

**Universidade Estadual de Campinas**  
Instituto de Física Gleb Wataghin  
Departamento de Física da Matéria Condensada

**Influência de uma Pressão Biaxial Externa  
nas Propriedades Ópticas de Poços Quânticos  
de GaAs / AlGaAs**

**Paulo Freitas Gomes**

Orientador:

**Prof. Dr. Fernando Iikawa**

**Campinas, Fevereiro de 2004**



"Sabido é que todo efeito tem sua causa, e esta é uma universal verdade, porém, não é possível evitar alguns erros de juízo, ou de simples identificação, pois acontece considerarmos que este efeito provém daquela causa, quando afinal ela foi outra, muito fora do alcance do entendimento que temos e da ciência que julgávamos ter."

*José Saramago*

*Aos meus pais,  
Carlos e Ireny.*

## Agradecimentos

Ao professor Fernando Iikawa, pela oportunidade, orientação e paciência.

À FAPESP, pelo suporte financeiro.

Aos grandes amigos do GPO: Márcio, Milton Tanabe, Hugo, Marcelo e a Lene, pelas amizades e pelas valiosas explicações e ajuda quando tudo insistia em dar errado no laboratório.

Ao Milton da criogenia e o André da oficina mecânica pela ajuda essencial no decorrer deste trabalho.

Ao professor Alan A. Quivy e seu aluno T. E. Lamas por terem feito as amostras utilizadas neste trabalho. Ao professor J. A. Brum, por ter “emprestado” o programa de cálculo já pronto, e aos professores Peter, Maria José e Cerdeira pelas explicações sempre esclarecedoras.

Aos amigos da sala de estudos.

A todos os amigos do OSA Student Chapter, pelos grandes eventos já realizados.

Aos grandes e importantes amigos da Rapeize<sup>®</sup>, conhecidos nestes 6 anos de Unicamp: *Odilans*, David, Elso, *Marésia*, *Dracena*, Wendel, *Lú*, *Giba*, David Excel, Cris, Rangel, Rodrigo, Chico, Marina, Lázaro, ....., pelo convívio, pela ajuda nas horas difíceis, pelas infinitas horas na cantina, baladas, café no Godiva, churras, etc.... E a todos os amigos feitos durante minha estadia aqui em Campinas: Eduardo, Ari, *Delirr*, Gerusa, Cristiano, Gustavo, Fernando, Deni, Mariana, Daniela, .....

À minha namorada Leila, por estar sempre ao meu lado e por ser tornar uma pessoa muito especial para mim.

À minha família, meu irmão Ricardo e meus pais Carlos e Ireny, por me amarem e sem os quais nada disso seria possível.

## **Resumo**

Estudamos a influência de uma pressão biaxial externa sobre a estrutura de banda de poços quânticos de GaAs / AlGaAs por medidas ópticas. A aplicação de uma pressão externa é uma técnica bastante útil no estudo de efeitos da mistura das bandas em heteroestruturas, principalmente da banda de valência. A sua grande vantagem é de ter controle externo utilizando uma mesma amostra. Utilizamos técnicas de medidas de fotoluminescência e fotoluminescência de excitação. A medida da deformação (tensão) foi feita a partir do pico de luminescência da camada espessa de GaAs da própria amostra. Os poços quânticos investigados têm uma largura nominal de 107Å, onde a separação de energia entre a subbanda de buraco pesado e leve no centro da zona de Brillouin é de 12 meV. A célula de pressão utilizada aplica uma tração biaxial suficiente para deslocar as subbandas com energias maiores que essa separação. Realizamos cálculos numéricos das dispersões de energia da banda de valência utilizando o Hamiltoniano 6x6 de Luttinger-Kohn e de Bir-Pikus, para analisar os dados experimentais. Uma propriedade interessante observada nos resultados experimentais, que fora previsto nos cálculos, é o anti-cruzamento entre as subbandas nos estados fundamentais do buraco leve e pesado. O “gap” indireto também previsto teoricamente, não foi observado devido ao efeito de localização que alarga a linha de emissão e absorção da ordem da diferença de energia entre o topo da banda de valência e o centro da zona.

Este trabalho abre possibilidades de realizar estudos futuros de efeitos da mudança na estrutura de bandas em poços quânticos, como por exemplo, sobre a dinâmica e formação de éxcitons, como também magneto-éxcitons. A aplicação simultânea de uma pressão biaxial e um campo magnético permite investigar o fator-g de Landé ( efeito Zeeman ) influenciado pela mistura das bandas em poços quânticos.

## **Abstract**

We have studied the influence of external biaxial stress in GaAs / AlGaAs quantum wells heterostructures by optical measurements. For this purpose, we have used photoluminescence and excitation photoluminescence measurement techniques. Biaxial stress application is a extremely useful technique to study the valence band mixing in heterostructures, and its greatest advantage is the external control of the sample strain..

The measurement of strain (stress) was carried out measuring the photoluminescence peak of the thick GaAs layer. The quantum wells have nominal width of  $L = 107 \text{ \AA}$ , and the energy difference between the heavy and light hole subband is about 12 meV, in  $\mathbf{k} = 0$  (center of first Brillouin zone). The pressure cell used applies a biaxial stress enough to dislocate the subbands more than 12 meV (the energy difference between the heavy and light hole subbands). We have numerically calculated the valence band energy dispersion using the Bir-Pikus and Luttinger-Kohn 6x6 hamiltonian to analyze the experimental data. An interesting property observed in the experimental data and theoretically simulation, is the anti-crossing between the heavy and light hole subband in the ground state. The indirect gap, also theoretically predicted, was not observed due the localization effect. This effect extends the emission and absorption line in amount of the energy difference between the valence band top and the center of the zone.

This work opens possibilities for future studies about the effects of changes in the quantum well band structure, like dynamics and formation of excitons, also magnetic-excitons. The simultaneous application of biaxial stress and magnetic field permits to investigate the Landé g-factor (Zeeman effect) influenced by the band mixing in quantum wells.

## Índice

Introdução _____	1
Capítulo 1 – Teoria _____	4
1.1 Estrutura de Banda do GaAs _____	4
1.2 Poços Quânticos _____	5
1.3 Tensão Biaxial em uma Placa _____	8
1.4 Deformação Biaxial _____	13
1.5 Estrutura da Banda de Valência de um Semicondutor Tensionado _	14
1.6 Aproximação para $k = 0$ _____	16
1.7 Comportamento das bandas em $k = 0$ _____	17
1.8 Massa Efetiva _____	19
Capítulo 2 – Resultados Teóricos _____	20
2.1 Dispersão de Energia _____	20
2.2 Energia de Transição _____	26
2.3 Massa Efetiva _____	28
Capítulo 3 – Aparato Experimental _____	30
3.1 Amostras _____	30
3.2 Célula de Pressão Biaxial _____	31
3.3 Técnicas Experimentais _____	32
3.4 Montagem Experimental _____	34

Capítulo 4 – Resultados Experimentais e Análise _____	37
4.1 Medida de Deformação _____	37
4.2 Alargamento de Energia devido ao gradiente de tensão _____	39
4.3 Espectros PL e PLE do poço quântico _____	41
4.4 Gap Indireto _____	46
Capítulo 5 - Conclusões _____	49
Referências _____	51
Apêndice _____	53

## **Introdução**

O crescimento de filmes finos semicondutores permaneceu, durante muito tempo, limitado a materiais com o mesmo parâmetro de rede do substrato ou no máximo com o parâmetro muito próximo, pois assim evitava defeitos criados pela tensão nas camadas depositadas. O advento de novas tecnologias de crescimento epitaxial, como MBE (“Molecular Beam Epitaxy”), CBE (“Chemical Beam Epitaxy”) e MOCVD (“Metal Organic Chemical Vapor Deposition”), tornou possível o crescimento de filmes biaxialmente tensionados até a espessura crítica – com parâmetro de rede distinto do substrato – de alta qualidade sem que houvesse defeitos ou com baixa densidade deles. Assim, a tensão biaxial, proveniente do descasamento do parâmetro, tornou-se uma variável a mais nos métodos de crescimento de cristais. Atualmente, utiliza-se inclusive a tensão intrínseca do filme depositado para favorecer o crescimento de pontos quânticos auto-organizados, que são estruturas bastante investigadas nos últimos anos por ter características de um sistema de zero-dimensão de estados discretos e possibilidade de se estudar efeitos de muitos elétrons, cujo número pode ser controlado externamente. É também utilizada na confecção de dispositivos, por exemplo “laser” de poços quânticos tensionados e transistor de efeito de campo. A presença da tensão (pressão), no entanto, modifica as propriedades de materiais semicondutores. A energia do “gap” é um dos parâmetros que depende dessa tensão, o que se tornou então uma variável adicional para a Engenharia do “gap” em aplicações tecnológicas de dispositivos opto-eletrônicos.

Em termos de física fundamental, a pressão biaxial em semicondutores tem influência significativa na estrutura de banda, principalmente, na banda de valência onde ela é formada por três bandas de orbitais atômicos P (momento angular orbital  $L = 1$ ). Essa mudança na banda de valência, que, no geral, pode ser induzida por qualquer outro agente (como por exemplo confinamento quântico, campo elétrico ou campo magnético), faz com que a alteração da mistura das três bandas provoque mudanças nas propriedades, por exemplo, dos éxcitons, massa efetiva, fator-g de Landé, etc., e também naquelas que envolvem os estados de spin, como transporte de spin. Esta última propriedade, atualmente, se tornou um assunto de grande interesse na comunidade por ser um promissor elemento de transporte de informações juntamente com o transporte de portadores de carga em semicondutores, cuja área está sendo chamada de eletrônica do spin ou simplesmente spintrônica.

Dessa forma, há interesses em entender como a tensão influencia as propriedades de materiais heteroestruturados. Dentro dessa idéia, foram

desenvolvidos dois trabalhos de dissertação de mestrado no grupo (Grupo de Propriedades Ópticas) sobre esse assunto. Um dos projetos foi estudar as propriedades ópticas de poços quânticos de camadas tensionadas de InGaAs / InP e também na presença de uma tensão biaxial externa. O outro projeto, foi sobre a construção de uma célula adaptada para o magneto-criostato. O trabalho de mestrado que apresentaremos aqui é uma continuação desses dois projetos com o objetivo de investigar amostras com melhores qualidades de interfaces comparadas com àquelas estudadas anteriormente. Além disso, a região espectral de transição óptica está dentro da região espectral das fontes de luz disponíveis no laboratório, como o laser de Ti-safira, de modo que possamos realizar, além das medidas de emissão, medidas de absorção, que não foi possível de ser feita nos trabalhos anteriores. As amostras que escolhemos foram poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidas por MBE (“molecular beam epitaxy”) que tem excelente qualidade de interface e tem também transições ópticas na região de emissão do laser de Ti-safira.

Para aplicar externamente uma tensão biaxial utilizamos uma célula de pressão, desenvolvida pelo Prof. Fernando Iikawa, baseada na deflexão de uma placa (amostra semicondutora) colocada entre um anel e uma esfera ([Baptzanskii, 1979], [Liarokapis, 1992]). Dessa forma, flexionando fisicamente a amostra, alteramos o parâmetro de rede criando a deformação ou a tensão desejada. Com a célula de pressão, podemos aplicar uma tensão biaxial variável em uma mesma amostra, permitindo um estudo mais sistemático de suas propriedades ópticas.

O GaAs “bulk” apresenta estrutura do tipo “gap” direto, com mínimo da banda de condução e máximo da banda de valência no ponto  $\Gamma$ , em  $k = 0$ , onde as sub-bandas de buraco pesado e leve estão degeneradas. Essa degenerescência é quebrada em poços quânticos devido à redução da simetria de translação formando subbandas de buracos pesado e leve. Aplicando uma tensão biaxial na amostra essas subbandas deslocam sempre em direções opostas independente da tensão ser tração ou compressão biaxial. A nossa célula aplica uma tração biaxial na amostra e, neste caso, as subbandas se aproximam. Isso faz com que a mistura da banda de valência aumente e altere a forma da dispersão de energia. Sobre esse efeito que exploramos nesse trabalho.

O objetivo desse trabalho é, portanto, estudar a evolução das sub-bandas tanto da banda de valência como da banda de condução em poços quânticos de GaAs/AlGaAs variando a deformação biaxial. Para isso, realizamos medida ópticas de fotoluminescência e fotoluminescência de excitação. Realizamos cálculos das dispersões de energia das subbandas utilizando o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn e Birus-Pikus.

Na literatura, encontramos poucos trabalhos sobre poços quânticos de GaAs com pressão biaxial externa. Sosin & Trzeciakowski (1994) apresentam dados experimentais em poços quânticos de GaAs/AlGaAs sob tração biaxial. Esses autores utilizaram um gás para pressionar a amostra na célula de pressão para aplicar tensão biaxial e as medidas foram feitas a temperatura de  $T = 80$  K. Os autores apresentam nesse artigo uma proposta de uma célula de pressão biaxial e nenhum estudo sistemático. A diferença da nossa célula com a deles é que ela foi projetada para operar a temperatura de He líquido onde a célula de Sosin & Trzeciakowski não é possível.

Uma contribuição importante deste trabalho foi a verificação experimental e teórica do efeito da mistura das bandas nas propriedades ópticas em poço de GaAs/AlGaAs provocada pela pressão biaxial externa.

A dissertação foi dividida em 4 capítulos. O capítulo 1 contém os conceitos básicos sobre confinamentos quânticos e efeitos de pressão e modelos teóricos da deflexão da amostra e da influência de uma deformação biaxial na estrutura de banda do GaAs. O capítulo 2 contém os resultados teóricos. O capítulo 3 apresenta a estrutura das amostras, o aparato experimental utilizado e as técnicas de medidas. No capítulo 4 apresentamos os resultados experimentais, os espectros obtidos com as técnicas de PL e PLE e a comparação com os resultados teóricos. Por último apresentamos as conclusões.

## **Capítulo 1 - Teoria**

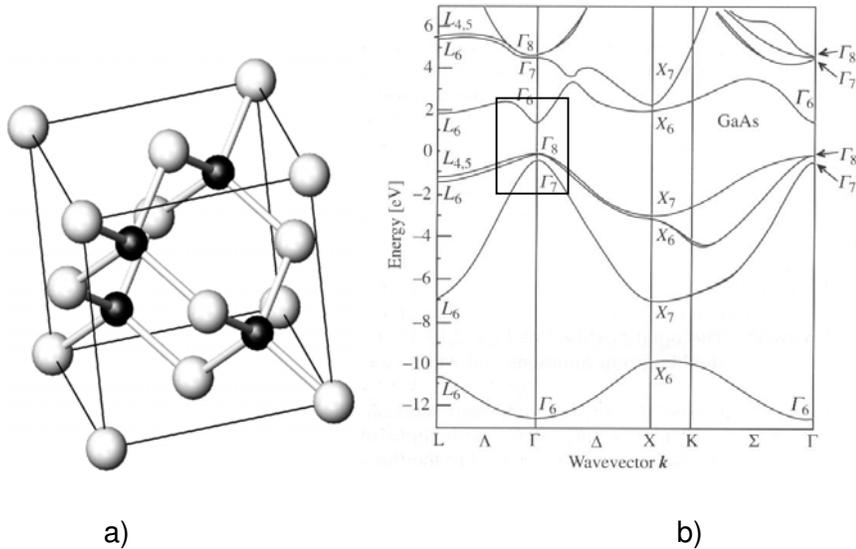
Nesse primeiro capítulo pretendemos apresentar alguns conceitos básicos envolvidos no trabalho, modelos e cálculos que serão utilizados para a interpretação dos dados experimentais. No primeiro ítem, apresentaremos algumas propriedades importantes do GaAs e da liga de AlGaAs e no item seguinte, trataremos do efeito de confinamento quântico em poços quânticos. Mostraremos também o princípio de funcionamento da célula de pressão que aplica uma tensão biaxial em uma placa colocada entre um anel e uma esfera. Em seguida, mostraremos a influência de uma pressão biaxial externa sobre a estrutura de banda, usando um modelo aproximado para  $k = 0$  e um cálculo numérico mais completo de dispersão de energia da banda de valência, incluindo tanto o efeito de confinamento quântico como a tensão biaxial.

### 1.1 Estrutura de banda do GaAs

GaAs e AlGaAs são semicondutores que tem uma estrutura cristalina tipo blenda de zinco, veja a célula unitária na figura 1-1a. A figura 1-1b mostra a estrutura de bandas do GaAs, i. e., dispersão de energia em função do vetor de onda  $\mathbf{k}$  em algumas direções de alta simetria como X, L e K. Trata-se de uma estrutura com “gap” direto, onde o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução estão no centro da zona de Brillouin, em  $\mathbf{k} = 0$ , o ponto  $\Gamma$ . A dispersão de energia para a liga de AlGaAs é muito similar a do GaAs para a concentração do alumínio menor que  $\sim 0.3$ .

