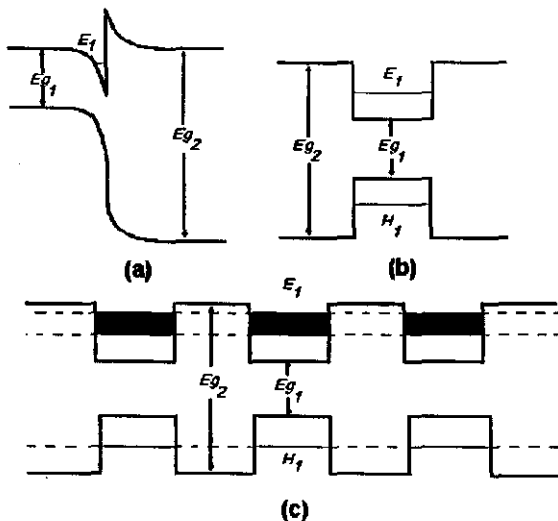


Figura 1.1: Algumas configurações usadas para obter confinamento eletrônico, (a) heterojunção simples, (b) poço quântico, (c) poço quântico múltiplo ou super-rede.

Os sistemas mais intensamente estudados são as heteroestruturas duplas e super-redes constituídas por materiais semicondutores polares do grupo III-V tais como GaAs-AlAs e GaAs-AlGaAs. A interação elétron-fônon nestes materiais é primordialmente de natureza polar (interação Fröhlich), isto quer dizer que vibrações óticas da rede, de comprimentos de onda grandes, que estão acompanhados por campos elétricos macroscópicos acoplam com o gás de elétrons quase-bidimensional. A interação eletrônica entre portadores de carga e o campo de polarização interna devido às vibrações óticas é muito mais intenso que a interação com o potencial de deformação.

Além disto, a presença das interfaces traz consequências nas propriedades vibracionais do sistema, que são fortemente modificadas [1]. Experimentos de espalhamento Raman indicam com clareza que os modos óticos em heteroestruturas duplas e super-redes são confinados nas camadas semicondutoras [2], foi também observada a presença de modos vibracionais de interface [3], que são localizados na vizinhança das interfaces e cuja amplitude decai exponencialmente. Portanto, no tratamento formal da interação elétron-fônon, além de considerar o confinamento dos portadores, deve-se levar em conta as modificações no comportamento vibracional.

A natureza dos modos vibracionais em heteroestruturas semicondutoras é objeto de intenso estudo. Nos últimos anos um grande número de modelos teóricos foram usados para descrever modos óticos polares confinados em heteroestruturas. Eles podem ser

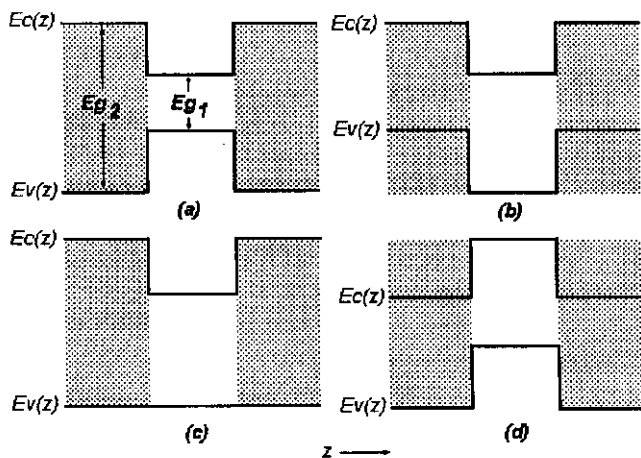


Figura 1.2: Diversas categorias de heteroestruturas de acordo com o alinhamento de suas bandas, (a) elétrons e buracos são confinados na camada 1 (poço tipo I), (b) elétrons são confinados na camada 1 e buracos na camada 2 (poço tipo II), (c) variação da configuração (a), (d) a camada 1 é uma barreira para elétrons e poço para buracos.

classificados basicamente em duas categorias: microscópicos [4,5] e macroscópicos [6–10]. Os modelos macroscópicos diferem nas condições de contorno impostas às interfaces e até hoje são de interesse devido a que eles proporcionam resultados analíticos para processos de espalhamento elétron-fônon. O ponto de partida destes modelos, chamados também de *continuidade dielétrica*, se baseia nas equações fenomenológicas propostas por Born e Huang [11] de onde se pode obter a hamiltoniana de interação elétron-fônon (Fröhlich) e as funções dielétricas dependem da frequência que são características de cada material. Em poços quânticos e super-redes as equações de Born e Huang devem ser resolvidas em cada material introduzindo condições de contorno apropriadas nas interfaces.

O primeiro modelo contínuo, chamado de modelo da camada dielétrica (*slab model*), foi proposto por Fuchs e Kliever [6]. Este modelo usa condições de contorno eletromagnéticas e é capaz de prever a existência de modos confinados longitudinais óticos em ambas camadas, os quais apresentam nós nas interfaces e são caracterizados pelas frequências *bulk*, também prediz a existência de modos de interface como uma consequência da discontinuidade da função dielétrica entre os dois meios. No entanto, as condições de contorno mecânicas referidas à continuidade nos deslocamentos iônicos relativos ao longo da interface não são satisfeitas por este modelo.

Uma versão diferente do modelo de continuidade dielétrica foi proposto por Ridley [8] que assume modos confinados a partir do anulamento dos deslocamentos óticos nas interfaces, ou seja, as condições de contorno eletromagnéticas são desprezadas em favor das condições de contorno mecânicas. É evidente que este modelo, ao considerar que os deslocamentos iônicos são nulos nas interfaces, é incapaz de descrever modos de interface e suas correspondentes interações com elétrons.

Huang e Zhu [10] propuseram um modelo *ad-hoc* baseado em cálculos microscópicos de dinâmica de rede numa super-rede de GaAs-AlAs. Neste modelo enquanto os efeitos de dispersão dos fônons *bulk* são ignorados, tanto o potencial escalar do fônon como os deslocamentos iônicos relativos são contínuos nas interfaces. A introdução da dispersão revela um novo e importante efeito: a mistura (*mixing*) de modos confinados e de interface. Uma deficiência dos modos calculados por este modelo é que eles são ortogonais só para $q \ll L^{-1}$, onde $2L$ é a largura do poço. É conhecido que valores de $q = \mathcal{O}(L^{-1})$ contribuem nos processos de espalhamento elétron-fônon. Uma solução para este problema foi proposta por Chen [12] que calculou modos confinados que satisfazem as condições de contorno eletromagnéticas e mecânicas e que são mutuamente ortogonais para qualquer q .

Weber [13] apresentou uma reformulação do modelo da camada dielétrica de Fuchs e Kliever, baseada na expansão dos potenciais escalares de fônons em termos de uma série de Fourier. Os modos assim obtidos são muito parecidos aos obtidos pelo modelo fenomenológico de Huang e Zhu, com a vantagem adicional de serem ortogonais e completos.

A interação de elétrons por fônons óticos polares governa um número considerável de propriedades em heteroestruturas semicondutoras, incluindo a mobilidade de portadores a temperatura ambiente, tunelamento assistido por fônons [14], captura de portadores [15], taxas de relaxação eletrônica, absorção devido a espalhamento elétron-fônon [16], polarons bidimensionais [17], ressonância ciclotrônica e taxas de transição intra- e intersub-banda em poços quânticos por interação elétron-fônon [18].

A interação elétron-fônon foi tratada no início desprezando os efeitos das interfaces [19]; posteriormente foram desenvolvidos tratamentos mais gerais incluindo confinamento dos modos óticos e efeitos da superfície e interface sobre as correspondentes modos vibracionais [18, 20, 21]. Efeitos adicionais como a presença de campos elétricos [22, 23] e magnéticos [17] foram também relatados.

Particularmente o cálculo de taxas de espalhamento elétron-fônon em super-redes e poços quânticos tem sido intensamente estudado nos últimos anos, devido à importância

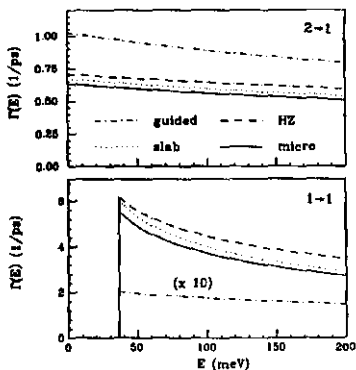


Figura 1.3: Comparação do cálculo de taxas de transição elétron-fônon $\Gamma(E)$ obtidas pela aproximação microscópica e pelos modelos contínuos [25].

no campo de novos dispositivos ultra-rápidos. Em termos gerais os cálculos das taxas de transição elétron-fônon foram feitos adotando a aproximação de massa efetiva para descrever o comportamento dos elétrons em poços quânticos de barreiras infinitas e finitas e esquemas de bandas parabólicas simples. A hamiltoniana de Fröhlich que descreve a interação de elétrons com fônons longitudinais óticos confinados e fônons de interface a partir do modelo de continuidade dielétrica foi determinada completamente por vários autores [7, 24]. Tendo as hamiltonianas sido determinadas, as taxas de interação elétron-fônon são calculadas usando a regra de ouro de Fermi. Cálculos baseados em modelos microscópicos também foram relatados [4] fornecendo taxas de transição muito parecidas às obtidas pelo modelo de Huang e Zhu e o modelo da camada dielétrica reformulado [25]. A figura 1.3 mostra as taxas de transição elétron-fônon calculadas via aproximação microscópica e modelos contínuos.

De outro lado, resultados experimentais para determinar relaxações inter e intra-subbanda mediante técnicas ópticas de resolução em tempo [26] mostram tempos de decaimento em transições inter-subbanda maiores que os calculados teoricamente. Discrepâncias mais importantes são observadas nas taxas devidas a fônons de interface do tipo AlAs [27]. As discrepâncias entre os resultados experimentais e os cálculos teóricos podem se atribuir a efeitos não levados em conta nos trabalhos relatados, por exemplo efeitos de não-parabolicidade na estrutura de bandas considerada.

A determinação de taxas de transição elétron-fônon dentro de um esquema de bandas aproximadamente realista é totalmente justificado, particularmente em processos de

captura de portadores, os quais envolvem valores grandes do momento de fônon e onde a aproximação de banda parabólica torna-se inadequada.

Diversos esquemas tem sido propostos na literatura para levar em consideração efeitos não-parabólicos [28-30] em poços quânticos. Estes modelos são caracterizados basicamente pela relação de dispersão ($E - k$) que descreve a não-parabolicidade das sub-bandas de energia e pelas definições de apropriadas condições de contorno e massas efetivas.

No presente trabalho estudaremos o efeito da inclusão de sub-bandas não parabólicas sobre as taxas de transição elétron-fônon em poços quânticos de GaAs-AlGaAs. Efetuaremos comparações com taxas calculadas na aproximação parabólica para determinar se diferenças quantitativas ocorrem e desta forma poderemos estabelecer as situações limites onde a não-parabolicidade pode ser tomada em conta ou rejeitada.

No capítulo 2 apresentaremos os fundamentos do modelo de continuidade dielétrica, obteremos as equações de movimento que permitem calcular os modos vibracionais ópticos e mostraremos finalmente os modos vibracionais confinados e de interface para o modelo da camada dielétrica (*slab model*) e para o modelo da camada dielétrica reformulado proposto por Weber [13]. No capítulo 3 mostramos as principais considerações para a descrição da não-parabolicidade das sub-bandas em poços quânticos e calculamos as energias de confinamento dentro do esquema proposto por Nag e Mukhopadhyay [30]. No capítulo 4 mostraremos as hamiltonianas de interação elétron-fônon para fônons confinados e de interface e discutiremos as expressões para o cálculo das taxas de espalhamento. Os cálculos das taxas de transição elétron-fônon com inclusão da não-parabolicidade são apresentadas e discutidas no capítulo 5. O capítulo 6 é dedicado as conclusões. Finalmente, no apêndices são apresentados em detalhe o modelo de continuidade dielétrica, cálculos analíticos das taxas de transição intra e intersub-banda para sub-bandas parabólicas e não-parabólicas e as integrais de *overlap* elétron-fônon confinado e de interface.

Parte deste trabalho foi publicado em "Nonparabolicity effects on transition rates due to confined phonons in GaAs-AlGaAs quantum wells"-- A. M. Alcalde e G. Weber, Solid State Commun. **96**, 763-766, 1995; "Intra and Intersubband Transition Rates Due to Emission of Optic Phonons in Quantum Wells: Effects of the Subband Nonparabolicity" --A. M. Alcalde e G. Weber, Proceedings da Ninth International Conference on Hot Carriers in Semiconductors (HCIS IX) (aceito para publicação); "Nonparabolicity effects on transition rates due to confined phonons in quantum wells"--A. M. Alcalde and G. Weber, Brazilian Journal of Physics (aceito para publicação).

Capítulo 2

Fônons óticos em heteroestruturas semicondutoras

2.1 Introdução

Existe na atualidade um grande interesse no estudo dos diversos modos vibracionais, presentes em heteroestruturas semicondutoras, o comportamento dos modos de vibração, os quais determinam algumas propriedades eletrônicas, são evidentemente diferentes, nestes sistemas, que no *bulk*. A presença de interfaces altera os modos de oscilação [1, 31]. Um modelo relativamente simples que permite demonstrar este fato, é o chamado *modelo de continuidade dielétrica*, onde cada camada da heteroestrutura é substituída por um meio dielétrico, caracterizado por uma função dielétrica dependente da frequência. Este modelo, aplicado inicialmente por Fuchs e Kliever [6] a uma camada dielétrica, com condições de contorno puramente eletrostáticas (*slab model*), proporciona dois tipos de modos: *modos confinados* com amplitudes unicamente num tipo de camada e frequências longitudinais óticas (LO) ou transversais óticas (TO), e *modos de interface* com frequência dependente do vetor de onda do fônon e amplitudes que decaem exponencialmente fora das interfaces. Ambos tipos de fônons foram observados experimentalmente por espalhamento Raman [2, 3].

Neste capítulo, apresentaremos os fundamentos básicos do modelo de continuidade dielétrica; dentro deste modelo, obteremos os modos vibracionais óticos confinados e de interface para poços quânticos de acordo com Licari e Evrard [7] e mostraremos uma reformulação deste modelo para modos confinados LO proposta por Weber [13], que será posteriormente usado nos cálculos das taxas de transição elétron-fônon.

2.2 Modelo de Continuidade Dielétrica

No limite de grandes comprimentos de onda, tanto os modos vibracionais acústicos como os óticos podem ser tratados sobre uma base macroscópica [10], que é particularmente simples para cristais diatômicos isotrópicos. As vibrações óticas são adequadamente descritas por um campo vetorial de deslocamentos, denotados por $\mathbf{w}$, que representa o deslocamento relativo dos íons positivos e negativos

$$\mathbf{w} = \left(\frac{\mu}{V} \right)^{1/2} \mathbf{u}, \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$ é o deslocamento iônico relativo e $\mu = m_+ m_- / (m_+ + m_-)$ é a massa reduzida dos íons positivos e negativos. Outra grandeza importante é o potencial elétrico ϕ relacionado com o campo elétrico definido da maneira usual $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ para o limite não retardado ($c \rightarrow \infty$).

Para cristais diatômicos a teoria macroscópica está totalmente contida nas seguintes equações fenomenológicas de Born e Huang [10]

$$\ddot{\mathbf{w}} = b_{11}\mathbf{w} + b_{12}\mathbf{E}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{P} = b_{21}\mathbf{w} + b_{22}\mathbf{E}, \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{P}$ e $\mathbf{E}$ são a polarização dielétrica e o campo elétrico, respectivamente, e os coeficientes b estão relacionados com quantidades de acesso experimental.

De (2.2) e (2.3) e com ajuda das equações eletrostáticas,

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla \cdot (\mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}) = 0, \quad (2.4)$$

é possível obter em materiais *bulk* soluções longitudinais ($\nabla \times \mathbf{E} = 0$) e transversais ($\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$) caracterizadas pelas frequências de oscilação ω_{LO} e ω_{TO} , respectivamente, que estão relacionadas mediante a formula de Lyddane-Sachs-Teller [32]

$$\omega_{LO}^2 = \frac{\epsilon_s}{\epsilon_\infty} \omega_{TO}^2, \quad (2.5)$$

onde ϵ_s e ϵ_∞ são as constantes dielétricas estática e de alta frequência, respectivamente. Se consideramos soluções periódicas para $\mathbf{u}$, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{P}$ [proporcionais a $\exp(i\omega t)$], a constante dielétrica para qualquer frequência ω pode ser deduzida diretamente de (2.2) e (2.3), e expressada com ajuda de (2.5) como

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega^2 - \omega_{LO}^2}{\omega^2 - \omega_{TO}^2}. \quad (2.6)$$

Se consideramos poços quânticos ou super-redes, como uma superposição de camadas de dois materiais iônicos diferentes, as equações de movimento devem ser resolvidas dentro

de cada camada. Em geral, duas soluções diferentes devem ser obtidas, correspondendo às funções dielétricas dos dois meios, estas soluções devem coincidir nas interfaces, onde o potencial e a componente perpendicular do deslocamento elétrico devem ser contínuos.

