



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**Efeitos de campos elétricos em nanoestruturas
semicondutoras baseadas no grupo III - V**

Thiago Freire de Oliveira

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

2015

Universidade Federal Rural de Pernambuco

Departamento de Física

Thiago Freire de Oliveira

Efeitos de campos elétricos em nanoestruturas semicondutoras baseadas no grupo III - V

Dissertação apresentada a coordenação do programa de pós-graduação em Física Aplicada da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em Física.

Área de Concentração: Física dos semicondutores.

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Sara Cristina Pinto Rodrigues

Recife - PE

2015

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**Efeitos de campos elétricos em nanoestruturas semicondutoras baseadas no
grupo III - V**

Thiago Freire de Oliveira

Dissertação julgada adequada para
obtenção do título de mestre em Física,
defendida e aprovada por unanimidade
em 10 de junho de 2015 pela Comissão
Examinadora.

ORIENTADORA

Prof^ª. Dr^ª. Sara Cristina Pinto Rodrigues

UFRPE

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa

UFRPE

Prof. Dr. Hélcio José Batista

UFRPE

À minha pequena Clarinha.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço à Deus pelo dom da vida concedido aos meus pais, sem isso eu não estaria aqui.

Aos meus pais, por terem me dado o bem mais precioso, uma boa educação familiar.

À minha linda esposa, Almíria, pela paciência, carinho e, especialmente, por ter dado a mim uma filha linda e cheia amor, Clarinha (minha bebê).

À minha orientadora, Dr^a Sara Cristina, por tanta atenção, paciência, cuidado, amizade, entre outras coisas, por serem tantas não caberiam aqui. São mais de 5 anos de convivência acadêmica. Aí vai professora, o meu muito obrigado.

Aos professores do DF-UFRPE, em especial aos professores: Dr. Pedro Hugo e Dr. Aílton Fernandes, os quais tenho como exemplo para minha carreira profissional.

Aos amigos do DF-UFRPE, Augusto (o pracinha), Carlos (o negão), Chico (Butico), Danilo (Catatau), Élder (o matuto), Jorge (cabeça de galo), Júlio (o forte) e aos demais, obrigado amigos, o mestrado ficou muito divertido por causa de todos vocês.

Aos amigos da época de graduação, Rafael Merces (o grande choio) e João Alexandre (o xandão), meus irmãos da física.

Ao meu amigo-irmão, Raphael (PH). Obrigado pelos conselhos dados e por sua amizade sincera.

Sumário

Agradecimentos	v
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
2 Fundamentação Teórica	7
2.1 Teoria de perturbação independente do tempo	7
2.1.1 Caso não degenerado	7
2.1.2 Correção de primeira ordem	8
2.1.3 Correção de segunda ordem	10
2.2 O que é o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$?	10
2.2.1 Introdução	10
2.2.2 A essência do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	10
2.2.3 Equação da massa efetiva para uma banda não degenerada usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	12
2.3 Descrição do hamiltoniano do sistema	13
2.3.1 Matriz 6×6 de Luttinger-Kohn	14
2.3.2 Matriz de Kane 8×8 (<i>Zinc-Blend</i>)	17
2.4 Propriedades mecânicas de um sólido	18
2.4.1 Tensor de compressão	18
2.4.2 Formulação do estado de deformação	19

2.4.3	Lei de Hooke para os sólidos anisotrópicos	21
2.4.4	Potencial de Tensão do Sistema	22
2.4.5	Potencial de Heteroestrutura	26
2.4.6	Potencial de troca-correlação	26
2.4.7	Potencial de Coulomb no espaço recíproco	28
2.5	Intensidade da Fotoluminescência	29
2.6	Programa Computacional	30
3	Ligas Ternárias de $GaAs_{1-y}N_y$	32
3.1	Parâmetros do $GaAs_{1-y}N_y$	32
3.2	Sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ não-dopados	35
3.2.1	Perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ não-dopados	35
3.2.2	Espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$	37
3.2.3	Estrutura de bandas para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$	38
3.2.4	Sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem e sob influência de campo elétrico externo	39
3.3	Sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ dopados	42
3.3.1	Perfis de Potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopado e sob influência de campo elétrico externo	42
3.3.2	Espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$	43
4	Ligas quaternárias de $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$	52
4.1	Sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ não dopados	54
4.1.1	Espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ não dopados	54
4.2	Sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ dopados	57
4.2.1	Perfis de potenciais para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$	58
4.2.2	Espectros de fotoluminescência para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$	64
5	Conclusões	68
	Lista de Figuras	76
	Lista de Tabelas	77

Resumo

Nas últimas décadas houve um aumento no interesse em estudar materiais do grupo III-V (GaN, GaAs, InN, InAs) e suas ligas na fabricação de dispositivos optoeletrônicos e de dispositivos eletrônicos de alta potência e alta temperatura. Os nitretos, em sua forma cristalina, têm duas fases: cubica (c), zinblende, e hexagonal (h), wurtizita. Ainda outros materiais de grande interesse tecnológico são aqueles que envolvem o $GaAs_{1-y}N_y$ e $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$. Estes materiais, também conhecidos como semicondutores diluídos de nitretos, têm diversas aplicações na fabricação de transistores bipolares e outros. Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas e ópticas de nanoestruturas semicondutoras usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, dentro do modelo 8×8 de *Kane*, generalizado para tratar diferentes materiais. A solução é obtida auto-consistentemente através da solução da equação da massa efetiva junto com a equação de Poisson. Os efeitos de tensão e troca correlação são levados em conta. Nós consideramos também nos cálculos um campo elétrico externo ao longo da direção de crescimento. Além disto, investigamos sistemas dopados e não dopados de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ e $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, variando diversos parâmetros, tais como: concentração de N e In, larguras do poço e barreira a concentração de aceitadores (N_A). Espectros de fotoluminescência (PL) teóricos são mostrados e discutimos os efeitos impostos pelas frações molares de N e In nas características de emissão destes sistemas, bem como outros parâmetros. Os diferentes tipos de tensão são apresentados e explicados para as estruturas de $GaAs_{1-y}N_y$. Além disso, discutimos como os potenciais de Coulomb e troca correlação influenciam nas transições eletrônicas. Estes resultados podem explicar diversos aspectos importantes sobre as propriedades ópticas nestes sistemas e podem ser um guia para futuros experimentos.

Abstract

In recent decades there has been increasing interest in studying materials from III -V group (GaN, GaAs, InN, InAs) and its alloys in the manufacture of optoelectronic devices and high-power and high-temperature electronic devices.. Nitrides, in his crystalline form, have two phases: cubic (c), zincblende, and hexagonal (h), wurtzite. Another great technological interest materials are and those involving the $GaAs_{1-y}N_y$ and $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, These materials, also known as diluted nitride semiconductors have numerous applications in manufacturing bipolar transistors and others. In this work we study the electronic and optical properties of semiconductor nanostructures using the method $\vec{k} \cdot \vec{p}$, within of Kane model 8×8 , generalized to treat different materials. The solution is obtained self-consistently by the solution of the effective mass equation together with the Poisson equation. The strain and exchange-correlation effects are taken into account. We also consider an external electric field, along the grown direction. Furthermore, we investigate the undoped and doped $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ and $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ systems, varying several parameters, such as: concentration of N and In, barrier and well widths and acceptor concentration (N_A). Theoretical photoluminescence spectra (PL) are shown and we discuss the effects imposed by the N and In molar fractions on the emission features of the systems, as well as other parameters. The different strain kinds are presented and explained for $GaAs_{1-y}N_y$ structures. Besides we discuss how the Coulomb and exchange-correlation potentials influence in the electronic transitions. These results can explain several important aspects about optical properties in these systems and can be a guide for future experiments.

Durante os últimos anos, as melhorias nas técnicas experimentais, proporcionaram um crescimento bastante expressivo, relacionado as aplicações tecnológicas dos semicondutores. O crescimento de filmes finos de materiais 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. A energia do *gap* do semicondutor é uma importante grandeza física que determina o tipo de aplicação tecnológica para um dado material semicondutor. A “engenharia da energia do *gap*”, através de manipulação de determinados parâmetros, tem diversas aplicações.

O presente trabalho, destacaremos os chamados *semicondutores diluídos de nitretos* (SNDs), no qual temos os semicondutores do grupo III-V que apresentam nitrogênio em sua composição química, e gerando diversas aplicações, já que atualmente, estes materiais possibilitam a construção de formas distintas de dispositivos semicondutores. Iremos abordar inicialmente os semicondutores do grupo III-V até chegarmos em nosso objeto de estudos: os SNDs.

A emissão de luz coerente, obtida a partir de diodos semicondutores, fabricados com arsênio (As) e com gálio (Ga), foi demonstrado, de maneira isolada por dois grupos norte-americanos liderados por Robert N. Hall, no centro de pesquisa da *General Electric* (GE) [1] e por Marshall Nathan na *IBM TJ Centro de Pesquisa Watson* [2]. Houve um debate em curso sobre se a IBM ou GE inventou o primeiro diodo laser que foi em grande parte baseado no trabalho teórico de William P. Dumke na IBM Labs em Yonkers, Nova Iorque [1].

A prioridade da descoberta, dada ao grupo da *General Electric*, se deve ao fato

de que eles não apenas apresentaram os seus resultados mais cedo; eles também foram mais longe e fizeram uma cavidade ressonante para o diodo. O diodo foi inicialmente especulado por Ben Lax, entre outros físicos. A partir disso, sugeriu-se que dispositivos com arsênio (As) e com gálio (Ga), seriam bons candidatos, de acordo com o trabalho teórico de Hall *et. al* [1], além de existirem em abundância na natureza. O primeiro comprimento de onda visível do *laser* de GaAs, foi demonstrado por Nick Holonyak, Jr. em 1962.

Acerca das aplicações na produção de dispositivos fabricados com outros materiais do grupo III-V, estes não são muito úteis para operarem em altas frequências, a energia do seu *gap* não é tão grande, por exemplo o GaAs possui uma energia do *gap* igual a 1,519 eV [3]. Eles também não podem ser usados em altas temperaturas, mas são muito usados na fabricação de sensores sensíveis a pequenos estímulos energéticos, como microscópio de varredura e sensores de sujeiras em salas cirúrgicas. Além disso, diodos contendo GaAs são usados como misturadores e elementos multiplicadores de sinais em toda a faixa do terahertz. O diodo *Schottky* é um bom exemplo de dispositivo misturador nessa faixa de frequência [4].

Ainda em relação ao grupo III-V temos que os nitretos (GaN, InN, AlN), desde 1970, são ótimos candidatos no desenvolvimento de dispositivos semicondutores. Além dos diodos, temos os LEDs (*Light Emitting Diodes*), que operam em regiões de comprimentos de onda curtos [5]. O GaN (nitreto de gálio) e o GaAs (arseneto de gálio) são os materiais que mais se destacam no grupo III-V, juntamente com suas ligas téternárias e quaternárias. Estes possibilitam controlar a emissão em toda a faixa do espectro visível, e com isso, são úteis na fabricação de visores (*displays*). Ainda acerca das aplicações tecnológicas, por exemplo, atualmente grande parte dos televisores domésticos e monitores de computador utilizam essa tecnologia.