A banda de valência é formada por orbitais tipo P, momento angular orbital atômico  $L = 1$ , e a banda de condução por orbitais tipo S, com  $L = 0$ . A banda de valência é então formada pelos estados do momento angular total,  $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$ , momento angular de spin + momento angular orbital, logo  $J = 3/2$  e  $1/2$ . Para  $J = 3/2$  temos quatro bandas e duas bandas para  $J = 1/2$ . A interação spin-órbita separa as bandas  $J = 1/2$  e  $3/2$ , veja a região selecionada com um retângulo na figura 1-1b, que é a região de nosso interesse. No centro da zona, a banda de valência é então degenerada para  $J = 3/2$  ( $\Gamma_8$ ) e as componentes do momento total na direção  $z$   $m_J = \pm 3/2$  são conhecidas como subbandas de buraco pesado (HH) e para  $m_J = \pm 1/2$  conhecidas como subbandas de

buraco leve (LH). Já para  $J = 1/2$  ( $\Gamma_7$ ) possui energia mais baixa. A banda de condução com  $L = 0$  é formada por  $J = 1/2$  ( $\Gamma_6$ ).



**Figura 1-1** – a) Célula unitária do GaAs, estrutura de blenda de zinco, uma rede cúbica de face centrada com dois átomos diferentes na base. As bolinhas claras representam os átomos de Ga e as pretas os de As. b) Dispersão de energia do GaAs. Possui gap direto, no ponto  $\Gamma$  (calculado por pseudopotencial, [Yu & Cardona, 1996]).

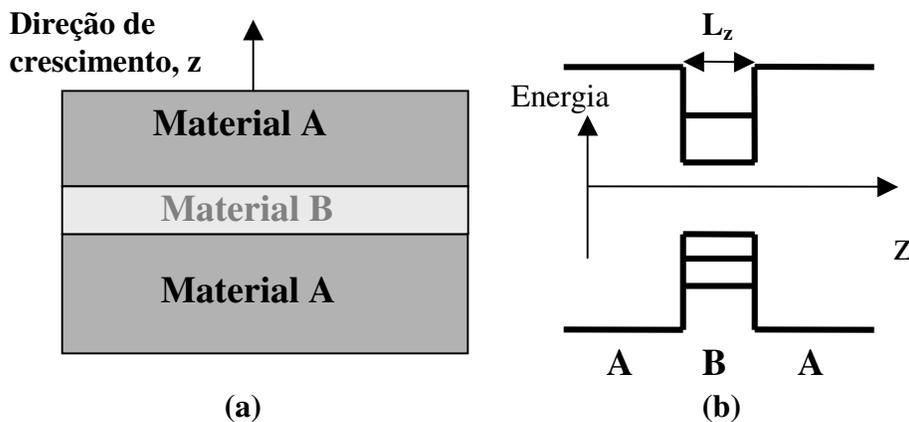
## 1.2 Poços Quânticos

Os poços quânticos são formados por heterojunções de dois materiais com as energias do “gap” diferentes, onde o material de menor energia fica entre os dois de maior energia, como está ilustrado na figura 1-2a. Para os poços quânticos como GaAs/AlGaAs, o perfil de potencial é do tipo mostrado na figura 1-2b.

Se a largura  $L_z$  é da ordem do comprimento de onda de *de Broglie*, temos o efeito de confinamento quântico, os portadores perdem a liberdade de locomoção na direção  $z$  mas continuam livres no plano perpendicular e formam estados bi-dimensionais, cujo sistema é conhecido como poço quântico. Nesse caso, formam sub-bandas tanto na banda de valência como na banda de condução, como estão mostrados na figura 1-3 na aproximação de bandas parabólicas. Na banda de condução mostramos o estado fundamental. Na banda de valência, mostramos duas sub-bandas,

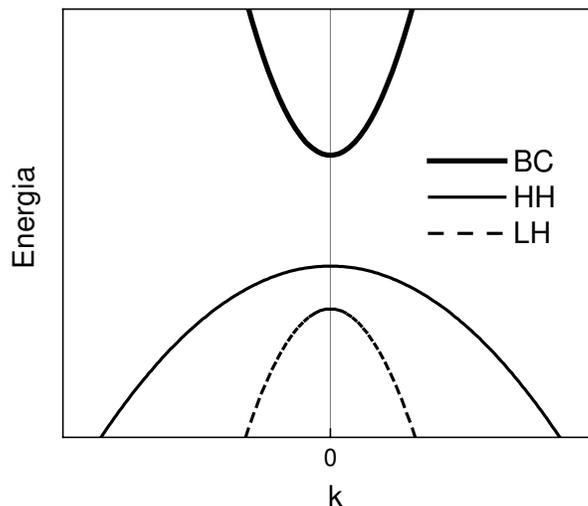
uma do buraco pesado e outra do buraco leve nos respectivos estados fundamentais que descreveremos a seguir com mais detalhes.

Nos poços quânticos de GaAs/AlGaAs a degenerescência no topo da banda de valência do GaAs,  $J = 3/2$ , é quebrada por redução da simetria de translação na direção  $z$ , separando as subbandas de buraco pesado (HH),  $m_j = \pm 3/2$ , e de buraco leve (LH),  $m_j = \pm 1/2$ . A subbanda de buraco leve, por ter menor massa efetiva, tem maior energia de confinamento (os buracos tem a massa efetiva positiva e a energia cresce no sentido oposto a do elétron), portanto, o topo da banda de valência é formada pela subbanda de buraco pesado.



**Figura 1-2** – Esquema ilustrativo de um poço quântico: a) multi-camadas de materiais A e B; b) perfil de potencial, material A tem energia do “gap” maior do que o material B. No poço, estão representados o nível do estado fundamental do elétron e dos buracos leve e pesado.

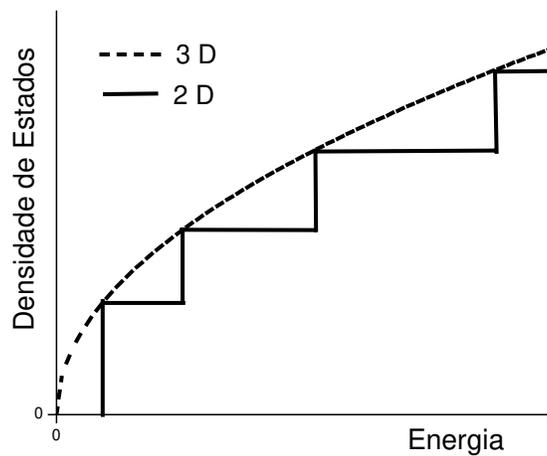
Um parâmetro importante quando se trata de poços quânticos é o alinhamento das bandas nas interfaces das junções (“*band-offset*”) entre dois materiais. Em muitas interfaces esse parâmetro não é bem definido, porém, no caso da junção GaAs/AlGaAs, que é um dos materiais mais estudados nos últimos anos, é bem aceito que 60% da diferença de energia do “gap” entre AlGaAs e GaAs,  $\Delta E_g = E_g^A - E_g^B$ , onde  $E_g$  é a energia do “gap” e A = AlGaAs e B = GaAs, está na banda de condução e o restante 40% está na banda de valência.



**Figura 1-3** – Dispersão de energia das subbandas na aproximação de bandas parabólicas. BC é a banda de condução, HH e LH são as subbandas de buraco pesado e leve, respectivamente.

Uma característica bem marcante em poços quânticos é a densidade de estados. Ela tem a forma de degraus, como está mostrado na figura 1-4, por ser sistema bi-dimensional na aproximação parabólica [Bastard, 1992]. Cada degrau corresponde a uma nova subbanda. A curva contínua é a densidade de estado de um sistema tri-dimensional, que depende de raiz quadrado de energia na aproximação parabólica, [Kittel, 1995].

Para se calcular as funções de onda e as subbandas na banda de condução e na banda de valência em um poço quântico utiliza-se o modelo de aproximação de função envelope [Bastard, 1992]. Nessa aproximação, a função de onda na direção do confinamento,  $z$ , é o produto de uma função envelope e uma função periódica e, na direção perpendicular, é uma função de onda de Bloch como é definida em um volume. A parte periódica por ser uma função que varia muito rapidamente utiliza-se a mesma em todo  $z$ , mesmo que os materiais sejam diferentes. Como estamos interessados em estudo de estrutura eletrônica na presença de uma tensão biaxial deixamos a discussão para as seções seguintes.

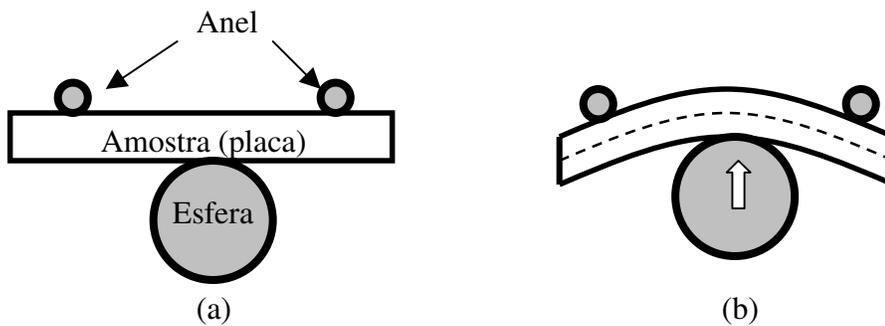


**Figura 1- 4** – Densidade de estados para sistemas 3D e 2D (poço quântico).

### 1.3 Tensão biaxial em uma placa

A célula de pressão biaxial utilizada no projeto é baseada na deflexão de uma placa plana colocada entre um anel e uma esfera ([Liarokapis, 1992], [Baptizsmanskii, 1979], veja figura 1-5a. Quando a esfera é deslocada contra o anel a placa se flexiona elasticamente, como está ilustrado na figura 1-5b. O parâmetro de rede no plano onde está indicada com a linha tracejada na amostra, que é o ponto médio, não se altera com a deflexão da placa, porém na parte superior, ou inferior, o parâmetro de rede aumenta (fica tracionada), ou diminui (fica comprimida), respectivamente.

Faremos aqui uma breve descrição do cálculo, utilizando a teoria da elasticidade, do perfil da placa e da tensão e deformação biaxial. Estamos aqui reproduzindo o cálculo já desenvolvido em livros sobre teoria da elasticidade [Filonenko-Borodich, 1966] e também na tese de mestrado de Marcio P. F. de Godoy [Godoy, 2002].

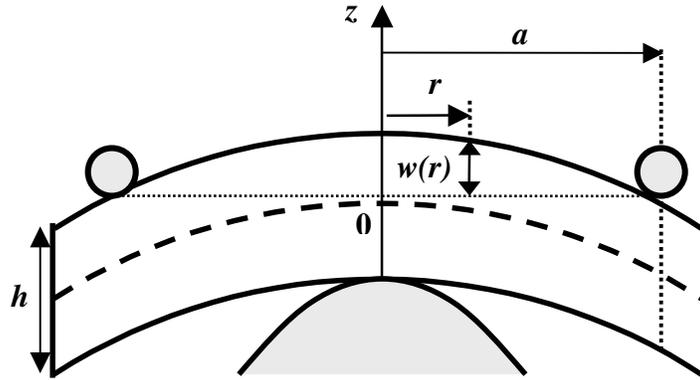


**Figura 1-5** – Vista lateral da placa (amostra) colocada entre um anel e uma esfera. a) antes de aplicar a tensão; b) placa tensionada. A curva tracejada representa a superfície intermediária da placa, na qual a deformação é zero. Quando o material é tracionado, o parâmetro de rede aumenta, enquanto que quando é comprimida, o parâmetro diminui.

Nesse modelo, algumas considerações são feitas:

- i) a espessura do filme crescido sobre o substrato é muito menor que a espessura do substrato (em geral, o filme epitaxial tem no máximo alguns microns de espessura e o substrato, centenas de microns). Desta maneira, é conveniente considerar que a deformação em todo filme acompanha a deformação da superfície do substrato e denominaremos este conjunto como apenas amostra ou placa;
- ii) a amostra é um disco de espessura  $h$  que é apoiado por um anel de raio  $a$ . Ele sofre um deslocamento (deflexão)  $w(r)$ , a uma distância  $r$  do centro, na direção perpendicular ao plano do disco devido a força aplicada no centro do disco pela esfera contra o anel, como está ilustrado na figura 1-6;
- iii) deflexões  $w(r)$  são bem menores que a espessura  $h$  da amostra, e que esta espessura é bem menor que as outras dimensões da amostra.

Tomamos como o eixo  $z$  a direção perpendicular ao plano da placa no centro do anel, e com origem no ponto intermediário da amostra. Esse eixo é paralelo à direção de crescimento dos filmes. O plano intermediário, indicado pela linha tracejada na figura 1-6, está livre de tensão e somente as partes superior e inferior estão tensionadas.



**Figura 1- 6** – Esquema da amostra deflexionada (vista lateral) com as identificações dos parâmetros utilizados para o cálculo.

Um cristal sujeito a uma *tensão* (“stress”) sofre uma *deformação* (“strain”) e essas duas grandezas são tensores e estão relacionadas através da *lei de Hooke*. O cristal, no nosso caso, tem a simetria cúbica, por isso, a tensão ( $\bar{\sigma}$ ) e a deformação ( $\bar{\epsilon}$ ) são tensores com apenas 6 componente diferentes. A Lei de Hooke, portanto, para esses tensores é escrita como [Kittel, 1995]:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{12} \end{pmatrix}, \quad (1-1)$$

onde  $C_{ij}$  são as constantes elásticas. Podemos também escrever a equação acima na forma inversa, onde neste caso, utilizamos a matriz cujo elementos são  $S_{ij}$ , que é uma matriz inversa a  $C_{ij}$ .

Os elementos do tensor de tensão e de deformação estão relacionados com as deflexões da placa, nas diferentes direções, através das derivadas parciais nas coordenadas  $x$ ,  $y$  e  $z$  [Filonenko-Borodich, 1966]. Utilizando essas equações a Lei de

Hooke pode ser reescrita na forma de uma equação diferencial quando a placa está sujeita a uma pressão no centro do disco  $q(x,y)$ :

$$\nabla^2 \nabla^2 w(r) = \frac{q(x,y)}{D}, \quad (1-2)$$

onde  $D$  é o coeficiente de rigidez, que está relacionado com as constantes elásticas. Por causa da simetria apresentada na deflexão da placa, utilizamos as coordenadas cilíndricas para resolver a equação diferencial acima. Resolvendo essa equação, considerando uma pressão constante no plano  $xy$ ,  $q(x,y) = q$ , encontramos a expressão para a deflexão:

$$w(r) = \frac{(1+\alpha)w_0}{(5+\alpha)a^4} \left\{ (a^2 - r^2)^2 + 4a^2 \frac{a^2 - r^2}{1+\alpha} \right\}, \quad (1-3)$$

onde

$$w_0 = w(0) = \frac{qa^4}{64D} \left( \frac{5+\alpha}{1+\alpha} \right) \quad (1-4)$$

é a deflexão no centro do disco ( $r = 0$ ),  $\alpha = \frac{C_{12}}{C_{11}}$  é a razão de Poisson e  $z$  é restrito ao

intervalo  $-\frac{h}{2} \leq z \leq \frac{h}{2}$ . Conhecendo então a deflexão  $w(r)$  podemos calcular a deformação biaxial  $\varepsilon$  no plano (componente *radial* no plano da placa) através das derivadas parciais, nas coordenadas cilíndricas, dada por:

$$\varepsilon = \frac{-z}{(1-\alpha)(1+2\alpha)} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\alpha}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) w(r). \quad (1-5)$$

Calculando as derivadas, temos que:

$$\varepsilon = -\frac{Aw_0z}{a^4} (r^2 - a^2), \quad (1-6)$$

onde

$$A = \frac{4(1+\alpha)(3+\alpha)}{(5+\alpha)(1-\alpha)(1+2\alpha)}. \quad (1-7)$$

A eq. (1-6) nos dá o valor da componente *radial* da deformação no plano da placa. Não apresentaremos aqui outras componentes perpendiculares (tanto a azimutal

como a da direção  $z$ ) da deformação, pois não serão utilizadas no cálculo. No centro do disco,  $r = 0$ , tanto a componente radial como a azimutal são iguais e temos então a tensão e deformação biaxial simétrica e a eq. (1-6) se torna:

$$\varepsilon = \frac{4(1+\alpha)(3+\alpha)}{a^2(1-\alpha)(1+2\alpha)(5+\alpha)} w_0 z. \quad (1-8)$$

A deformação no plano varia linearmente com a posição  $z$  e da quantidade deflexionada (ou deslocamento da esfera com relação ao anel)  $w_0$ . No ponto intermediário ( $z = 0$ ) a deformação é nula. A partir da eq. (1-8), podemos verificar que na superfície da placa, do lado do anel,  $z = +h/2$  teremos uma tração biaxial e do lado oposto,  $z = -h/2$ , teremos uma compressão biaxial, e ambos tem uma dependência linear com a espessura  $h$ .