2.3 Equações de movimento e modos normais

Consideremos uma heteroestrutura dupla de dois materiais polares diferentes (Fig. 2.1). Escolhemos o eixo z perpendicular às interfaces localizadas em $z = \pm L/2$. Estamos interessados em modos óticos de grande comprimento de onda, portanto usaremos o modelo de continuidade dielétrica, contido nas equações de Born e Huang [10].

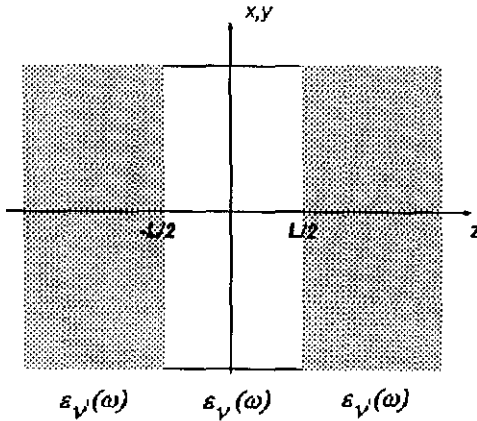


Figura 2.1: Geometria da heteroestrutura dupla.

Começamos com as equações de movimento para o deslocamento relativo $u(\mathbf{r}, t)$ de um par de íons no material ν ($\nu = 1, 2$) (ver Apêndice A.1)

$$\mu_\nu \ddot{u}(\mathbf{r}, t) = -\mu_\nu \omega_{0\nu}^2 u(\mathbf{r}, t) + e_\nu^* \mathbf{E}^l(\mathbf{r}, t), \quad (2.7)$$

onde μ é a massa reduzida do par de íons, $\mu \omega_0^2$ é a constante de força de curto alcance, sem considerar campos de Coulomb, $\mathbf{E}^l(\mathbf{r}, t)$ é o campo local na posição dos íons e e_ν^* é a carga efetiva dos íons. Os íons quando oscilam, produzem um campo de polarização $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ dado por

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = n_\nu e_\nu^* u(\mathbf{r}, t) + n_\nu \alpha_\nu \mathbf{E}^l(\mathbf{r}, t), \quad (2.8)$$

onde n é o número de pares de íons por célula unitária e α é a polarizabilidade eletrônica. O primeiro termo de (2.8) representa a contribuição à polarização do par de íons quando a rede oscila num modo ótico, e o segundo termo é polarização eletrônica dos íons devido ao campo elétrico associado aos modos óticos.

O campo local $\mathbf{E}^l(\mathbf{r}, t)$ em (2.8) é relacionado com a polarização mediante a relação de Lorentz [33]

$$\mathbf{E}^l = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0}. \quad (2.9)$$

É conveniente expressar o vetor polarização como $\mathbf{P} = (P_p, P_s)$, onde P_p é um vetor de duas dimensões definido por $P_p = (P_{q_{\parallel}}, P_z)$. Assim,

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = P_{q_{\parallel}}(\mathbf{q}_{\parallel}, z)\hat{\mathbf{q}}_{\parallel} + P_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z)\hat{\mathbf{z}} + P_s(\mathbf{q}_{\parallel}, z)\hat{\mathbf{s}}, \quad (2.10)$$

$\mathbf{q}_{\parallel}$ é a componente no plano (x, y) do vetor de onda do fônon e o vetor unitário $\hat{\mathbf{s}}$ é definido por $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{q}}_{\parallel}$. Realizando estas transformações é possível separar o campo de polarização em uma polarização s [$\mathbf{P} = (0, 0, P_s)$] e uma polarização p [$\mathbf{P} = (P_{q_{\parallel}}, P_z, 0)$]. Então as relações analíticas para ambas as polarizações são completamente desacopladas.

É possível obter as equações de movimento para as polarizações assumindo que a dependência temporal da polarização pode ser escrita como $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}(\mathbf{r}) e^{i\omega t}$ e introduzindo a invariância translacional no plano (x, y) [7, 33]. Para a polarização s

$$\chi_{\nu}^{-1}(\omega) P_s(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = 0, \quad (2.11)$$

e para a polarização p

$$\chi_{\nu}^{-1}(\omega) \frac{d}{dz} P_{q_{\parallel}}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = i q_{\parallel} \chi_{\nu}^{-1}(\omega) P_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z), \quad (2.12)$$

$$\chi_{\nu}^{-1}(\omega) \epsilon_{\nu}(\omega) \frac{d}{dz} P_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = i q_{\parallel} \chi_{\nu}^{-1}(\omega) \epsilon_{\nu}(\omega) P_{q_{\parallel}}(\mathbf{q}_{\parallel}, z), \quad (2.13)$$

onde $\chi_{\nu}(\omega) = \epsilon_{\nu}(\omega) - 1$ é a susceptibilidade dielétrica e permite relacionar o campo elétrico com as polarizações

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \epsilon_0 \chi_{\nu}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}_{\parallel}, z); \quad (2.14)$$

as soluções de (2.12) e (2.13) formam um conjunto completo de soluções para fônons de interface, fônons longitudinais óticos e fônons transversais óticos.

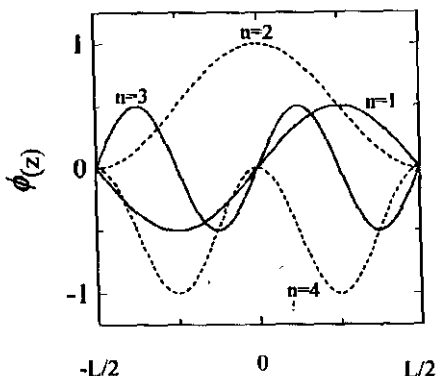


Figura 2.2: Componente z do potencial escalar do fônon para modos confinados LO dentro do modelo da camada dielétrica.

2.3.1 Fônons confinados

Para fônons confinados longitudinais óticos ($\omega = \omega_{LO\nu}$), temos que $\epsilon_\nu(\omega_{LO\nu}) = 0$ e $\epsilon_{\nu'}(\omega_{LO\nu}) \neq 0$ para $\nu \neq \nu'$. Desta forma, dentro da camada ν temos que $\mathbf{D} = 0$ e $\mathbf{E} = -\mathbf{P}/\epsilon_0$. Da continuidade do deslocamento elétrico ao longo da interface, temos que $\mathbf{D}=0$ na camada ν' . Já que $\epsilon_{\nu'}(\omega_{LO\nu}) \neq 0$, temos que $\mathbf{E}=0$ e $\mathbf{P}=0$. Portanto as soluções para modos confinados LO com frequências $\omega_{LO\nu}$ são identicamente nulas para a camada ν' .

O campo elétrico macroscópico está relacionado com o potencial escalar elétrico da seguinte forma $\mathbf{E} = -\nabla\phi(\mathbf{r})$, logo $\mathbf{P} = \frac{1}{\epsilon_0}\nabla\phi(\mathbf{r})$. O potencial escalar se pode escrever como

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi(z)e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}, \quad (2.15)$$

se levamos em conta que o sistema tem invariância translacional ao longo das interfaces. Substituindo na expressão para a polarização obtemos (ver Apêndice A.2)

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \left(i\phi(z)\mathbf{q}_{\parallel} + \frac{\partial\phi(z)}{\partial z}\hat{\mathbf{z}} \right). \quad (2.16)$$

Mostraremos posteriormente que para o cálculo de taxas de espalhamento, a magnitude física de interesse é a componente z do potencial de fônon ou equivalentemente a componente em $\mathbf{q}_{\parallel}$ do vetor polarização.

Das equações (2.12) e (2.13), obtemos para fônons confinados LO na camada ν

$$\mathbf{P}_n(\mathbf{q}_{||}, z) = C_n \left(i\mathbf{q}_{||} \cos \frac{n\pi}{L} z - \hat{\mathbf{z}} \frac{n\pi}{2} \sin \frac{n\pi}{L} z \right) \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.17)$$

$$\mathbf{P}_n(\mathbf{q}_{||}, z) = C_n \left(i\mathbf{q}_{||} \sin \frac{n\pi}{L} z + \hat{\mathbf{z}} \frac{n\pi}{2} \cos \frac{n\pi}{L} z \right) \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.18)$$

onde C_n são constantes de normalização do fônon. A componente z do potencial têm a seguinte forma

$$\phi_n(z) = \begin{cases} \cos(n\pi z/L), & n = 1, 3, 5, \dots, \\ \sin(n\pi z/L), & n = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (2.19)$$

A figura 2.2 mostra esquematicamente a componente z do potencial escalar de fônon confinado ou equivalentemente a componente $\hat{\mathbf{q}}_{||}$ do campo de polarizações. Note-se que estes modos são nulos em $z = \pm L/2$, de acordo com a condição de contorno sobre o campo elétrico $\mathbf{E}$.

2.3.2 Fônons de interface

Para fônons de interface, temos que $\epsilon_\nu(\omega) \neq 0$ e $\chi_\nu^{-1}(\omega)\epsilon_\nu(\omega) \neq 0$, são válidas para frequências compreendidas entre $\omega_{LO\nu}$ e $\omega_{TO\nu}$. De (2.12) e (2.13) obtemos como soluções modos de interface simétricos e anti-simétricos

$$P_{q_{||},S}(\mathbf{q}_{||}, z) = C_S \begin{cases} \exp[q_{||}(z + L/2)], & z \leq -L/2 \\ \cosh(q_{||}z)/\cosh(q_{||}L/2), & |z| < L/2 \\ \exp[-q_{||}(z - L/2)], & z \geq L/2 \end{cases} \quad (2.20)$$

$$P_{q_{||},A}(\mathbf{q}_{||}, z) = C_A \begin{cases} -\exp[q_{||}(z + L/2)], & z \leq -L/2 \\ \sinh(q_{||}z)/\sinh(q_{||}L/2), & |z| < L/2 \\ \exp[-q_{||}(z - L/2)], & z \geq L/2 \end{cases} \quad (2.21)$$

onde C_S e C_A são constantes de normalização. A figura (2.3) mostra esquematicamente a componente z do potencial escalar de fônon para modos de interface simétricos e anti-simétricos.

As frequências para os modos de interface simétricos são dadas pelas soluções de

$$\epsilon_1(\omega) \tanh(q_{||}L/2) + \epsilon_2(\omega) = 0. \quad (2.22)$$

Para comprimentos de onda pequenos, as frequências dos modos simétricos são aproximadamente iguais * a $\omega_\pm$ e para comprimentos de onda grandes a $\omega_{LO,2}$ ou $\omega_{TO,1}$. As frequências para os modos de interface anti-simétricos são dadas pelas soluções de

$$\epsilon_1(\omega) \coth(q_{||}L/2) + \epsilon_2(\omega) = 0. \quad (2.23)$$

* $\omega_\pm$ são as frequências dos modos de interface para uma heteroestrutura simples obtidas a partir da equação $\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega) = 0$.

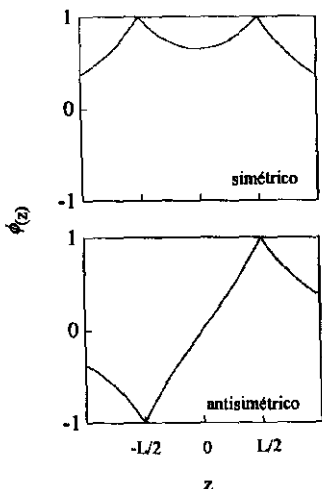


Figura 2.3: Componente z do potencial escalar de fônon para modos de interface simétricos e anti-simétricos, ou equivalentemente a componente $\hat{q}_{\parallel}$ do campo de polarização.

Para comprimentos de onda pequenos, as frequências dos modos anti-simétricos são aproximadamente iguais a $\omega_{\pm}$ e para comprimentos de onda grandes a $\omega_{LO,1}$ ou $\omega_{TO,2}$. Na figura (2.4) se mostra as frequências tanto para modos de interface simétricos como anti-simétricos em função de $q_{\parallel}L$.

2.4 Modelo da camada dielétrica reformulado

Uma descrição alternativa e simples do modelo da camada dielétrica é obtida se consideramos a camada dielétrica só do ponto de vista eletrostático. As equações de Maxwell no limite não retardado proporcionam a seguinte equação diferencial para a componente z de potencial escalar de fônon

$$\epsilon(\omega) \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_{\parallel}^2 \right) \phi(z) = 0. \quad (2.24)$$

Para modos com frequência *bulk* ω_{LO} temos que a função dielétrica na camada é zero ($\epsilon(\omega_{LO}) = 0$), portanto qualquer função arbitrária verifica a equação (2.24). A única restrição é a condição de contorno eletrostática a ser aplicada sobre o campo elétrico. Fora da camada dielétrica, onde $\epsilon(\omega_{LO}) \neq 0$, as soluções de (2.24) são funções exponenciais decrescentes. Aplicando as condições de fronteira sobre os campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{D}$, obtemos que o potencial escalar de fônon é nulo fora da camada dielétrica. Fônons de interface são

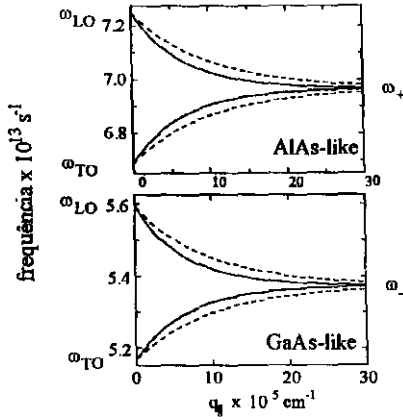


Figura 2.4: Frequências dos modos de interface simétricos e anti-simétricos como uma função de $q_{||}L$ para um poço quântico de GaAs-AlAs. As linhas sólidas são para um poço de 150 Å e a linha tracejada para 100 Å.

obtidos quanto $\epsilon(\omega) \neq 0$ dentro da camada dielétrica onde $\phi(z)$ deve satisfazer a equação (2.24).

No caso de modos confinados Licari e Evrard [7] supõem uma solução arbitrária incompleta para $\phi(z)$ da seguinte forma

$$\phi(z) = \sum_{q_z} A \sin q_z z + B \cos q_z z. \quad (2.25)$$

Weber [13] propõe como solução uma função arbitrária expandida sobre um conjunto completo de funções ortogonais. Uma série de Fourier é apropriada para este propósito. O potencial escalar para fônons confinados assim obtido é

$$\phi_n(z) = \begin{cases} \sin[(n+1)\pi z/L], & n = 1, 3, 5, \dots \\ \cos(n\pi z/L) - (-1)^{n/2}, & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (2.26)$$

Esta descrição dos modos confinados proporciona resultados consistentes quando comparada com outras descrições, particularmente com o modelo fenomenológico de Huang e Zhu [10]. Ambos os modelos predizem taxas de espalhamento elétron-fônon semelhantes e compatíveis com resultados obtidos por modelos microscópicos [25]. Este modelo resolve também o problema da não-ortogonalidade dos modos confinados obtidos pelo modelo de Huang e Zhu. A figura (2.5) mostra uma comparação da componente z do potencial do

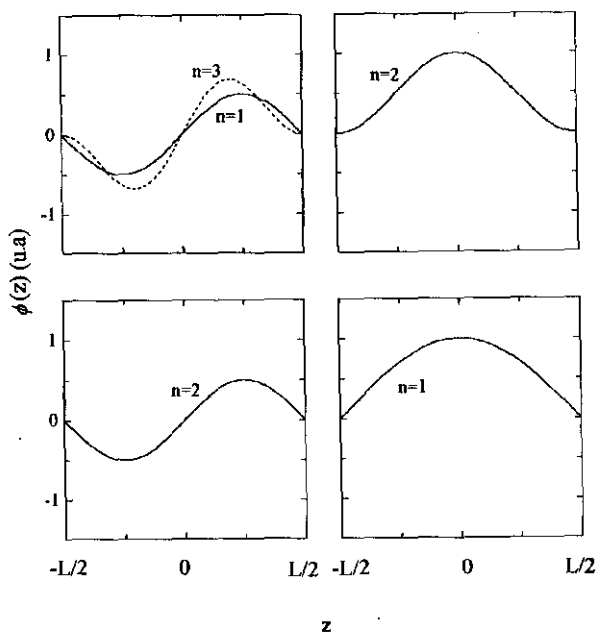


Figura 2.5: Componente z do potencial do fônon para o modelo da camada dielétrica reformulado. É mostrada na parte superior da figura uma comparação em linhas tracejadas com o modelo de Huang e Zhu para o primeiro modo ímpar, o primeiro modo par não é modificado. Na parte inferior da figura são mostrados os dois primeiros modos ímpar e par respectivamente no modelo da camada dielétrica (*slab model*).

fônon para o modelo da camada dielétrica reformulado com o modelo de Huang e Zhu (linhas tracejadas) para os primeiros modos ímpares e pares respectivamente. Se pode notar que os modos pares não são alterados. Na parte inferior da figura se mostram os primeiros modos ímpares e pares dentro do modelo da camada dielétrica (*slab model*), onde os modos ímpares são os mesmos que os obtidos pelo modelo da camada dielétrica reformulado.