No entanto, a aplicação destes materiais não se restringe aos visores, os LEDs também são utilizados em: impressoras de alta qualidade (*lasers*), no armazenamento de informações com altíssima densidade, por exemplo em *drivers de blue-ray* (formato de mídia mais moderno), assim como na produção de lâmpadas visando baixo custo energético, pois os LEDs, além de terem um vida útil maior que as lâmpadas convencionais, emitem energia com baixa potência e alta luminosidade. Além do mais, o GaN tem outra aplicação relevante a ser destacada, que seria a utilização desses materiais na fabricação de

transistores de alta potência/temperatura para sistemas de transmissão de energia, motores de automóveis, veículos elétricos e para o desenvolvimento de sistemas para controle de aviões [6].

Os nitretos do grupo-III, nitreto de alumínio (AlN), nitreto de gálio (GaN) e o nitreto de índio (InN), são adequados para essa área. A energia do *gap* para o InN vale $\sim 1,9$ eV, sendo relativamente pequena. Para o GaN, a energia do *gap* é muito grande, valendo $\sim 3,15$ eV, pois acima de $3,0$ eV o *gap* é considerado muito grande [3]. Portanto, por admitirem um *gap* muito grande, também possuem uma ligação química muito forte, o que permite que estes materiais sejam utilizados na fabricação de dispositivos que operam em comprimentos de onda bem específicos, bem como na produção de transistores que operam em altas temperaturas.

Acerca do processo de cristalização existente, para os nitretos, podemos destacar duas formas: a fase *wurtzita* também conhecida como hexagonal e a fase *zincblende* ou fase cúbica. A importância da cristalização tem forte influência nos parâmetros físico-químicos dos materiais. A fase hexagonal ocorre com maior frequência na natureza, e logicamente é o mais estudado na literatura. No entanto, essa cristalização faz com que haja polarização nestes sistemas: a polarização espontânea e a polarização piezoelétrica. No caso da polarização espontânea, esta surge devido a simetria do cristal [7]. Quando o sistema é submetido a tensões, devido a pressão exercida no sistema, os átomos se deslocam, gerando a polarização piezoelétrica. No caso da fase cúbica não existem estas polarizações, novamente devido a própria simetria cristalina. Todavia quando se aplica um campo elétrico externo a uma estrutura cúbica, esta passa a ter um potencial elétrico similar ao potencial piezoelétrico da estrutura hexagonal. Neste caso, temos o que chamamos de efeito *Stark* [8].

Materiais submetidos a presença de um campo elétrico externo são os componentes chave em muitos dispositivos, tais como sensores, atuadores, transdutores de ultra-som, sistemas de sonar, e captadores de energia.

Em meados de 1990, descobriu-se que com a introdução de nitrogênio no *GaAs*, a energia do *gap* da liga $GaAs_{1-y}N_y$ reduzia drasticamente com o aumento da concentração de nitrogênio [9], o que atraiu um grande interesse dos pesquisadores nos últimos anos por causa de suas propriedades ópticas distintas. Neste contexto, destacamos suas aplicações tecnológicas para transistores de multijunções, células solares de alta eficiên-

cia [10, 11] e dispositivos optoeletrônicos de redes de comunicação de fibra óptica [12], além de serem materiais com ótimas características de cristalização (neste caso cúbica). Na literatura há duas observações relevantes acerca do $GaAs_{1-y}N_y$: primeiramente, com apenas 1% de nitrogênio em substituição isoeletrônica no $GaAs$, há redução da energia do gap ($E_g^{GaAs_{1-y}N_y}$) em $\sim 150 meV$, que conduz ao assim chamado "arqueamento da energia do gap ". É importante que alguns pontos sejam salientados. De acordo com resultados experimentais e teóricos só é possível a formação da liga de $GaAs_{1-y}N_y$ para $y \geq 1,0\%$ [13, 14]. Também foi observado que para $y > 7,0\%$ não é possível inserir mais N na liga, sem que não haja excesso de formação de regiões ricas em N , *clusters* [14]. A segunda observação, seria a forte dependência do parâmetro de rede com a concentração de nitrogênio, que faz a tensão do sistema ser do tipo distendida, para concentrações de nitrogênio abaixo de 3,3%, e comprimida acima desse valor, isso para sistemas sem dopagem [14, 15].

Outro sistema dentro dos semicondutores diluídos de nitretos são as ligas quaternárias de $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ [16–19], por causa de suas propriedades físicas e de seu potencial na aplicação de uma vasta variedade de dispositivos optoeletrônicos [20–22]. O que mais impressiona nesta liga é sua capacidade de, atualmente, ser um dos principais candidatos a serem utilizados na fabricação de *lasers* para transmissão de dados de alta eficiência, pois apresentam emissão e absorção de sinais de baixa frequência, ideais na fabricação de antenas para satélites por apresentarem interferência praticamente desprezível. Além disso, estes materiais podem ser utilizados nos transistores bipolares de heterojunção (*HBT*), muito eficazes na produção de células solares e dispositivos portáteis, que operam na faixa de $1.3 - 1.55 \mu m$ do comprimento de onda [23]. Assim como o $GaAs_{1-y}N_y$, a liga de $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ também apresenta uma redução considerável na energia do gap com a incorporação de nitrogênio em pequenas quantidades [24–26].

Em relação ao estudo das heteroestruturas de poços quânticos não dopados e dopados tipo-p e mesmo tipo-n nos SNDs, o que existe na literatura, em geral, deixa muito a desejar, pois não leva em consideração de forma completa todos os efeitos relacionados, tais como a tensão que surge devido ao descasamento dos parâmetros de rede, a diferenciação dos três tipos de buracos existentes (buraco pesado, leve e de *split-off*), os diferentes materiais usados no crescimento das camadas, os efeitos de muito corpos (troca-correlação), que surge de maneira significativa quando há dopagem no sistema, influência

do campo elétrico externo, entre outros [27–47].

Neste trabalho iremos procurar abordar e considerar todas estas questões. Para isso iremos utilizar o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [48], dentro do modelo 6×6 de Luttinger-Korn [49] para determinação da bandas de valência, assim como o modelo 8×8 de Kane [50] que inclui a banda de condução. O método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ é baseado na perturbação de um sistema periódico, no qual verificamos uma parabolicidade na estrutura de banda de condução, e uma não-parabolicidade na banda de valência, para sistemas dopados tipo-p. O método também leva em consideração os efeitos de tensão e troca-correlação existentes no sistema [51]. Além disso, nos cálculos, são considerados os efeitos devido a aplicação de um campo elétrico externo ao longo da direção de crescimento. O objetivo é entender sua influência nos espectros de fotoluminescência teóricos.

No capítulo 2, destinado a nossa fundamentação teórica, apresentamos uma breve introdução acerca da teoria de perturbação independente do tempo, no qual descrevemos a formulação dos autoestados e dos autovalores de energia de primeira e segunda ordem. Descrevemos, de maneira sucinta, o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, que consiste no método perturbativo utilizado neste presente trabalho e apresentamos uma descrição dos fenômenos referentes as propriedades mecânicas presente num sólido cristalino. Mostraremos o hamiltoniano total do sistema estudado, descrevendo as componentes que formam o mesmo, tais como: a energia cinética, o potencial de tensão, o potencial de heteroestrutura, o potencial de troca-correlação, o potencial de Coulomb no espaço recíproco. O motivo pelo qual se faz essa escolha, trabalhar no espaço recíproco recai no fato de que: o operador de energia cinética é escrito nessa base e a equação de *Poisson*, quando escrita nessa base, torna-se uma expressão muito simples de ser analisada. O presente trabalho, todos os termos propostos serão tratados na base de ondas planas e analisaremos cada termo do hamiltoniano.

O capítulo 3 é destinado à investigação das características dos perfis de potenciais, espectros de fotoluminescência teóricos e estruturas de bandas referentes aos sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, primeiramente sem dopagem, no qual determinamos os parâmetros mais adequados para o mesmo, tendo como base a literatura [14,15]. Analisamos sistemas dopados, ambos sem a influência do campo elétrico externo, em seguida, submetidos a presença de um campo elétrico externo, sendo assim, enfatizamos a relevância do mesmo, com intuito de verificar as transições ópticas.

No capítulo 4, também investigamos as características dos perfis de potenciais e dos espectros de fotoluminescência teóricos referentes aos sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, sem dopagem e com dopagem, ambos submetidos a presença de um campo elétrico, novamente afim de verificar que influência causa aos espectros de fotoluminescência teóricos e nos perfis de potenciais. Ainda acerca desse mesmo sistema, investigamos os efeitos dos potenciais de Coulomb e troca-correlação com a variação de aceitadores, N_A [47]. E por fim, no capítulo 5, apresentaremos às conclusões referente ao nosso trabalho.

2.1 Teoria de perturbação independente do tempo

Nesta seção, apresentaremos a teoria de perturbação independente do tempo, onde descreveremos as correções de 1^a e 2^a ordem, tanto para os autoestados, quanto para os autovalores.

2.1.1 Caso não degenerado

Na natureza, há poucos sistemas físicos que possuem soluções analíticas, para tal, recorreremos a métodos aproximativos [52]. Primeiramente estudaremos a *teoria das perturbações independente do tempo* (teoria de *Rayleigh - Schrödinger*), a qual representa um procedimento sistemático usado na obtenção de soluções *aproximadas* para um problema perturbado, com base nas soluções exatas conhecidas para o caso *não perturbado*. Sendo assim, vamos supor que temos conhecimento da solução da *equação de Schrödinger* (independente do tempo) para um dado potencial:

$$H^{(0)}|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle. \quad (2.1)$$

Além do mais, também temos um conjunto completo de autoestados ortonormais, $|n^{(0)}\rangle$

$$\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle = \delta_{mn}. \quad (2.2)$$

Com isso, supomos que os autovalores de $H^{(0)}$ são discretos e não degenerados. Em seguida, introduzimos uma leve perturbação no potencial original, portanto, podemos escrever a *equação de Schrödinger* da seguinte forma:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (2.3)$$

No caso perturbado, introduzimos o parâmetro λ que indica a magnitude da perturbação, ou seja, o hamiltoniano pode ser escrito da seguinte forma,

$$H = H^{(0)} + \lambda V, \quad (2.4)$$

com o termo λV sendo muito pequeno, se comparado com $H^{(0)}$,

$$H^{(0)} \gg \lambda V. \quad (2.5)$$

Em seguida, representamos E_n e $|n\rangle$ como potências de λ ,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (2.6)$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \quad (2.7)$$

Usando as equações 2.3, 2.4, 2.6 e 2.7, temos que:

$$(H^{(0)} + \lambda V)|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} (H^{(0)} + \lambda V)(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots) = \\ (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Separando as potências de mesma ordem,

$$\lambda^0 \implies H^{(0)}|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \quad (2.10)$$

$$\lambda^1 \implies (H^{(0)} - E_n^{(0)})|n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - V)|n^{(0)}\rangle \quad (2.11)$$

$$\lambda^2 \implies (H^{(0)} - E_n^{(0)})|n^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - V)|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle. \quad (2.12)$$

2.1.2 Correção de primeira ordem

Vamos supor que:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} a_m |m^{(0)}\rangle \quad (2.13)$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} (H^{(0)} - E_n^{(0)}) a_m |m^{(0)}\rangle = (E_n^{(1)} - V) |n^{(0)}\rangle \quad (2.14)$$

Multiplicando ambos os lados da equação por $\langle k^{(0)}|$, temos que:

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m [\langle k^{(0)}|H_0|m^{(0)}\rangle - \langle k^{(0)}|E_n^{(0)}|m^{(0)}\rangle] = \langle k^{(0)}|E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle - \langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \quad (2.15)$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m [E_m^{(0)} \langle k^{(0)}|m^{(0)}\rangle - E_n^{(0)} \langle k^{(0)}|m^{(0)}\rangle] = E_n^{(1)} \langle k^{(0)}|n^{(0)}\rangle - \langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \quad (2.16)$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} a_m (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \delta_{km} = E_n^{(1)} \delta_{kn} - \langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \quad (2.17)$$

Para $k = n$, temos que:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle, \quad (2.18)$$

ou seja, a correção de primeira ordem da energia é o valor esperado do potencial. Para $k \neq n$,

$$a_k = \left[\frac{\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \right], \quad (2.19)$$

como $k \neq n$, o espectro é não degenerado e os coeficientes a_k convergem!