A pressão que a esfera está exercendo sobre a placa no centro é dada por:

$$q = \frac{16C_{11}}{3a^4} \frac{1+\alpha}{5+\alpha} w_0 h^3, \quad (1-9)$$

enquanto que a força equivalente é

$$F = q\pi a^2 = \frac{16\pi C_{11}}{3a^2} \frac{1+\alpha}{5+\alpha} w_0 h^3. \quad (1-10).$$

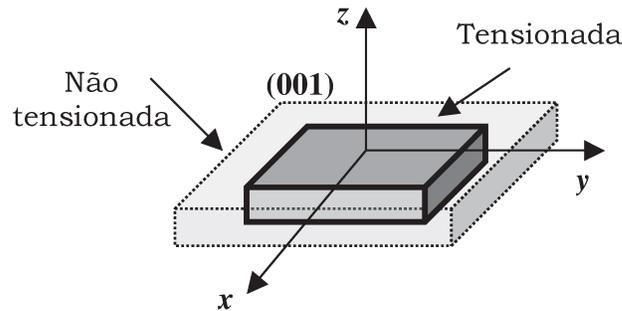
Note que a força possui uma dependência linear com o deslocamento da esfera,  $w_0$ , e cúbica com a espessura da amostra,  $h^3$ , e inversamente proporcional a  $a^2$ . Portanto, temos de escolher  $a$ ,  $h$  e  $w_0$  para que a célula tenha força suficiente para deformar a amostra.

A espectroscopia óptica e de raios X são as técnicas mais utilizadas na determinação direta da deformação  $\varepsilon$ . Neste trabalho, utilizamos espectroscopia de fotoluminescência (PL) para esse fim. Ela nos fornece a energia do gap e a partir da variação desta energia podemos determinar  $\varepsilon$ , como será mostrado a seguir.

No nosso sistema utilizamos um anel com raio  $a = 4$  mm e a nossa amostra tem uma espessura de  $h \cong 550$   $\mu\text{m}$ . Podemos estimar a deflexão  $w_0$  para alguma deformação  $\varepsilon$  e usando  $z = h/2$ , através da eq. 1-8. Para o estado mais tensionado,  $\varepsilon = 0,217$  %, logo  $w_0 = 36$   $\mu\text{m}$ . Com esses valores, a força calculada pela eq. 1-10 é de  $F \cong 200$  N, que é uma força facilmente obtida.

### 1.4 Deformação (tensão) biaxial

Em geral, a pressão externa é aplicada em uma determinada direção onde o cristal apresenta uma simetria. Apresentaremos aqui somente o caso estudado nesse trabalho. Na figura 1-7, está ilustrada uma amostra semicondutora cristalina sujeita a uma tensão biaxial no plano (001).



**Figura 1-7** – Semicondutor com e sem a tensão biaxial aplicada no plano (001).

A tensão biaxial, no plano  $xy$ , tem  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma$  e outras componentes  $\sigma_{ij} = 0$ . Substituindo essas componentes na eq. 1-1, obtemos as componentes do tensor de deformação:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon = \frac{C_{11}}{C_{11} - (C_{11} + 2C_{12})C_{12}} \sigma, \quad (1-11)$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx}, \quad (1-12)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0. \quad (1-13)$$

A deformação acima nada mais é do que a variação do parâmetro de rede quando submetido a uma força externa. A definição que utilizamos aqui da deformação biaxial é

$$\varepsilon = \frac{a_f - a_i}{a_i}, \quad (1-14)$$

onde,  $a_f$  e  $a_i$  são os parâmetros de rede da amostra no plano (001) com e sem a tensão, respectivamente.

### 1.5 Estrutura da Banda de Valência de um Semicondutor Tensionado

A estrutura de bandas de um semicondutor na presença de tensão pode ser descrita por um hamiltoniano 6 x 6, que inclui o acoplamento entre as bandas de buraco pesado (HH,  $|3/2, \pm 3/2\rangle$ ), buraco leve (LH,  $|3/2, \pm 1/2\rangle$ ) e a banda separada devido a interação spin-órbita, “split-off” (SO,  $|1/2, \pm 1/2\rangle$ ), ou seja, três subbandas degeneradas por spin (veja por exemplo como referência [Chao & Chuang, 1992]). As sub-bandas de “split-off”, freqüentemente negligenciadas, têm participação significativa no cálculo dos níveis de energia superiores e das massas efetivas quando se tratam de materiais fortemente tensionados, como no nosso trabalho.

O Hamiltoniano de Luttinger-Kohn e Bir-Pikus na base  $|j,m\rangle$ , onde  $J$  é o momento angular total e a componente  $z$ , pode ser escrito na forma [Chao & Chuang, 1992]:

$$H = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^* & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P+Q & -\sqrt{2}R^* & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^* & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix},$$

(1-15)

onde

$$P = \left( \frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (1-16a)$$

$$Q = \left( \frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}), \quad (1-16b)$$

$$R = \left( \frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} [2i\gamma_3 k_x k_y - \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2)] + \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} \quad (1-16c)$$

$$S = \left( \frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2k_z \gamma_3 (k_x - ik_y) \sqrt{3} - (\varepsilon_{zx} - i\varepsilon_{yz}) d. \quad (1-16d)$$

Nessas equações,  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  e  $\gamma_3$  são os parâmetros de Luttinger,  $\mathbf{a}_v$ ,  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{d}$  são os potenciais de deformação de Bir-Pikus,  $\Delta$  é a energia de desdobramento da interação spin-órbita e  $\varepsilon_{ij}$  é o tensor simétrico de deformação (Yu & Cardona, 1996). A base  $|j,m\rangle$  denota a função de onda de Bloch no centro da zona de Brillouin e foi escolhida de modo a fazer o hamiltoniano da interação spin-órbita diagonal. Ela é definida como combinação linear das funções de ondas orbitais tipo P:

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |(x+iy)\uparrow\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{6}} |-(x+iy)\downarrow + 2z\uparrow\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{6}} |(x+iy)\uparrow + 2z\downarrow\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |(x-iy)\downarrow\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |(x+iy)\downarrow + z\uparrow\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |(x-iy)\uparrow - z\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (1-17)$$

A dispersão das subbandas de valência de um semiconductor em função da deformação é determinado pela equação de Schrödinger independente do tempo, que se reduz para a equação de auto valor:

$$|H_{ij}(k) - \delta_{ij}E| = 0. \quad (1-18)$$

Para calcular a estrutura de banda de um poço quântico foi introduzido na equação 1-18 o potencial de confinamento na direção do eixo z. O alinhamento das bandas (“band offset”) das bandas na junção de GaAs / AlGaAs utilizado no cálculo é 60% na banda de condução e 40% na banda de valência. Os valores dos parâmetros utilizados nos cálculos estão listados na tabela 1-1. O programa, em Fortran, foi desenvolvido pelo Prof. J. A. Brum, com quem temos colaboração nesse projeto.

Parâmetros	GaAs
a (Å)	5,65
E <sub>g</sub> (eV)	1,424
γ <sub>1</sub>	6,85
γ <sub>2</sub>	2,1
γ <sub>3</sub>	2,9
C <sub>11</sub> (10 <sup>11</sup> dyn/cm <sup>2</sup> )	11,879
C <sub>12</sub> (10 <sup>11</sup> dyn/cm <sup>2</sup> )	5,376
a <sub>c</sub> - a <sub>v</sub> (eV)	-9,77
b (eV)	-1,7
m <sub>e</sub> / m <sub>0</sub>	0,067

**Tabela 1-1** – Parâmetros utilizados no cálculo, [Chao & Chuang, 1992].

### 1.6 Aproximação para k = 0

Com o modelo apresentado no item anterior, podemos calcular numericamente os valores da energia para  $k > 0$ , tendo assim um gráfico da dispersão de energia,  $E \times k$ . Porém, podemos encontrar soluções analíticas aproximando o modelo para  $k \cong 0$ , [Pollak, 1991].

Fazendo essa aproximação, a dependência da energia das sub-bandas em função da tensão biaxial pode ser escrita como, na notação utilizada em [Iikawa, 1988]:

$$\begin{aligned}
 E_g^{hh} &= E_g^0 + \delta E_c - \delta E_{v2} \\
 E_g^{lh} &= E_g^0 + \delta E_c - \delta E_{v1} ,
 \end{aligned}
 \tag{1-19}$$

onde:

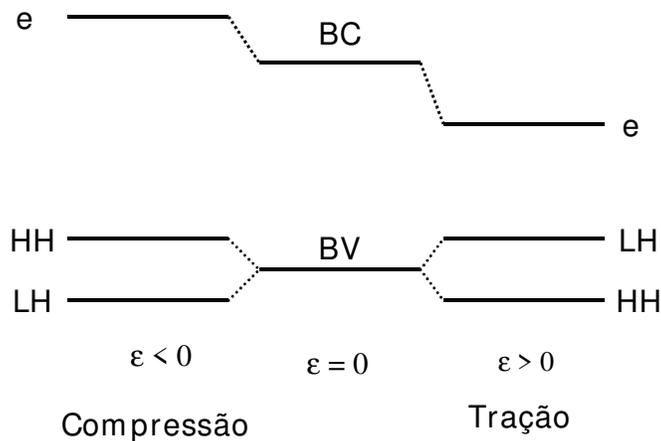
$$\begin{aligned}
 \delta E_c &= 2a(1-\alpha)\varepsilon \\
 \delta E_{v1} &= -b(1+2\alpha)\varepsilon + \frac{2b^2(1+2\alpha)^2}{\Delta_0}\varepsilon^2 , \\
 \delta E_{v2} &= b(1+2\alpha)\varepsilon
 \end{aligned}
 \tag{1-20}$$

Nessas equações,  $\mathbf{a}$  é o potencial de deformação hidrostático,  $\mathbf{b}$  é o potencial de deformação apropriado para a simetria tetragonal.  $\delta E_c$ ,  $\delta E_{v1}$  e  $\delta E_{v2}$  são o deslocamento em energia da banda de condução, da sub-banda de LH e da sub-banda de HH, respectivamente.

### 1.7 Comportamento das bandas em $k = 0$

#### a) Volume

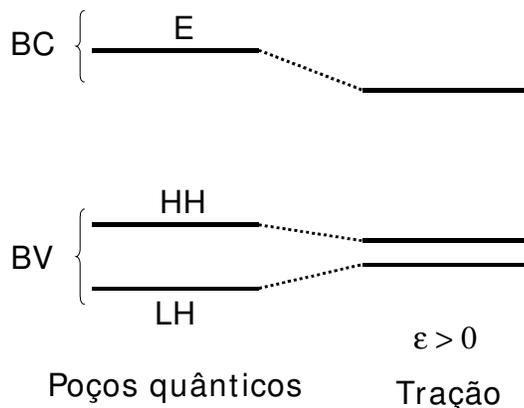
Uma pressão biaxial externa quebra a degenerescência das sub-bandas HH e LH por redução de simetria cúbica para tetragonal. Para a tração, a banda de condução (e) e a banda de buraco pesado (HH) deslocam para baixa energia, enquanto que a banda de buraco leve (LH) desloca para alta energia, como está ilustrado na figura 1-8. Porém, a banda de condução desloca mais do que as bandas de valência. A energia do “gap” diminui e o topo da banda de valência é da banda de buraco leve. Na compressão ocorre o oposto, a energia do “gap” aumenta e o topo da banda de valência é a banda de buraco pesado.



**Figura 1- 8** - *Influência de uma pressão biaxial nas bandas de condução e nas bandas de buraco leve e pesado, bulk.*

b) Poço Quântico

Em poços quânticos, o confinamento espacial em  $z$ , devido a redução de simetria translacional nesta direção, já quebra também a degenerescência das sub-bandas de HH e LH. O deslocamento das bandas com a tração segue o mesmo raciocínio, as bandas de condução e de buraco pesado deslocam para baixas energias e a da banda de buraco leve deslocam para altas energias, veja a figura 1-9. Neste caso, as sub-bandas de HH e LH se aproximam. No caso da compressão, as bandas se afastam e aumenta a energia do “gap” (não está mostrado na figura)



**Figura 1- 9** - *Influência de uma tração biaxial nas bandas de condução e nas sub-bandas de valência de um poço quântico.*

Note que aumentando a tração biaxial em poços quânticos, as sub-bandas de LH e HH em  $k = 0$  se aproximam e podem cruzar. Veremos no capítulo seguinte que na realidade ocorre um anti-cruzamento.

### 1.8 Massa Efetiva

Calculamos também a massa efetiva da subbanda de buraco pesado através das dispersões de energia utilizando a sua definição:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} . \quad (1-21)$$

Basta, portanto, determinar a segunda derivada da dispersão de energia, obtida como resultado do cálculo numérico feito para diagonalizar o hamiltoniano apresentado. Os resultados estão apresentados no capítulo seguinte.

## **Capítulo 2 – Resultados Teóricos**

Neste capítulo, apresentamos os resultados dos cálculos baseados no modelo teórico discutido no capítulo 1. Inicialmente, mostraremos a dispersão de energia  $E(k)$  das subbandas da banda de condução e de valência do poço quântico de GaAs/AlGaAs sem tensão e em seguida em função da tensão. Discutiremos também a energia de transições, a massa efetiva, “gap” indireto, e anti-cruzamento entre subbandas.

### 2.1 Dispersão de energia

#### a) Banda de condução

Para a largura do poço quântico que estamos utilizando,  $\sim 100\text{\AA}$ , e a concentração do alumínio da barreira de  $x = 0,3$ , a banda de condução só tem uma subbanda. A dispersão de energia dessa subbanda é praticamente parabólica nas proximidades de  $k = 0$  (centro da primeira zona de Brillouin), cuja concavidade está relacionada com a massa efetiva do elétron. Essa aproximação é razoavelmente boa já que estamos tratando de recombinação em torno do  $k = 0$ . O que precisamos saber é a massa efetiva do elétron em poços quânticos. A massa efetiva do elétron na aproximação  $k.p$  pode ser expressa por [Yu & Cardona, 1996]:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} \left( 1 + \sum_{u \neq c} \frac{2|\langle c|p|v \rangle|^2}{E_c - E_u} \right), \quad (2-1)$$

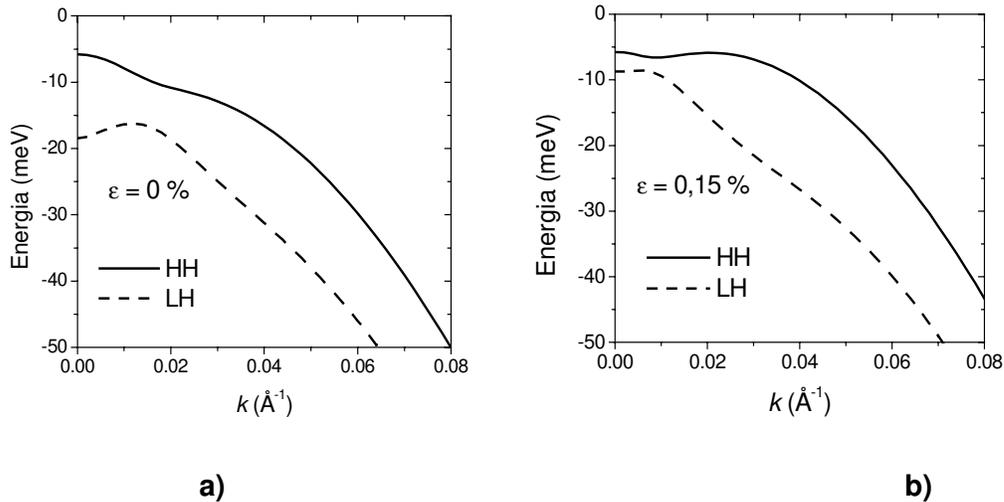
onde  $|\langle c|p|v \rangle|$  é o elemento de matriz do momento linear entre os estados da base em  $k = 0$ ,  $E_c - E_u$  é a diferença de energia entre as bandas envolvidas e  $m_0$  é a massa do elétron livre. Em poços quânticos essa diferença de energia varia com a largura do poço, no entanto, a variação é muito pequena comparada com a energia do “gap” sem o confinamento. No caso do GaAs, a energia do “gap” é de 1,519 eV a 2K e a contribuição do confinamento quântico para o poço quântico de  $100\text{\AA}$  é da ordem de dezenas de milieV, isso corresponde a uma variação menor que 5% na diferença de energia ( $E_c - E_u$ ). Isso significa que a variação da massa efetiva do elétron em poços quânticos é muito

pequena nas nossas amostras, comparada com a massa efetiva do GaAs, sem confinamento quântico.

Baseado ainda na eq. 2-1, podemos considerar que a influência da pressão externa sobre a massa efetiva do elétrons também é pequena. A variação na energia do “gap” com a pressão chega no máximo 30 meV e isso é praticamente desprezível comparado com o valor da energia do “gap” [Pollak, 1991].

Dessa forma, iremos considerar a dispersão da banda de condução como sendo do volume do GaAs e independente da tensão externa, exceto na posição em energia com relação a banda de valência.

b) Banda de valência



**Figura 2-1** – Dispersão de energia da banda de valência de um poço quântico de AlGaAs / GaAs com largura de 115 Å, a)  $\epsilon = 0 \%$  e b)  $\epsilon = 0,15 \%$ .