Capítulo 3

Não-parabolicidade e condições de contorno

3.1 Introdução

Poços quânticos semicondutores e super-redes apresentam novas e interessantes propriedades óticas e eletrônicas; para um controle preciso destas propriedades, é necessária uma detalhada descrição da estrutura eletrônica. Por exemplo em problemas de tunelamento ressonante, é necessário um conhecimento muito exato dos níveis de confinamento e no estudo de processos de espalhamento intra e intersub-banda deve ser empregada uma relação de dispersão ($\mathcal{E} - k_{||}$) realista na direção paralela às interfaces.

Em situações onde são envolvidos níveis de energia próximos ao fundo da banda de condução a energia do elétron pode usualmente ser descrita por uma relação de dispersão parabólica. Para sub-bandas longe do fundo da banda de condução é necessário incorporar correções devido à não-parabolicidade.

Este comportamento tem sido intensamente estudado teoricamente em materiais *bulk* [34], poços quânticos [28, 30, 35] e super-redes [36, 37]. O formalismo para estes estudos teóricos esta baseado no modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ proposto por Kane [34].

Existem diversas formulações deste método, que dependem do número de bandas que são incluídas e das condições de contorno usadas para descrever a continuidade das funções de onda ao longo das interfaces entre os diferentes materiais [38, 39]. Neste capítulo, mostramos a derivação de uma relação de dispersão ($\mathcal{E} - k$), dentro do modelo de Kane, que descreve razoavelmente bem a não-parabolicidade das bandas de condução particularmente em semicondutores III-V. Aplicamos esta dispersão ao cálculo de níveis de energia confinados num poço quântico de $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ seguindo o método proposto por Nag

e Mukhopadhyay [30].

3.2 Não-parabolicidade nas bandas de condução

Em materiais semicondutores III-V ou II-VI, as bandas relevantes para as propriedades óticas e de transporte possuem simetrias Γ_6 , Γ_7 e Γ_8 (ver figura 3.1). As bandas de buracos pesados e leves são degeneradas no ponto Γ_8 e a banda de valência Γ_7 é deslocada com respeito a Γ_8 devido ao acoplamento spin-orbita ($\Delta=0.341$ eV para GaAs).

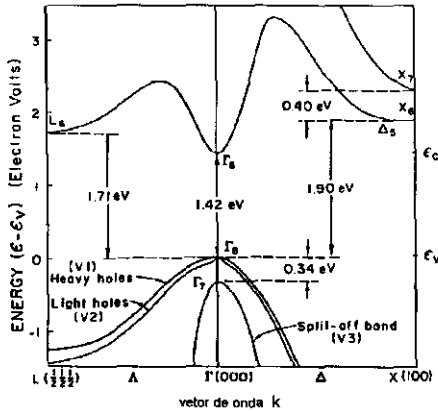


Figura 3.1: Variação da energia em função do vetor de onda para o GaAs [40].

A aproximação local $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ permite encontrar relações de dispersão num pequeno intervalo de energias próximo ao extremo da banda. Este modelo pode ser consideravelmente mais complexo que a versão de Kane, se forem incluídas as perturbações adicionais causadas por bandas remotas [38]. Outras aproximações ($\epsilon_i \gg \Delta$) foram também desenvolvidas [36, 37]. O modelo de Kane de três bandas, com ϵ_i e Δ como os únicos *gaps* considerados, é apropriado para descrever as bandas Γ_6 , Γ_7 e Γ_8 no centro da zona com boa precisão. Este modelo descreve as interações entre as quatro bandas em termos dos elementos de matriz do operador de momento P . Estas interações podem ser parametrizadas equivalentemente pela quantidade

$$X = \frac{2m_0 P^2}{3\hbar^2}. \quad (3.1)$$

Kane demonstrou que o determinante secular tem uma solução para as três bandas (C_1 ,

V_2 e V_3) (ver figura 3.1) na forma de uma equação de terceiro grau

$$\mathcal{E}'(\mathcal{E}' + \mathcal{E}_i)(\mathcal{E}' + \mathcal{E}_i + \Delta) = k^2 P^2(\mathcal{E}' + \mathcal{E}_i + 2\Delta/3), \quad (3.2)$$

onde

$$\mathcal{E}' = \mathcal{E} - \mathcal{E}_c - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (3.3)$$

e m_0 é a massa do elétron livre.

As três soluções podem ser identificadas com as bandas de condução C_1 e as bandas de valência V_2 e V_3 . Cada solução se reduz a uma forma parabólica para o limite de k pequenos. Estas formas assintóticas são

$$\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} [1 + X[2/\mathcal{E}_i + (\mathcal{E}_i + \Delta)^{-1}]], \quad (C1) \quad (3.4)$$

$$(3.5)$$

$$\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} [(2X/\mathcal{E}_i) - 1], \quad (V2) \quad (3.6)$$

$$(3.7)$$

$$\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}_v - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} [X/(\mathcal{E}_i + \Delta) - 1]. \quad (V3) \quad (3.8)$$

Contudo, podemos notar que não existe um único valor de X que possa reproduzir o valor da massa efetiva

$$m^* = \hbar^2 (\partial^2 \mathcal{E} / \partial k^2)^{-1}, \quad (3.9)$$

para as três bandas modeladas pelas equações (3.5), (3.7) e (3.8). Em vez disso, valores de massas efetivas experimentalmente medidos devem ser usados na determinação de X para cada uma das três bandas.

A dispersão parabólica deixa de ser uma aproximação aceitável quando k é maior que uma pequena fração de um vetor da rede recíproca. Este fato é comprovado na figura 3.2 onde se mostra o afastamento da parabolicidade da estrutura de bandas do GaAs.

Consideremos particularmente a não-parabolicidade da banda de condução mais baixa (C_1) no Γ_6 . Podemos escrever (3.5) como

$$\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}_c + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right), \quad (3.10)$$

onde m^* é a massa efetiva

$$m^* = m_0 \left\{ 1 + X_c [(2/\mathcal{E}_i) + (\mathcal{E}_i + \Delta)^{-1}] \right\}^{-1} \simeq 0.067 m_0, \quad (3.11)$$

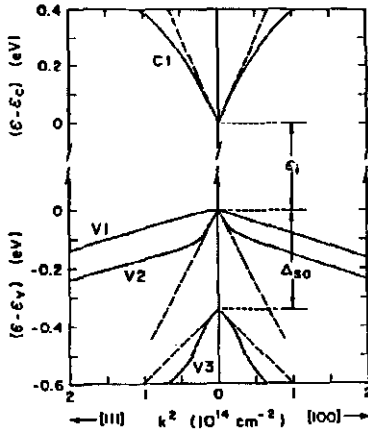


Figura 3.2: Uma aproximação para a energia com k^2 ao redor do centro da zona de Brillouin para banda de condução mais baixa (C_1) e as três bandas de valência (V_1 - V_3) mais altas [40].

para GaAs com $X_c=7.51$ eV, $\Delta=0.341$ eV e $\mathcal{E}_i=1.42$ eV.

Quando k aumenta, a não-parabolicidade deve ser incluída através de um termo k^4 . Negligenciando termos $\mathcal{E}^3$ na equação (3.2) e expandindo a solução em potências de k^2 e k^4 temos

$$\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}_c + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) + \left(\frac{\alpha}{\mathcal{E}_i} \right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right)^2, \quad (3.12)$$

onde o coeficiente α que caracteriza a não-parabolicidade é

$$\alpha = - \frac{[1 - \mathcal{E}_i \Delta / [(3\mathcal{E}_i + 2\Delta)(\mathcal{E}_i - \Delta)]]}{[1 + \mathcal{E}_i(\mathcal{E}_i + \Delta) / X_c(3\mathcal{E}_i + 2\Delta)]^2}. \quad (3.13)$$

Já que α é negativo para a banda de condução a energia aumenta mais devagar do que para uma banda perfeitamente parabólica com massa efetiva m^* que independe da energia. Esta situação é comumente descrita como se fosse um aumento da massa efetiva com a energia.

3.3 Condições de contorno e níveis de energia em poços quânticos

Consideremos uma heteroestrutura dupla de GaAs-AlGaAs-GaAs (figura 3.3). A direção de crescimento é escolhida na direção z .

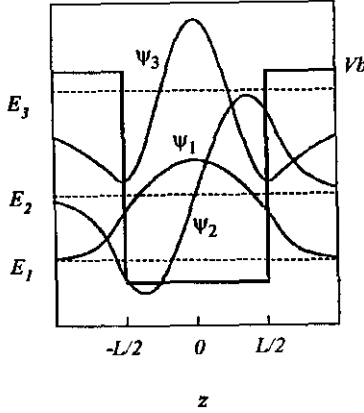


Figura 3.3: Geometria da heteroestrutura dupla em discussão. O material 1 ocupa o espaço entre $z = \pm L/2$ (L é a largura do poço) e o material 2 ocupa os espaços $z \geq L/2$ e $z \leq -L/2$.

A aproximação da massa efetiva é obtida da aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de Kane [34] para descrever a dispersão da energia próximo aos pontos de alta simetria na estrutura de bandas em materiais *bulk*. Devido ao fato de que os parâmetros de rede são assumidos como aproximadamente iguais, a heteroestrutura torna-se invariante translacionalmente no plano (x, y) . Assim, as funções de onda podem ser escritas como uma combinação linear de funções de Bloch multiplicadas por funções envelope, que variam lentamente na escala das constantes de rede,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l f_l(\mathbf{r}) u_{l0}(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

$$f_l(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}) \psi_l(z), \quad (3.15)$$

onde l é o índice das bandas no conjunto base e $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$, $\mathbf{r}_{\parallel} = (x, y)$ são as projeções bi-dimensionais do vetor de onda e posição, respectivamente. Na equação (3.15) supõe-se que as partes periódicas da função de Bloch u_{l0} são exatamente iguais para cada material da heteroestrutura. As condições de contorno que devem cumprir as funções de onda (3.15) são

$$f_W(\mathbf{r}_{\parallel}, \pm L/2) = f_B(\mathbf{r}_{\parallel}, \pm L/2), \quad (3.16)$$

$$\left. \frac{1}{m_W^*(E)} \frac{\partial f_W}{\partial z} \right|_{z=\pm L/2} = \left. \frac{1}{m_B^*(E)} \frac{\partial f_B}{\partial z} \right|_{z=\pm L/2}, \quad (3.17)$$

onde os índices W e B indicam o poço e a barreira, respectivamente. A primeira condição pode ser deduzida dos postulados da mecânica quântica e a segunda garante a continuidade da corrente de probabilidade.

Existe alguma controvérsia na literatura a respeito de qual massa efetiva $m_j^*(E)$ deveria ser usada para bandas não-parabólicas, já que a relação de dispersão não-parabólica sugere três definições diferentes de massas efetivas dependentes da energia [40, 41]; a massa efetiva energética m_e^* , a massa efetiva ótica ou massa efetiva de velocidade m_v^* e a massa efetiva de aceleração m_a^* , as quais são definidas como

$$m_e^* = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mathcal{E}}, \quad (3.18)$$

$$m_v^* = \frac{\hbar^2 k}{\nabla_k \mathcal{E}}, \quad (3.19)$$

$$m_a^* = \frac{\hbar^2}{\nabla_k^2 \mathcal{E}}, \quad (3.20)$$

respectivamente. A massa efetiva energética m_e^* é definida tal que a razão entre o momento $\hbar k$ e duas vezes esta massa da energia do elétron, a massa efetiva de velocidade m_v^* é definida de modo que a razão entre o momento $\hbar k$ e esta massa proporcione a velocidade do elétron e a massa efetiva de aceleração m_a^* mede a curvatura da banda.

Bastard [37] e Nelson *et al.* [28] usaram (3.18), enquanto Ekenberg [35], Hiroshima e Lang [42] obtém k a partir de $\mathcal{E}$ usando a relação de dispersão não-parabólica, mas usaram a massa efetiva independente da energia na condição de contorno (3.17). Nag [43] justificam teoricamente o uso de m_v^* na condição de contorno (3.17) e m_e^* para obter k a partir de $\mathcal{E}$.

Para cálculos numéricos, a relação de dispersão (3.12) pode ser escrita

$$\mathcal{E} - V_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} (1 - \gamma_i k^2), \quad (3.21)$$

aqui m_i^* é a massa efetiva e γ_i o novo parâmetro de não-parabolicidade, o índice i indica o poço ($i=W$) ou barreira ($i=B$). Explicitamente, as massas efetivas m_e e m_v são

$$m_{e,i} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(\mathcal{E} - V_i)} = [\hbar^2/4\gamma_i(\mathcal{E} - V_i)] \left\{ 1 - [1 - 8\gamma_i m_i^*(\mathcal{E} - V_i)/\hbar^2]^{1/2} \right\}, \quad (3.22)$$

$$m_{v,i} = \frac{\hbar^2 k}{\partial_k \mathcal{E}} = m_i^* [1 - 8\gamma_i m_i^*(\mathcal{E} - V_i)/\hbar^2]^{-1/2}, \quad (3.23)$$

onde $V_W = 0$ e $V_B = V$.

As funções envelope, tanto no poço como na barreira, podem ser tomadas como

$$\psi_j(z) = N_j \begin{cases} \exp[k_{B,j}(z + L/2)], & z \leq -L/2 \\ \beta_j \cos(k_{W,j}z), & |z| < L/2 \\ \exp[-k_{B,j}(z - L/2)], & z \geq L/2 \end{cases} \quad (3.24)$$

para os níveis pares, e

$$\psi_j(z) = N_j \begin{cases} -\exp[k_{B,j}(z + L/2)], & z \leq -L/2 \\ \beta_j \sin(k_{W,j}z), & |z| < L/2 \\ \exp[-k_{B,j}(z - L/2)], & z \geq L/2 \end{cases} \quad (3.25)$$

para os níveis ímpares, com

$$k_W^2 = (2m_{e,W}/\hbar^2)E, \quad (3.26)$$

$$k_B^2 = (2m_{e,B}/\hbar^2)(V - E), \quad (3.27)$$

Os coeficientes de normalização das funções de onda β_j e N_j são

$$\beta_j = [\cos(k_{W,j}L/2)]^{-1}, \quad (3.28)$$

$$N_j = \left[\beta_j^2 \left(\frac{L}{2} + \frac{\sin(k_{W,j}) \cos(k_{W,j})}{k_{W,j}} \right) + \frac{1}{k_{B,j}} \right]^{-1/2}, \quad (3.29)$$

para níveis pares, e

$$\beta_j = [\sin(k_{W,j}L/2)]^{-1}, \quad (3.30)$$

$$N_j = \left[\beta_j^2 \left(\frac{L}{2} - \frac{\sin(k_{W,j}) \cos(k_{W,j})}{k_{W,j}} \right) + \frac{1}{k_{B,j}} \right]^{-1/2}, \quad (3.31)$$

para os níveis ímpares.

Os níveis de energia para as simetrias par e ímpar são calculados pelas seguintes relações

$$\tan(k_W L/2) = r, \quad (3.32)$$

$$\cot(k_W L/2) = -r, \quad (3.33)$$

respectivamente, onde

$$r = \frac{m_{v,W} k_B}{m_{v,B} k_W}. \quad (3.34)$$

Estas equações são obtidas a partir das condições de contorno (3.16), (3.17).

	GaAs	Al _{0.3} Ga _{0.7} As	AlAs
$m^*(m_0)$	0.0665	0.092	0.15
$\gamma(\text{\AA}^2)$	49.0	26.70	9.60

Tabela 3.1: Massas efetivas e coeficientes de não-parabolicidade para o cálculo de energia de confinamento em poços quânticos.

Para bandas na aproximação parabólica ($\gamma = 0$) na relação de dispersão (3.21), as massas efetivas definidas nas equações (3.18), (3.19) e (3.20) convergem à usual massa efetiva dada por (3.9) e os níveis de energia se calculam com as relações (3.32), (3.33) modificando a razão r para

$$r = \frac{m_W^* k_B}{m_B^* k_W}. \quad (3.35)$$

Os parâmetros usados para o cálculo são mostrados na tabela 3.1.

A figura 3.4 mostra a dependência com a largura do poço da energia de confinamento nas aproximações parabólica e não-parabólica calculada dentro do modelo de Nag e Mukhopadhyay [30] para poços quânticos. Pode-se observar que o nível fundamental aumenta devido à inclusão da não-parabolicidade especialmente em poços estreitos; em modelos onde m_e^* é usado em lugar de m_v^* [28] os efeitos da não-parabolicidade são desprezíveis. Níveis superiores são afetados de modo mais significativo quando estados mais altos em energia são envolvidos, particularmente o terceiro nível é fortemente reduzido na aproximação não-parabólica; este comportamento é compatível com cálculos mais elaborados [44] para resolver a hamiltoniana $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de segunda ordem na aproximação da função envelope.