Para encontrar os valores permitidos dos coeficientes a_k , os autoestados $|n\rangle$, devem ser normalizados, portanto,

$$\langle n|n\rangle = 1 \quad (2.20)$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle \quad (2.21)$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} a_m |m^{(0)}\rangle. \quad (2.22)$$

Assim, após algumas manipulações algébricas e levando em consideração que $\lambda \gg \lambda^2$,

$$\lambda (a_n^* + a_n) = 0, \quad (2.23)$$

como $\lambda \neq 0$, o termo $a_n = 0$ ($a_n \in \mathbb{R}$). Assim, o autoestado e a energia de primeira ordem são, respectivamente:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{m \neq n}^{\infty} \left[\frac{\langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} \right] |m^{(0)}\rangle \quad (2.24)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle. \quad (2.25)$$

2.1.3 Correção de segunda ordem

Supondo que $|n^{(1)}\rangle$ e $|n^{(2)}\rangle$ são conhecidos, temos que:

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} a_m |m^{(0)}\rangle \quad (2.26)$$

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} b_m |m^{(0)}\rangle \quad (2.27)$$

E usando a mesma técnica, empregada na correção de primeira ordem, temos a correção do autoestado e da energia de segunda ordem, respectivamente:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{m \neq n}^{\infty} \left[\frac{\langle m^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} \right] |m^{(0)}\rangle - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{m \neq n}^{\infty} \left[\frac{\langle m^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} \right]^2 |m^{(0)}\rangle \quad (2.28)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n}^{\infty} \frac{(\langle m^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle)^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} \quad (2.29)$$

Na próxima seção falaremos acerca de um tipo de método perturbativo, o qual aplicamos em nossa pesquisa, sendo este o *método $\vec{k} \cdot \vec{p}$* .

2.2 O que é o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$?

2.2.1 Introdução

Com o passar dos anos e o aprimoramento das técnicas teóricas, os semicondutores na fase sólida e cristalina, tiveram suas propriedades melhor compreendidas. Acerca das técnicas teóricas, podemos destacar o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, pois para super-células, o método tem resultados bem próximos aos encontrados em experimentos, isso quando tratamos poços quânticos e super-redes (SLs) [53, 54].

2.2.2 A essência do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Nos métodos empíricos de pseudopotencial, o parâmetro analisado, em geral, é a energia do *gap*. Em experimentos de óptica, tipicamente se determina a energia do *gap* e a força do oscilador nas transições eletrônicas [55]. Isso pode ser relevante, pois com os elementos da matriz óptica é possível determinarmos os parâmetros úteis no cálculo da estrutura de bandas.

No método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, a estrutura de bandas, ao longo de toda a zona de Brillouin, pode ser construída a partir das lacunas de energia, no centro de zona, e com os elementos da matriz óptica, portanto, essa técnica, é particularmente conveniente para a interpretação de espectros ópticos. Além disso, com este método, pode-se obter expressões analíticas para a dispersão da banda e as massas efetivas dos portadores envolvidos¹, em torno dos pontos de alta simetria.

Sendo assim, o método, pode ser obtido a partir da *equação de Schrödinger independente do tempo*, para um elétron, como vemos na equação 2.30, com a utilização da autofunção de *Bloch* 2.31:

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{d^2}{dr^2} \right) + V(\vec{r}) \right] \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.30)$$

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.31)$$

onde n indexa a banda, \vec{k} é o vetor de onda da primeira zona de *Brillouin* e $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ representa a função periódica do cristal estudado. Assim, aplicando a 2.31 diretamente em 2.30 e levando em consideração que $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dr}$, nós obtemos o seguinte resultado:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \left(\frac{\hbar}{m} \right) \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.32)$$

Para $k_0 = (0, 0, 0)$, a equação 2.32 é reduzida a:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{n0}(\vec{r}) = E_{n0} u_{n0}(\vec{r}) \implies (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.33)$$

Equações similares também podem ser obtidos para \vec{k} igual a qualquer ponto k_0 . A equação 2.33, é muito mais fácil de resolver do que 2.32 uma vez que as funções u_{n0} são periódicas. As soluções de 2.33 formam um conjunto completo e ortonormal de funções de base, uma vez E_{n0} e u_{n0} são conhecidos, podemos tratar os termos $\left(\frac{\hbar}{m} \right) \vec{k} \cdot \vec{p}$ e $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ como perturbações em 2.32 sendo degenerada ou não degenerada. Esse esquema de aproximação para realização do cálculo da estrutura de bandas (massa efetiva) e das propriedades ópticas dos sólidos cristalinos é conhecido como: método $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

Desde que os termos de perturbação sejam proporcionais a \vec{k} , o método funciona muito bem para valores de \vec{k} pequenos. Em geral, o método pode ser aplicado para calcular a dispersão banda perto de qualquer ponto em torno de k_0 , desde que as funções

¹Vale salientar que estudamos os quatro portadores de carga, sendo eles: o elétron (EL), o buraco pesado (HH), o buraco leve (LH) e o *split-off* (SO).

de onda (ou os elementos da matriz de \hat{p} entre essas funções de onda) e as energias em k_0 sejam conhecidas [55].

Com auxílio de computadores potentes, é possível, através da utilização de um número suficientemente grande de u_{n0} , aproximar um conjunto completo de funções de base e calcular a estrutura de bandas ao longo de toda a zona de Brillouin [55]. Apenas um número limitado de lacunas de energia e elementos da matriz de \hat{p} , determinados experimentalmente, são usados como entrada para o cálculo computacional [55].

2.2.3 Equação da massa efetiva para uma banda não degenerada usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Para formular uma expressão que relaciona a teoria de perturbação não degenerada padrão, com a massa efetiva dos portadores de cargas, vamos levar em consideração que a estrutura de bandas possui um valor extremo de energia E_{n0} e que para este valor, a banda seja não degenerada. Consideraremos também a seguinte mudança na notação:

$$u_{n0} \equiv |n^{(0)}\rangle. \quad (2.34)$$

Se compararmos os resultados obtidos nas equações 2.24, 2.7, 2.28 e 2.29, com a expressão 2.32, percebemos a seguinte equivalência:

$$\lambda \equiv \left(\frac{\hbar}{m} \right), \quad (2.35)$$

podemos escrever as correções de energias até segunda ordem, utilizando essa representação, que faz referência a teoria de perturbação não degenerada, sendo assim:

$$E_{n\vec{k}}^{(0)} = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (2.36)$$

$$E_{n\vec{k}}^{(1)} = E_{n\vec{k}}^{(0)} + \left(\frac{\hbar}{m} \right) \langle n^{(0)} | \vec{k} \cdot \vec{p} | m^{(0)} \rangle, \quad (2.37)$$

$$E_{n\vec{k}}^{(2)} = E_{n\vec{k}}^{(1)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \left[\frac{(\langle n^{(0)} | \vec{k} \cdot \vec{p} | m^{(0)} \rangle)^2}{E_n - E_m} \right], \quad (2.38)$$

Os termos lineares em k desaparecem, devido ao fato de que $E_{n\vec{k}}^{(0)}$ foi assumido como sendo um extremo. É conveniente expressar a energia $E_{n\vec{k}}^{(2)}$, para pequenos valores de k , da seguinte forma:

$$E_{n\vec{k}}^{(2)} = E_{n\vec{k}}^{(1)} + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right), \quad (2.39)$$

subtraindo a equação 2.38 da equação 2.39 e fazendo algumas manipulações, encontramos:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{2}{k^2 m^2} \left[\frac{\left(\langle n^{(0)} | \vec{k} \cdot \vec{p} | m^{(0)} \rangle \right)^2}{E_n - E_m} \right], \quad (2.40)$$

onde m^* representa a massa efetiva do portador de carga para o caso em que não temos degenerescência. Esta equação também nos mostra que o portador de carga tem sua massa diferente, o que não ocorre com o movimento "livre", por causa do acoplamento entre os estados quânticos em diferentes bandas de energia, devido ao termo $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Na próxima seção, analisaremos o operador hamiltoniano, proposto para o nosso trabalho, quando o mesmo é aplicado a super-redes e heteroestruturas.

2.3 Descrição do hamiltoniano do sistema

Para o nosso trabalho, o hamiltoniano H de uma partícula, para uma heteroestrutura dopada, é composto por vários operados, sendo assim, temos a seguinte expressão:

$$H = H_0 + H_S + V_{HET} + \underbrace{V_C}_{V_A + V_H} + V_{XC} + V_E \quad (2.41)$$

onde H_0 é o hamiltoniano de energia cinética, H_S é o hamiltoniano de tensão (*strain*), devido aos diferentes valores parâmetros de rede, V_{HET} é o potencial de heteroestrutura, que surge com os diferentes valores de *gap*, V_C é o potencial de *Coulomb*, devido às cargas do sistema, V_{XC} é o potencial de *troca-correlação*, que surge por causa da interação dos diferentes tipos de portadores de cargas, e por fim V_E é o potencial elétrico, que surge devido a presença do campo elétrico externo. É importante destacarmos que o potencial de *Coulomb* é constituído de duas contribuições, a primeira surge devido à distribuição de aceitadores ionizados (V_A), a segunda surge devido à distribuição de buracos livres (V_H). Os cálculos foram considerados dentro da aproximação do funcional de densidade local (*LDA*) [48].

A equação 2.41 também é conhecida como *Equação da Massa Efetiva*, pois os elétrons em um cristal não estão em total liberdade, agem de acordo com o potencial periódico específico da rede, resultando numa movimentação dos elétrons extremamente diferente daquela observada no espaço livre.

A solução da equação 2.41 é obtida computacionalmente, através de um processo

autoconsistente. Para esse novo hamiltoniano, a equação 2.30 resulta em:

$$(H_0 + H_S + V_{HET} + V_C + V_{XC}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.42)$$

Na próxima seção, apresentaremos a *matriz de Luttinger-Kohn* para o operador de energia cinética.