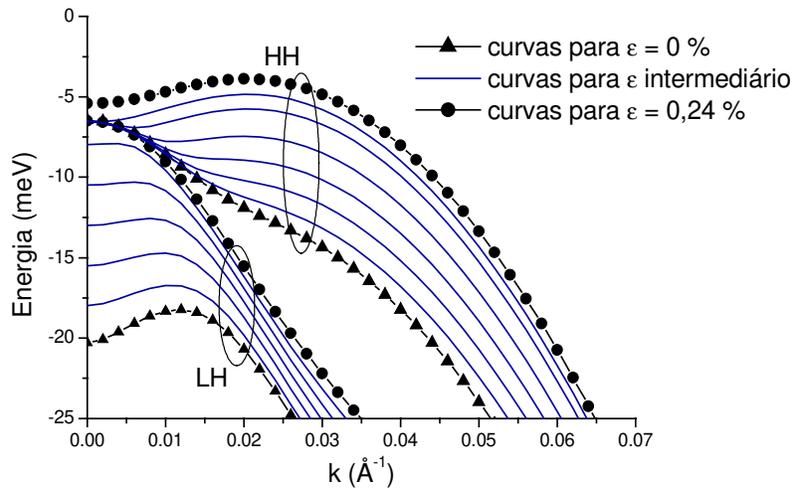
Na figura 2-1a, apresentamos a dispersão de energia calculada para o poço quântico não tensionado,  $\epsilon = 0 \%$ , para os dois primeiros estados da banda de valência: para buraco pesado, HH, e para o buraco leve, LH. A energia de referência é o topo da banda de valência do GaAs sem confinamento quântico. No cálculo, foi utilizado como parâmetro de entrada largura do poço  $L = 115 \text{ \AA}$  e demais parâmetros usamos os valores listados na tabela 1-1 do cap. 1. Realizamos o cálculo para diferentes larguras do poço para comparar com os dados experimentais. O melhor ajuste foi obtido para o valor de  $L = 115 \text{ \AA}$ . Essa largura do poço está muito próxima do valor nominal  $L = 107 \text{ \AA}$  que é aceitável, considerando as aproximações utilizadas no cálculo teórico e na estimativa para

determinar o valor nominal de crescimento. Os demais detalhes da comparação entre os dados teóricos e experimentais serão apresentados nos capítulos seguintes.

A não parabolicidade das bandas é bem clara tanto para a subbanda do buraco pesado como a do buraco leve. No caso da subbanda do buraco leve o máximo fica fora do centro da zona de Brillouin. Isso mostra o forte acoplamento entre essas duas subbandas. A separação das duas subbandas em  $k = 0$  é de 12 meV. A nossa célula de pressão aplica uma tensão suficiente para deslocar as subbandas de energia maiores que esse valor, isto é, suficiente para a subbanda de buraco leve cruzar a subbanda de buraco pesado.

Na figura 2-1b temos as dispersões de energia para  $\varepsilon = 0,15\%$ . A energia de referência, neste caso, é o topo da banda de valência em  $k = 0$  do GaAs sem confinamento, porém tensionado, isto é, topo da banda de buraco pesado que é em  $k = 0$ . Nesse cálculo, incluímos tensão biaxial somente na camada de GaAs. Realizamos cálculo também considerando tensão em todas as camadas e observamos que a mudança no resultado é muito pequena. Importante salientar que no poço quântico tensionado o buraco leve e o buraco pesado ficam sujeitos a diferentes potenciais. Essa diferença foi incluída no cálculo, mas observamos que praticamente ela não tem influência no resultado se considerarmos tensão somente na camada de GaAs ou em ambas camadas, GaAs e AlGaAs.

Podemos notar na figura 2-1b a aproximação entre as duas subbandas em torno do  $k = 0$  e mudança drástica na forma da dispersão. A dispersão da subbanda do buraco pesado forma um ombro em  $k \sim 0,3 \text{ \AA}^{-1}$ . Esse é um efeito de repulsão das bandas e, esse ombro, para pressões maiores, se torna o topo da banda de valência, isto é, banda de “gap” indireto. Discutiremos sobre esse assunto mais adiante. A evolução das dispersões com o aumento da deformação  $\varepsilon$  fica bem claro na figura 2-2 onde estão apresentadas as curvas de dispersão de energia de ambas as subbandas para várias deformações. Enquanto a curva de dispersão da subbanda do buraco leve vai se tornando mais com a forma de “gap” direto, isto é, topo da subbanda em  $k = 0$ , o de buraco pesado se torna com a forma de “gap” indireto.

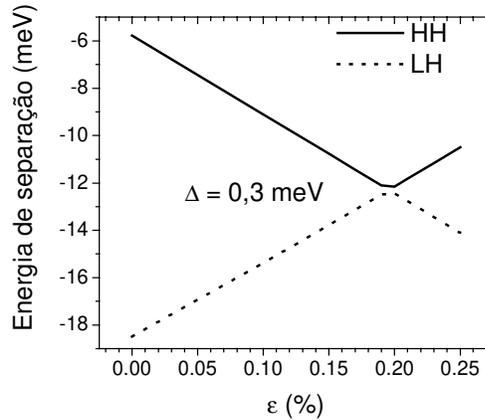


**Figura 2-2** – Dispersão dos estados fundamentais do buraco leve e pesado para várias deformações. Importante salientar que para cada  $\varepsilon$  o referencial de energia,  $E = 0$ , é diferente, como está descrito no texto. A primeira zona de Brillouin tem extremo em  $\pi/a = 0,6 \text{ \AA}^{-1}$ .

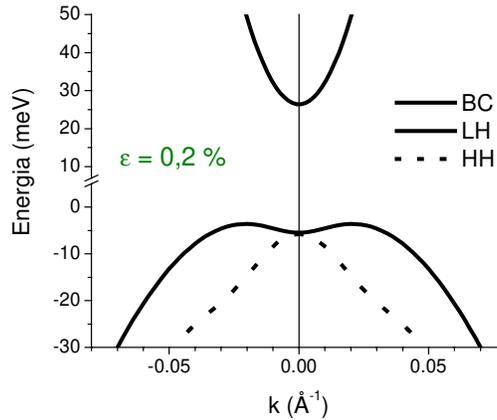
Calculando a dispersão para vários valores de deformação fica evidente o anti-cruzamento entre as duas subbandas. Isso pode ser visualizado nas curvas traçadas da energia de deslocamento das subbandas, em  $k = 0$ , em função da deformação mostradas na figura 2-3. Nessas curvas, a nossa referência é a energia do poço quântico não tensionado (foi feita a correção da tensão em cada dispersão). O deslocamento da subbanda de buraco leve, tem uma dependência quadrática, mas como a deformação é muito pequena ela varia praticamente linearmente, como no caso do buraco pesado. A menor separação entre elas ocorre em  $\varepsilon = 0,2 \%$  com  $\Delta = 0,3 \text{ meV}$ , veja a figura 2-3. Para  $\varepsilon > 0,2 \%$  a sub-banda de maior energia, denominado ainda de buraco pesado, tem caráter de buraco leve, e a de baixa energia o oposto.

Como foi mencionado antes, conforme aumentamos a deformação o topo da banda de valência passa a ser em  $k \neq 0$ , veja a figura 2-4. Isso ocorre em torno do anti-cruzamento entre as duas sub-bandas onde a mistura das bandas é maior. Isso significa que em termos de propriedades ópticas o poço quântico tem a estrutura de banda de “gap” indireto. O ponto máximo da dispersão de energia do buraco pesado ocorre em  $k = 0,02 \text{ \AA}^{-1}$ . Para o poço de  $115 \text{ \AA}$ , verificamos que a transição de “gap” direto para indireto acontece em  $\varepsilon = 0,16 \%$ . A diferença de energia  $\Delta_1$ , entre o máximo da subbanda do

buraco pesado e o seu valor em  $k = 0$ , depende da deformação e da largura do poço. O valor máximo de  $\Delta_I$  para a largura de poço 115 Å é de 1,7 meV e ocorre em  $\varepsilon = 0,2 \%$ .



**Figura 2- 3** –Variação de energia das subbandas de buraco leve e pesado em  $k = 0$  com relação as suas posições do poço quântico sem a tensão. A diferença mínima de energia entre as subbandas em  $k = 0$  é de 0,3 meV.  $L = 115 \text{ Å}$ .



**Figura 2- 4** – Dispersão de energia dos estados fundamentais da subbanda de elétron e das subbandas de buraco pesado e leve para uma deformação de 0,2%, valor para o qual ocorre cruzamento. A sub-banda do buraco pesado apresenta máximo em  $k = \pm 0,02 \text{ Å}^{-1}$ .

Realizamos também cálculos para outras larguras dos poços quânticos. As informações mais relevantes que obtivemos desses cálculos para as três larguras dos poços quânticos, como: a deformação onde ocorre o anti-cruzamento das bandas, transição gap direto / indireto,  $\Delta_I$ , e a deformação  $\varepsilon_I$  onde  $\Delta_I$  é máximo, estão listadas na tabela 2-1. Podemos notar que algumas características em questão, que são

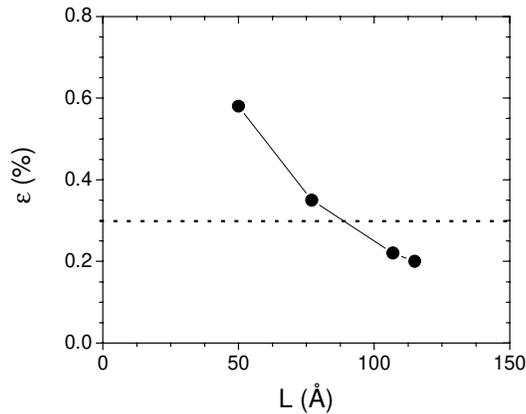
consequências do aumento da mistura das bandas, tornam-se mais acessíveis experimentalmente quando aumentamos a largura do poço quântico, uma vez que o nível de energia em um poço quântico é inversamente proporcional a sua largura.

O valor da deformação para ter o anti-cruzamento é menor quando a largura do poço é maior. A nossa célula de pressão está limitada para deformações de até ~ 0,3 %. Na figura 2-5 apresentamos o gráfico da deformação onde ocorre o anti-cruzamento em função da largura do poço quântico. Baseado nesse gráfico podemos dizer que para observarmos algum efeito de anti-cruzamento utilizando a nossa célula de pressão é necessário que a largura do poço seja maior que 80Å.

Um outro parâmetro importante que está na tabela é o valor de  $\Delta_I$ . O valor é relativamente pequeno e aumenta com a redução da largura do poço quântico. O valor estimado para nossa amostra é 1,7 meV. Veremos no capítulo seguinte que esse valor é da ordem do alargamento de energia, isto é, largura de linha de emissão óptica dos poços quânticos, portanto, isso poderá mascarar a observação da transição “gap” direto-indireto.

L (Å)	Valor de $\epsilon$ no anti-cruzamento das subbandas (%)	Valor de $\epsilon$ da transição de gap direto/indireto (%)	$\Delta_I$ (meV)	$\epsilon_I$ (%)
50	0,58	0,54	2	0,59
77	0,35	0,32	1,8	0,38
107	0,22	0,19	1,7	0,22
115	0,2	0,16	1,7	0,2

**Tabela 2-1** – Propriedades calculadas através das dispersões de energia em função da deformação.  $\Delta_I = E_{HH}(k = k_M) - E_{HH}(k = 0)$ , onde  $E(k)$  é a energia e  $k_M$  é o máximo da subbanda de buraco pesado, respectivamente.



**Figura 2-5** – Gráfico da deformação onde ocorre o anti-cruzamento em função da largura do poço quântico.

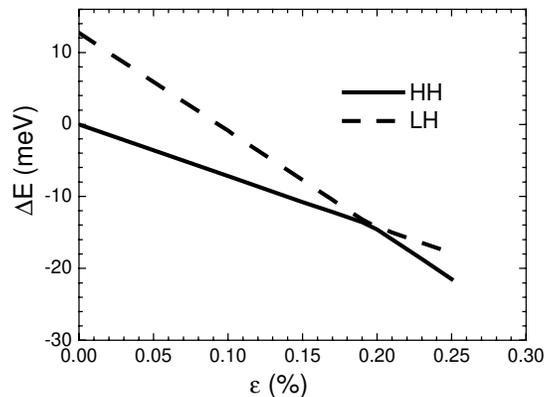
## 2.2 Energia de Transição

Conhecendo então as dispersões de energia tanto da banda de condução como de valência podemos calcular as energias das transições que podem ser observadas nas medidas de fotoluminescência e fotoluminescência de excitação (relacionada com a medida de absorção). Por medidas de fotoluminescência, que será tratado no capítulo seguinte, observamos a transição do estado de menor energia do par elétron-buraco. Por causa da interação Coulombiana entre o par, forma-se um estado ligado de menor energia, tipo hidrogenóide, conhecido como éxciton [Bastard, 1992]. A energia de ligação do éxciton em GaAs é da ordem de 5 meV. Essa energia cresce em poços quânticos por causa do efeito de confinamento. Para poços quânticos de GaAs/AlGaAs, dependendo da altura da barreira, a energia de ligação pode chegar quase perto de 10 meV para uma largura do poço quântico de 100Å [Bastard, 1992]. A recombinação do éxciton em poços quânticos, por exemplo, de GaAs/AlGaAs a baixas temperaturas é devido ao elétron e ao buraco pesado do estado fundamental, pois a subbanda do buraco pesado fica no topo da banda de valência. As nossas medidas foram realizadas a 2K, cujo  $k_B T$  é bem menor do que a energia de ligação do éxciton, que é  $\sim 8$  meV (para o nosso poço quântico de  $\sim 100\text{Å}$ ), e também é menor do que a separação de energia entre as subbandas do buraco pesado e buraco leve, que é de  $\sim 12$  meV.

Nas medidas de absorção é possível observar transições de éxcitons associados tanto a buraco pesado como a buraco leve. A energia de ligação dos dois tipos de éxcitons é muito próxima para o poço de 100Å [Bastard, 1992]. Para os nossos cálculos iremos portanto considerar que elas são iguais. Assumindo isso, a separação dos picos de absorção desses dois tipos de éxcitons podemos tirar diretamente a separação de energia entre as subbandas de buraco pesado e de buraco leve em torno do  $k = 0$  se as bandas são de “gap” direto.

Como o cálculo do éxciton é mais complexo quando introduzimos a tensão e a banda de valência mais realística, trataremos aqui somente da transição do par elétron-buraco sem considerar a interação Coulombiana.

Na figura 2-6 apresentamos o gráfico da variação das energias das transições do par elétron-buraco envolvendo as subbandas dos estados fundamentais do buraco pesado e buraco leve em função da deformação.



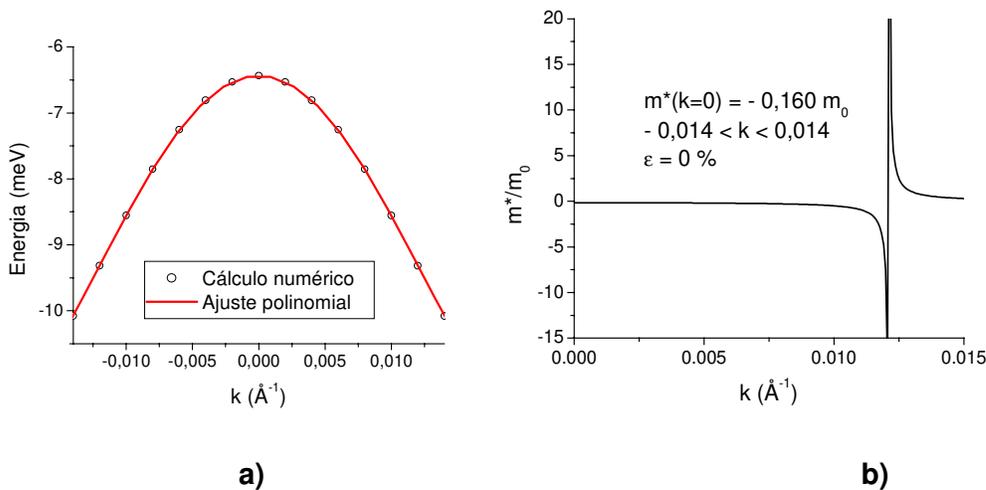
**Figura 2-6** – Variação da energia das transições em função da deformação. O anti-cruzamento das bandas ocorre em  $\epsilon = 0,2\%$ .  $L = 115 \text{ \AA}$ .

Como era esperado, a energia da transição do elétron com o buraco leve,  $E_{e-LH}$ , diminui mais rapidamente do que a do buraco pesado,  $E_{e-HH}$ . Vemos novamente que o anti-cruzamento ocorre para  $\epsilon = 0,2\%$ . Temos que  $E_{e-LH} = E_{LH}$  (energia de confinamento do estado fundamental do LH no poço) +  $E_G$  (energia do gap do GaAs) +  $E_e$  (energia de confinamento do estado fundamental do elétron no poço), e  $E_{e-HH} = E_{HH} + E_G + E_e$  para o buraco pesado. A energia do gap,  $E_G$ , é o termo que mais varia com a tensão, as energias de confinamento, tanto do elétron como do buraco, variam muito pouco, pois a

profundidade do poço para esses portadores permanece praticamente constante porque tanto GaAs como AlGaAs tem os valores dos parâmetros muito similares.