Por outro lado, derivaremos uma expressão para a densidade de estados para uma distribuição eletrônica quase bi-dimensional com dispersão não-parabólica, onde o movimento é livre no plano (x, y) enquanto que o movimento na direção z é confinado; podemos portanto expressar o vetor de onda como $k^2 = k_{\parallel}^2 + k_z^2$, com $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$. A densidade de estados representa o número de estados quânticos na banda por unidade de energia, assim, para uma distribuição eletrônica quase bi-dimensional a densidade de estados pode ser definida como

$$g = \frac{dN}{d\mathcal{E}}, \quad (3.36)$$

onde N é o número de estados quânticos com energia menor que $\mathcal{E}$. Para um material isotrópico de constante de rede a , as superfícies de energia constantes são círculos no

espaço k onde cada elemento de área $(2\pi/a)^2$ é ocupado por dois estados eletrônicos (um para cada direção do spin). Contando o número de estados dentro de um círculo de raio $\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ e dividindo por a^2 , obtém-se

$$\mathcal{N} = \frac{1}{2\pi}(k^2 - k_z^2), \quad (3.37)$$

então, da definição (3.36) e da relação de dispersão não-parabólica (3.21), chega-se rapidamente em

$$g_{np} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \frac{d(k^2)}{d\mathcal{E}} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left(1 + \frac{4m^* \gamma}{\hbar^2} \mathcal{E} \right). \quad (3.38)$$

Para bandas parabólicas a densidade de estados é independente da energia e é dada por

$$g_p = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}. \quad (3.39)$$

Na figura 3.5 comparam-se as densidades de estados para sub-bandas parabólicas e não-parabólicas para um poço quântico de GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As de 120 Å. A não-parabolicidade produz um significativo incremento na densidade de estados, especialmente para os níveis mais altos de energia.

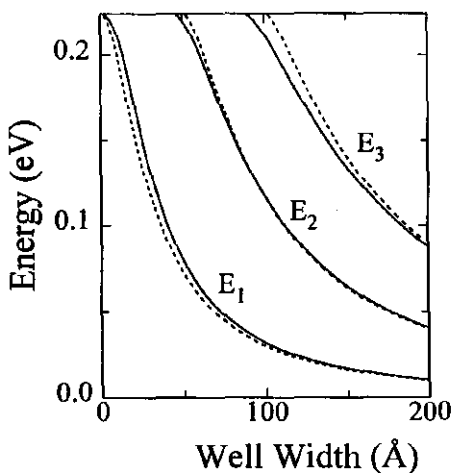


Figura 3.4: Energia de confinamento em função da largura do poço para um poço quântico de GaAs- $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$. As linhas tracejadas mostram a aproximação parabólica e as linhas sólidas mostram o cálculo incluindo não-parabolicidade.

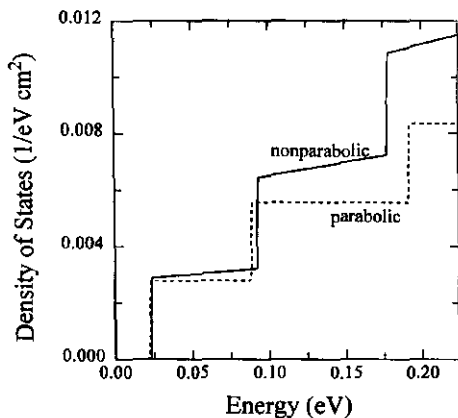


Figura 3.5: Densidade de estados para sub-bandas parabólicas (linhas tracejadas) e não-parabólicas (linhas sólidas) para um poço quântico de GaAs- $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ de 120 Å.

Capítulo 4

Interação elétron-fônon

4.1 Introdução

Os meios dielétricos (cristais iônicos ou semicondutores polares) estão constituídos por um par de íons positivo e negativo por célula de Wigner-Seitz. Um fônon ótico faz que os íons com diferentes cargas elétricas no cristal vibrem fora de fase. Quando os íons opostos oscilam em direção contrária, produzem um campo de polarizações P_q . Isto origina um campo elétrico E_q que espalha elétrons de condução. Esta é a fonte do acoplamento polar. Fônons transversais óticos (TO) não acoplam significativamente com elétrons por acoplamento polar. Isto é devido a que fônons TO não produzem um significativo campo elétrico quando vibram.

Os fônons óticos são caracterizados por um vetor de onda $\mathbf{q}$. Para comprimentos de onda grandes, os fônons longitudinais óticos (LO) vibram ao longo da direção de $\mathbf{q}$ e os TO vibram perpendicularmente a $\mathbf{q}$. A polarização elétrica P_q tem a mesma direção da vibração portanto é paralela para fônons LO e perpendicular para fônons TO.

Para modos LO, o campo elétrico associado é

$$E_q = -4\pi P_q, \quad (4.1)$$

e para fônons TO com $q \perp E_q$ e com frequência ω_q

$$E_q = \left(\frac{\omega_q}{cq} \right)^2 4\pi P_q. \quad (4.2)$$

A quantidade $(\omega_q/cq)^2$ é normalmente muito pequena para vetores de onda de interesse na maioria dos problemas de estado sólido. Isto faz com que o campo elétrico que acompanha um modo TO seja muito pequeno e usualmente de pouca importância, exceto para vetores de onda q muito pequenos, onde o acoplamento eletromagnético pode ser intenso.

Neste capítulo, mostraremos a forma da hamiltoniana que descreve a interação elétron-fônon LO (Fröhlich) para modos confinados e de interface em heteroestruturas tipo poço quântico, assim como expressões para as correspondentes taxas de transição elétron-fônon.

4.2 Interação Fröhlich em heteroestruturas

A energia de interação de um elétron e os modos de polarização no ponto $\mathbf{r}$ [10] é

$$H(\mathbf{r}) = - \int D(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}', \quad (4.3)$$

onde $D(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o campo produzido no ponto $\mathbf{r}$ por um elétron em $\mathbf{r}'$, $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ é o campo total de polarizações já que o elétron interage com a polarização iônica e a polarização eletrônica resultante da polarização iônica.

A hamiltoniana de interação elétrons com fônons confinados LO em heteroestruturas, derivada a partir da interação de Fröhlich (equação 4.3) é dada por [7, 24]

$$H_n = \frac{\lambda}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, n} \exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}) t_n(\mathbf{q}_{\parallel}) u_{\parallel n}(z) [a_n(\mathbf{q}_{\parallel}) + a_n^\dagger(-\mathbf{q}_{\parallel})], \quad (4.4)$$

onde a_n e $a_n^\dagger$ são os operadores de aniquilação e criação de fônons respectivamente, e

$$\lambda^2 = 4\pi e^2 \hbar \omega_{LO} (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_s^{-1}), \quad (4.5)$$

onde ϵ_s e ϵ_∞ são as constantes dielétricas estática e de alta frequência respectivamente, ω_{LO} é a frequência do modo LO, e a carga do elétron e $\mathbf{q}_{\parallel}$ é a componente no plano (x, y) do vetor de onda do fônon. As componentes paralelas do deslocamento iônico relativo $u_{\parallel n}$ são proporcionais à componente $\mathbf{q}_{\parallel}$ do campo de polarizações e totalmente equivalentes à componente z do potencial escalar de fônon tal como é mostrado no Apêndice (A.2). Finalmente o termo $t_n = (2I_n)^{-1/2}$ é definido a partir de

$$I_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} \left[q_{\parallel}^2 u_n^2 + \left(\frac{du_n}{dz} \right)^2 \right] dz, \quad (4.6)$$

Para o modelo da camada dielétrica reformulado (eq.2.26), t_n é explicitamente dado por

$$t_n(\mathbf{q}_{\parallel}) = \begin{cases} \left[q_{\parallel}^2 + (n+1)^2 \pi^2 / L^2 \right]^{-1/2}, & n = 1, 3, 5, \dots \\ \left[3q_{\parallel}^2 + n^2 \pi^2 / L^2 \right]^{-1/2}, & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (4.7)$$

Assim, podemos escrever $t_n(\mathbf{q}_{\parallel})$ de forma geral como

$$t_n(\mathbf{q}_{\parallel}) = (a_n q_{\parallel}^2 + b_n / L^2), \quad (4.8)$$

onde os coeficientes a_n e b_n podem ser obtidos de (4.7).

Do mesmo modo a hamiltoniana para a interação de elétrons com fônons de interface é derivada a partir dos modos ortonormais calculados pela aproximação do continuidade dielétrica [7, 24]. Explicitamente

$$H_{\alpha\mu} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \left(\frac{\hbar\omega_{\alpha\mu}e^2}{2\epsilon_0L^2} \right)^{1/2} f_{\alpha\mu}(\mathbf{q}_{\parallel}) h_{\alpha}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) \frac{e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}}{\sqrt{2q_{\parallel}}} [a_{\alpha\mu}(\mathbf{q}_{\parallel}) + a_{\alpha\mu}^{\dagger}(-\mathbf{q}_{\parallel})], \quad (4.9)$$

onde $\omega_{\alpha\mu}$ é a frequência do fônon de interface, ϵ_0 é a permissividade do vácuo, $\mathbf{q}_{\parallel}$ é a componente no plano (x, y) do vector de onda do fônon e $a_{\alpha\mu}$ e $a_{\alpha\mu}^{\dagger}$ são os conhecidos operadores de aniquilação e criação de fônons. O índice α se refere à paridade (S ou A, simétrico ou anti-simétrico, respectivamente) e μ indica as possíveis soluções das equações de dispersão (2.22) e (2.23) do fônon de interface.

Definimos também as seguintes funções auxiliares

$$f_{S\mu} = [\beta_W^{-1}(\omega_{S\mu}) \tanh(q_{\parallel}L/2) + \beta_B^{-1}(\omega_{S\mu})]^{-1/2}, \quad (4.10)$$

$$f_{A\mu} = [\beta_W^{-1}(\omega_{A\mu}) \coth(q_{\parallel}L/2) + \beta_B^{-1}(\omega_{A\mu})]^{-1/2}, \quad (4.11)$$

e

$$\beta_i(\omega) = \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty i}} - \frac{1}{\epsilon_{si}} \right) \frac{\omega_{LOi}^2}{\omega^2} \left(\frac{\omega^2 - \omega_{TOi}^2}{\omega_{LOi}^2 - \omega_{TOi}^2} \right)^2, \quad (4.12)$$

aqui i pode ser B (barreira) ou W (poço).

A função h_{α} da hamiltoniana (4.9) é dada por [24]

$$h_S(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \begin{cases} \exp[\mathbf{q}_{\parallel}(z + L/2)], & z \leq -L/2 \\ \cosh(\mathbf{q}_{\parallel}z) / \cosh(\mathbf{q}_{\parallel}L/2), & |z| < L/2 \\ \exp[-\mathbf{q}_{\parallel}(z - L/2)], & z \geq L/2 \end{cases} \quad (4.13)$$

para modos de interface simétricos, e

$$h_A(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \begin{cases} -\exp[\mathbf{q}_{\parallel}(z + L/2)], & z \leq -L/2 \\ \sinh(\mathbf{q}_{\parallel}z) / \sinh(\mathbf{q}_{\parallel}L/2), & |z| < L/2 \\ \exp[-\mathbf{q}_{\parallel}(z - L/2)], & z \geq L/2 \end{cases} \quad (4.14)$$

para modos de interface anti-simétricos.

4.3 Taxas de espalhamento elétron-fônon

Consideremos a taxa de transição eletrônicas devido às perturbações induzidas por vibrações (fônons) polares da rede. Estas perturbações podem ser tratadas pela teoria de perturbações dependentes do tempo.

A taxa de transição eletrônicas com emissão ou absorção de fônon, provocadas por uma perturbação representada pela hamiltoniana H_{e-ph} , de um estado inicial $|\mathbf{K}_i\rangle$ com energia $\mathcal{E}_i$ a um estado final $|\mathbf{K}_f\rangle$ com energia $\mathcal{E}_f = \mathcal{E}_i - \hbar\omega$ (emissão) ou, $\mathcal{E}_f = \mathcal{E}_i + \hbar\omega$ (absorção) é dada pela Regra de Ouro de Fermi [18, 22]

$$W^{(i \rightarrow f)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f \pm \hbar\omega) |\langle \mathbf{K}_f | H_{e-ph} | \mathbf{K}_i \rangle|^2 dN_f, \quad (4.15)$$

onde a integração é feita sobre os estados finais N_f .

Os elementos da matriz $|\langle \mathbf{K}_f | H_{e-ph} | \mathbf{K}_i \rangle|^2$ para transições eletrônicas acompanhadas de emissão ou absorção de fônons confinados LO são dados por

$$|\langle \mathbf{K}_f | H_n | \mathbf{K}_i \rangle|^2 = \frac{\lambda^2}{V} \sum_n t_n^2(q_{\parallel}) |G_n|^2 \delta_{\mathbf{k}_{i\parallel}, \mathbf{k}_{f\parallel} \pm q_{\parallel}} \left(N_{LO} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right), \quad (4.16)$$

aqui H_n é a hamiltoniana (4.4), N_{LO} é função de distribuição de Bose-Einstein para fônons LO, e G_n representa a integral de *overlap* entre a componente z da hamiltoniana (4.4) e as funções de onda eletrônicas $\psi(z)$ inicial e final,

$$G_n = \int_{-L/2}^{+L/2} \psi_f^*(z) u_{\parallel n}(z) \psi_i(z) dz. \quad (4.17)$$

O momento no plano (x, y) é conservado, ou seja,

$$\mathbf{k}_{i\parallel} = \mathbf{k}_{f\parallel} \pm \mathbf{q}_{\parallel}. \quad (4.18)$$

A figura 4.1 mostra esquematicamente algumas possíveis transições compatíveis com a conservação do momento no plano (x, y) e a conservação da energia.

Para transições com emissão ou absorção de fônons de interface, os elementos de matriz de transição podem ser escritos como

$$|\langle \mathbf{K}_f | H_{\alpha\mu} | \mathbf{K}_i \rangle|^2 = \frac{\hbar\omega_{\alpha\mu} e^2}{4\epsilon_0 L^2} \left(N_{\alpha\mu} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \delta_{\mathbf{k}_{i\parallel}, \mathbf{k}_{f\parallel} \mp \mathbf{q}_{\parallel}} \frac{f_{\alpha\mu}^2(q_{\parallel}) |G_{\alpha\mu}(q_{\parallel})|^2}{q_{\parallel}}, \quad (4.19)$$

onde $N_{\alpha\mu}$ é a função de distribuição de Bose-Einstein para fônons de interface e o *overlap* entre a componente z da hamiltoniana (4.9) e as funções de onda eletrônicas é

$$G_{\alpha\mu} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f^*(z) h_{\alpha}(q_{\parallel}, z) \psi_i(z) dz. \quad (4.20)$$

Notar que, nas expressões (4.16), (4.18) e (4.19) o sinal superior corresponde a uma emissão de fônon e o sinal inferior corresponde a uma absorção de fônon, em cálculos posteriores, trataremos unicamente processos mediados por emissão de fônons já que consideraremos baixas temperaturas onde o número de ocupação $N_{LO} \simeq 0$.

Para detalhes das formas analíticas das integrais de overlap definidas nas equações (5.7) e (5.10) ver apêndice C.

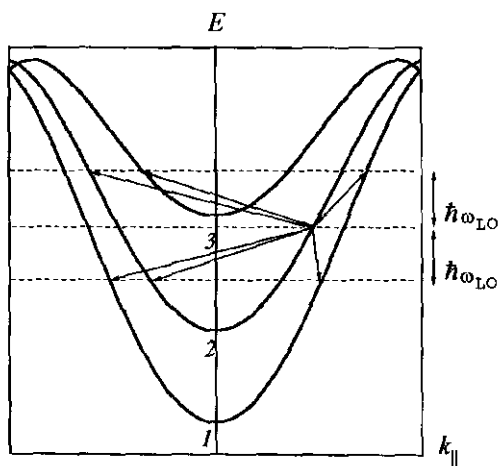


Figura 4.1: Transições intra e intersub-banda com emissão ou absorção de fônons óticos que satisfazem a conservação do momento no plano (x, y) e a conservação da energia.

Capítulo 5

Cálculo de taxas de transição

5.1 Introdução

Neste capítulo* mostraremos cálculos de taxas de transições intra e intersub-banda via emissão de fônons confinados e de interface, para poços quânticos semicondutores de GaAs-AlGaAs com altura de barreira finita V_b considerando a aproximação de banda parabólica e não-parabólica. As taxas de transições intrasub-banda são calculadas considerando que a energia do elétron é justo a necessária para emitir um fônon ótico e para transições intersub-banda supõem-se um elétron no fundo de uma sub-banda j ($k_{\parallel j} = 0$) que é espalhado para a banda $j - 1$ emitindo um fônon ótico. Ambas as situações são mostradas esquematicamente na figura 5.1.

A figura também mostra que os vetores de onda $q_{\parallel}$ do fônon emitido para bandas não-parabólicas são significativamente maiores que os correspondentes para bandas parabólicas, que implica em um fator de acoplamento menor para bandas não-parabólicas, devido a interação de Fröhlich que é inversamente proporcional ao vetor de onda do fônon $q_{\parallel}$.

5.2 Transições intrasub-banda e intersub-banda via fônons confinados

Calculamos as taxas de espalhamento elétron-fônon LO na descrição de fônons confinados do modelo da camada dielétrica reformulado [13] em um poço quântico de GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As.

*Parte deste capítulo foi publicado em A. M. Alcalde e G. Weber, Solid State Commun. 90, 763 (1995).