2.3.1 Matriz 6×6 de Luttinger-Kohn

A construção das linhas e colunas do operador matricial 6×6 de *Luttinger-Kohn*, é feita a partir das autofunções de *Bloch*, ou seja, $\langle jm_j \vec{k} K | H_L | j' m_j' \vec{k}' K' \rangle$. Dentro do modelo de *Luttinger-Kohn*, temos seis funções, quatro degeneradas no topo da banda de valência, sendo elas: buracos leves e pesados com simetria Γ_8 , tal que $j = 3/2$, $m_j = 3/2$; $1/2$; $-3/2$; $-1/2$ e duas funções degeneradas para os buracos de *split-off* com simetria Γ_7 , tal que $j = 1/2$, $m_j = 1/2$; $-1/2$.

Apresentamos a matriz 6×6 de Luttinger-Kohn de energia cinética H_0 [54]:

$$H_0 = \begin{bmatrix} \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{R} \\ \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + \hat{T}) & i\frac{3}{\sqrt{2}}\hat{S} \\ \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S}^* & -i\frac{3}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) \\ 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2}\hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & i\frac{3}{\sqrt{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) & 0 \\ i\sqrt{2}\hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) \end{bmatrix} \quad (2.43)$$

onde \hat{Q} , \hat{R} , \hat{S} e \hat{T} são operadores diferenciais:

$$\hat{Q} = -\frac{1}{2m_0}[\hbar(\gamma_1(z) + \gamma_2(z))(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z))\hat{p}_z\hat{p}_z], \quad (2.44)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}[\gamma_2(z)(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3(z)k_x k_y], \quad (2.45)$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2m_0}2i\sqrt{3}(k_x - ik_y)\gamma_3(z)\hat{p}_z, \quad (2.46)$$

$$\hat{T} = -\frac{1}{2m_0}[\hbar(\gamma_1(z) - \gamma_2(z))(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1(z) + 2\gamma_2(z))\hat{p}_z\hat{p}_z], \quad (2.47)$$

com Δ sendo a energia do desdobramento de *spin*-órbita, γ_1, γ_2 e γ_3 são os parâmetros de Luttinger-Kohn. Porém, serão utilizados os parâmetros de Kane que podem ser escritos em termos dos parâmetros de Luttinger como:

$$\gamma'_1 = \gamma_1 - \frac{1}{3} \frac{E_p}{E_g}, \quad (2.48)$$

$$\gamma'_2 = \gamma_2 - \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_g}, \quad (2.49)$$

$$\gamma'_3 = \gamma_3 - \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_g}, \quad (2.50)$$

onde E_p é a energia de acoplamento da banda de condução com a banda de valência, E_g é a energia de *gap* ou energia da zona proibida, γ_1, γ_2 e γ_3 são os parâmetros de Luttinger-Kohn.

Para heteroestruturas, os materiais possuem parâmetros diferentes, por exemplo: os parâmetros de *Luttinger* dependem da direção de crescimento do material. Os novos parâmetros serão representados, de forma geral, pela função $f(z)$, tal que z é a direção de crescimento. sendo $\hat{p} = i\hbar\nabla$, operador momento, podemos escrever $f(z)$, como um produto de operadores, tal que:

$$f(z)\hat{p}_i\hat{p}_j \rightarrow \frac{1}{2} \left[\hat{p}_j^\dagger f(z)\hat{p}_i + \hat{p}_i^\dagger f(z)\hat{p}_j \right], \quad (2.51)$$

como $f(z)$ só depende de z , ele não comuta com operadores e admitem direções diferentes de z , sendo assim, por hermiticidade, o produto de operadores se transforma em:

$$f(z)\hat{p}_z\hat{p}_z \rightarrow \hat{p}_z^\dagger f(z)\hat{p}_z. \quad (2.52)$$

Considerando que, por simetria, $K \equiv K + k_z$ e $K' \equiv K' + k_z$, podemos contruir os elementos de matriz do operador de energia cinética a partir da representação da base de *Bloch* no espaço recíproco:

$$\langle jm_j\vec{k}K | H_0 | j'm'_j\vec{k}K' \rangle = \langle K | H_0 | K' \rangle. \quad (2.53)$$

Com isso, podemos construir os elementos de matriz para os operadores simetrizados:

$$\langle K | f(z) | K' \rangle = \frac{1}{d} \left[\int_0^d e^{iKz} f(z) e^{iK'z} dz \right], \quad (2.54)$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [\hat{p}_z^\dagger f(z) + f(z)\hat{p}_z] | K' \rangle = \frac{1}{d} \left\{ \int_0^d e^{-iKz} \frac{1}{2} [\hat{p}_z^\dagger f(z) + \hat{p}_z^\dagger f(z)] e^{iK'z} dz \right\}$$

$$= \frac{\hbar(K + K')}{2d} \int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{-iK'z} dz \quad (2.55)$$

e

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K' \rangle = \frac{\hbar^2}{d} K K' \int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{-iK'z} dz \quad (2.56)$$

onde temos que os vetores de base são: $|K'\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{iK'z}$ e $|K\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{iKz}$.

Teremos que analisar as integrais em duas situações distintas, primeiramente analisaremos $K = K'$, em seguida $K \neq K'$.

Para $K = K'$, temos que:

$$\langle K | f(z) | K \rangle = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n f_i(z_i - z_{i-1}), \quad (2.57)$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [\hat{p}_z f(z) + \hat{f}(z) p_z] | K' \rangle = \frac{\hbar K}{d} \sum_{i=1}^n f_i(z_i - z_{i-1}), \quad (2.58)$$

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K \rangle = \frac{\hbar^2 K^2}{d} \sum_{i=1}^n f_i(z_i - z_{i-1}). \quad (2.59)$$

Para $K \neq K'$, teremos:

$$\langle K | f(z) | K' \rangle = -\frac{i}{d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_i^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{-(K' - K)z_i} \right], \quad (2.60)$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [\hat{p}_z^\dagger f(z) + f(z) \hat{p}_z] | K' \rangle = -\frac{i\hbar(K' + K)}{2d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_i^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{-(K' - K)z_i} \right], \quad (2.61)$$

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K' \rangle = -\frac{-i\hbar^2 K' K}{d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_i^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{-(K' - K)z_i} \right]. \quad (2.62)$$

Determinadas as integrais, podemos substituir estes valores para determinação dos elementos da matriz 2.43, ou seja, para $K' = K$,

$$\hat{Q} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 d} \sum_{i=1}^n [(\gamma_1^i + \gamma_2^i)(z_i - z_{i-1})(k_x^2 + k_y^2) + K^2(\gamma_1^i - 2\gamma_2^i)(z_i - z_{i-1})], \quad (2.63)$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 d} \sum_{i=1}^n [(\gamma_1^i + \gamma_2^i)(z_i - z_{i-1})(k_x^2 + k_y^2) + K^2(\gamma_1^i + 2\gamma_2^i)(z_i - z_{i-1})], \quad (2.64)$$

$$\hat{S} = \frac{\sqrt{3}i\hbar^2}{m_0 d} (k_x^2 - ik_y^2) K \sum_{i=1}^n \gamma_3^i(z_i - z_{i-1}), \quad (2.65)$$

$$\hat{R} = -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0 d} \left\{ \left[\sum_{i=1}^n \gamma_2^i(z_i - z_{i-1}) \right] (k_x^2 - k_y^2) - 2i \left[\sum_{i=1}^n \gamma_3^i(z_i - z_{i-1}), \sum_{i=1}^n \gamma_3^i(z_i - z_{i-1}) k_x k_y \right] \right\}, \quad (2.66)$$

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n \Delta_i (z_i - z_{i-1}). \quad (2.67)$$

Para $K' \neq K$, temos que:

$$\hat{Q} = \frac{i\hbar^2}{2m_0d(K'-K)} \times \left[(\gamma_1^n + \gamma_2^n) - (\gamma_1 + \gamma_2) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \frac{i\hbar^2}{2m_0d(K'-K)} \times \left[(\gamma_1^n - 2\gamma_2^n) - (\gamma_1 - 2\gamma_2) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] KK', \quad (2.68)$$

$$\hat{T} = \frac{i\hbar^2}{2m_0d(K'-K)} \times \left[(\gamma_1^n + \gamma_2^n) + (\gamma_1 + \gamma_2) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + \gamma_2^i) + (\gamma_1^{i+1} - \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \frac{i\hbar^2}{2m_0d(K'-K)} \times \left[(\gamma_1^n - 2\gamma_2^n) + (\gamma_1 - 2\gamma_2) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) + (\gamma_1^{i+1} - 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] KK', \quad (2.69)$$

$$\hat{S} = \frac{2\sqrt{3}\hbar^2(k_x - ik_y)(K' + K)}{2m_0d(K' - K)} \left[(\gamma_3^n - \gamma_3) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right], \quad (2.70)$$

$$\hat{R} = \frac{\sqrt{3}i\hbar^2}{2m_0d(K'-K)} \times (\gamma_2^n - \gamma_2) + \frac{\sqrt{3}i\hbar^2}{2m_0d(K'-K)} \times \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_2^i - \gamma_2^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} (k_x^2 - k_y^2) + \frac{\sqrt{3}i\hbar^2}{2m_0d(K' - K)} \times -2i(\gamma_3^n - \gamma_3) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} k_x k_y, \quad (2.71)$$

e por fim,

$$\hat{\Delta} = \frac{-i}{d(K' - K)} (\Delta_n - \Delta) + \sum_{i=1}^{n-1} (\Delta_i - \Delta_{i-1}) e^{i(K'-K)z_i}. \quad (2.72)$$

Na próxima seção, apresentamos o modelo 8×8 de *Kane*.

2.3.2 Matriz de Kane 8×8 (*Zinc-Blend*)

O operador utilizado para a energia cinética, de acordo com o modelo de Kane, é apresentado na forma de uma matriz 8×8 , e descrita abaixo [54]:

$$H_0 = \begin{bmatrix} \hat{E}_g + \hat{A}k^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{E}_g + \hat{A}k^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} \\ 0 & 0 & \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} \\ 0 & 0 & \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S} & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) \\ 0 & 0 & 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2}\hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* \\ 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2}\hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) \end{bmatrix},$$

onde \hat{Q} , \hat{R} , \hat{S} e \hat{T} são operadores diferenciais, e já foram obtidos na seção 2.3.1. O parâmetro A , é definido como:

$$A = \frac{\hbar^2}{m_e^*}. \quad (2.74)$$

Neste modelo, consideramos que o termo de acoplamento entre as bandas de valência e condução é praticamente nulo, fato que se deve à energia do *gap* destes materiais ser grande o bastante para que não haja interação entre as bandas. A seguir apresentamos outro termo da equação 2.41, o potencial de tensão. Todavia apresentaremos antes uma breve descrição das propriedades mecânicas de um sólido.

2.4 Propriedades mecânicas de um sólido

As propriedades mecânicas num sólido surgem devido a interações exteriores, tais interações podem ser: tração; flexão; compressão; torção [56].