### 2.3 Massa Efetiva

Calculamos também a massa efetiva do elétron da banda de valência (que é igual a massa do buraco com sinal oposto) em torno do  $k = 0$ , a partir das dispersões de energia utilizando a sua definição, eq. 1-18. Para obtermos a segunda derivada da energia, ajustamos os pontos calculados da dispersão por um polinômio, de grau 4 ou 5, como está mostrado na figura 2-7a. O grau do polinômio foi otimizado para cada conjunto de pontos e escolhemos um intervalo conveniente para cada dispersão. Na figura 2-7b podemos observar como a massa efetiva correspondente a subbanda de buraco pesado do estado fundamental varia em função do vetor de onda  $k$  para  $\varepsilon = 0$ . Como a segunda derivada está relacionada com a curvatura da dispersão e a concavidade está voltada para baixo em torno de  $k = 0$  o valor da massa efetiva é negativa. Aumentando o vetor de onda  $k$  a concavidade inverte e teremos uma singularidade no ponto de inversão em  $k_0 = 0,012 \text{ \AA}^{-1}$ , como está mostrada na figura. A segunda derivada se torna zero nesse ponto de inversão e assim a massa efetiva tende para  $-\infty$  quando aumenta o  $k$  e  $+\infty$  quando diminui o  $k$  tendendo para o ponto de inversão.

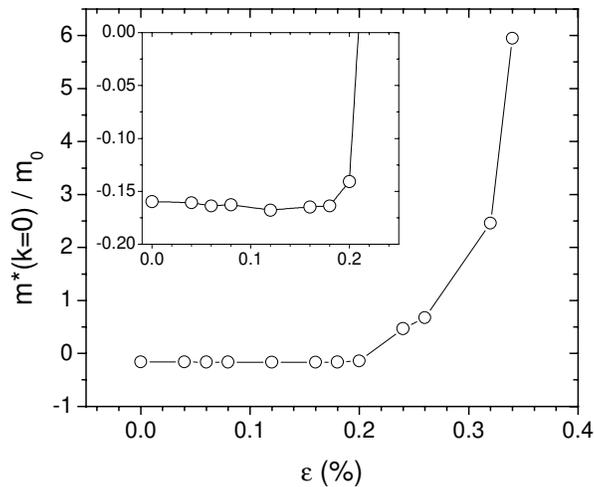


**Figura 2-7** – a) Pontos calculados para a dispersão e o ajuste polinomial pelo polinômio  $y(x) = -6.433 + 9.33 \times 10^{-6} - 23939 x^2 - 0.356 x^3 + 2.718 x^4 \cdot 10^7$ . b) Massa efetiva da subbanda do buraco

*pesado dividida pela massa de repouso do elétron,  $m_0$ , em função do vetor de onda  $k$ , poço quântico não tensionado.*

Da mesma forma, calculamos a massa efetiva do estado fundamental em  $k = 0$  para vários valores de deformação biaxial  $\varepsilon$ , que está mostrada no gráfico da figura 2-8. Notamos que o módulo da massa efetiva tem um valor aproximadamente constante,  $(0,165 \pm 0,005)m_0$ , para deformação  $\varepsilon < 0,19$  %. Para  $\varepsilon$  acima desse valor, a massa efetiva diminui em módulo e inverte de sinal, por causa da inversão da curvatura, e depois aumenta bruscamente. Isso porque na região de anti-cruzamento a dispersão de energia apresenta o máximo fora do centro da zona.

Apresentamos a massa efetiva da banda de valência nessa dissertação, porém não realizamos nenhuma medida desse parâmetro.



**Figura 2-8** – Valores da massa efetiva da subbanda de buraco pesado no estado fundamental em  $k = 0$ , calculados a partir das dispersões de energia em função da deformação. Ampliação da região para  $\varepsilon < 0,22$  %

## Capítulo 3 – Montagem Experimental e Amostras

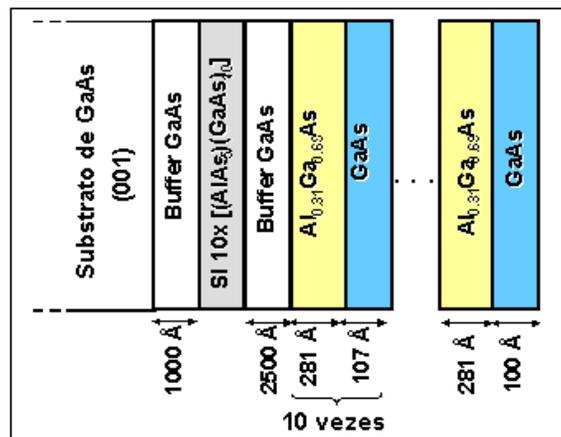
Neste capítulo estão descritos em detalhe as informações sobre amostras, célula de pressão, técnicas de medidas utilizadas e a montagem experimental.

### 3.1 Amostras

Para esse projeto foram preparadas uma série de amostras de poços quânticos de GaAs/AlGaAs crescidas por MBE (“molecular beam epitaxy”) na Universidade de São Paulo, pelo Prof. A. A. Quivy. O conjunto de 3 amostras estudado aqui consiste de multipoços, no total de 10, de GaAs/AlGaAs com diferentes larguras de poço da barreira e estão listados a tabela 3-1.

Amostra #	Esp. GaAs (Å)	ESP. $Al_xGa_{1-x}As$ (Å)	X da liga (%)
2371	77	294	30,8
2372	107	281	30,8
2373	146	285	30,2

**Tabela 3-1** – Valores nominais da espessura do poço e da barreira e da concentração de Al da liga de AlGaAs das amostras utilizadas.



**Figura 3-1** – Estrutura da amostra de poço quântico com largura  $L = 107 \text{ \AA}$  (#2372).

Um esquema da estrutura das amostras, com as diferentes camadas crescidas, está ilustrado na figura 3-1. A estrutura foi crescida sobre o substrato de GaAs(001). Inicialmente uma camada espessa de GaAs foi crescida sobre o substrato e

acompanhada de super-rede de (AlAs)(GaAs). Estas camadas servem de bloqueadores de difusão de impurezas provenientes do substrato. Em seguida, segue uma outra camada espessa de GaAs, que é uma camada importante para a nossa experiência, pois foi utilizada como sensor de deformação (tensão) da amostra, como mostraremos adiante. E por último o multi-poços que GaAs/AlGaAs e coberta com a camada fina de 10 nm de GaAs.

Podemos notar que a espessura total das camadas de multi-poços quânticos é da ordem de 4300 Å e a camada de GaAs utilizada como sensor de deformação fica muito próximo dessa estrutura. Portanto, a variação de deformação entre eles deve ser pequena se levarmos em consideração a espessura do substrato que é de aproximadamente 550 µm, ou seja, cerca de 1300 vezes maior. A forma como é aplicada a tensão sobre o filme depende da espessura do substrato como veremos a seguir.

### 3.2 Célula de Pressão Biaxial

O funcionamento da célula de pressão é baseada na deformação de uma placa fina quando ela é colocada entre um anel e uma esfera, como já foi mencionado no cap. 1. Quando deslocamos a esfera contra a amostra no sentido do anel a placa deforma elasticamente, como está mostrado na figura 1-5a e b. Essa deformação faz com que as regiões próximas as duas superfícies tenham respectivamente tração e compressão biaxial no plano da placa. A região central do anel, ou no ponto de contato da esfera, a tensão biaxial é máxima e simétrica.

As heteroestruturas, como poços quânticos, são filmes finos cuja espessura é bem menor do que a do substrato. No geral, o substrato é da ordem de centenas de microns e os filmes da ordem de centenas de nm. Na realidade, para aplicar pressão biaxial, utilizando esse princípio, é necessário que a espessura da amostra seja bem maior do que a região a ser analisada. Caso contrário, o gradiente de tensão biaxial ao longo da direção perpendicular ao plano da amostra (placa) poderá influenciar na medida.

Para conseguirmos essa pressão biaxial na amostra, utilizamos uma célula de pressão projetada e construída pelo Prof. Fernando Iikawa, nos laboratórios do GPO, veja as imagens de fotografia da célula na figura 3-2. A figura da esquerda mostra a esfera, cujo diâmetro é 5 mm. Ela é deslocada através das engrenagens girando a barra fina que

aparece na fotografia. O deslocamento é da ordem de 8 micros por volta. A fotografia da direita mostra o anel com diâmetro de 8 mm e os grampos para segurar a amostra. Essa célula foi projetada para ser utilizada no criostato de imersão de He para realizar medidas ópticas. Como somente a superfície da amostra do lado do anel está voltada para fora, só podemos realizar medidas com a aplicação da tração biaxial. Não temos acesso para medidas com compressão biaxial, que fica do lado da esfera. A deformação que pode ser obtida com essa célula é da ordem de 0,3% para compostos de GaAs e InP.



**Figura 3-2** – Fotografia da célula de pressão biaxial. Lado esquerdo, mostra a esfera e uma barra fina que gira para deslocar a esfera. Do lado direito, mostra o suporte de amostra onde contém o anel e os grampos para prender a amostra.

Para coletar a luminescência do centro da amostra colocamos uma máscara sobre a amostra com um furo circular de 1mm de diâmetro. As medidas foram feitas em função do número de voltas, onde cada volta corresponde a um deslocamento de aproximadamente 8  $\mu\text{m}$  da esfera. As tensões foram determinadas a partir da variação de energia dos picos de luminescência da camada espessa de GaAs. Como conhecemos os parâmetros, tais como constantes elásticas e os potenciais de deformação desse material, substituímos na expressão da variação da energia do “gap” em função da tensão biaxial para determinar a tensão correspondente.

### 3.3 Técnicas Experimentais

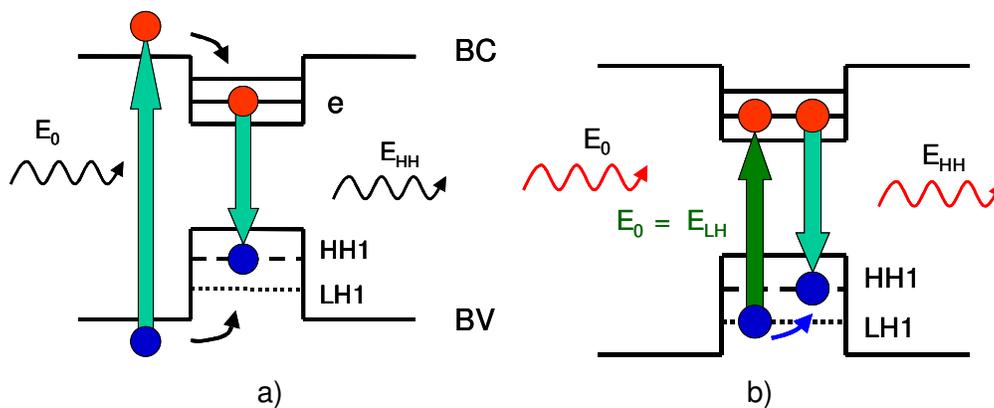
As técnicas experimentais utilizadas foram as de fotoluminescência (PL – “photoluminescence”) e de fotoluminescência de excitação (PLE – “photoluminescence excitation”). Em ambas as técnicas detectamos a luminescência da amostra, mas o que difere entre elas é a fonte de excitação que é fixa (comprimento de onda) na PL e variável na PLE. Na figura 3.3-a e b estão ilustrados todos processos em uma medida de fotoluminescência: absorção da luz, relaxação dos portadores e a recombinação. Na técnica de PL, a energia do fóton incidente, no geral, de um laser, que gera os portadores na absorção, é maior do que a de recombinação. Essa energia do fóton incidente é mantida constante e a luminescência é analisada fazendo a varredura em comprimento de onda. A relaxação dos portadores mais eficiente é via espalhamento com fônons, tanto acústicos como ópticos. O último só é possível quando a energia dos portadores é maior ou igual a energia do fônon óptico. O tempo de espalhamento dos portadores com os fônons é da ordem de alguns pico-segundos e a recombinação é da ordem de centenas de pico-segundos, portanto, é mais fácil relaxar emitindo fônons do que fótons. Por essa razão observamos luminescência somente do estado de menor energia a baixas temperaturas. Naturalmente, a altas temperaturas, onde a energia térmica é suficiente para manter a população dos estados excitados é que observamos a luminescência também dos estados excitados.

A intensidade de luminescência pode ser resumida pela equação abaixo:

$$I_{PL}(\hbar\omega) \sim \sum_{\vec{k}} |\langle c | \vec{p} | v \rangle|^2 f_{c,\vec{k}} \cdot (1 - f_{v,\vec{k}}) \cdot \mathcal{D}(E_{\vec{k}} - \hbar\omega) \quad (3-1)$$

onde  $|\langle c | \vec{p} | v \rangle|$  é o elemento de matriz do momento linear,  $|c\rangle$  e  $|v\rangle$  são o produto da função envelope e das funções periódicas de Bloch da banda de condução e da valência, respectivamente,  $f_{c,k}$  e  $f_{v,k}$  são funções de distribuição de ocupação de elétrons na banda de condução e de valência, respectivamente, e o último termo é a densidade de estados. A somatória é feita sobre todos os estados  $k$  satisfazendo a conservação do vetor de onda,  $k_c = k_v \sim 0$ , onde  $k_c$  e  $k_v$  são vetores de onda do elétron da banda de condução e de valência, respectivamente. A intensidade de emissão, portanto, depende da ocupação (número de portadores) próximo ao extremo das bandas e também do termo que chamamos de força do oscilador, que é proporcional ao quadrado do módulo do elemento de matriz do momento linear. Este último depende do tipo de banda envolvida na transição, se é a banda de buraco leve ou pesado. A força do oscilador é maior para o buraco pesado, por um fator 3, do que para o buraco leve, [Yu & Cardona, 1996].

No caso da técnica de PLE, é feita a varredura na energia do fóton incidente (comprimento de onda do laser variável) e a detecção é mantida em um comprimento de onda fixo onde ocorre o pico de luminescência. A varredura do comprimento de onda do laser é feita na região espectral interessada, mas a energia do fóton deve ser maior do que a energia do fóton de recombinação. Quando a energia do fóton incidente entra em ressonância com uma transição dos estados excitados (como no caso da absorção do éxciton de buraco leve ilustrada na figura 3.4-b) aumenta a população de portadores fotocriados, conseqüentemente, aumenta a luminescência do estado fundamental onde está sendo detectado. No caso de poços quânticos, o espectro de PLE apresenta picos devido a absorção de éxcitons de elétrons e de buracos de estados excitados. Esse espectro, portanto, reflete o espectro de coeficiente de absorção, porém não é exatamente o mesmo, pois a detecção é feita somente em uma determinada região da amostra.



**Figura 3-3** – Ilustração esquemática dos processos que ocorrem em medida de fotoluminescência em poços quânticos. a) energia do fóton incidente é maior do que a do “gap” da barreira; b) ilustra a ressonância na absorção com a transição do éxciton do buraco leve. A recombinação em ambas as figuras é devido ao éxciton de buraco pesado.

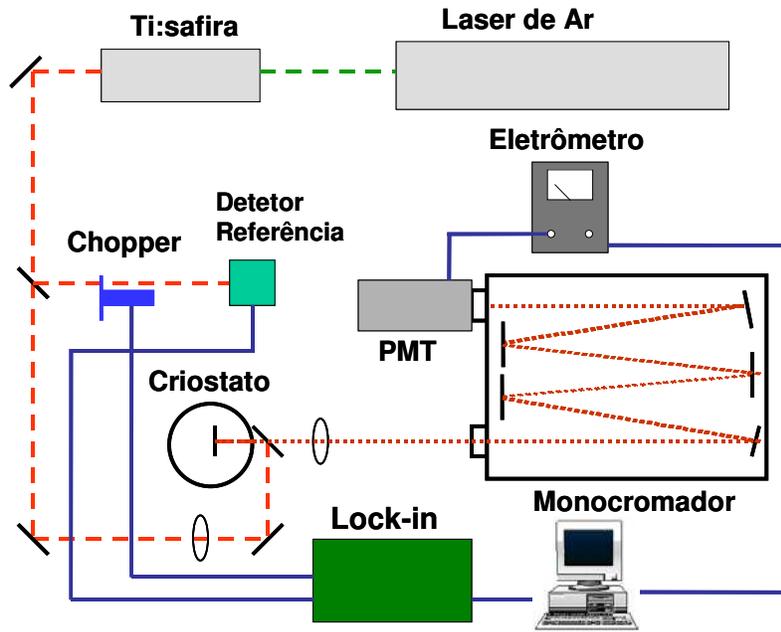
### 3.4 Montagem Experimental

A figura 3-4 mostra uma ilustração esquemática da montagem experimental utilizada que vale tanto para PL como PLE. Como fonte de excitação utilizamos o laser de Ti-safira, que é bombeado por um laser de argônio de alta potência. O laser de Ti-Safira emite na região espectral infra-vermelho próximo (0,7 a 1,1 microns). O feixe é conduzido até a amostra por conjunto de espelhos e lentes. A amostra colocada na célula de

pressão fica submersa no He superfluido,  $T = 2\text{K}$ , em um criostato. A luminescência é focalizada por uma lente convergente ao monocromador duplo (com grade de 1200 linhas/mm) e a sua intensidade é medida por uma fotomultiplicadora de GaAs. Essa fotomultiplicadora tem uma boa eficiência de detecção na faixa de 0,4 a 0,95 microns de comprimento de onda. As nossas amostras tem emissão óptica nessa faixa espectral. O sinal da fotomultiplicadora é amplificada por um eletrômetro e depois armazenada no computador.