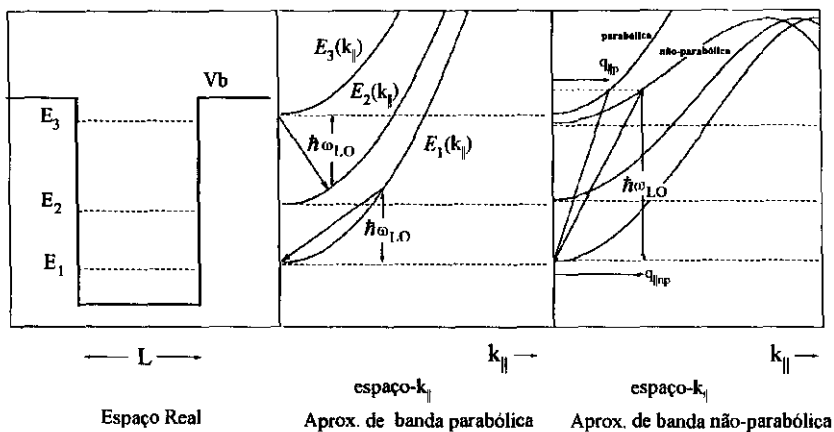


Figura 5.1: Diagrama esquemático das transições intra e inter-subbanda com emissão de fônons óticos em poços quânticos.

Para bandas parabólicas a conservação da energia pode ser expressada como

$$\frac{\hbar^2 k_{\parallel f}^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel i}^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} - \hbar\omega_{LO}, \quad (5.1)$$

pode ser definida uma energia efetiva de fônon

$$\hbar\omega^* = E_{\text{initial}} - E_{\text{final}} - \hbar\omega_{LO}, \quad (5.2)$$

onde E_{initial} (E_{final}) representa a energia de confinamento inicial (final), logo a conservação da energia pode ser escrita

$$\frac{\hbar^2 k_{\parallel f}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel i}^2}{2m^*} = \hbar\omega^*. \quad (5.3)$$

A taxa de espalhamento com emissão de fônon, dentro dos limites propostos inicialmente, pode ser escrita da forma

$$W_{\mathbf{p}}^{(i)} = \frac{m_i^* \lambda^2 I}{\hbar^3} \sum_n |G_n|^2 (N_{LO} + 1) [b_n - a_n L^2 Q_i^2]^{-1}, \quad (5.4)$$

aqui os coeficientes a_n e b_n , para o modelo da camada dielétrica reformulado, foram definidos nas equações (4.7) e (4.8). Para emissão de fônons, definimos

$$Q_i^2 = \pm \frac{2m_i^*}{\hbar^2} (E_{\text{initial}} - E_{\text{final}} - \hbar\omega_{LO}), \quad (5.5)$$

onde o sinal superior corresponde a transições intrasub-banda, enquanto o sinal inferior corresponde a transições intersub-banda. Os outros parâmetros foram definidos no capítulo prévio.

Para bandas na aproximação não-parabólica, a conservação da energia possui uma forma mais complexa, já que não é possível expressar a energia total como $\mathcal{E} = E_{\parallel} + E_z$. Usando a relação de dispersão (3.21) podemos escrever a conservação da energia como

$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m^*} (1 - \gamma k_f^2) = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m^*} (1 - \gamma k_i^2) - \hbar\omega_{LO}, \quad (5.6)$$

com $k^2 = k_{\parallel}^2 + k_z^2$, e definindo $E = \mathcal{E}(k_{\parallel} = 0)$ como a energia de confinamento

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} (1 - \gamma k_z^2), \quad (5.7)$$

podemos escrever (5.6) como

$$\frac{\hbar^2 k_{\parallel f}^2}{2m^*} [1 - \gamma(k_{\parallel f}^2 + 2k_z^2)] = \frac{\hbar^2 k_{\parallel i}^2}{2m^*} [1 - \gamma(k_{\parallel i}^2 + 2k_z^2)] + \hbar\omega^*. \quad (5.8)$$

As taxas de transição intra e intersub-banda com emissão de fônon confinados, para bandas não parabólicas podem ser calculadas com a seguinte expressão [45]

$$W_{np}^{(i)} = \frac{m_i^* \lambda^2 L}{h^3} \sum_n |G_n|^2 (N_{LO} + 1) \times \frac{1}{\alpha_i} \left\{ \frac{a_n L^2}{2\gamma} \left[(1 - 2\gamma k_z^2) - \alpha_i \right] + b_n \right\}^{-1}, \quad (5.9)$$

onde

$$\alpha_i = \left[(2\gamma k_z^2 - 1)^2 + 4\gamma Q_i^2 \right]^{1/2}, \quad (5.10)$$

onde k_z é a componente z do vetor de onda eletrônico inicial (final) para transições intrasub-banda (intersub-banda).

Se pode notar que a expressão obtida para as taxas de transição com não-parabolicidade (5.9) não tem um limite trivial para $\gamma \rightarrow 0$. Não obstante uma aplicação elementar da regra de L'Hopital mostra que esta taxa converge à expressão para taxas na aproximação parabólica, equação (5.4). É importante destacar, que para a dedução das taxas de transição incluindo a não-parabolicidade, não foi feita nenhuma suposição acerca do modelo empregado para o cálculo das energias de confinamento e funções de onda, nem do modelo para a descrição do fônon; ela é consequência direta da relação de dispersão não-parabólica usada [equação (3.21)], e da conservação do momento na direção paralela às interfaces. Outro ponto de interesse, é o fato que as integrais de *overlap* G_n mantem sua forma funcional devido a que o modelo escolhido para a descrição da não-parabolicidade não introduz modificações funcionais nas funções envelope [30].

Para os nossos cálculos foi considerado um poço quântico de GaAs-Al_xGa_{1-x}As com barreira finita de 224 meV correspondente a $x=0.3$. Os parâmetros materiais usados nos cálculos são mostrados na tabela (5.1). Assumimos o número de ocupação $N_{LO} \simeq 0$ correspondente a baixas temperaturas.

Nossos cálculos para taxas de transição intrasub-banda devido à emissão de fônons confinados em função da largura do poço são mostrados na figura 5.2. As linhas sólidas são as taxas com inclusão de não-parabolicidade e as linhas tracejadas representam as taxas na aproximação de banda parabólica.

Se pode observar que a inclusão de bandas não-parabólicas produz um incremento nas taxas de transição; este efeito é mais importante em transições que envolvem estados mais altos em energia. O efeito nas taxas de transição intersub-banda é mostrado na figura 5.3. Se pode observar um comportamento semelhante ao caso das transições intrasub-banda, mas o efeito se torna menos pronunciado na medida em que a largura do poço é

	GaAs	Al _{0.3} Ga _{0.7} As
ω_{LO} (meV)	36.25	34.44 (modo-GaAs) 46.96 (modo-AlAs)
ω_{TO} (meV)	33.29	32.99 (modo-GaAs) 44.76 (modo-AlAs)
ϵ_s	13.18	14.11
ϵ_∞	10.89	10.07

Tabela 5.1: Parâmetros materiais para poço quântico de GaAs-Al_xGa_{1-x}As com $x = 0.3$ [46].

incrementada. Particularmente, para poços suficientemente largos, onde a separação das sub-bandas é próxima à energia do fônon LO, a componente paralela às interfaces do vetor de onda do fônon é zero, e em consequência o efeito da não-parabolicidade é praticamente nulo. A transição $2 \rightarrow 1$ (figura 5.3) ilustra este comportamento.

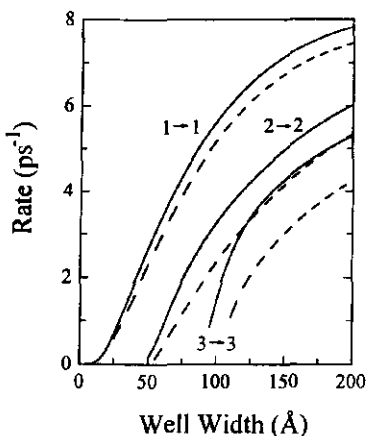


Figura 5.2: Taxas de espalhamento para transições intrasub-banda em poços quânticos de GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As em função da largura do poço. As linhas sólidas são transições com inclusão de bandas não-parabólicas e as linhas tracejadas para bandas parabólicas.

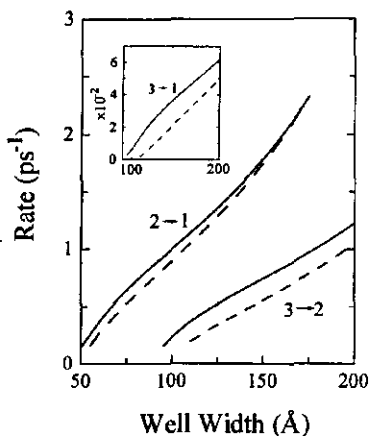


Figura 5.3: Taxas de espalhamento para transições intersub-banda em poços quânticos de GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As em função da largura do poço. As linhas sólidas são transições com inclusão de bandas não-parabólicas e as linhas tracejadas para bandas parabólicas.

A figura 5.4 mostra a razão das taxas não-parabólicas e parabólicas para todas as transições (W_{np}/W_p , equações 5.9 e 5.4). Estas razões são obtidas plotando as taxas mostradas nas figuras 5.2 e 5.3, sempre que ambas estejam definidas para a mesma largura do poço. Salvo para a transição $1 \rightarrow 1$ em poços estreitos (menores que $15 \text{ \AA}$), todas as outras taxas apresentam incremento comparado às parabólicas. Em geral se confirma a importante influência da não-parabolicidade das bandas para transições que envolvem níveis mais altos em energia, por exemplo a transição $3 \rightarrow 1$ é aproximadamente seis vezes maior que a correspondente taxa parabólica. Além disto, se pode notar que para poços quânticos maiores que $150 \text{ \AA}$ as taxas de transição com não-parabolicidade convergem às correspondentes taxas parabólicas.

Os tempos de relaxação do elétron com emissão de fônon confinado são portanto reduzidos com a inclusão da não-parabolicidade. Em alguns casos como por exemplo a transição $1 \rightarrow 1$ esta redução não é muito significativa, para larguras de $50 \text{ \AA}$, o tempo de relaxação se reduz de 0.4 ps. em bandas parabólicas para 0.35 ps. no caso de bandas não-parabólicas. Mudanças maiores são observadas para transições entre níveis que envolvem energias mais altas, como no caso da transição $3 \rightarrow 1$ onde os tempos variam de 142.0 ps. para bandas parabólicas a 41.6 ps. para bandas não-parabólicas em poços de largura de $152 \text{ \AA}$. A literatura não reporta resultados experimentais para tempos de relaxação em transições que envolvam níveis mais altos em energia; as medidas experimentais estão principalmente concentradas nas transições intrasub-banda $1 \rightarrow 1$ e intersub-banda $2 \rightarrow 1$ [47-49]. Os resultados experimentais apresentam ainda na atualidade certo nível de controvérsia devido a algumas limitações nas técnicas de medida e às diversas interpretações dos dados obtidos.

O comportamento observado nas taxas de transição intra e intersub-banda, quando bandas não-parabólicas são consideradas, é devido principalmente ao incremento do *overlap* das funções de onda e a componente z do potencial do fônon. Este incremento da integral de *overlap* é uma consequência do maior confinamento eletrônico presente para estados excitados devido à inclusão da não-parabolicidade, tal como mostra a figura 5.6, onde também se comprova que o confinamento eletrônico é reduzido para o estado fundamental como consequência da redução da energia desse nível.

Os elétrons são portanto mais fortemente acoplados com os modos confinados para transições que envolvem estados excitados. Este fato é mostrado na figura 5.7, onde são apresentadas as integrais de *overlap* para transições intra e intersub-banda, se pode notar que o maior confinamento eletrônico induzido pela não-parabolicidade, produz em geral um incremento no *overlap* com exceção da transição $1 \rightarrow 1$, devido a redução do confinamento

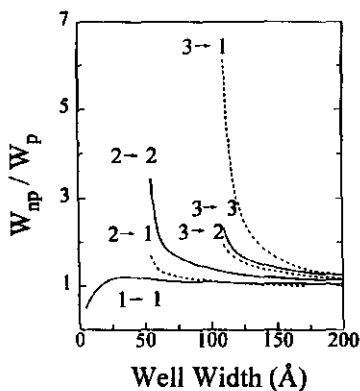


Figura 5.4: Razão das taxas não-parabólicas e parabólicas, W_{np}/W_p para transições intra e intersub-banda. As linhas sólidas são para transições intrasub-banda e as linhas tracejadas transições intersub-banda.

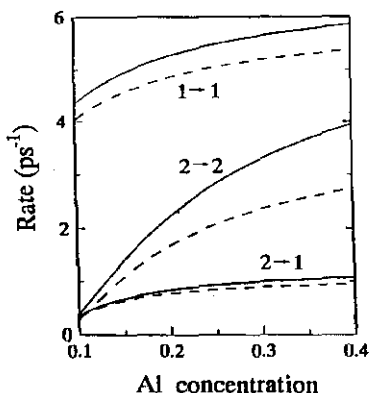


Figura 5.5: Transições intra e intersub-banda como uma função da concentração x de Al para um poço de largura fixa de 100 $\text{\AA}$. As linhas sólidas são para bandas não-parabólicas e as tracejadas para bandas parabólicas.

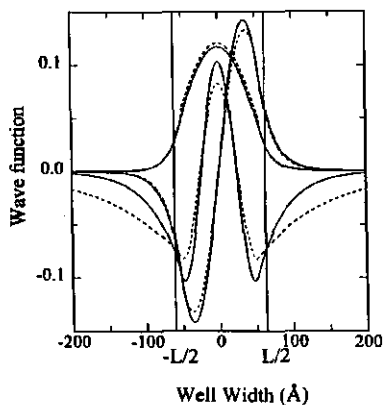


Figura 5.6: Funções de onda para o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados para um poço quântico de GaAs-AlGaAs de 120 Å. As funções de onda não-parabólicas são mostradas em linhas sólidas e as parabólicas em linhas tracejadas.

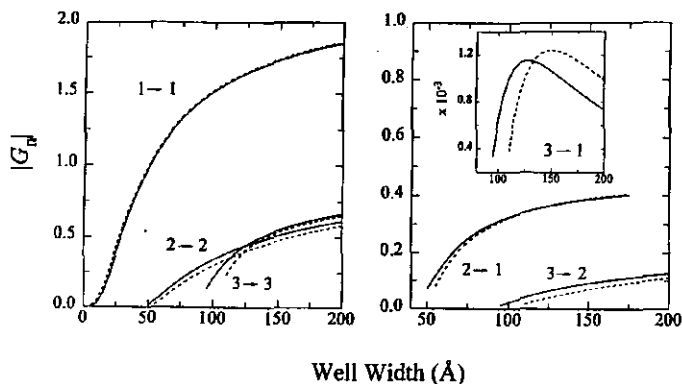


Figura 5.7: Integrais de overlap para o primeiro modo confinado em termos da largura do poço. As linhas sólidas são para bandas não-parabólicas e as tracejadas para bandas parabólicas.

para o estado fundamental provocado pela não-parabolicidade. O incremento da taxa de transição $1 \rightarrow 1$, pode ser atribuído a um incremento da densidade final de estados.

Estes efeitos são quantitativamente mais importantes que o fato de que o fônon confinado emitido possui um vetor de onda maior, devido à não-parabolicidade das sub-bandas eletrônicas, que implicaria um menor acoplamento de Fröhlich do que para o caso parabólico. Para poços quânticos de largura maior que 150 Å, o efeito não-parabólico é praticamente desprezível, neste caso o confinamento eletrônico é reduzido, e portanto a não parabolicidade das sub-bandas tem pouco efeito sobre as integrais de *overlap*. O confinamento também pode ser reduzido em poços com altura de barreiras pequenas, que implica em uma redução dos efeitos da não-parabolicidade como mostra a figura 5.5. Nesta figura mostramos algumas taxas de espalhamento em função da concentração de Al e se pode notar uma diminuição dos efeitos não-parabólicos quando a concentração diminui. Os parâmetros materiais foram tomados da referencia [46] e o parâmetro de não-parabolicidade γ como função da concentração de Al foi tomado da referencia [50].

5.3 Transições intrasub-banda e intersub-banda via fônons de interface

Calculamos as taxas de espalhamento elétron-fônon na descrição de fônons de interface de Mori e Ando [24], para heteroestruturas duplas. A taxa de espalhamento com emissão de fônons de interface para bandas de condução parabólicas pode ser escrita [51]

$$W_p^{(i)} = \frac{\omega_{\alpha\mu} e^2 m_i^*}{4\hbar^2 \epsilon_0} (N+1) \frac{|G_{\alpha\mu}(Q_i)|^2 f_{\alpha\mu}^2(Q_i)}{Q_i}, \quad (5.11)$$

onde, para emissão de fônons definimos

$$Q_i^2 = \pm \frac{2m_i^*}{\hbar^2} (E_{\text{initial}} - E_{\text{final}} - \hbar\omega_{\alpha\mu}), \quad (5.12)$$

aqui a sinal superior corresponde a transições intrasub-banda e a sinal inferior corresponde a transições intersub-banda, os outros parâmetros foram definidos no capítulo anterior.