Há outras propriedades num sólido, que não necessariamente tem dependências mecânicas, sendo assim, podemos destacar: térmicas; magnéticas; elétricas; quânticas. Basicamente, as propriedades mecânicas estão ligadas as forças de interação dos átomos e moléculas que constituem o sólido.

2.4.1 Tensor de compressão

Na figura 2.1, apresentamos um corpo cilíndrico isotrópico, no qual o mesmo esteja submetido a forças externas, em cada ponto do corpo surgem interações mecânicas.

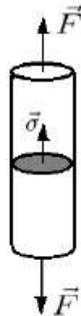


Figura 2.1: Representação das interações das forças externas que atuam num corpo.

As forças externas se equilibram com as forças internas, nos casos em que há equilíbrio estático, assim sendo, a resultante dessas forças obdecem a seguinte expressão,

$$\vec{F} = \int d\vec{S}\sigma, \quad (2.75)$$

onde σ representa a densidade superficial² e S a área de secção transversal. Como o cilindro é isotrópico, a expressão 2.75 se reduz a:

$$\sigma = \frac{F}{S} \quad (2.76)$$

Na figura 2.2, apresentamos a representamos “ σ_{ij} ” em 3D, e chamando “ σ_{ij} ”, o tensor da tensão normal a área de secção transversal, as componentes σ_{11} , σ_{22} e σ_{33} , são

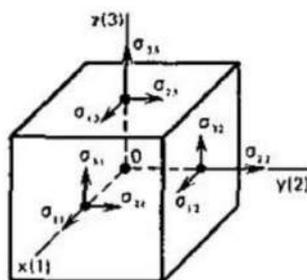


Figura 2.2: Representação do tensor de tensão [56].

conhecidas como tensões de compressão, já as componentes σ_{12} , σ_{21} , \dots , são conhecidas como tensões de cisalhamento, assim podemos construir o operador das tensões mecânicas,

$$T = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

Uma característica importante da tensão é o coeficiente de suavidade, que corresponde a razão entre as tensões de cisalhamento com as tensões de compressão [56].

2.4.2 Formulação do estado de deformação

Primeiramente, consideraremos deformações unidimensionais e infinitesimais, supomos também, uma corda esticada como na figura 2.3,

²Mais tarde chamaremos σ de tensor de compressão.

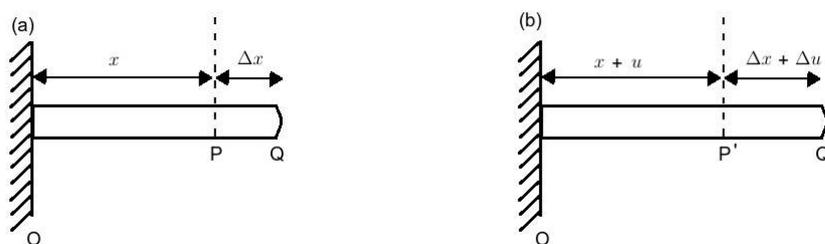


Figura 2.3: (a) Corda esticada com deformação Δx . (b) Corda esticada com deformação Δx e descolamento Δu .

Tomando $\overline{PQ} = \Delta x$ e $\overline{P'Q'} = \Delta x + \Delta u$, a deformação “ e ”, é dada por:

$$e = \frac{\overline{P'Q'} - \overline{PQ}}{\overline{PQ}} = \frac{\Delta x + \Delta u - \Delta x}{\Delta x} = \frac{\Delta u}{\Delta x}, \quad (2.77)$$

$$e = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{du}{dx}, \quad (2.78)$$

ou seja, a deformação de um ponto qualquer é a derivada do deslocamento, na respectiva coordenada. Para o caso tridimensional, figura 2.4, consideraremos deslocamentos u , v e w , relacionando-se aos eixos x , y e z , respectivamente:

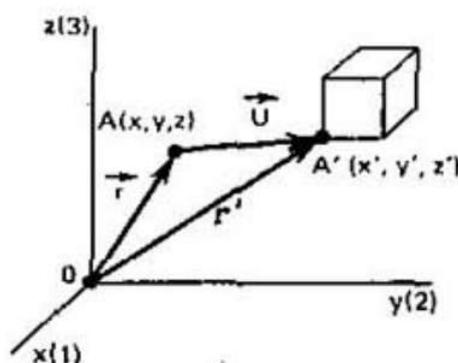


Figura 2.4: Representação das deformações em 3D, dentro de um corpo sólido [56].

Como, de acordo com a figura 2.4, temos que:

$$AA' = \vec{r}' - \vec{r} = U(u, v, w) \implies (x' - x, y' - y, z' - z) = (u, v, w) \quad (2.79)$$

Da mesma forma, como foi feito no caso unidimensional, podemos expressar a deformação em cada direção:

$$e_{11} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.80)$$

De maneira análoga, temos que:

$$e_{22} = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{\Delta v}{\Delta y} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.81)$$

$$e_{33} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta w}{\Delta z} = \frac{\partial w}{\partial z}. \quad (2.82)$$

Como as coordenadas de 'U' são funções lineares de x, y, e z, podemos generalizar a idéia para os termos cruzados do tensor de compressão, portanto,

$$du = e_{11}dx + e_{12}dy + e_{13}dz \quad (2.83)$$

$$dv = e_{21}dx + e_{22}dy + e_{23}dz \quad (2.84)$$

$$dw = e_{31}dx + e_{32}dy + e_{33}dz. \quad (2.85)$$

Os termos cruzados representam as projeções da deformação em cada um dos eixos, sendo assim, podemos construir um tensor de compressão total,

$$T_{total} = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} + e_{21} & e_{13} + e_{31} \\ e_{21} + e_{12} & e_{22} & e_{23} + e_{32} \\ e_{31} + e_{13} & e_{32} + e_{23} & e_{33} \end{pmatrix}.$$

Podemos ainda simplificar o tensor T_{total} , levando em consideração que as componentes $e_{ii} = \varepsilon_{ii}$ descrevem o alargamento da compressão e as componentes $e_{ij} = \varepsilon_{ij}$ equivalem as tensões de cisalhamento [56] . sendo assim,

$$T_{total} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}.$$

2.4.3 Lei de Hooke para os sólidos anisotrópicos

Com a lei de *Hooke*, é possível representar as componentes de tensão como combinações lineares das componentes de *strain*, para deformações consideradas suficientemente pequenas, temos que [56]:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix}, \quad (2.86)$$

onde σ_{ij} são as componentes de tensão, o índice i representa a direção da força aplicada, já o índice j representa a direção normal ao plano que a força foi aplicada e C_{ij} são as constantes elásticas ou módulos de elasticidade. A forma da expressão 2.86, fica reduzida quando tratamos cristais com simetria cúbica. A compreensão do tensor de rigidez elástica é de grande relevância, pois sua contribuição influencia diretamente o potencial de tensão (*strain potential*).

2.4.4 Potencial de Tensão do Sistema

A tensão é bastante investigada no âmbito das propriedades eletrônicas e ópticas dos semicondutores [57, 58]. Estes estudos são bastante relevantes para uma melhoria do entendimento das estruturas de bandas de semicondutores.

No processo de crescimento do material, geralmente, ocorre o descasamento dos parâmetros de rede (*lattice mismatch*). Os parâmetros de rede tentam manter-se iguais, causando um tensionamento mecânico, surgindo, portanto, uma deformação ou *strain*. O efeito de tensão será mais ou menos forte segundo o descasamento dos parâmetros de rede $\frac{\delta a}{a}$, que é descrito por:

$$\frac{\delta a}{a} = \frac{a_2 - a_1}{a_2}, \quad (2.87)$$

onde a_1 é o parâmetro de rede do material 1, o substrato, e a_2 é o parâmetro de rede do material 2, chamado de camada epitaxial. Se δa estiver entre 0,1% a 2% a tensão começa a afetar a estrutura de bandas. E se δa for maior do que 2% a estrutura de bandas é fortemente modificada [48]. Na figura 2.5, apresentamos o comportamento do parâmetro de rede quando há descasamento no crescimento do material. De forma geral, durante o casamento dos parâmetros de rede, ou tensionamento, ocorrem dois tipos de processos na camada, devido à atuação da força mecânica sobre a mesma: a compressão, que ocorre quando o parâmetro de rede da camada epitaxial é maior do que o parâmetro de rede do substrato, ou a distensão, que ocorre caso contrário [57]. A tensão biaxial que atua nestes sistemas pode ser decomposta em dois tipos de tensões: uniaxial e hidrostática. A tensão uniaxial ocorre quando a força atua numa única direção e a pressão hidrostática ocorre quando existe variação de volume (*aumentando ou diminuindo*) na camada. A tensão hidrostática causa no sistema um aumento ou diminuição na energia do *gap*. E a parte uniaxial da tensão é responsável pelas modificações dos perfis de potenciais nas bandas de valência. Na figura 2.6, encontramos essa descrição das

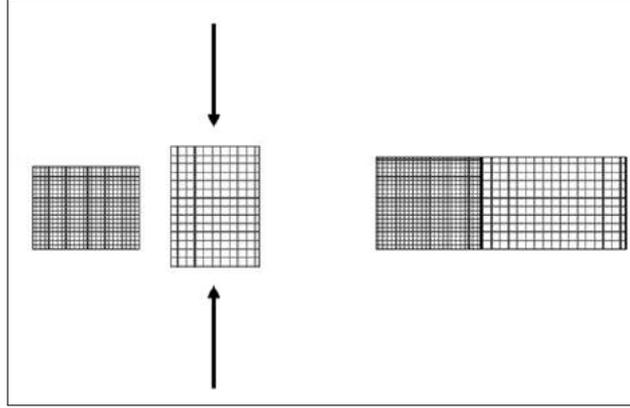


Figura 2.5: Esquema do descasamento e casamento de dois materiais com parâmetros de rede diferentes. [5]

tensão em 3D. Para a banda de valência temos a seguinte matriz de tensão [48]:

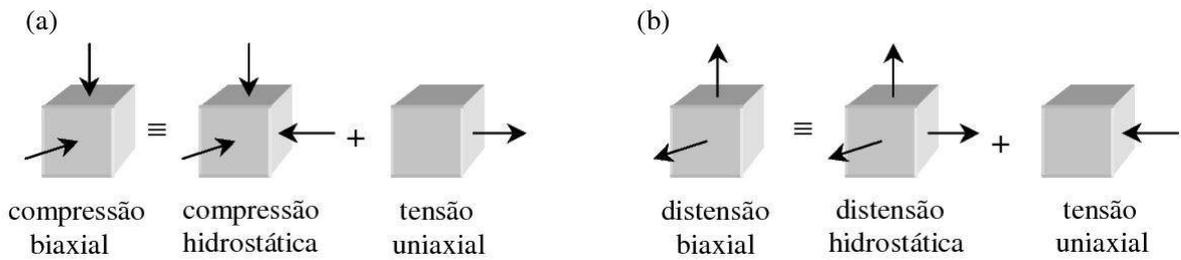


Figura 2.6: Representação da (a) tensão de compressão biaxial e (b) a distensão biaxial [5].