Na medida de PLE, fixamos o monocromador na posição do pico de luminescência e variamos o comprimento de onda do laser de Ti-Safira. A variação do comprimento de onda é feita variando a posição do microdeslocador que é sempre calibrado após o alinhamento. O posicionamento do microdeslocador é feito por um motor de passo que é controlado pelo computador. Como a intensidade do laser varia com o comprimento de onda, uma parte do feixe do laser é desviado antes de chegar no criostato e medido por um detector fotoacústico. Este detector é um corpo negro que tem a detecção constante independente do comprimento de onda, pelo menos na região espectral visível e infravermelho próximo. O sinal do detector é amplificado por um amplificador Lock-in e em seguida enviado para o computador. O sinal de PLE é, portanto, normalizado com essa intensidade do laser fazendo simplesmente a razão entre o sinal de PLE e do detector fotoacústico.

Todas as medidas foram realizadas a temperatura de 2 K, temperatura do hélio líquido superfluido, baixa o suficiente para que os éxcitons não sejam ionizados termicamente, assumindo que a energia de ligação do éxciton é maior do que 5 meV em poços quânticos de GaAs. A célula de pressão com a amostra, imersa no He líquido, era controlada externamente via uma barra fina para girar as engrenagens da célula.



**Figura 3- 4** – Ilustração da montagem experimental utilizada para realizar medidas de PL e PLE.

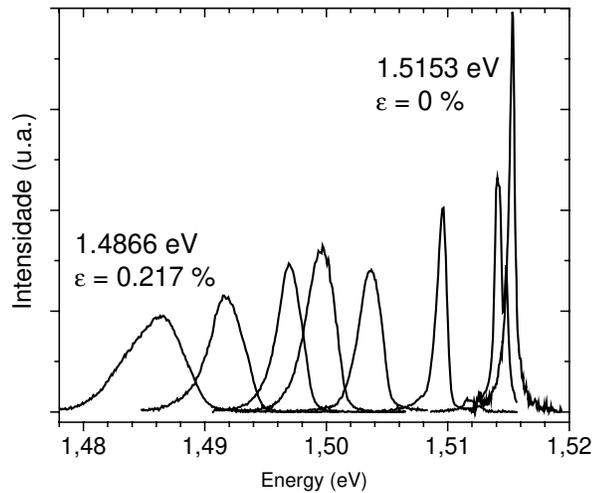
## **Capítulo 4 - Resultados Experimentais e Análise**

Nesse capítulo, apresentaremos os principais resultados experimentais de medidas de PL e PLE dos poços quânticos de GaAs/AlGaAs e as análises desses dados comparando com os resultados dos cálculos teóricos descritos no cap. 2. No cap. 3 apresentamos o conjunto de amostras utilizadas no trabalho. Realizamos medidas de PL e PLE nas amostras #2371 (poços quânticos de 77Å) e #2373 (146Å), porém durante as medidas com pressão uma das amostras quebrou antes de terminar as medidas sistemáticas de PL e PLE em função desta pressão. A outra amostra não apresentou resultados satisfatórios. Como os dados estão incompletos e não acrescentam nenhuma informação relevante, decidimos apresentar, nessa dissertação, somente os dados da amostra #2372 (poços quânticos de 107Å). As medidas nas amostras #2371 e #2373 foram importantes para aprender a operar com a célula de pressão e realizar medidas ópticas a baixas temperaturas.

Na seção seguinte, estão descritos os detalhes das medidas de deformação através da camada de GaAs, em seguida, a discussão sobre a origem do alargamento da linha de emissão óptica que aumenta com a tensão. As últimas seções apresentam os dados de PL e PLE dos poços quânticos em função da pressão externa e suas análises.

### 4.1 Medida de deformação

Inicialmente apresentaremos os espectros de fotoluminescência proveniente da camada de GaAs da amostra #2372 mencionada no cap. 3, que está próximo aos poços quânticos, para determinar a deformação em cada medida. Para cada pressão aplicada realizamos medidas de PL e PLE dos poços quânticos e também PL dessa camada de GaAs. Os espectros PL de GaAs estão mostrados na figura 4-1.



**Figura 4-1** – Espectros de fotoluminescência da camada de GaAs. Para cada pico determinamos a deformação  $\varepsilon$  correspondente a partir da equação teórica. Estão mostrados nos espectros os valores de energia do pico e da deformação do primeiro e do último espectro.

Podemos observar o deslocamento dos picos de emissão do GaAs para menor energia com o aumento da deformação  $\varepsilon$ . Esse comportamento já era esperado baseado na análise teórica descrita no cap. 2. Como estamos aplicando uma tração biaxial em GaAs, sem confinamento quântico, a energia do “gap” do material se torna menor conforme aumentamos a deformação. A linha de emissão é atribuída a recombinação do éxciton ligado a impureza rasa, cujo tipo de impureza não é identificado. O éxciton é associado ao buraco leve para a amostra com tração biaxial, como já foi mencionado antes. Sem a tensão, o éxciton tem o caráter do buraco pesado, apesar de ser degenerado. A redução na intensidade está exatamente relacionada com a diferença na força do oscilador entre a transição envolvendo o buraco pesado e leve. Vimos no cap. 3 que a força do oscilador associado ao buraco leve é menor, por um fator 3, do que o associado ao buraco pesado, resultando em uma menor intensidade da radiação emitida. Por isso há uma redução significativa na intensidade da linha de emissão do GaAs nos primeiros momentos em que tensão é aplicada.

Observamos também um alargamento da linha de luminescência conforme aumentamos a tensão. As possíveis origens desse alargamento na linha de emissão estão descritas na seção seguinte.

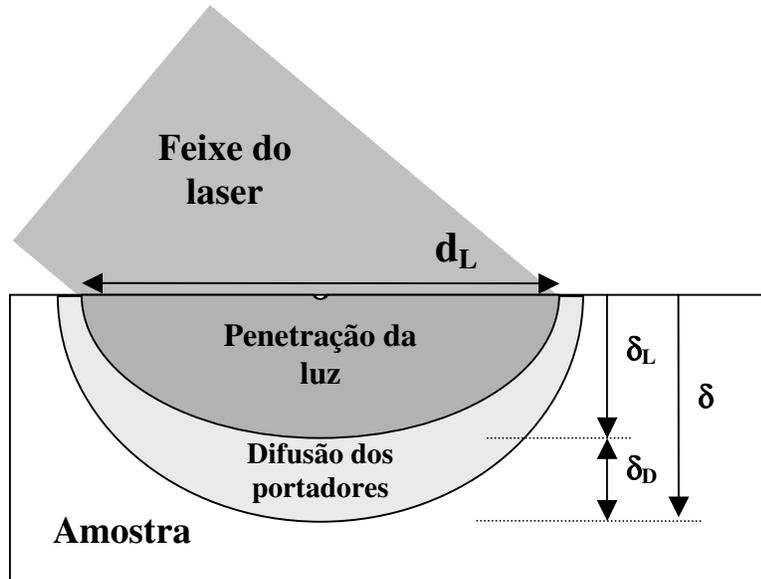
## 4.2 Alargamento de energia devido ao gradiente de tensão.

O alargamento da linha de luminescência, no geral, é devido a diferentes espalhamentos dos portadores envolvidos durante a recombinação, como por exemplo, espalhamento com fônons, impurezas e também entre portadores. O espalhamento com fônons depende da temperatura, pois a sua população aumenta quando aumenta a temperatura. No caso da impureza, também depende da temperatura, que pode estar neutro ou ionizado. Essas contribuições devem ser desprezíveis nos nossos dados, porque as medidas foram realizadas a baixa temperatura e esta foi mantida constante e a densidade de impureza residual também é baixa ( $< 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ), portanto, não iria mudar com a tensão. No caso do espalhamento entre portadores também deve ser desprezível pois as experiências foram realizadas a baixas intensidades de excitação.

Uma possível origem do alargamento de energia observado nos nossos dados, sem ser por espalhamento, é o gradiente da tensão ao longo da profundidade da amostra e também ao longo do plano da camada que provocaria gradiente na energia do “gap”. O feixe do laser tem uma penetração no material que depende do coeficiente de absorção. A emissão óptica proveniente de regiões iluminadas pelo feixe do laser com energias do “gap” diferentes resultaria naturalmente em uma linha de emissão mais larga. Esse alargamento em energia pode ser estimado utilizando as equações deduzidas para a deformação em função da profundidade e do raio no cap. 1.

Calculamos então a variação da deformação com a profundidade  $\delta$ , no eixo  $z$ , e do raio  $r$  na lateral no plano das camadas da amostra. A deformação é máxima quando  $z = h/2$  e diminui conforme reduzimos  $z$ , de acordo com a eq. 1-8. Na direção do plano da superfície, a deformação é máxima no centro,  $r = 0$ , e diminui quando aumenta o  $r$ , além disso, eq. 1-6, a tensão biaxial se torna assimétrica. Podemos estimar a variação da deformação nas duas direções,  $z$  e  $r$ , a partir das equações 1-6 e 1-8. Conhecendo a variação de deformação podemos estimar a variação da energia do “gap”.

Vamos determinar aqui somente casos extremos, isto é, a diferença de energia do “gap” no centro e na borda do feixe do laser na superfície da amostra e a diferença de energia do “gap” na superfície e na região interna em uma profundidade  $\delta$  onde ocorre efetivamente a recombinação do par elétron-buraco. Apresentamos na figura 4-2 um esquema ilustrativo (escala exagerada) da penetração da luz e da difusão dos portadores para facilitar visualização da região analisada por PL.



**Figura 4-2** – Ilustração da penetração da luz e da difusão dos portadores na amostra. A área mais escura na amostra está representando a penetração da luz e a área menos escura, região onde ocorre a difusão dos portadores.

O comprimento médio de penetração da luz  $\delta_L$  pode ser estimado através do coeficiente de absorção. Quando a luz penetra exatamente o inverso deste coeficiente a sua intensidade reduz para  $\sim 30\%$ . Esse número, portanto, dá a ordem de grandeza da penetração média da luz. O comprimento de onda do laser  $\delta_L$  utilizado para a medida de PL da camada de GaAs foi de  $7200 \text{ \AA}$ , o que corresponde a um coeficiente de absorção de  $\sim 2 \times 10^4 / \text{cm}$  [Landolt – Börnstein, 1982]. A penetração da luz neste caso é  $\sim 0,5 \text{ \mu m}$ . O comprimento de difusão dos portadores é mais complicado para estimar, pois depende das características da amostra. A difusão dos elétrons é bem maior do que a do buraco, porém para ter a recombinação é necessário ter ambos os portadores, portanto quem irá efetivamente determinar a região onde ocorre a recombinação é então a difusão dos buracos. Baseado nos dados da literatura [Swaminathan & Macrander, 1991], na média a difusão de buracos é da ordem de  $2 \text{ \mu m}$  a  $2 \text{ K}$ . No total, então, a profundidade da região onde ocorre a emissão óptica na camada de GaAs é no total  $\delta = 2,5 \text{ \mu m}$ . Na lateral, como o diâmetro do feixe do laser é bem maior do que a difusão dos portadores, o diâmetro lateral da região onde tem a emissão é portanto igual ao próprio valor do tamanho do feixe que é  $d_L \sim 0,5 \text{ mm}$ . Usaremos ainda  $\epsilon = 0,217 \%$ , que foi a deformação máxima obtida.

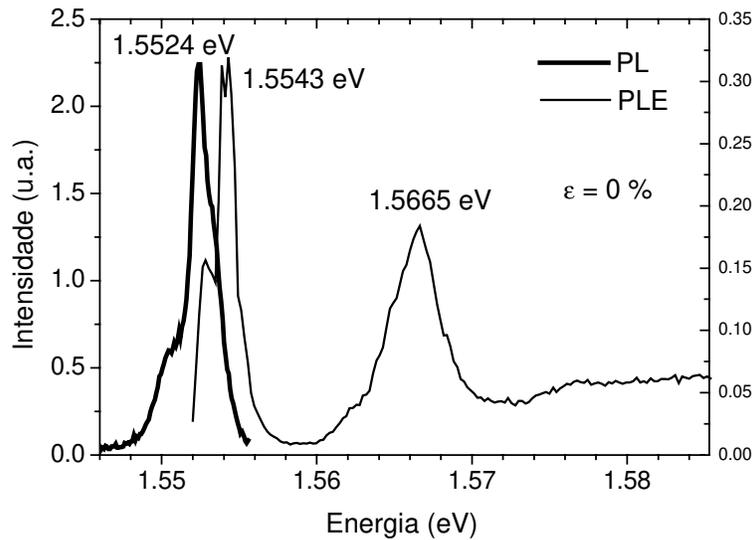
Substituindo esses valores na expressão da deformação em função do desvio lateral, eq. 1-6, calculando a diferença de energia entre  $r = 0$  e  $r = 0,5$  mm, e da profundidade, eq. 1-8, calculando para  $z = h$  e  $h - 2,5 \mu\text{m}$  e para os valores dos parâmetros do GaAs, dados no cap. 1, obtemos a variação de deformação para  $\varepsilon = 2,2 \times 10^{-3}$ :

- i) Na profundidade:  $\Delta\varepsilon = |\varepsilon(h/2-\delta) - \varepsilon(h/2)| = 1,8 \times 10^{-5}$ , isso corresponde a  $\Delta\varepsilon/\varepsilon = 0,82\%$  e a variação de energia de  $\Delta E_{LH} = |E(\varepsilon-\Delta\varepsilon) - E(\varepsilon)| = 0,25$  meV.
- ii) Na lateral:  $= |\varepsilon(h/2-\delta) - \varepsilon(h/2)| = 3,4 \times 10^{-5}$ , isso corresponde a  $\Delta\varepsilon/\varepsilon = 1,6\%$  e a variação de energia de  $\Delta E_{LH} = |E(\varepsilon-\Delta\varepsilon) - E(\varepsilon)| = 0,5$  meV.

Os valores obtidos para a variação de deformação são pequenos e não explicam quantitativamente o alargamento verificado nos espectros PL. Essa discordância entre os valores calculados e os valores obtidos experimentalmente pode ser devido à equação deduzida no cap. 1 do perfil de deflexão da placa, eq. 1-3, não corresponder a deflexão real da placa em função do raio  $r$ . É necessário, portanto, um estudo mais detalhado sobre o perfil da deformação.

### 4.3 Espectros PL e PLE do poço quântico

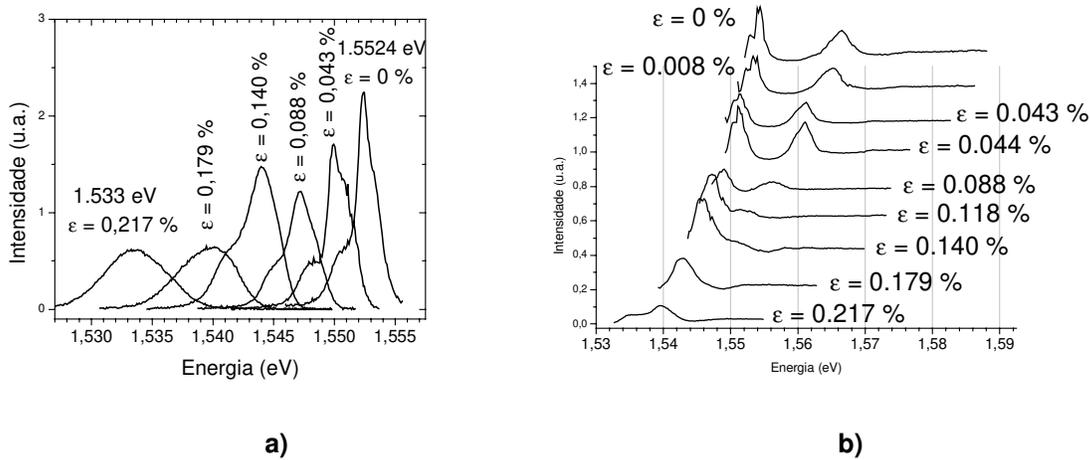
Na figura 4-3 estão apresentados os espectros de PL e PLE do poço quântico de  $107 \text{ \AA}$  sem tensão. O espectro de PL apresenta um pico forte e vários ombros, que no total podemos identificar como 3 linhas de emissão superpostas. A presença de várias linhas de emissão é atribuída à rugosidade das interfaces e a flutuação na largura dos diferentes poços da amostra. A largura de linha total do conjunto é de  $\sim 2$  meV, porém cada uma das linhas tem a largura da ordem de 1 meV. Esses picos são atribuídos a recombinação dos éxcitons do poço quântico associados a buracos pesados. O espectro de PLE apresenta dois fortes picos separados de  $12,2$  meV. Esses picos são atribuídos, respectivamente, a absorção óptica de éxcitons associados a buracos pesados e leves.



**Figura 4-3 – a)** Espectros de PL (largura de linha  $\Delta = 2$  meV) e PLE ( $\Delta = 1$  e  $\Delta = 3$  meV para o primeiro e segundo picos, respectivamente) do poço quântico não tensionado.

O pico de menor energia do espectro de PLE, que é do éxciton de buraco pesado, apresenta também um ombro que está relacionado também com a rugosidade das interfaces e a flutuação da largura dos poços. Não apresentamos aqui os espectros para energias maiores, pois estamos interessados na estrutura de banda na região do estado fundamental.