Para bandas na aproximação não-parabólica, as taxas de transição intra e intersub-banda com emissão de fônon de interface podem ser calculadas com a seguinte expressão

$$W_{np}^{(i)} = \frac{\omega_{\alpha\mu} e^2 m_i^*}{4\hbar^2 \epsilon_0} (N+1) \frac{1}{\alpha_i} \frac{|G_{\alpha\mu}(Q_{i(np)})|^2 f_{\alpha\mu}^2(Q_{i(np)})}{Q_{i(np)}}, \quad (5.13)$$

onde

$$Q_{i(np)}^2 = \frac{(1 - 2k_z^2 \gamma_i) - \alpha_i}{2\gamma_i}, \quad (5.14)$$

com α_i funcionalmente definido por (5.10) e k_z é a componente do vetor de onda eletrônico inicial (final) para transições intrasub-banda (intersub-banda).

É importante notar que como foi levada em conta a dispersão para fônons para o cálculo das taxas de transição nas aproximações parabólica e não-parabólica, os valores apropriados de $\omega_{\alpha\mu}$ e $q_{||}$ são calculados para cada caso.

Para transições intrasub-banda, contribuem unicamente os modos simétricos e a contribuição dominante à taxa é devida ao modo mais alto em energia (modos tipo AlAs). Em transições intersub-banda contribuem os modos anti-simétricos em transições que envolvem sub-bandas de paridade oposta, e os modos simétricos em transições entre sub-bandas com mesma paridade. Efeitos externos como campos elétricos modificam substancialmente estas regras de seleção [51].

Na figuras 5.8 e 5.9 mostramos as taxas de transição intrasub-banda e intersub-banda respectivamente devido à emissão de fônons de interface como função da largura de poço. As linhas sólidas são as taxas na aproximação de banda não-parabólica, enquanto que as linhas tracejadas representam as taxas na aproximação de banda parabólica.

Podemos comprovar que os fônons de interface são dominantes no processo de espalhamento elétron-fônon em transições intrasub-banda para poços estreitos (menores que 50 Å), em todas as outras situações tanto os fônons confinados como os fônons de interface são de importancia no processo de espalhamento. A inclusão de bandas não-parabólicas produzem em geral uma redução das taxas de transição intrasub-banda, especialmente importante em poços estreitos, este efeito é significativamente menor para poços de maior largura (maiores que 150 Å). Este comportamento pode ser explicado como uma consequência da redução da integral de *overlap* entre as funções de onda eletrônicas e a componente z do potencial do fônon. A não-parabolicidade produz um maior confinamento eletrônico, provocando que as funções de onda eletrônicas se afastem das interfaces, onde os modos vibracionais de interface são máximos. A figura 5.10 mostra as integrais de *overlap* para a transição $1 \rightarrow 1$ e $2 \rightarrow 1$, onde é possível comprovar a redução da integral de *overlap* não-parabólica com respeito à parabólica, devido principalmente ao maior confinamento produzido pela não-parabolicidade e ao caráter dos modos de interface.

Em transições intersub-banda as taxas não-parabólicas apresentam um incremento em poços relativamente estreitos: menores que 60 Å para a transição $2 \rightarrow 1$ e menores que 155 Å para a transição $3 \rightarrow 1$, para a transição $3 \rightarrow 2$ a taxa não parabólica é incrementada para todas as larguras de poço consideradas. Este comportamento não pode ser atribuído exclusivamente à modificações das integrais de *overlap* devido à inclusão de bandas não-parabólicas; o incremento da densidade final de estados, a forte dependencia dos modos

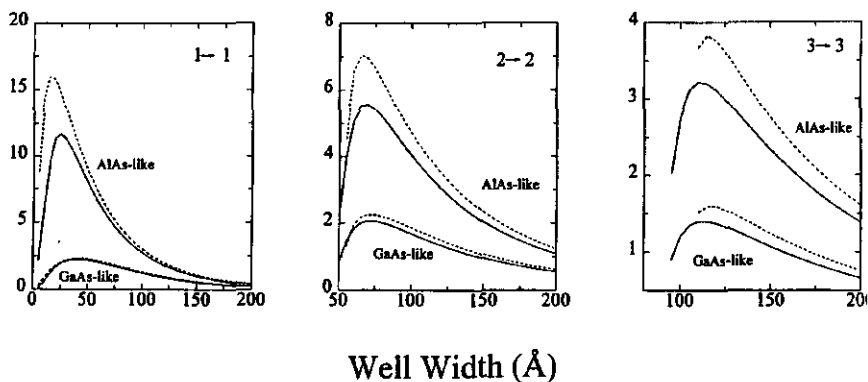


Figura 5.8: Transições intrasub-banda com emissão de fônons de interface em função da largura do poço. As linhas sólidas são as taxas com inclusão de não-parabolicidade e as linhas tracejadas são as taxas parabólicas.

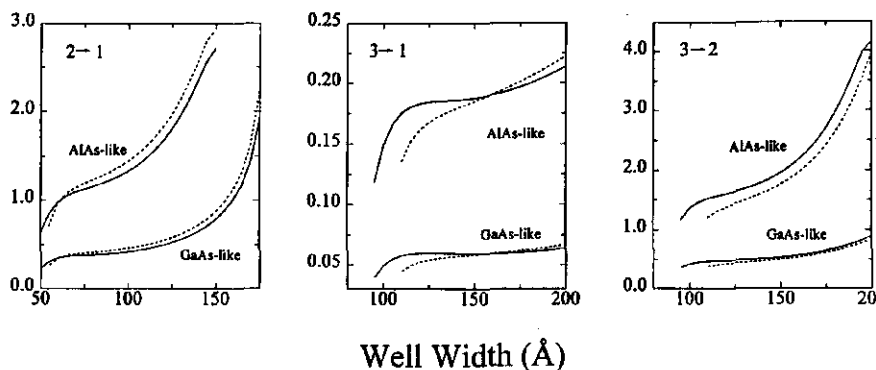


Figura 5.9: Transições intersub-banda com emissão de fônons de interface em função da largura do poço. As linhas sólidas são as taxas com inclusão de não-parabolicidade e as linhas tracejadas são as taxas parabólicas.

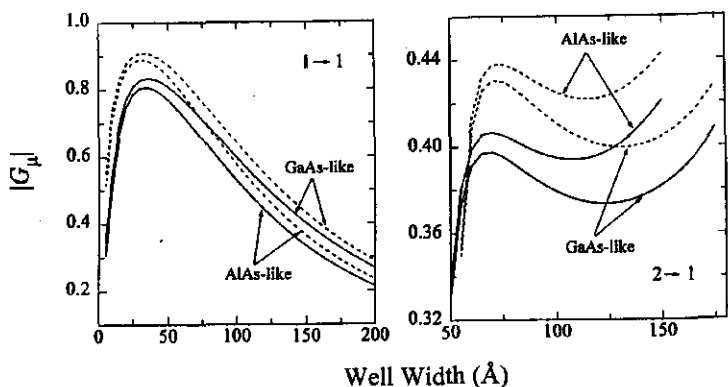


Figura 5.10: Integrais de overlap para modos de interface em termos da largura do poço. As linhas sólidas são para bandas não-parabólicas e as tracejadas para bandas parabólicas.

de interface com o vetor de fônon e a influência da dispersão dos modos de interface são as possíveis causas do aumento das taxas de transição intersub-banda, especialmente importante quando transições mais altas em energia são envolvidas (transição $3 \rightarrow 2$). As taxas de transição intersub-banda são mais afetadas pela não-parabolicidade em poços relativamente estreitos, este efeito é particularmente notório para as taxas de transição devidas ao modo de interface tipo AlAs (maior energia), a transição $3 \rightarrow 1$ ilustra claramente este comportamento, em poços de de maior largura onde os fônons de interface são de maior relevância as taxas não-parabólicas $2 \rightarrow 1$ e $3 \rightarrow 1$ são reduzidas respeito às parabólicas. Em geral, tanto as taxas intersub-banda devidas a modos do tipo GaAs como AlAs apresentam um comportamento qualitativamente semelhante.

Para propósito de comparação a tabela 5.2 apresenta os tempos de relaxação para a transição $1 \rightarrow 1$ calculados dentro da aproximação parabólica e não-parabólica para os modos confinados e de interface; também é mostrado o resultado experimental obtido por Collings *et al.* [48] para poços quânticos de 78 Å a 298 K. A tabela 5.3 mostra tempos de relaxação calculados para a transição $2 \rightarrow 1$ e o resultado experimental de Tatham *et al.* [52] para poços quânticos de 146 Å a 30 K. Em ambos casos, nossos resultados mostram uma razoável concordância com o experimento e revelam que tanto fônons confinados como fônons de interface podem ser apropriados canais de relaxação eletrônica.

	$\tau_{1 \rightarrow 1}$ (parab.)	$\tau_{1 \rightarrow 1}$ (não-parab.)	$\tau_{1 \rightarrow 1}$ (experimental)
Confinado	0.24 ps.	0.21 ps.	
IF-GaAs	0.5 ps.	0.51 ps.	
IF-AlAs	0.2 ps.	0.22 ps.	
Ref. [48]			0.2 ± 0.05 ps.

Tabela 5.2: Tempos de relaxação calculados e experimental para a transição $1 \rightarrow 1$ para um poço de 78 Å.

	$\tau_{2 \rightarrow 1}$ (parab.)	$\tau_{2 \rightarrow 1}$ (não-parab.)	$\tau_{2 \rightarrow 1}$ (experimental)
Confinado	0.59 ps.	0.57 ps.	
IF-GaAs	1.1 ps.	1.2 ps.	
IF-AlAs	0.36 ps.	0.38 ps.	
Ref. [52]			1.0 ps.

Tabela 5.3: Tempos de relaxação calculados e experimental para a transição $2 \rightarrow 1$ para um poço de 146 Å.

Finalmente, a figura 5.11 mostra as taxas de espalhamento totais em termos da largura de poço para algumas transições típicas, se pode comprovar que os efeitos da inclusão da não-parabolicidade sobre as taxas de espalhamento: aumento das taxas devido a fônons confinados e redução para os fônons de interface não são efeitos mutuamente compensados, as taxas totais nas duas aproximações da estrutura de bandas: parabólica e não-parabólica apresentam em todos os casos importantes diferenças com exceção de algumas larguras específicas do poço.

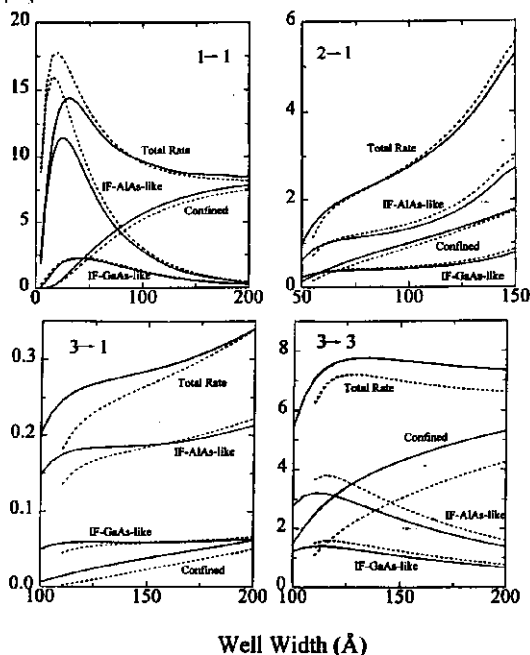


Figura 5.11: Taxas de transição totais para transições $1 \rightarrow 1$, $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 1$ e $3 \rightarrow 3$ em função da largura do poço. Linhas sólidas são para as taxas não-parabólicas e as linhas tracejadas são para as taxas parabólicas. Se mostram também as contribuições individuais dos modos confinados e dos modos de interface.

Capítulo 6

Conclusões

Foram calculadas as taxas de transição intra e intersub-banda devido à emissão de fônons confinados e de interface em poços quânticos de GaAs-AlGaAs, com inclusão de não-parabolicidade da banda de condução.

Encontramos que para as transições intrasub-banda e intersub-banda devido à emissão de fônons confinados, as taxas de transição são significativamente incrementadas, em particular para sub-bandas correspondentes a níveis de energia mais altos e situações de grande confinamento eletrônico. O comportamento observado se explica devido ao incremento da densidade final de estados e do *overlap* entre as funções de onda eletrônicas e o potencial do fônon. Este comportamento ocorre apesar de que os fônons emitidos possuem um vetor de onda maior do que na aproximação parabólica.

Para transições produzidas por emissão de fônons de interface, se observa que em geral estes são reduzidas devido aos efeitos da não-parabolicidade. Isto ocorre devido à redução da integral de *overlap* elétron-fônon quando as funções de onda eletrônicas se afastam das interfaces, onde os modos vibracionais são máximos.

Com exceção de algumas larguras do poço quântico, a redução das taxas devidos a fônons de interface não é compensada pelo incremento das taxas devidos a modos confinados.

Finalmente, os nossos resultados mostram que as taxas de transição elétron-fônon são significativamente sensíveis à estrutura eletrônica, especialmente para transições envolvendo estados de energia mais alta, e portanto um conhecimento detalhado da estrutura das sub-bandas de energia é claramente importante.

Apêndice A

Modelo de continuidade dielétrica

A.1 Equações de movimento

Sejam as equações fenomenológicas de Born e Huang [11]:

$$\ddot{\mathbf{w}} = b_{11}\mathbf{w} + b_{12}\mathbf{E}, \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{P} = b_{21}\mathbf{w} + b_{22}\mathbf{E}, \quad (\text{A.2})$$

onde

$$\mathbf{w} = \left(\frac{\mu}{V}\right)^{1/2} \mathbf{u}, \quad (\text{A.3})$$

aqui $\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$ é o deslocamento relativo dos íons positivos e negativos, a massa reduzida dos íons

$$\mu = \{M_+ M_- / (M_+ + M_-)\}, \quad (\text{A.4})$$

e V é o volume da célula primitiva.

Pode ser demonstrado que (Born e Huang, Apêndice V [11]):

$$b_{12} = b_{21}. \quad (\text{A.5})$$

Se considerarmos soluções periódicas

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{w} &= \mathbf{w}_0 \\ \mathbf{P} &= \mathbf{P}_0 \end{aligned} \right\} \times e^{-i\omega t}, \quad (\text{A.6})$$

obtemos das equações (A.1) e (A.2):

$$-\omega^2 \mathbf{w} = b_{11}\mathbf{w} + b_{12}\mathbf{E}, \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{P} = b_{21}\mathbf{w} + b_{22}\mathbf{E}, \quad (\text{A.8})$$

eliminando $\mathbf{w}$ das equações anteriores, obtemos:

$$\mathbf{P} = \left\{ b_{22} + \frac{b_{12}b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} \right\} \mathbf{E}. \quad (\text{A.9})$$

Comparando com a definição de deslocamento elétrico, $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E}$, obtemos uma expressão para a constante dielétrica

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi b_{22} + \frac{4\pi b_{12}b_{21}}{-b_{11} - \omega^2}, \quad (\text{A.10})$$

ou também

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_\infty - \epsilon_0}{1 - (\omega/\omega_{TO})^2}. \quad (\text{A.11})$$

Usando (A.5) com (A.10) e (A.11) obtemos

$$b_{22} = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi}, \quad (\text{A.12})$$

$$b_{11} = -\omega_{TO}^2, \quad (\text{A.13})$$

$$b_{12} = b_{21} = \left(\frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \omega_{TO}. \quad (\text{A.14})$$

Finalmente, substituindo estes coeficientes nas equações (A.1) e (A.2) e usando a relação Lyddane-Sachs-Teller

$$\omega_q^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \omega_{TO}^2, \quad (\text{A.15})$$

obtemos as equações de movimento para o deslocamento relativo $\mathbf{u}$ dos íons

$$\begin{aligned} \mu \ddot{\mathbf{u}} &= -\mu \omega_{TO}^2 \mathbf{u} + \left[\frac{\mu V \epsilon_\infty (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{4\pi} \right]^{1/2} \mathbf{E}, \\ &= -\mu \omega_{TO}^2 \mathbf{u} + e^* \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

onde e^* é a carga efetiva e definida como

$$e^* = \left[\frac{\mu V \epsilon_\infty (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{4\pi} \right]^{1/2}. \quad (\text{A.17})$$

A.2 Equivalências entre $\mathbf{P}_\parallel$, $\mathbf{u}_\parallel$ e $\phi(z)$

Se substituirmos a solução periódica para o deslocamento relativo $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 e^{-i\omega t}$, na equação (A.16) obtemos

$$e^* \mathbf{E} = -\mu(\omega^2 - \omega_{TO}^2) \mathbf{u}, \quad (\text{A.18})$$

considerando a definição de carga efetiva (A.17) e fônons longitudinais óticos $\omega = \omega_{\mathbf{q}}$, obtemos uma relação que mostra a proporcionalidade do campo elétrico $\mathbf{E}$ e o deslocamento iônico relativo $\mathbf{u}$

$$\mathbf{E} = -\frac{4\pi e^*}{V\epsilon_s}\mathbf{u}, \quad (\text{A.19})$$

além disto, e da definição do vetor polarização

$$\mathbf{P} = \frac{\epsilon(\omega) - 1}{4\pi}\mathbf{E}, \quad (\text{A.20})$$

se demonstra claramente a proporcionalidade entre $\mathbf{P}$, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{u}$.