$$\begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\epsilon & 0 & 0 & -i\sqrt{2}\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon & 0 & 0 & -i\sqrt{2}\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2}\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2}\epsilon & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

com:

$$\epsilon \equiv b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{22}} \right), \quad (2.89)$$

onde b é o potencial de deformação de cisalhamento da banda de valência de acordo com a nomenclatura de *Bir-Pikus*, para a simetria de *strain* tetragonal e ϵ_{\parallel} o descasamento dos parâmetros de rede relativos. Os termos C_{11} e C_{12} são as constantes elásticas de *stiffness* ou módulos de elasticidade e tem dimensão de força por unidade de área ou energia por unidade de volume. A partir desta matriz, para o caso distendido, temos que o potencial

para buracos pesados e *split-off* descem de uma quantidade ϵ e o potencial para buracos leves sobe de uma quantidade 2ϵ , a figura 2.7 mostra o que mencionamos. Para o caso

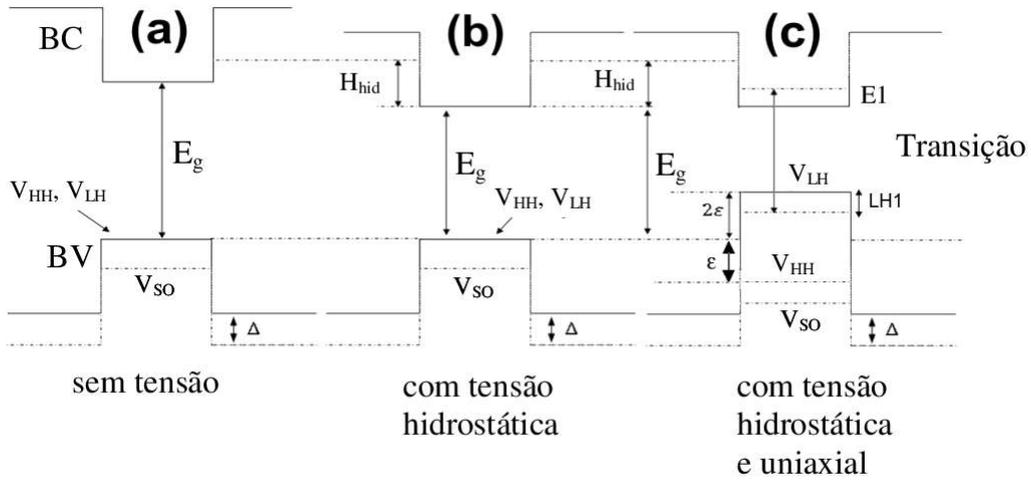


Figura 2.7: Representação esquemática do potencial de portadores da banda de valência (BV) (a) sem tensão; (b) com tensão hidrostática distensora e (c) com tensão hidrostática e uniaxial distensora. V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos leves e V_{SO} é o potencial de buracos de *split-off*.

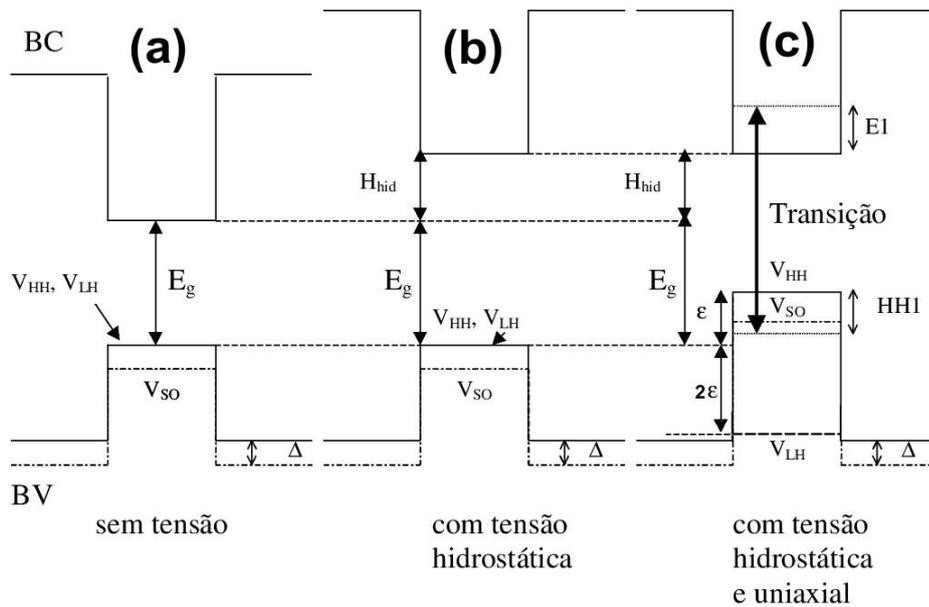


Figura 2.8: Representação esquemática do potencial de portadores da banda de valência (BV) (a) sem tensão; (b) com tensão hidrostática compressiva e (c) com tensão hidrostática e uniaxial compressiva. V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos leves e V_{SO} é o potencial de buracos de *split-off*.

em que a tensão é do tipo comprimida, o comportamento é o inverso. Na figura 2.8 esse comportamento fica melhor representado.

Este é o caso se a tensão for do tipo distendida, se for comprimida ocorrerá o contrário. O termo ϵ_{\parallel} é dada pela expressão abaixo:

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_2 - a_1}{a_1}, \quad (2.90)$$

Considerando os efeitos da tensão, iremos determinar as componentes hidrostáticas da banda de valência e condução. Estas componentes são dadas pelas expressões abaixo:

$$H_{Hid}^c = a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}), \quad (2.91)$$

e

$$H_{Hid}^v = a_v (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}), \quad (2.92)$$

onde a_c e a_v são os potenciais de deformação hidrostáticos da banda de condução e de valência, respectivamente. As quantidades ϵ_{ij} são os componentes da deformação. Utilizando as seguintes expressões:

$$\epsilon_{zz} = \epsilon_{\perp} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon_{\parallel}, \quad (2.93)$$

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel}, \quad (2.94)$$

note que apenas foi usado os termos de mesmo índice, os termos de índice cruzado são nulos devido ao fato da simetria do material estudado ser cúbica [5], além do mais o tensionamento é biaxial, compressivo ou distendido, como veremos mais adiante. Portanto, temos que:

$$H_{Hid} = H_{Hid}^c + H_{Hid}^v = 2\epsilon_{\parallel}a_g \left(1 - \frac{C_{11}}{C_{12}}\right), \quad (2.95)$$

$$a_g = a_c + a_v, \quad (2.96)$$

onde a_g é a soma do potencial de deformação hidrostática da banda de valência (a_v) e condução (a_c). Logo de forma geral, temos o potencial de tensão total é:

$$H_s = H_{Uniaxial} + H_{Hid}. \quad (2.97)$$

Na próxima seção, apresentaremos uma breve descrição do potencial de heteroestrutura.

2.4.5 Potencial de Heteroestrutura

Como nosso sistema é constituído por heteroestruturas, a diferença entre as energias dos *gaps* dos materiais, gera um potencial quadrado. Utilizando a representação da base de *Bloch* no espaço recíproco, temos que:

$$\langle jm_j\vec{k}K|V_{HET}|j'm_j'\vec{k}'K'\rangle = \langle K|V_{HET}|K'\rangle\delta_{jj'}\delta_{m_jm_j'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \quad (2.98)$$

A expressão 2.98, representa a descontinuidade da banda de valência, que leva em consideração o fato de termos qualquer elemento fora da diagonal principal desprezível, isso se justifica pelos simples fato de haver um único potencial para cada portador de carga [51]. O termo $\langle K|V_{HET}|K'\rangle$, representa os coeficientes de *Fourier* do potencial analisado, levando em consideração que a análise se faz ao longo da direção de crescimento do material. O próximo potencial a ser analisado será o potencial de *troca-correlação*.

2.4.6 Potencial de troca-correlação

O potencial de troca-correlação para um gás de elétrons homogêneo imerso num meio de constante dielétrica ε e raio de blindagem r_s , é encontrado através da parametrização de *Hedin-Lundqvist* [5]. A expressão é mostrada abaixo:

$$V_{XC} = -\frac{e^2}{2\varepsilon a_B^*} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon a_B^*} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0,0368 \ln \left(1 + \frac{21}{r_s} \right), \quad (2.99)$$

onde

$$a_B^* = \varepsilon \left(\frac{m_0}{m^*} \right) a_B \quad (2.100)$$

$$\alpha = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.101)$$

$$r_s = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^*)^3 \rho \right]^{\frac{1}{3}} \quad (2.102)$$

O primeiro termo da expressão (2.99) relaciona-se com a interação de troca entre os portadores e o segundo termo com a correlação Coulombiana. A expressão (2.99) não diferencia o tipo de portador e como há três deles (no caso os buracos), podemos escrevê-la de forma que a mesma faça distinção entre o raio de blindagem da troca e da correlação Coulombiana.

Portanto, as expressões para o potencial de troca-correlação para os três tipos de buracos podem ser escritos como [5]:

$$V_{XC}^{hh} = -\frac{e^2}{2\varepsilon(a_B^*)^{hh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s^{hh}} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon(a_B^*)^{hh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0,0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{hh}} \right), \quad (2.103)$$

$$V_{XC}^{lh} = -\frac{e^2}{2\varepsilon(a_B^*)^{lh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s^{lh}} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon(a_B^*)^{lh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0,0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{lh}} \right), \quad (2.104)$$

$$V_{XC}^{so} = -\frac{e^2}{2\varepsilon(a_B^*)^{so}} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s^{so}} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon(a_B^*)^{so}} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0,0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{so}} \right), \quad (2.105)$$

Tal que:

$$a_B^* = \varepsilon \left(\frac{m_0}{m^*} \right) a_B \quad (2.106)$$

$$R_s^q = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^{*q})^3 p(z) \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (2.107)$$

$$r_s^q = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^{*q})^3 p_q \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (2.108)$$

onde o índice $q = hh, lh, e so$, representa os buracos pesados, leve e *split-off*, respectivamente, os termos p_q e $p(z)$ são as probabilidades de ocupação dos portadores e a ocupação total, nessa ordem. É importante destacar que as ocupações relacionam-se com as massas efetivas dos portadores e ao potencial químico $\mu(z)$, conforme detalhado na referência [59].

A matriz para o potencial de troca-correlação é dada abaixo [5]:

$$V_{XC} = \begin{pmatrix} Q_{XC} & S_{XC} & R_{XC} & 0 & 0 & 0 \\ S_{XC}^* & T_{XC} & 0 & R_{XC} & 0 & 0 \\ R_{XC}^* & 0 & T_{XC} & -S_{XC} & 0 & 0 \\ 0 & R_{XC}^* & -S_{XC} & Q_{XC} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{XC}^{so} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{XC}^{so} \end{pmatrix}, \quad (2.109)$$

tal que

$$Q_{XC} = \frac{1}{4} [V_{XC}^{hh} + 3V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + V_{XC}^{hh} \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \quad (2.110)$$

$$T_{XC} = \frac{1}{4} [V_{XC}^{hh} + 3V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + V_{XC}^{lh} \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \quad (2.111)$$

$$R_{XC} = -\frac{\sqrt{3}}{4}[V_{XC}^{hh} - V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x - ik_y}{k} \right)^2, \quad (2.112)$$

$$S_{XC} = -i\frac{\sqrt{3}}{4}[V_{XC}^{hh} - V_{XC}^{lh}] \left(\frac{(k_x - ik_y)k_z}{k^2} \right), \quad (2.113)$$

$$Q_{XC}^{so} = V_{XC}^{so}. \quad (2.114)$$

A matriz (2.109) será do tipo diagonal se foram assumidos valores idênticos para V_{XC}^{lh} e V_{XC}^{hh} . Todavia vale ressaltar que as densidades de buracos leves e pesados são distintas em (2.103) e (2.104). Na próxima seção decreveremos o operador coulombiano.