A diferença entre o pico de emissão e absorção do éxciton do estado fundamental, conhecida como “Stokes *shift*”, é de  $\sim 2$  meV, que é igual a da largura de linha total do PL. Essa diferença é pequena e isso mostra que a amostra é de boa qualidade. Essa diferença é atribuída ao efeito de localização proveniente da rugosidade das interfaces e das inhomogeneidade dos poços.



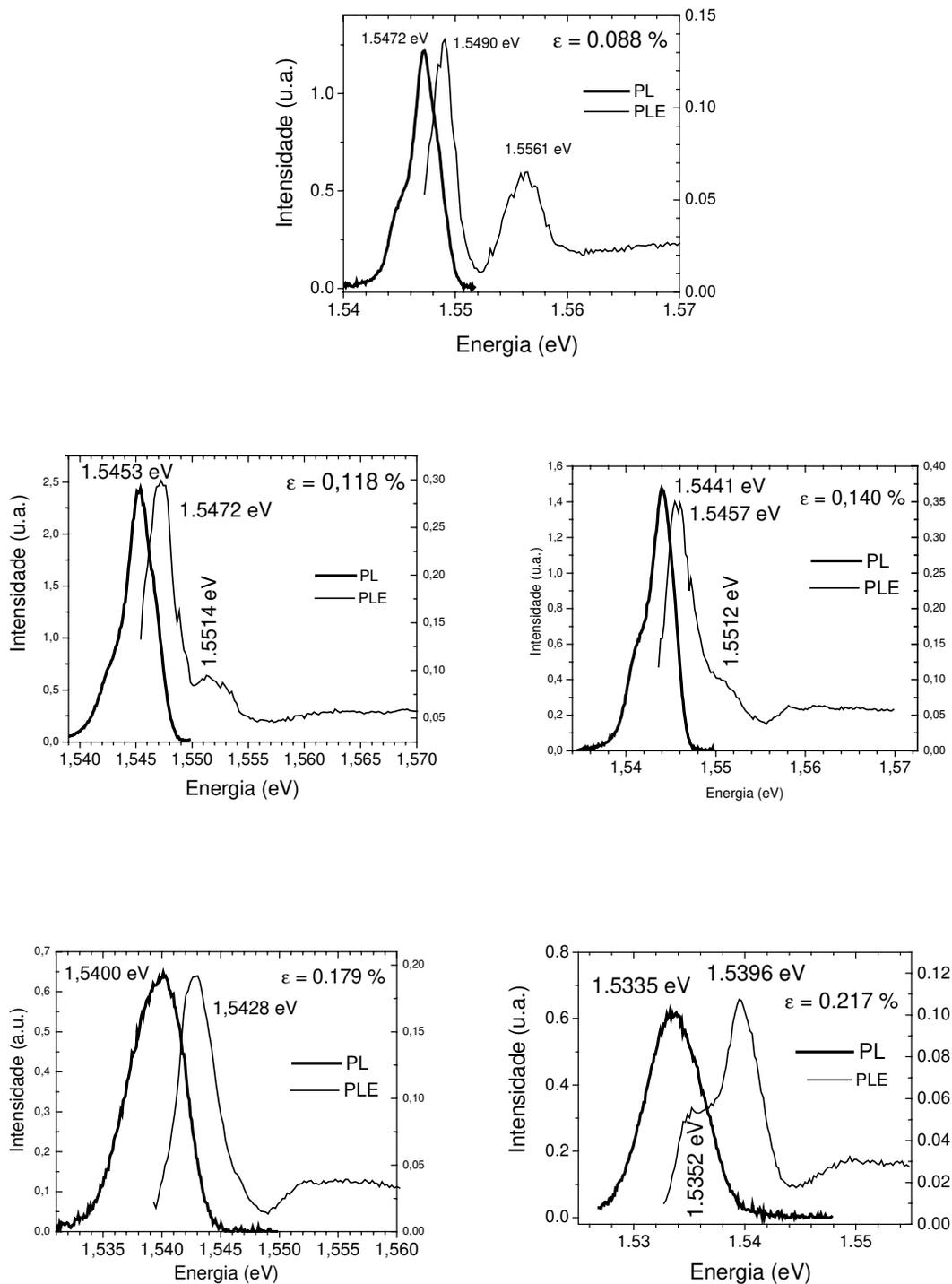
**Figura 4-4** – Espectros de PL (a) e PLE (b) do poço quântico de GaAs/AlGaAs de 107 Å medidos para várias deformações

Na figura 4-4a temos os espectros de PL do poço quântico medida para várias deformações. Como no caso dos espectros de PL do GaAs o comportamento com o aumento da tensão biaxial é bem semelhante, a energia de transição diminui a largura de linha aumenta. As 3 linhas de emissões superpostas continuam visíveis somente para deformações pequenas e conforme aumenta a deformação elas deixam de ser resolvidas e formam uma banda larga. O alargamento de cada uma das linhas chega a ser da ordem de 2 meV para o valor máximo da deformação medida. Os mesmos fatores que provocaram aumento na largura de linha de emissão no espectro de PL da camada espessa de GaAs também influenciam o alargamento da linha de emissão dos poços quânticos. Desde que a separação entre o poço quântico próximo a superfície e aquele mais próximo ao substrato é muito pequena,  $\sim 0,4 \mu\text{m}$ , comparada com a espessura do substrato,  $550 \mu\text{m}$ , o gradiente de energia deve ser praticamente desprezível, como vimos anteriormente. O principal fator, que acreditamos que seja o dominante, é o gradiente de deformação na direção do plano do poço quântico. A nossa estimativa para o alargamento de energia é maior na direção lateral (no plano do poço quântico) do que na direção de crescimento, como observamos também no item anterior. A nossa estimativa, que é da ordem de 0,5 meV de alargamento, continua abaixo do experimental. A razão dessa

discordância pode ser o que foi comentado no item anterior: a eq. 1-3 não reflete o real perfil de  $w(r)$  ao longo da superfície da amostra.

Existe uma outra possível causa para o alargamento de energia no caso do poço quântico, é que para altas deformações a estrutura de banda se torne indireta e, conseqüentemente, o espalhamento com fônons aumenta alargando a energia. Porém, essa contribuição se torna significativa somente para a deformação acima de 0,16 %, como foi prevista no cálculo, e o alargamento já é observado para deformações antes desse valor. Portanto, o alargamento de energia de emissão do poço quântico é atribuído ao gradiente de tensão ao longo da camada.

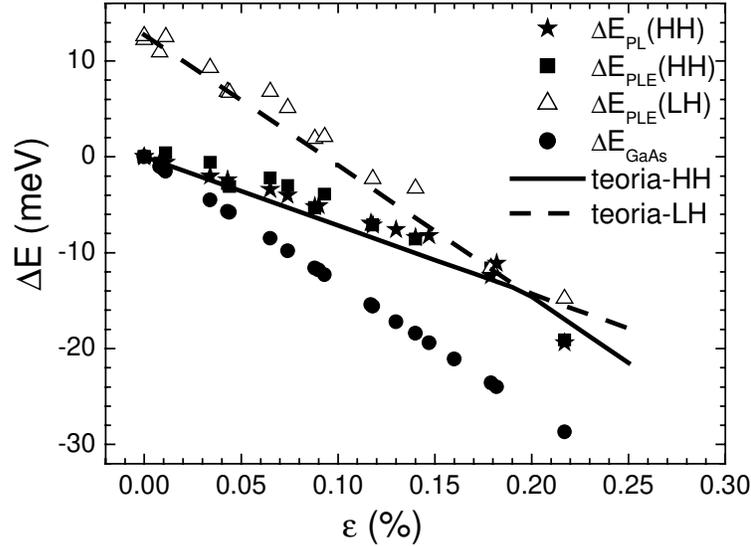
Na figura 4-4b apresentamos os espectros de PLE do poço quântico medidas para várias deformações. Como no caso dos dados de PL, observamos a evolução semelhante para os picos de éxcitons de buraco pesado e buraco leve nos espectros de PLE conforme aumenta a deformação, com uma diferença de que o pico de éxciton de buraco leve se desloca mais do que o de buraco pesado e para deformações altas ocorre o anti-cruzamento. Para ter a melhor visualização dos comportamentos tanto dos espectros de PL e PLE do poço quântico apresentamos na figura 4-5 os dois espectros PL e PLE juntos, para cada deformação. Podemos notar nos espectros para  $\varepsilon = 0,179$  % que os dois picos do espectro de PLE não são mais resolvidos e em  $\varepsilon = 0,217$  % o pico de absorção de menor energia tem a intensidade mais baixa. Baseado nos resultados dos cálculos que para esse valor de deformação já ultrapassou o anti-cruzamento, a transição de menor energia, que atribuímos ainda ao éxciton do buraco pesado, tem o caráter da banda de buraco leve com a força do oscilador menor do que a da banda de buraco pesado.



**Figura 4-5** – Espectros de PL e PLE do poço quântico de GaAs / AlGaAs de 107 Å

O gráfico do deslocamento da posição dos picos de emissão (PL) e absorção (PLE) com relação às posições dos picos em tensão está mostrado na figura 4-6. O

deslocamento do pico de emissão do GaAs,  $\Delta E_{GaAs}$ , em função de  $\varepsilon$ , que foi utilizado para determinar a deformação, também foi incluído no gráfico. Utilizando o modelo descrito no capítulo 1, para o cálculo das dispersões de energia das subbandas da banda de valência, calculamos o deslocamento da energia de transição entre o elétron no estado fundamental, na banda de condução, e os buracos pesado e leve nos estados fundamentais da banda de valência. Essas linhas teóricas estão de acordo com os dados experimentais do deslocamento dos picos de emissão e de absorção dos éxcitons. O efeito de anti-cruzamento, como previsto teoricamente, fica claro no gráfico da figura 4-6 e nos espectros da figura 4-5 onde as intensidades se invertem para deformação após o ponto de anti-cruzamento.



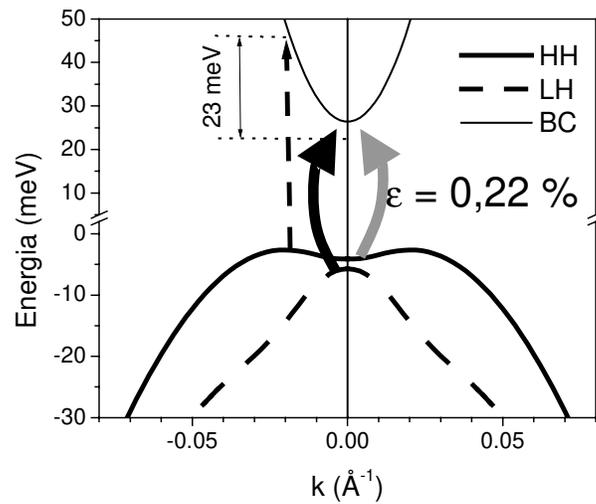
**Figura 4- 6** – Variação em energia do pico de linha de PL ( $\Delta E_{PL}[H]$ ) e de PLE ( $\Delta E_{PLE}[HH]$  e  $\Delta E_{PLE}[LH]$ ) e do pico de emissão da camada de GaAs em função da deformação  $\varepsilon$ . A linha contínua e tracejada são a curvas teóricas de deslocamento da energia de transição entre o elétron e o buraco pesado e buraco leve, respectivamente, em  $k = 0$ .

#### 4.4 Gap Indireto

No capítulo 2 vimos que a banda de valência pode ter o máximo fora do centro da zona de Brillouin quando ocorre o anti-cruzamento das bandas. O “gap” indireto começa a

partir da deformação  $\varepsilon = 0,16\%$  e o máximo ocorre quando  $\varepsilon = 0,2\%$ . A diferença de energia entre o máximo da sub-banda (em  $k_l = 0,02 \text{ \AA}^{-1}$ ) e a sua energia em  $k = 0$ ,  $\Delta_l$ , apresenta um máximo de  $E(k_l = 0,02 \text{ \AA}^{-1}) - E(k = 0) = 1,7 \text{ meV}$ .

Na figura 4-7 apresentamos a dispersão de energia calculada para a banda de valência e banda de condução. Uma característica do “gap” indireto é a redução na intensidade de luminescência por causa da redução da população dos portadores em torno do  $k = 0$ , pois os buracos fotocriados deslocam para o topo da banda de valência fora do centro da zona. Sendo  $k_l$ , do topo da banda de valência, muito maior do que o  $k$  do fóton, que é praticamente nulo, a transição óptica ocorre, satisfazendo a conservação de  $k$ , envolvendo um terceiro elemento, que é o fônon. O que observamos nos nossos dados experimentais de PL é que a linha de emissão apresenta uma redução na intensidade para  $\varepsilon = 0,217\%$ , devido à mudança na força do oscilador de transição que mudou de caráter tipo buraco pesado para o buraco leve por causa do anti-cruzamento. Se existe alguma contribuição do “gap” indireto na variação da intensidade fica difícil tirar alguma conclusão. O efeito de espalhamento com os fônons, a princípio, deve aumentar quando o “gap” se torna indireto, mas esse efeito também fica mascarado devido o alargamento de energia provocada pelo gradiente de tensão no plano da camada. Um fato que deve contribuir para dificultar a observação do efeito de “gap” indireto é o valor de  $\Delta_l$  ser muito pequeno, da ordem da largura de linha de PL da amostra sem tensão e que aumenta com a tensão, e isso deve mascarar o efeito. Analisando os dados de PLE, por exemplo, para  $\varepsilon = 0,217\%$  os dois picos estão muito próximos. Isso significa que os máximos de absorção nos dois casos ocorrem em torno de  $k = 0$ . Se o máximo ocorresse em torno do  $k_l = 0,02 \text{ \AA}^{-1}$  (topo da banda de valência) a posição do pico estaria bem acima do pico de PL, quase da ordem de  $23 \text{ meV}$ , como está ilustrado na figura 4-7. A nossa conclusão é que os dados experimentais que temos até o momento não são suficientes para demonstrar que a estrutura de banda é indireta. É necessário, portanto, amostras com a largura da linha de emissão bem menores que  $2 \text{ meV}$  e técnicas de medidas adicionais, como fotoluminescência resolvida no tempo, para investigar o “gap” indireto.



**Figura 4-7** – Dispersão calculada da banda de valência e da banda de condução em poço quântico com deformação de  $\epsilon = 0,2\%$ .

Em resumo, um fato importante que aprendemos nesse trabalho que deve ser mencionado, aqui é que uma simples célula de pressão biaxial é suficiente para modificar a estrutura de banda em poços quânticos e provocar mudanças nas propriedades ópticas. Isso é uma prova de que ela pode ser utilizado para estudos futuros nas investigações de outras propriedades, por exemplo, como da dinâmica de éxcitons ou magneto-éxcitons.

## **Capítulo 5 - Conclusões**

Neste trabalho, desenvolvemos um estudo sobre o efeito da mistura das bandas de valência, provocada pela presença de uma tensão biaxial, nas propriedades ópticas em poços quânticos de GaAs/AlGaAs. Para isso, utilizamos uma célula de tração biaxial construída especialmente para realizar medidas ópticas em criostato de He de imersão. As amostras são multi-poços quânticos de GaAs/AlGaAs com largura nominal do poço de 107Å crescidas por sistema MBE. A boa qualidade da amostra permitiu estudar por medida óptica os efeitos na mudança da estrutura de banda com a tensão biaxial.

Utilizamos técnicas de medidas de fotoluminescência e fotoluminescência de excitação para obter as energias das transições do poço quântico. Os espectros ópticos apresentam picos de transição correspondentes a éxcitons associados a buracos pesados e leves nos estados fundamentais. A separação entre esses picos é de 12 meV que é a separação das subbandas de buraco pesado e leve em  $k = 0$ . Com o aumento da tração biaxial, verificamos a aproximação dessas subbandas e também o anti-cruzamento.

Realizamos cálculos da dispersão de energia da banda de valência em função da tensão biaxial baseado no hamiltoniano de Luttinger-Kohn e Bir-Pikus. Os resultados dos cálculos mostram claramente a mudança significativa da dispersão de energia das subbandas de buracos leve e pesado. Com o aumento da tração biaxial observamos a aproximação entre essas duas subbandas nos estados fundamentais e o posterior anti-cruzamento. Para tensões onde ocorre esse efeito observamos que o topo da banda de valência fica fora do centro da zona de Brillouin, isto é, estrutura de banda de “gap” indireto. Isso é uma consequência direta da mistura das bandas. No entanto, não observamos nos nossos dados experimentais a evidência do “gap” indireto. Atribuímos a esse fato a largura da linha de fotoluminescência que é da ordem de grandeza do quanto o “gap” é indireto em energia.

Como perspectiva para futuros projetos pretendemos realizar investigações de outras propriedades, por exemplo, como da dinâmica de éxcitons ou magneto-éxcitons. Estão sendo planejadas medidas ópticas na presença de um campo magnético externo, utilizando a célula de pressão construída por Marcio P. F. de Godoy no seu projeto de mestrado, para estudar o efeito Zeeman, ou o fator-g de Landé, em função da mudança da dispersão de energia da banda de valência provocada pela tração biaxial. A contribuição da banda de valência no desdobramento de Zeeman em heteroestruturas é um assunto

que ainda não é muito bem compreendido e a aplicação da pressão externa pode ser uma alternativa para investigar o efeito da mistura da banda de valência sobre o fator-g usando uma mesma amostra. As medidas da dinâmica de éxciton, por outro lado, pode ser feita por técnica de fotoluminescência resolvida no tempo.