Da definição de potencial elétrico $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ e levando em conta que o sistema é translacionalmente invariante, que implica um potencial escalar da forma

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi(z)e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}, \quad (\text{A.21})$$

podemos escrever a polarização elétrica $\mathbf{P}$ definida pela equação (A.20), para modos longitudinais óticos como

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \frac{1}{4\pi}\nabla\phi(\mathbf{r}), \\ &= \frac{1}{4\pi}e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}\left(i\phi(z)\mathbf{q}_{\parallel} + \frac{\partial\phi(z)}{\partial z}\hat{\mathbf{z}}\right); \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

analogamente, para o campo elétrico $\mathbf{E}$ dado pela equação (A.19), temos

$$\nabla\phi = \frac{4\pi e^*}{V\epsilon_s}\mathbf{u}, \quad (\text{A.23})$$

e da equação (A.21) que define o potencial elétrico, obtemos finalmente

$$\mathbf{u} = \frac{V\epsilon_s}{4\pi e^*}e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}\left(i\phi(z)\mathbf{q}_{\parallel} + \frac{\partial\phi(z)}{\partial z}\hat{\mathbf{z}}\right), \quad (\text{A.24})$$

onde $\mathbf{q} = q_x\hat{\mathbf{x}} + q_y\hat{\mathbf{y}}$.

As equações (A.22) e (A.24) mostram claramente a total equivalência entre a componente z do potencial escalar de fônon e as componentes na direção $\mathbf{q}_{\parallel}$ do campo de polarização $\mathbf{P}$ e do campo dos deslocamentos iônicos relativos $\mathbf{u}$.

Apêndice B

Taxas de transição elétron-fônon

B.1 Fônons confinados

A hamiltoniana de Fröhlich para fônons confinados é dada por [7, 24]

$$H_n = \frac{\lambda}{\sqrt{V}} \sum_{q_{\parallel}, n} \exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}) t_n(q_{\parallel}) u_{\parallel n}(z) [a_n(\mathbf{q}_{\parallel}) + a_n^{\dagger}(-\mathbf{q}_{\parallel})], \quad (\text{B.1})$$

as funções de estado são da forma

$$|\mathbf{K}\rangle = |\mathbf{k}_{\parallel}\rangle \otimes |k_z\rangle \otimes |N_{\mathbf{q}}\rangle, \quad (\text{B.2})$$

com a parte eletrônica definida como

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{r}_{\parallel} | \mathbf{k}_{\parallel} \rangle \otimes \langle z | k_z \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}}{\sqrt{A}} \psi(z), \quad (\text{B.3})$$

e $|N_{\mathbf{q}}\rangle$ a parte vibracional.

Os elementos de matriz para uma transição entre um estado inicial $|\mathbf{K}_i\rangle$ e um estado final $|\mathbf{K}_f\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{K}_f | H_{e-ph} | \mathbf{K}_i \rangle &= \frac{\lambda}{\sqrt{V}} \sum_{q_{\parallel}, n} t_n(q_{\parallel}) G_n \\ &\times \left[e^{-\mathbf{k}_{f\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{k}_{i\parallel}} \langle N_{\mathbf{q}f} | a_n | N_{\mathbf{q}i} \rangle + e^{-\mathbf{k}_{f\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{k}_{i\parallel}} \langle N_{\mathbf{q}f} | a_n^{\dagger} | N_{\mathbf{q}i} \rangle \right] \\ &= \frac{\lambda}{\sqrt{V}} \sum_n t_n(q_{\parallel}) G_n \delta_{\mathbf{k}_{i\parallel}, \mathbf{k}_{f\parallel} \mp \mathbf{q}_{\parallel}} \delta_{N_{\mathbf{q}f}, N_{\mathbf{q}i} \mp 1} \sqrt{N_{\mathbf{q}i} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

aqui, G_n é definido

$$G_n = \langle k_{zf} | u_{\parallel}(z) | k_{zi} \rangle = \int_{-L/2}^{+L/2} \psi(z)^* u_{\parallel}(z) \psi_i(z) dz, \quad (\text{B.5})$$

onde a integração é feita entre $-L/2$ e $L/2$ devido ao caráter confinado do modo oscilatório.

Se pode notar de (B.4) que unicamente são possíveis processos onde se conserve a componente no plano (x, y) do momento

$$\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k}_f \parallel \pm \mathbf{q}_{\parallel}, \quad (\text{B.6})$$

aqui a sinal superior corresponde a uma emissão e a sinal inferior a uma absorção. Para processos de emissão, o elemento de matriz (B.4) é

$$\langle \mathbf{K}_f | H_{e-ph} | \mathbf{K}_i \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{V}} \sum_n t_n(q_{\parallel}) G_n \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_f \parallel + \mathbf{q}_{\parallel}} \sqrt{N_{\mathbf{q}} + 1}. \quad (\text{B.7})$$

No que segue nos referiremos exclusivamente a este tipo de processos.

A taxa de transição é calculada pela Regra de Ouro de Fermi

$$W^{(i \rightarrow f)} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f \pm \hbar\omega) |\langle \mathbf{K}_f | H_{e-ph} | \mathbf{K}_i \rangle|^2 dN_f, \quad (\text{B.8})$$

substituindo (B.4) em (B.8), obtemos finalmente uma expressão para a taxa de transição com emissão de fônons

$$W = \frac{\lambda^2}{2\pi \hbar L} \sum_n |G_n|^2 t_n^2(q_{\parallel}) \int \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f \pm \hbar\omega) \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_f \parallel + \mathbf{q}_{\parallel}} (N_{\mathbf{q}} + 1) d\mathbf{q}_{\parallel}, \quad (\text{B.9})$$

onde foi usado

$$\frac{dN_f}{d\mathbf{k}_{\parallel}} = \frac{S}{(2\pi)^2}. \quad (\text{B.10})$$

B.1.1 Bandas Parabólicas

Para o caso de bandas parabólicas, podemos escrever a conservação da energia como

$$\frac{\hbar^2 k_{\parallel f}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel i}^2}{2m^*} = \hbar\omega^*, \quad (\text{B.11})$$

e a expressão para as taxas como

$$W = \frac{\lambda^2 m^*}{\hbar^3 L} \sum_n |G_n|^2 (N_{\mathbf{q}} + 1) \int t_n(q_{\parallel})^2 \delta \left(k_{\parallel i}^2 - k_{\parallel f}^2 + \frac{2m^* \omega^*}{\hbar} \right) \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_f \parallel + \mathbf{q}_{\parallel}} d\mathbf{q}_{\parallel}. \quad (\text{B.12})$$

Prestamos atenção à integral

$$I_n = \int t_n(q_{\parallel})^2 \delta \left(k_{\parallel i}^2 - k_{\parallel f}^2 + \frac{2m^* \omega^*}{\hbar} \right) \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_f \parallel + \mathbf{q}_{\parallel}} d\mathbf{q}_{\parallel}, \quad (\text{B.13})$$

usando a conservação de momento [ver Fig. (B.1)]

$$k_{\parallel f}^2 = k_{\parallel i}^2 - 2k_{\parallel i} q_{\parallel} \cos \theta, \quad (\text{B.14})$$

e substituindo em (B.13) obtemos

$$I_n = \int_q \int_0^{2\pi} t_n^2(q_{\parallel}) \delta \left(-q_{\parallel}^2 + 2q_{\parallel} k_{\parallel} \cos \theta + Q^2 \right) q_{\parallel} dq_{\parallel} d\theta, \quad (\text{B.15})$$

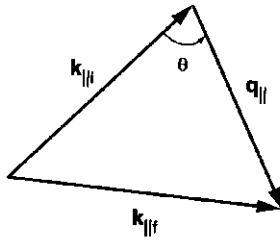


Figura B.1: Diagrama ilustrativo da conservação do momento na direção (x, y) .

fazendo a transformação $\theta \rightarrow \cos \theta$

$$\int_0^{2\pi} \dots d\theta = 2 \int_{-1}^1 \dots \frac{d(\cos \theta)}{\sin \theta}, \quad (\text{B.16})$$

e usando a propriedade da função delta

$$\delta(Ax + B) = \frac{1}{|A|} \delta\left(x - \frac{B}{A}\right), \quad (\text{B.17})$$

para $x = \cos \theta$, obtemos

$$I_n = \int_q \int_{-1}^1 t_n^2(q_{||}) \frac{1}{k_{||}} \delta\left(x - \frac{q_{||}^2 - Q^2}{2k_{||}q_{||}}\right) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} dq_{||}, \quad (\text{B.18})$$

integrando sobre x com a condição

$$-1 \leq \frac{q_{||}^2 - Q^2}{2k_{||}q_{||}} \leq 1, \quad (\text{B.19})$$

$$I_n = \int_{q_{||\min}}^{q_{||\max}} \frac{1}{(a_n q_{||}^2 + b_n/L^2)} \frac{2q_{||} dq_{||}}{\sqrt{-Q^2 + 2q_{||}^2(Q^2 + 2k_{||}^2) - q_{||}^4}}, \quad (\text{B.20})$$

onde foi empregada a forma geral para $t_n(q_{||}) = a_n q_{||}^2 + b_n/L^2$ e os limites de integração $q_{||\min}$ e $q_{||\max}$ são obtidos a partir das condições de conservação de energia e momento,

$$\begin{aligned} q_{||\min} &= |k_{||i} - k_{||f}| = k_{||} - \sqrt{k_{||}^2 + Q^2}, \\ q_{||\max} &= |k_{||i} + k_{||f}| = k_{||} + \sqrt{k_{||}^2 + Q^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

fazendo a transformação $u = q_{||}^2$ e $du = 2q_{||} dq_{||}$, obtemos

$$I_n = \int_u \frac{du}{a_n \left(u + \frac{b_n}{a_n L^2}\right) \sqrt{-u^2 + 2u(k_{||}^2 + Q^2) - Q^4}}, \quad (\text{B.22})$$

esta integral pode ser apropriadamente trasformada, com a seguinte mudança de variavel

$$t = \frac{1}{u + R_n}, \quad (\text{B.23})$$

onde $R_n = b_n/a_n L^2$. Logo

$$I_n = -\frac{1}{a_n} \int_t \frac{dt}{\sqrt{(-Q^4 - 2(2k_{\parallel}^2 + Q^2)R_n - R_n^2)t^2 + 2((2k_{\parallel}^2 + Q^2) + R_n)t - 1}}, \quad (\text{B.24})$$

esta última forma de I_n pode-se integrar analiticamente

$$I_n = \frac{1}{a_n} \frac{1}{\sqrt{Q^4 + 2(2k_{\parallel}^2 + Q^2)R_n + R_n^2}} \times \arcsin \frac{[-Q^4 - 2(2k_{\parallel}^2 + Q^2)R_n - R_n^2]t + [(2k_{\parallel}^2 + Q^2) + R_n]}{2k_{\parallel} \sqrt{k_{\parallel}^2 + Q^2}} \Bigg|_{t_{min}}^{t_{max}} \quad (\text{B.25})$$

onde os limites t_{min} e t_{max} podem ser determinados a partir de (B.21) e (B.23).

Finalmente, podemos escrever a expressão para a taxa de transição elétron-fônon para $k_{\parallel}$ arbitrário como

$$W_n = \frac{\lambda^2 m^* L}{\hbar^3} \sum_n |G_n|^2 (N_q + 1) \frac{1}{\sqrt{Q^4 a_n^2 L^4 + (4k_{\parallel}^2 + 2Q^2) a_n b_n L^2 + b_n^2}}. \quad (\text{B.26})$$

B.1.2 Bandas Não-Parabólicas

Para sub-bandas de condução não-parabólicas, a conservação da energia pode ser expressada como

$$\frac{\hbar^2 k_{\parallel f}^2}{2m^*} [1 - \gamma(k_{\parallel f}^2 + 2k_{zf})] = \frac{\hbar^2 k_{\parallel i}^2}{2m^*} [1 - \gamma(k_{\parallel i}^2 + 2k_{zf})] + \hbar\omega^*, \quad (\text{B.27})$$

e a função delta de conservação de energia na equação (B.8), pode ser escrita com auxílio da conservação do momento no plano (x, y) como

$$\begin{aligned} \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f) &= \delta \left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel i}^2}{2m^*} [1 - \gamma(k_{\parallel i}^2 + 2k_{zf})] - \frac{\hbar^2 k_{\parallel f}^2}{2m^*} [1 - \gamma(k_{\parallel f}^2 + 2k_{zf})] + \hbar\omega^* \right) \\ &= \delta(a \cos^2 \theta + b \cos \theta + b), \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

onde os parâmetros a, b e c foram definidos como

$$a = \frac{\hbar^2}{2m^*} 4\gamma k_{\parallel}^2 q_{\parallel}^2, \quad (\text{B.29})$$

$$b = \frac{\hbar^2}{2m^*} (2k_{\parallel} q_{\parallel} - 4\gamma(k_{\parallel}^2 + q_{\parallel}^2)k_{\parallel} q_{\parallel} - 4\gamma k_{zf}^2 k_{\parallel} q_{\parallel}), \quad (\text{B.30})$$

$$c = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[k_{\parallel}^2 \left(1 - \gamma(k_{\parallel}^2 + 2k_{zi}^2) \right) - (k_{\parallel}^2 + q_{\parallel}^2)(1 - 2\gamma k_{zf}^2) + \gamma(k_{\parallel}^2 + q_{\parallel}^2)^2 + Q^2 \right], \quad (\text{B.31})$$

usamos a seguinte propriedade da função delta

$$\delta f(x) = \sum_j \frac{\delta(x - x_j)}{|f'(x_j)|}, \quad (\text{B.32})$$

onde $f(x)$ é um polinômio em x e $f'(x_j)$ representa a primeira derivada de f avaliada na raiz x_j .

Fazendo $x = \cos\theta$, a função delta pode ser escrita como

$$\delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f) = |b^2 - 4ac|^{-1/2} \delta(x - R_-), \quad (\text{B.33})$$

onde

$$R_- = \frac{-b - (b^2 - 4ac)^{1/2}}{2a}, \quad (\text{B.34})$$

é a raiz negativa de $f(x)$, a raiz positiva não foi levada em conta pois diverge no limite $\gamma \rightarrow 0$.

Finalmente, a taxa de transição elétron-fônon com inclusão de não-parabolicidade da banda de condução para $k_{\parallel}$ arbitrário pode ser escrita como

$$W_n = \frac{\lambda^2}{\pi \hbar L} \sum_n |G_n|^2 (N_q + 1) \times \int_{q_{\parallel \min}}^{q_{\parallel \max}} \left(a_n q_{\parallel}^2 + \frac{b_n}{L^2} \right)^{-1} |b^2 - 4ac|^{1/2} (1 - R_-^2)^{-1/2} q_{\parallel} dq_{\parallel}, \quad (\text{B.35})$$

aqui, os limites de integração $q_{\parallel \min}$ e $q_{\parallel \max}$ são

$$q_{\parallel \min} = k_{\parallel i} - \sqrt{\mathcal{K}}, \quad (\text{B.36})$$

$$q_{\parallel \max} = k_{\parallel i} + \sqrt{\mathcal{K}}, \quad (\text{B.37})$$

onde

$$\mathcal{K} = \frac{(1 - 2\gamma k_{zf}^2) - \left[(1 - 2\gamma k_{zf}^2)^2 - 4\gamma \left(k_{\parallel i}^2 (1 - \gamma k_{\parallel i}^2) - 2\gamma k_{\parallel i}^2 k_{zi}^2 + Q^2 \right) \right]^{1/2}}{2\gamma}. \quad (\text{B.38})$$

B.2 Fônons de interface

A hamiltoniana que descreve a interação de elétrons e fônons de interface é dada por

$$H_{\alpha\mu} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \left(\frac{\hbar\omega_{\alpha\mu}e^2}{2\epsilon_0L^2} \right)^{1/2} f_{\alpha\mu}(q_{\parallel}) h_{\alpha}(q_{\parallel}, z) \frac{e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}}}{\sqrt{2q_{\parallel}}} [a_{\alpha\mu}(\mathbf{q}_{\parallel}) + a_{\alpha\mu}^{\dagger}(-\mathbf{q}_{\parallel})], \quad (\text{B.39})$$

os outros termos e parâmetros foram definidos no capítulo 4.

Os elementos de matriz para uma transição entre um estado inicial $|\mathbf{K}_i\rangle$ e um estado final $|\mathbf{K}_f\rangle$ são dados por

$$|\langle \mathbf{K}_f | H_{\alpha\mu} | \mathbf{K}_i \rangle|^2 = \frac{\hbar\omega_{\alpha\mu}e^2}{4\epsilon_0L^2} f_{\alpha\mu}^2(q_{\parallel}) \frac{|G_{\alpha\mu}(q_{\parallel})|^2}{q_{\parallel}} \quad (\text{B.40})$$

aqui, $G_{\alpha\mu}$ é definido

$$G_{\alpha\mu} = \langle k_{zf} | f_{\alpha\mu}(q_{\parallel}z) | k_{zi} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_f(z)^* f_{\alpha\mu}(q_{\parallel}z) \psi_i(z) dz, \quad (\text{B.41})$$

onde a integração é feita entre $-\infty$ e $+\infty$ devido ao caráter não-confinado deste modo oscilatório.

As expressões para as taxas de transição para bandas parabólicas e não-parabólicas são obtidas a partir da Regra de Ouro de Fermi e seguindo procedimentos análogos ao caso dos modos confinados.