2.4.7 Potencial de Coulomb no espaço recíproco

Para formulação dos elementos de matriz do potencial de *Coulomb* no espaço recíproco, vamos supor uma função de onda $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \langle s\vec{r}|n\vec{k} \rangle$ que obedece o teorema de *Bloch*, admita também as autofunções de *Bloch* $|jm_j\vec{k}K\rangle$, sendo assim, podemos representar a função de onda na base de *Bloch*:

$$\mathbb{I}|n\vec{k}\rangle = \sum_{jm_jK} |jm_j\vec{k}K\rangle \langle jm_j\vec{k}K|n\vec{k}\rangle, \quad (2.115)$$

$$\langle s\vec{r}|\mathbb{I} = \sum_{j'm'_jK'} \langle s\vec{r}|j'm'_jK'\rangle \langle j'm'_j\vec{k}K'|, \quad (2.116)$$

onde o termo $\mathbb{I} = \sum_{jm_jK} |jm_j\vec{k}K\rangle \langle jm_j\vec{k}K| = \sum_{j'm'_jK'} |j'm'_jK'\rangle \langle j'm'_j\vec{k}K'|$. Dentro do modelo de *Luttinger-Kohn*, as autofunções são dadas por:

$$\langle s\vec{r}|j'm'_j\vec{k}K'\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \right) e^{i(\vec{k}+K'\vec{e}_z)\vec{r}} \langle s\vec{r}|j'm'_j\rangle, \quad (2.117)$$

portanto, a função de onda $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$, escrita na base de *Bloch*, é dada por:

$$\langle s\vec{r}|n\vec{k}\rangle = \sum_{jm_jK} \langle jm_j\vec{k}K|s\vec{r}\rangle \langle n\vec{k}|jm_j\vec{k}K\rangle. \quad (2.118)$$

Definimos o potencial Coulombiano, obtido através da solução da equação de *Poisson*, como descrito abaixo:

$$\nabla^2 V_C(\vec{r}) = \left(-\frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \right) [N_A(\vec{r}) + p(\vec{r})], \quad (2.119)$$

onde $N_A(\vec{r})$ representa a distribuição de aceitadores ionizáveis e $p(\vec{r})$ representa a distribuição de buracos livres. O termo $e^2 [N_A(\vec{r}) + p(\vec{r})]$, também é conhecido como *densidade de carga (buracos)*, tal que a quantidade $p(\vec{r})$ depende da aproximação de Hartree,

onde a contribuição de cada buraco é levada em consideração, como isso temos que $p(\vec{r})$ é dada pela densidade de probabilidade, formulada a partir de $\psi_{n\vec{r}}(\vec{r})$, sendo assim:

$$p(\vec{r}) = \sum_s \sum_{n\vec{k} \text{ vazios}} |\langle s\vec{r} | n\vec{k} \rangle|^2. \quad (2.120)$$

Na próxima seção, apresentaremos uma breve descrição dos cálculos dos espectros de fotoluminescência teóricos.

2.5 Intensidade da Fotoluminescência

O experimento de fotoluminescência nos fornece a excitação ótica por energia externa dos pares elétrons-buracos. Os pares energizados relaxam em torno de uma distribuição quase em equilíbrio térmico (*termalização*). Os pares termalizados recombinam-se radiativamente para produzir a emissão (*recombinação*) [55]. Para nossa pesquisa, depois de determinarmos os operadores mencionados nas seções anteriores, resolvemos a equação da massa efetiva multibandas (EME) e a equação de *Poisson*, com as autofunções e os autovalores, determinamos a intensidade de fotoluminescência do sistema, que é dada pela aplicação da seguinte função ou expressão geral [59]:

$$I(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{\pi} \frac{e^2}{m_0c^3} \sum_{\vec{k}} \sum_{n_e} \sum_{n_q} \left[\frac{f_{n_en_q}(\vec{k}) N_{n_e\vec{k}} (1 - N_{n_q\vec{k}}) \gamma_{n_e\vec{k}n_q\vec{k}}}{(E_{n_e\vec{k}}(\vec{k}) - E_{n_q\vec{k}}(\vec{k}) - \hbar\omega)^2 + \gamma_{n_e\vec{k}n_q\vec{k}}^2} \right], \quad (2.121)$$

$$f_{n_en_q}(\vec{k}) = \frac{2}{m_0} \sum_{\sigma_e\sigma_q} \left[\frac{|\langle n_e\sigma_e\vec{k} | p_x | n_q\sigma_q\vec{k} \rangle|^2}{E_{n_e\vec{k}}(\vec{k}) - E_{n_q\vec{k}}(\vec{k})} \right]. \quad (2.122)$$

onde $f_{n_en_q}(\vec{k})$ representa a força do oscilador, $\langle n_e\sigma_e\vec{k} |$ representa o estado inicial, $|n_q\sigma_q\vec{k}\rangle$ representa o estado final, σ_e e σ_q são os valores de *spin* para elétrons e buracos. O termo, $N_{n_e\vec{k}}$ representa a probabilidade de ocupação dos elétrons na banda de condução e $(1 - N_{n_q\vec{k}})$ é a probabilidade de ocupação dos buracos na banda de valência. Os índices n_e e n_q estão relacionados aos estados de condução e de valência, respectivamente, da mesma forma E_{n_e} e E_{n_q} são os estados de energia para os elétrons e buracos, e por fim γ é o alargamento da transição eletrônica. As probabilidades de ocupações são dadas na expressão abaixo:

$$(1 - N_{n_q\vec{k}}) = \left[\frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E_{n_q\vec{k}}(\vec{k})}{k_B T}\right) + 1} \right], \quad (2.123)$$

$$(N_{n_e}) = \left[\frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E_{n_e\vec{k}}(\vec{k})}{k_B T}\right) + 1} \right], \quad (2.124)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e E_F é a energia de Fermi. Levando em consideração que a energia do *gap* varie para cada valor de temperatura analisado, usaremos a fórmula de *Varshni* [60] para realizar a correção, tal que:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (2.125)$$

onde E_0 representa a energia do *gap* do material à $T = 2\text{ K}$, α (eV/K) e β (K) representam os coeficientes da fórmula de *Varshni* que dependem do tipo de material estudado [3].

2.6 Programa Computacional

Em nossas investigações, foi necessário um breve entendimento sobre a manipulação do programa, bem como sua aplicação. O programa consiste na solução autoconsistente das Equações da Massa Efetiva e de Poisson, onde a convergência do cálculo ocorre quando a diferença entre o potencial e a energia de Fermi da penúltima e da última interações é menor que $0,1eV$ [54, 59]. Cada matriz, H_0 , H_S , V_{HET} , V_C e V_{XC} é montada. A Hamiltoniana total é então diagonalizada e calcula-se a energia de energia de Fermi através do preenchimento (*ocupação*) dos estados. A partir das ocupações dos estados calcula-se a distribuição de cargas no sistema e através desta o potencial de Coulomb via resolução da equação de Poisson. O potencial de troca-correlação também é calculado. Com estes potenciais é reiniciado o ciclo autoconsistente [5]. O programa que utiliza o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ descrito anteriormente foi criado em 1997 pelo laboratório de Novos Materiais Semicondutores do Instituto de Física da Universidade de São Paulo (USP). Este programa foi sendo aperfeiçoado com a inclusão de potenciais de tensão e magnéticos. Também foi possível aplicar a heteroestrutura semicondutoras nas fases cúbicas e wurtzita. Atualmente o programa está sendo desenvolvido numa parceria entre a Profa. Dra. Sara C. P. Rodrigues do Departamento de Física da UFRPE e o Prof. Dr. Guilherme M. Sipahi do Instituto de Física da USP de São Carlos para aplicação em sistemas de baixa dimensionalidade (*pontos quânticos*). Nós utilizamos o programa SSH (*Secure Shell*) para acesso remoto com as máquinas que rodam os programas, localizadas no Departamento de Física da UFPE e as novas máquinas localizadas no CENAPESQ na UFRPE. Utilizamos o mesmo

na aquisição dos dados calculados para construção de gráficos e interpolação dos mesmos. A seguir, encontra-se um fluxograma, figura 2.9, do programa descrito anteriormente.

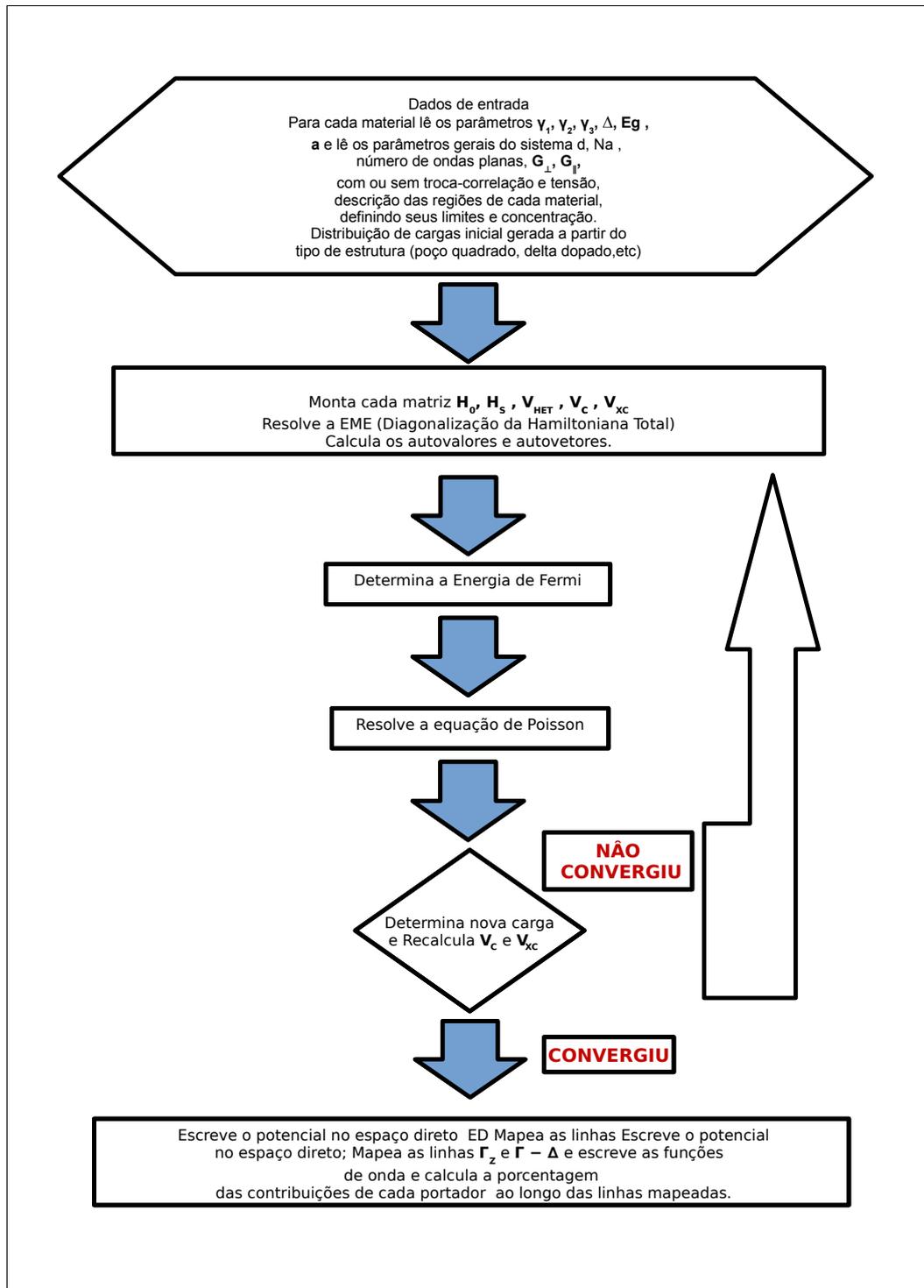


Figura 2.9: Diagrama esquemático autoconsistente para determinação das propriedades do material.