Durante o programa de mestrado apresentei alguns resultados importantes, que estão relacionados no Apêndice, dos trabalhos desenvolvidos no período em encontros nacionais e em conferências internacionais na área de física de semicondutores.

## **Referências**

[Bastard, 1992] – Bastard, G, “Wave Mechanics applied to semiconductor heterostructures”, Paris: Les Editions de Physique (1992);

[Baptizanskii, 1979] – Baptizanskii, V. V.; Novak, I. I., Titovets, Y. F. – *Sov. Phys Solid State* **21**, 1925 (1979);

[Chao & Chuang, 1992] – Chao, C. Y.-P & Chuang, S. L. Spin orbit coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. *Physical Review B*. v. **46**, n. 7, p. 4110 – 4122, 1992;

[Filonenko-Borodich, 1963] – Filonenko-Borodich, M. – Theory of Elasticity, Peace Publishers Moscow (1966);

[Godoy, 2002] – M. P. F. Godoy, - Célula de Pressão Biaxial e aplicações em filmes semicondutores - Dissertação de Mestrado – Unicamp – 2002;

[Iikawa *et al*, 1998] – F. Iikawa, F. Cerdeira, C. Vazquez-Lopes, P. Motisuke, M. A. Sacilotti, R. A. Masut, A. P. Roth, - *Phys. Rev. B*, **38**, 8473 (1998);

[Kittel, 1995] – Kittel – Introduction to Solid State Physics, 7. Ed., John Wiley & Sons, Inc, (1995);

[Landolt – Börnstein, 1982] - Landolt – Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology”, Editores: O. Madelung, M. Schulz and H. Weiss, volume 17 – Semicondutores, Springer – Verlag Berlin, Heidelberg, NY (1982);

[Liarokapis, 1992] – Liarokapis, E., Richter, W. – *Meas. Sci. Technol.* **3**, 347 (1992);

[Pollak, 1991] - F. H. Pollak – Semiconductor and semimetals: a treatise. Orlando: Academic Press, Inc. 1966 – 1991. V.**32**, cap. 2 (1991).

[Sosin & Trzeciakowski, 1994] – T. P. Sosin, W. Trzeciakowski, *Proc. Of the XXIII Inter. School of Semiconducting Compounds*, p. 151, (1994);

[Swaminathan & Macrander, 1991] - V. Swaminathan and A. T. Macrander, “Material aspects of GaAs and InP based structures”, Prentice-Hall, Inc. , New Jersey, 1991, pag. 298]

[Tudury, 2001] - H. A. P. Tudury, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, J. A. Brum, E. Ribeiro, W. Carvalho Jr., A. A. Bernussi, and A. L. Gobbi, *Phys. Rev. B* **64**, 153301 (2001).

[Yu & Cardona] – Yu, P. Y. & Cardona, M. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. Berlin: Springer, c1996. 617p.

## **Apêndice – Trabalhos apresentados em Congresso**

*“Theoretical Calculations of Valence Band Structure in GaAs/AlGaAs Quantum Wells under Tensile Biaxial Strain”*, Paulo F. Gomes, M. P. F. Godoy, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, T. E. Lamas and A. A. Quivy, J. A. Brum; “*8<sup>th</sup> Conference on Optics of Excitons in Confined Systems*”, de 15 a 18 de setembro de **2003** em Lecce – Itália.

*“Anti-Cruzamento das sub-bandas de buracos leve e pesado em poços quânticos de GaAs / AlGaAs sob tensão externa de tração”*- Paulo F. Gomes, M. P. F. Godoy, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, T. E. Lamas and A. A. Quivy; “*XXVI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada*”, realizado de 06 a 10 de maio de **2003** - Caxambu - MG.

*“Heavy- and light-hole subband anti-crossing in GaAs/AlGaAs quantum wells under tensile biaxial strain”* - Paulo F. Gomes, M. P. F. Godoy, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, T. E. Lamas and A. A. Quivy; “*11th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*”, 09 a 14 de Março de **2003**, Fortaleza - CE.

## Valence band anti-crossing in GaAs/AlGaAs quantum wells under tensile biaxial strain

P. F. Gomes<sup>1</sup>, M. P. F. Godoy<sup>1</sup>, M. K. K. Nakaema<sup>1</sup>, F. Iikawa<sup>\*1</sup>, T. E. Lamas<sup>2</sup>,  
A. A. Quivy<sup>2</sup>, and J. A. Brum<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, C. P. 6165, 13083-970 Campinas, SP, Brazil

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade Estadual de São Paulo, C.P. 66318, 05315-970, São Paulo, SP, Brazil

<sup>3</sup> Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, C.P.-6192, 13084-971, Campinas, SP, Brazil

Received 15 September 2003, accepted 18 September 2003

Published online 2 February 2004

PACS 78.55.Cr, 78.67.De

We present here the study of the effects of the biaxial tensile strain on the optical properties in GaAs/AlGaAs quantum wells using low-temperature photoluminescence and photoluminescence excitation techniques. We used a pressure cell that permits to apply a biaxial tensile strain on an epitaxial film up to  $\sim 0.3\%$  (for GaAs). The strain was determined by the energy shift of the excitonic recombination of the own GaAs buffer layer of the sample. The results of the optical measurements show clear the strain effects on the light and heavy hole excitons transitions and also show their anti-crossing. This new results show that this system is appropriated to study optical properties involving resonant phenomena in semiconductor quantum wells.

© 2004 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

### 1 Introduction

External pressure has been frequently used to investigate semiconductor properties. The application of such stress on heterostructures is a powerful tool to change their electronic structure, leading to a controlled “band gap engineering”. In previous work, Tudury et al. [1] have reported the application of the biaxial strain on InGaAs/InP modulation doped quantum wells to study the indirect-direct gap transition. The authors report that the variation of the Ga composition in InGaAs alloy in the quantum well has a same behavior to the case under external biaxial strain showing the evidence of the indirect gap band structures. However, the InGaAs/InP systems present strong localization effects, due to the alloy potential fluctuation and the interface roughness. These effects is a limitation of a detailed investigation, *e. g.*, of the exciton dynamics when involves strong valence band mixing. In this work, we present the investigation of the effects of the biaxial strain on the band structure in GaAs/AlGaAs quantum wells, which have lesser localization effects compared to InGaAs/InP systems. The results of photoluminescence and photoluminescence excitation measurements show clear evidence of the change of the heavy and light hole exciton transitions and also the anti-crossing of these excitons induced by the external strain.

### 2 Experimental details

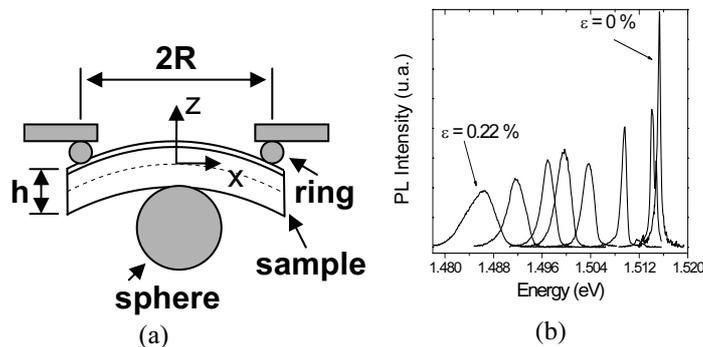
The samples consists of 10x(GaAs/AlGaAs) multi-quantum wells with 107 Å GaAs layer grown by molecular beam epitaxy. We used sample size of 10x10 mm<sup>2</sup>, which is the minimum dimension that can be used in our pressure cell. The photoluminescence (PL) and photoluminescence excitation (PLE)

\* Corresponding author: e-mail: iikawa@ifi.unicamp.br

measurements were carried out at liquid He temperature using a continuous wave (CW) Ti:sapphire laser pumped by a high power Ar<sup>+</sup> laser. The luminescence was monitored by a double monochromator and detected by a GaAs photomultiplier. The pressure cell is based on the bending of a plate for sample placed between a ring and a sphere [2]. Biaxial tensile strain on the epitaxial layer is achieved by compressing the sample against a ring by pushing the sphere (see the illustration of the pressure cell in the Fig. 1a). The top of the sample, at the center of the ring, is where strain is maximum, it is under biaxial tensile strain and the bottom side of the sample, where the sphere touches, it is under compressive strain. GaAs excitonic emission, arising from the buffer layer close to the quantum wells, was used to determine the tensile strain ( $\epsilon$ ) on the quantum wells. The difference of the strain between the GaAs buffer layer and the quantum well is very small because the substrate thickness is much larger than the epitaxial layer ones.

### 3 Results and discussions

We present in Fig. 1b the PL spectra of the GaAs buffer layer under different biaxial strain. The emission corresponds to the bound exciton recombination for unstrained case, which becomes a bound light hole excitons under strain (due to the break of the band degeneracy of the center of the zone). The decrease of the intensity with the strain indicates the change from the heavy hole exciton to light hole one, since the oscillator strength of the light hole optical transition is smaller than the heavy hole one. The values of the strain were determined using the relation of the energy gap variation with the biaxial strain (see. ref. [3]) with the parameter values given in the ref. [4]. The broadening of the emission line width with the increase of the strain is attributed to the gradient of the strain distribution along the growth direction.

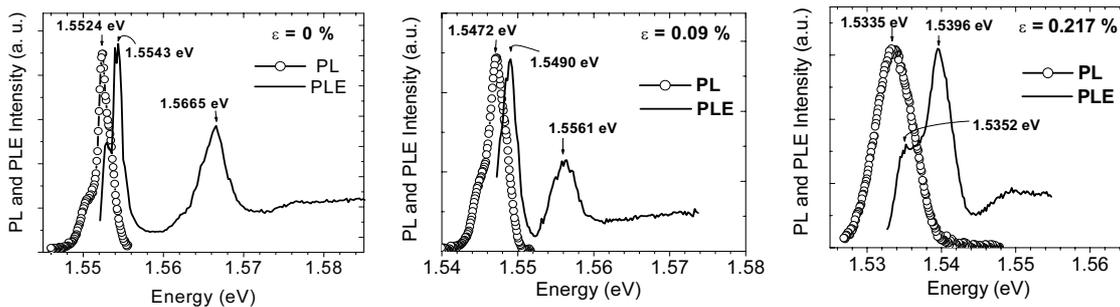


**Fig. 1** (a) Diagram of the pressure cell containing a ring and a sphere. The sample is deformed due to a stress applied by a sphere towards a ring. (b) 2 K PL spectra of the GaAs buffer layer for different biaxial tensile strain.

For each applied strain on the quantum well we measured the PL and PLE. The typical PL and PLE spectra are shown in the Fig. 2 for strain  $\epsilon = 0$  (a), 0.09 (b) and 0.22 % (c). The PL spectrum of the quantum well without strain shows a sharp peak due to the recombination of the heavy hole exciton and PLE spectrum shows two absorption peaks due to the heavy and light hole excitons at low and high spectral energy region respectively. From the energy separation between these two peaks from the PLE spectrum we determined the heavy and light hole subband splitting energy of 12.2 meV. The Stokes shift energy in this sample is 1.9 meV, which is the same value of the PL emission broadening. This energy is related to the localization effects due to the interface roughness, but it is smaller than the value compared to In-GaAs/InP systems, which presents Stokes shift larger than 6 meV [1, 5, 6]. All emission and absorption peaks of the quantum well show red shift as predicted for quantum well under biaxial tensile strain and the energy shift of the light hole exciton peak is larger than the heavy hole one, as shown in the PLE spectra of the Fig. 2b and 2c for  $\epsilon = 0.09$  and 0.22, respectively. The crossing between both peaks occurs for  $\epsilon_a \sim 0.18\%$ , therefore for  $\epsilon > \epsilon_a$  it is expected the ground state transition dominated by the light hole exciton character instead of the heavy hole one giving also lower intensity, as observed in our experimental data shown in the Fig. 2c for  $\epsilon = 0.22$ .

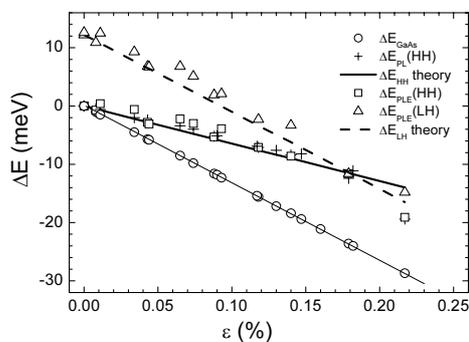
Figure 3 shows the plot of the energy shift of the PL and PLE peak positions as a function of the tensile strain. We also plotted the PL data of the GaAs buffer layer (circles) and the theoretical data (straight lines). The energy shift of the emission (crosses) (PL line) and absorption (squares) (low energy PLE line) peaks, both attributed to the heavy hole exciton transitions, practically coincides, since the both transitions arise from the same origin. The energy shift related to the light hole excitons in quantum well (triangles) observed in PLE spectra has, as predicted theoretically, same behavior of the energy shift of the GaAs buffer layer (circles), which is due to the light hole exciton emission.

The remarkable results observed in the experimental data is that the light hole exciton transition peak (triangles) anti-crosses with heavy hole one (squares and crosses symbols) for strain  $\epsilon \sim 0.18\%$ , as mentioned above. This means that the strain is enough to induces strong valence band mixing. We also calculated the valence band dispersion using 6 bands k-p method as a function of the tensile strain (see ref. 7) and the results show agreement with the experimental data. The value of the strain where the anti-crossing occurs also agrees with the observed data. The calculation results also show that when the light hole subband anti-crosses the heavy hole one resulting in an indirect gap structure, where the maximum of the valence band is at wave vector  $k_M = 0.03 \text{ \AA}^{-1}$ . The maximum energy separation between for  $k = 0$  and  $k = k_M$  is  $\Delta = 1.7 \text{ meV}$ , which is close to the energy broadening of our sample. The transition direct-indirect gap occurs for  $\epsilon_t = 0.22 \%$ . The experimental results do not show clear evidence related to the indirect band structure, because the value of  $\Delta$  is the same order of magnitude of the localization effect energy.



**Fig. 2** PL (circles) and PLE (strait line) spectra of the quantum wells for biaxial strain (a) 0 %; (b) 0.09 %; and (c) 0.22 %.

The experimental and theoretical results in GaAs/AlGaAs quantum wells in the presence of the external tensile strain show a clear evidence of the effect of the strain on the band structure, resulting in significant change on the excitonic emission and absorption spectra. This system therefore will be used to study the dynamic of the excitons and spins for band structure controlled by the external strain.



**Fig. 3** PL (crosses symbol) and PLE (squares (heavy hole) and triangles (light hole)) peak shift energies of the quantum wells and GaAs buffer layer (circles) as a function of the biaxial tensile strain. The straight lines are theoretical ones, dashed and thick lines correspond to the light and heavy hole exciton transitions in the quantum well, respectively, and thin line for the light hole exciton transition in the GaAs buffer layer. The PLE light hole data are shifted in energy with the value of the separation energy between heavy and light hole subband at  $k = 0$ .

## 4 Conclusions

We present in this work the investigation of the effect of the external biaxial tensile strain on the optical spectra of GaAs/AlGaAs quantum wells. For the strain used here was able to observe a significant change of the optical spectra of the heavy and light hole exciton transitions. The anti-crossing of the light and heavy hole excitons predicted by the theoretical calculations is also observed. The results show that the biaxial pressure cell is a powerful tool to study excitonic effects with the advantage to change externally the band structure.

**Acknowledgements** We thank Milton M. Tanabe and André R. de Paula for technical assistance to built the pressure cell. We also acknowledge FAPESP, CNPQ and CAPES for financial support.

## References

- [1] H. A. P. Tudury, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, J. A. Brum, E. Ribeiro, W. Carvalho, Jr., A. A. Bernussi, and A. L. Gobbi, *Phys. Rev. B* **64**, 153301 (2001).
- [2] M. L. W. Thewald, D. A. Harrison, C. F. Heinhart, and J. A. Wok, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 269 (1997).
- [3] F. Iikawa, F. Cerdeira, C. Vazquez-Lopes, P. Motisuke, M. A. Sacilotti, R. A. Masut, and A. P. Roth, *Phys. Rev. B* **38**, 8473 (1988).
- [4] Landoldt-Börnstein, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, edited by O. Madelung (Springer-Verlag, Berlin, 1982), New Series, Vol. III/17a, pp. 218.
- [5] P. Michler, A. Hangleiter, A. Moritz, G. Fuchs, V. Härle, and F. Scholz, *Phys. Rev. B* **48**, 11991 (1993).
- [6] D. Gershoni, J. M. Vandenberg, R. A. Hamm, H. Temkin, and M. B. Panish, *Phys. Rev. B* **36**, 1320 (1987).
- [7] A. L. C. Triques and J. A. Brum, *Proc. of 22<sup>nd</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors, Vancouver, 1994*, edited by D. J. Lockwood (World Scientific, 1995), vol. 2, pp. 1328.