B.2.1 Bandas parabólicas

As taxas de transição elétron-fônon de interface, em termos da energia cinética do elétron e considerando sub-bandas de condução parabólicas pode ser calculada pela seguinte expressão

$$W = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left(\frac{L^2}{(2\pi)^2} \right) \left(\frac{\hbar e^2}{4\epsilon_0L^2} \right) \int_{q_{\parallel}} \omega_{\alpha\mu}(q_{\parallel}) \frac{1}{|a|} f_{\alpha\mu}^2(q_{\parallel}) |G_{\alpha\mu}(q_{\parallel})|^2 \frac{2}{\sqrt{1-R^2}} dq_{\parallel}, \quad (\text{B.42})$$

onde R é dada por $R = -B/A$ e os parâmetros a e b são definidos como

$$A = \frac{\hbar^2}{2m^*} 2q_{\parallel} k_{\parallel i}, \quad B = \frac{\hbar^2}{2m^*} (Q^2 - q_{\parallel}), \quad (\text{B.43})$$

B.2.2 Bandas não-parabólicas

Uma expressão análoga a (B.42) para sub-bandas de condução não-parabólicas é dada por

$$W = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left(\frac{L^2}{(2\pi)^2} \right) \left(\frac{\hbar e^2}{4\epsilon_0L^2} \right) \int_{q_{\parallel}} \omega_{\alpha\mu}(q_{\parallel}) \frac{1}{|b^2 - 4ac|^{1/2}} f_{\alpha\mu}^2(q_{\parallel}) |G_{\alpha\mu}(q_{\parallel})|^2 \frac{2}{\sqrt{1-R_-^2}} dq_{\parallel}. \quad (\text{B.44})$$

aqui a, b, c e R_- são definidos em (B.31) e (B.34) respectivamente.

Os limites de integração consistentes com as condições de conservação do momento e energia são os mesmos definidos nas equações (B.21) para o caso parabólico e nas equações (B.37) e (B.38) para o caso não-parabólico.

Apêndice C

Integrais de overlap

C.1 Fônons confinados

Avaliando a integral de *overlap* definida na equação (5.7) e definindo $k_{\pm} = k_{W,i} \pm k_{W,f}$, obtemos para o modelo da camada dielétrica reformulado

$$\begin{aligned} G_n^{1 \rightarrow 1} &= N_1^2 \alpha_1^2 L \left[\left(\frac{\sin(k_{W,1}L + n\pi/2)}{4(k_{W,1}L + n\pi/2)} + \frac{\sin(k_{W,1}L - n\pi/2)}{4(k_{W,1}L - n\pi/2)} \right) \right. \\ &\quad \left. - (-1)^{n/2} \left(\frac{\sin(k_{W,1}L/2) \cos(k_{W,1}L/2)}{k_{W,1}L/2} + \frac{1}{2} \right) \right], \\ n &= 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \quad (C.1)$$

$$\begin{aligned} G_n^{2 \rightarrow 1} &= N_1 \alpha_1 N_2 \alpha_2 L (-1)^{(n+1)/2} \left[\sin(k_-L/2) \left(\frac{(n+1)\pi}{(k_-L)^2 - (n+1)^2\pi^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sin(k_+L/2) \left(\frac{(n+1)\pi}{(k_+L)^2 - (n+1)^2\pi^2} \right) \right], \\ n &= 1, 3, 5, \dots \end{aligned} \quad (C.2)$$

$$\begin{aligned} G_n^{2 \rightarrow 2} &= N_2^2 \alpha_2^2 L \left[\left(-\frac{\sin(k_{W,2}L + n\pi/2)}{4(k_{W,2}L + n\pi/2)} - \frac{\sin(k_{W,2}L - n\pi/2)}{4(k_{W,2}L - n\pi/2)} \right) \right. \\ &\quad \left. - (-1)^{n/2} \left(-\frac{\sin(k_{W,1}L/2) \cos(k_{W,1}L/2)}{k_{W,1}L/2} + \frac{1}{2} \right) \right], \\ n &= 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \quad (C.3)$$

$$\begin{aligned}
G_n^{3 \rightarrow 1} &= N_1 \alpha_1 N_3 \alpha_3 L (-1)^{n/2} \left[\sin(k_- L/2) \left(\frac{k_- L}{(k_- L)^2 - (n\pi)^2} \right) \right. \\
&\quad + \sin(k_+ L/2) \left(\frac{k_+ L}{(k_+ L)^2 - (n\pi)^2} \right) \\
&\quad \left. - \sin(k_- L/2) \left(\frac{1}{k_- L} \right) - \sin(k_+ L/2) \left(\frac{1}{k_+ L} \right) \right], \\
n &= 2, 4, 6, \dots
\end{aligned} \tag{C.4}$$

$$\begin{aligned}
G_n^{3 \rightarrow 2} &= N_2 \alpha_2 N_3 \alpha_3 L (-1)^{(n+1)/2} \left[\sin(k_+ L/2) \left(\frac{(n+1)\pi}{(k_+ L)^2 - (n+1)^2 \pi^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \sin(k_- L/2) \left(\frac{(n+1)\pi}{(k_- L)^2 - (n+1)^2 \pi^2} \right) \right], \\
n &= 1, 3, 5, \dots
\end{aligned} \tag{C.5}$$

$$\begin{aligned}
G_n^{3 \rightarrow 3} &= N_3^2 \alpha_3^2 L \left[\left(\frac{\sin(k_{W,3} L + n\pi/2)}{4(k_{W,3} L + n\pi/2)} + \frac{\sin(k_{W,3} L - n\pi/2)}{4(k_{W,3} L - n\pi/2)} \right) \right. \\
&\quad \left. - (-1)^{n/2} \left(\frac{\sin(k_{W,3} L/2) \cos(k_{W,3} L/2)}{k_{W,3} L/2} + \frac{1}{2} \right) \right], \\
n &= 2, 4, 6, \dots
\end{aligned} \tag{C.6}$$

C.2 Fônons de interface

Avaliando a integral de overlap definida na equação (5.10) e definindo $k_{\pm} = k_{W,i} \pm k_{W,f}$, obtemos para modos de interface

$$\begin{aligned}
G_{s\mu}^{1 \rightarrow 1} &= \frac{2N_1 N_1}{k_+ + q_{\parallel}} \\
&\quad + \frac{N_1 \alpha_1 N_1 \alpha_1}{\cosh(q_{\parallel} L/2)} \left[\frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_- L/2) + k_- \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_- L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_-^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2) + k_+ \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_+ L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_+^2} \right], \tag{C.7}
\end{aligned}$$

$$G_{a\mu}^{2 \rightarrow 1} = \frac{2N_1 N_1}{k_+ + q_{\parallel}}$$

$$+ \frac{N_2 \alpha_2 N_1 \alpha_1}{\sinh(q_{\parallel} L/2)} \left[\frac{q_{\parallel} \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_+ L/2) - k_+ \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_+^2} - \frac{q_{\parallel} \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_- L/2) - k_- \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_- L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_-^2} \right], \quad (C.8)$$

$$G_{s\mu}^{2 \rightarrow 2} = \frac{2N_2 N_2}{k_+ + q_{\parallel}} + \frac{N_2 \alpha_2 N_2 \alpha_2}{\cosh(q_{\parallel} L/2)} \left[\frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_- L/2) + k_- \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_- L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_-^2} - \frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2) + k_+ \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_+ L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_+^2} \right], \quad (C.9)$$

$$G_{s\mu}^{3 \rightarrow 1} = \frac{2N_3 N_1}{k_+ + q_{\parallel}} + \frac{N_3 \alpha_3 N_1 \alpha_1}{\cosh(q_{\parallel} L/2)} \left[\frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_- L/2) + k_- \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_- L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_-^2} + \frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2) + k_+ \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_+ L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_+^2} \right], \quad (C.10)$$

$$G_{a\mu}^{3 \rightarrow 2} = \frac{2N_3 N_2}{k_+ + q_{\parallel}} + \frac{N_3 \alpha_3 N_2 \alpha_2}{\sinh(q_{\parallel} L/2)} \left[\frac{q_{\parallel} \cosh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2) - k_+ \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_+^2} + \frac{q_{\parallel} \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_- L/2) - k_- \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_- L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_-^2} \right], \quad (C.11)$$

$$G_{s\mu}^{3 \rightarrow 3} = \frac{2N_3 N_3}{k_+ + q_{\parallel}} + \frac{N_3 \alpha_3 N_3 \alpha_3}{\cosh(q_{\parallel} L/2)} \left[\frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_- L/2) + k_- \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_- L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_-^2} + \frac{q_{\parallel} \sinh(q_{\parallel} L/2) \cos(k_+ L/2) + k_+ \cosh(q_{\parallel} L/2) \sin(k_+ L/2)}{q_{\parallel}^2 + k_+^2} \right]. \quad (C.12)$$

Referências

- [1] M V Klein. Phonons in semiconductor superlattices. *IEEE J. Quantum Electron.*, QE-22:1760–1770, 1986.
- [2] B Jusserand, D Paquet, and A Regreny. “Folded” optical phonons in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs superlattices. *Phys. Rev. B*, 30:6245–6247, 1984.
- [3] A K Sood, J Menéndez, M Cardona, and K Ploog. Resonance Raman scattering by confined LO and TO phonons in GaAs-AlAs superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 54:2111–2114, 1985.
- [4] H Rücker, E Molinari, and P Lugli. Microscopic calculation of the electron-phonon interaction in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 45:6747–6756, 1992.
- [5] A R Bhatt, K W Kim, M A Strosio, and J M Higman. Simplified microscopic model for electron-optical-phonon interactions in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 48:14671–14674, 1993.
- [6] R Fuchs and K L Kliewer. Optical modes of vibration in an ionic crystal slab. *Phys. Rev.*, 140:A2076–A2088, 1965.
- [7] J J Licari and R Evrard. Electron-phonon interaction in a dielectric slab: Effect of the electronic polarizability. *Phys. Rev. B*, 15:2254–2264, 1977.
- [8] B K Ridley. Electron scattering by confined LO polar phonons in a quantum well. *Phys. Rev. B*, 39:5282–5286, 1989.
- [9] M Babiker. Longitudinal polar optical modes in semiconductor quantum wells. *J. Phys. C.*, 19:683–697, 1986.
- [10] K Huang and B Zhu. Dielectric continuum model and Fröhlich interaction in superlattices. *Phys. Rev. B*, 38:13377–13386, 1988.

- [11] M Born and K Huang. *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford University Press, 1954.
- [12] C Y Chen, P W Jin, and S Q Zhang. Binding energy of the bound polaron in a quantum well within an electric field. *J. Phys. Condens. Matter*, 4:4483–4489, 1992.
- [13] G Weber. Electron-confined-phonon interaction in quantum wells: reformulation of the slab model. *Phys. Rev. B*, 46:16171–16173, 1992.
- [14] P J Turley and S W Teitsworth. Theory of localized phonon modes and their effects on electron tunneling in double-barrier structures. *J. Appl. Phys.*, 72:2356–2365, 1992.
- [15] G Weber and A M de Paula. Carrier capture processes in GaAs-AlGaAs quantum wells due to emission of confined phonons. *Appl. Phys. Lett.*, 63:3026–3028, 1993.
- [16] I C da Cunha Lima and T L Reinecke. Infrared absorption due to electron-lattice-vibration scattering in AlAs/GaAs quantum wells. *Phys. Rev. B*, 46:1620–1627, 1992.
- [17] G Q Hai, F M Peeters, and J T Devreese. Electron optical-phonon coupling in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells due to interface, slab and half-space modes. *Phys. Rev. B*, 48:4666–4674, 1993.
- [18] S Rudin and T L Reinecke. Electron-LO-phonon scattering rates in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B*, 41:7713–7717, 1990.
- [19] D K Ferry. Scattering by polar-optical phonons in a quasi-two-dimensional semiconductor. *Surf. Sci.*, 75:86–91, 1978.
- [20] L Wendler and R Pechstedt. Dynamical screening, collective excitations, and electron-phonon interaction in heterostructures and semiconductor quantum wells. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 141:129–150, 1987.
- [21] M H Degani and O Hipólito. Electron-interface-phonon interaction in GaAs/AlAs and InAs/GaSb heterojunctions. *Surf. Sci.*, 196:459–465, 1988.
- [22] G Weber and J F Ryan. Electron-confined-optical-phonon scattering rates in single quantum wells in an applied electric field. *Phys. Rev. B*, 45:11202–11208, 1992.
- [23] G Weber. The effect of electric field on intrasubband and intersubband transitions via interface phonons in GaAs-AlAs quantum wells. *J. Phys. Condens. Matter*, 4:9831–9842, 1992.

- [24] N Mori and T Ando. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures. *Phys. Rev. B*, 40:6175–6188, 1989.
- [25] H Rücker, P Lugli, S M Goodnick, and J E Lary. Intersubband relaxation of photoexcited carriers in asymmetric coupled quantum wells. *Semicond. Sci. Technol.*, 7:B98–B101, 1992.
- [26] M C Tatham and J F Ryan. Inter- and intra-subband relaxation of hot carriers in quantum wells probed by time-resolved Raman spectroscopy. *Semicond. Sci. Technol.*, 7:B102–B108, 1992.
- [27] K T Tsen, R Joshi, and H Morkoç. Direct measurements of electron-optical photon scattering rates in ultrathin GaAs-AlAs multiple quantum well structures. *Appl. Phys. Lett.*, 62:2075–2077, 1993.
- [28] D F Nelson, R C Miller, and D A Kleinman. Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B*, 35:7770–7773, 1987.
- [29] U Ekenberg. Enhancement of nonparabolicity effects in a quantum well. *Phys. Rev. B*, 36:6152–6155, 1987.
- [30] B R Nag and S Mukhopadhyay. Energy levels in quantum wells of nonparabolic semiconductors. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 175:103–112, 1993.
- [31] J Menéndez. Phonons in GaAs-Al_xGa_{1-x}As superlattices. *J. Lumin.*, 44:285–314, 1989.
- [32] N W Ashcroft and N D Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, 1976.
- [33] L Wendler. Electron-phonon interaction in dielectric bilayer systems. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 129:513–530, 1985.
- [34] E O Kane. volume 1 of *Semiconductors and Semimetals*. Academic, 1966.
- [35] U Ekenberg. Nonparabolicity effects in a quantum well: Sublevel shift, parallel mass, and Landau levels. *Phys. Rev. B*, 40:7714–7727, 1989.
- [36] G Bastard. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, 24:5693–5697, 1981.
- [37] G Bastard. Theoretical investigation of superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, 25:7584–7597, 1982.

- [38] U Rössler. Nonparabolicity and warping in the conduction band of GaAs. *Solid State Commun.*, 49:943–947, 1984.
- [39] Paul von Allmen. Conduction subbands in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well: Comparing different k.p models. *Phys. Rev. B*, 46:15382–15386, 1992.
- [40] J S Blakemore. Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. *J. Appl. Phys.*, 53:R123–R181, 1982.
- [41] R Sauer, T D Harris, and D A Kleinmann. Spectroscopy of excited states in In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP single quantum wells grown by chemical-beam epitaxy. *Phys. Rev. B*, 34:9023–9026, 1986.
- [42] T Hiroshima and R Lang. Effect of conduction-band nonparabolicity on quantized energy levels of a quantum well. *Appl. Phys. Lett.*, 49:456–457, 1986.
- [43] B R Nag. Boundary conditions for tunneling through potential barriers in nonparabolic semiconductors. *Appl. Phys. Lett.*, 59:1620–1622, 1991.
- [44] K H Yoo, L R Ram-Moham, and D F Nelson. Effect of nonparabolicity in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B*, 39:12808–12813, 1989.
- [45] A M Alcalde and G Weber. Nonparabolicity effects on transition rates due to confined phonons in GaAs-AlGaAs quantum wells. *Solid State Commun.*, 96:763–766, 1995.
- [46] S Adachi. GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research device applications. *J. Appl. Phys.*, 58:R1–R29, 1985.
- [47] A Seilmeier, H-J Hübner, G Abstreiter, G Weimann, and W Schlapp. Intersubband relaxation in GaAs-Al_xGa_{1-x}As quantum well structures observed directly by infrared bleaching technique. *Phys. Rev. Lett.*, 59:1345–1348, 1987.
- [48] D Collings, K L Schumacher, F Raksi, H P Hughes, and R T Phillips. Ultrafast transient absorption measurements of the electron-LO phonon scattering time in GaAs-Al_{0.33}Ga_{0.67}As multiple quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 64:889–891, 1994.
- [49] K Turner, L Rota, R A Taylor, J F Ryan, and C T Foxon. Femtosecond optical absorption measurements of electron-phonon scattering in GaAs quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 66:3188–3190, 1995.

- [50] B W Kim and E M Charlson. Barrier property dependence of band nonparabolicity effects in a quantum well. *J. Appl. Phys.*, 76:1334–1336, 1994.
- [51] G Weber. Electric-field induced ultrafast intersubband transitions in large GaAs–AlAs quantum wells via electron–interface-phonon interaction. *Solid State Commun.*, 84:595–598, 1992.
- [52] M C Tatham, J F Ryan, and C T Foxon. Time-resolved Raman measurements of inter-subband relaxation in GaAs quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, 63:1637–1640, 1989.