Ligas Ternárias de $GaAs_{1-y}N_y$

Nesta seção, apresentaremos uma descrição de como foram determinados os parâmetros da liga ternária de $GaAs_{1-y}N_y$, a partir daí, o nosso objetivo é compreender e descrever, o comportamento dos perfis de potenciais para todos os portadores de cargas, sejam eles buracos (HH, LH ou SO) ou elétrons (EL), as estruturas de bandas de condução e valência e os espectros de fotoluminescência teóricos, primeiramente, para sistemas não dopados, em seguida, sistemas dopados, e por fim, sistemas dopados e sob influência de um campo elétrico externo. Analisaremos vários sistemas baseados no grupo III - V, com nitrogênio, assim como, analisaremos, a importância das dimensões da barreira e/ou do poço e de que como estas, influenciam as propriedades optoeletrônicas nas estruturas estudadas.

3.1 Parâmetros do $GaAs_{1-y}N_y$

Na tabela 3.1, apresentamos os parâmetros que utilizamos para realização de nossos cálculos para interpolação linear, assim como, para os cálculos realizados na modelagem computacional, considerando o $GaAs$ e o GaN . Estes dados foram obtidos a partir de artigos teóricos e experimentais [14, 15, 61–63].

Nesta tabela são mostrados os parâmetros de Luttinger ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$), a energia de desdobramento de *spin órbita* (Δ), os parâmetros de rede de cada material (a), as constantes elásticas (C_{11} e C_{12}), as massas efetivas de cada portador envolvido: buraco pesado (m_{hh}), leve (m_{lh}), *split-off* (m_{so}) e o elétron (m_e), em função de m_0 , onde m_0 é a massa do elétron livre, ε é a constante dielétrica do material, b é o potencial de cisalhamento, e a_g é a soma do potencial hidrostático da banda de condução (BC) mais o potencial de

Tabela 3.1: Parâmetros do cristal para o $GaAs$ e o GaN extraídos da literatura [14, 15, 61–63].

	GaAs	GaN
γ_1	6,98	2,96
γ_2	2,06	0,9
γ_3	2,93	1,2
Δ (eV)	0,341	0,017
a (Å)	5,653	4,55
$m_{hh}^*(m_0)$	0,34	0,85
$m_{lh}^*(m_0)$	0,094	0,22
$m_{so}^*(m_0)$	0,172	0,34
ε	12,9	9,7
a_g (eV)	-8,33	-8,5
b (eV)	-2	-1,6
C_{11} (GPa)	122,1	293
C_{12} (GPa)	56,6	159

deformação hidrostático da banda de valência (BV).

Para a energia do gap buscamos obter informações dos artigos teóricos e experimentais, para tal usamos a figura 3.1a extraída da referência [14], onde representa o comportamento da energia do gap para a liga de $GaAs_{1-y}N_y$ em função da concentração de nitrogênio presente na mesma, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ (largura da barreira) e $d_2 = 8 \text{ nm}$ (largura do poço). A curva pontilhada representa uma regressão não linear (exponencial), visando maior proximidade com os dados experimentais. Vale salientar que quase todos os parâmetros aqui apresentados foram interpolados linearmente, sendo assim, apresentamos na equação 3.1, como foram feitos esses cálculos:

$$P(y) = (1 - y)GaAs + yGaN, \quad (3.1)$$

onde $P(y)$ representa o resultado da interpolação linear do parâmetro escolhido e y representa a concentração de nitrogênio. Da mesma forma que a energia do gap , o parâmetro de rede e do potencial de deformação de cisalhamento [15, 61], não possuem essa linearidade.

Nas figuras 3.1b e 3.2, temos o comportamento do potencial de deformação de cisalhamento e do parâmetro de rede, respectivamente, ambos em função da concentração de nitrogênio. É importante destacarmos, nas figuras 3.1b e 3.2, a forte dependência do

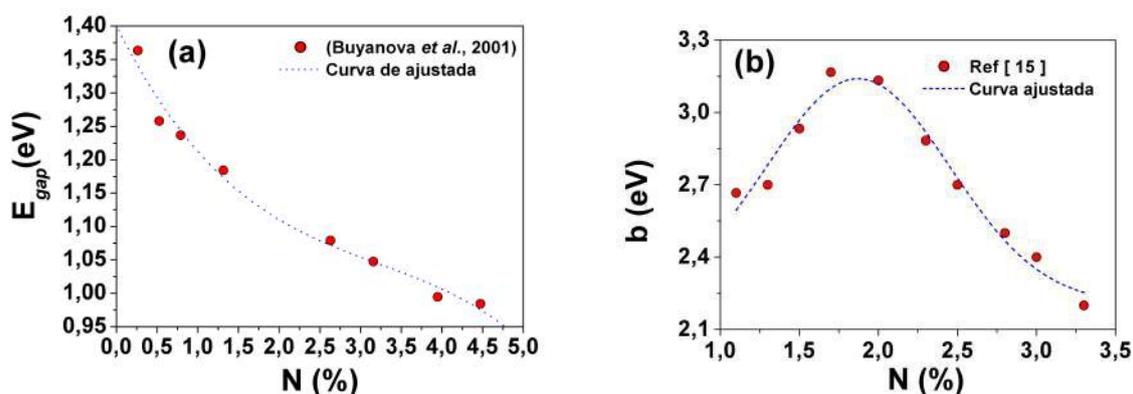


Figura 3.1: (a) Comportamento da energia do *gap* em função da concentração de nitrogênio [14] e (b) comportamento do potencial de deformação de cisalhamento em função da concentração de nitrogênio [15].

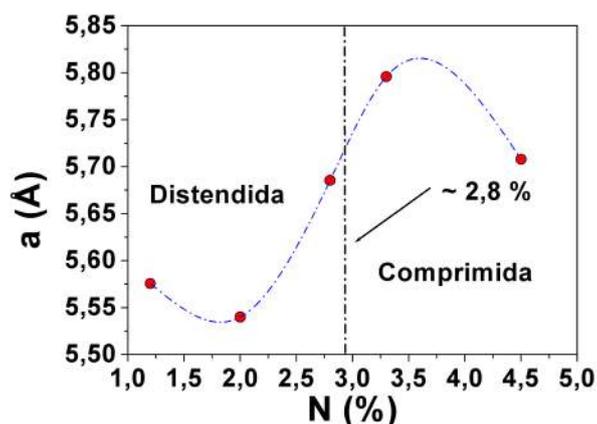


Figura 3.2: Comportamento do parâmetro de rede em função da concentração de nitrogênio.

potencial de deformação de cisalhamento e do parâmetro de rede com a concentração de nitrogênio. O potencial de deformação de cisalhamento, surge devido a uma distorção na estrutura do material, mas sem alteração significativa do volume total, ocasionada pelo aumento da concentração de nitrogênio e conseqüentemente da tensão, tal comportamento fica bem evidenciado na figura 3.1b. Ainda sobre esta mesma figura, a curva pontilhada representa uma aproximação *gaussiana* para os pontos do artigo [15].

Para a figura 3.2, observamos o comportamento do parâmetro de rede da liga, em função da concentração de nitrogênio. Este foi obtido ajustando-se o valor original do parâmetro de rede, ou seja, alteramos o valor encontrado do parâmetro de rede obtido linearmente, visando que a energia da transição eletrônica estivesse coerente com o valor

encontrado nas experiências [15] e levando em consideração os valores referentes as concentrações de nitrogênio mencionadas no artigo. Ainda falando da figura 3.2, observamos que, em todos os sistemas investigados, há tensionamento, que será: distendido para concentrações de y menores que 2,8%, o que justifica as energias de transições eletrônicas serem bem menores, se comparadas às energias de transições eletrônicas para valores de y superiores ou iguais a 2,8%, pois para tais concentrações, o tensionamento é do tipo comprimido. Vale salientar que, de 1,2% para 2,0%, e que de 3,3% para 4,5%, percebemos um leve queda no valor do parâmetro de rede da liga, ou seja, certamente isto causará uma queda da tensão, o que afetará, de maneira significativa as energias de transições eletrônicas. A razão e os detalhes serão apresentados na próxima seção. Ainda enfatizando o comportamento do parâmetro de rede na tensão do sistema, quando o tensionamento for distendido o parâmetro de rede da barreira é maior que o parâmetro de rede do poço, caso contrário, a tensão será comprimida. Entender o comportamento da energia do *gap*, do parâmetro de rede e do potencial de deformação de cisalhamento são de extrema importância para o trabalho, pois como mencionado anteriormente, os mesmos não obedecem uma linearidade.

Salientamos que foi usado para todas as análises 30% para a descontinuidade da banda de valência e, conseqüentemente, 70% para banda de condução [5]. Na próxima seção, apresentaremos nossas análises para sistemas de $GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem.

3.2 Sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ não-dopados

Os resultados a seguir foram obtidos para poços quânticos de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com estrutura cúbica. Realizamos comparações com dados da literatura [14, 15, 61]. O sistema consiste num poço quadrado de $GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem, e numa barreira de $GaAs$, levando em consideração os efeitos de tensionamento da liga. A largura do poço é de $d_2 = 8 \text{ nm}$ e a largura da barreira é de $d_1 = 20 \text{ nm}$. Utilizamos diversos valores de concentração de nitrogênio, entre eles: $y = 1,2\%$; $2,0\%$; $2,8\%$; $3,3\%$ e $4,5\%$ [14, 15].

3.2.1 Perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ não-dopados

Apresentamos na figura 3.3 os perfis de potenciais dos portadores de cargas: buracos, pesado (V_{HH}), leve (V_{LH}) e *split-off* (V_{SO}) e o elétron (V_{EL}). Para análise, mostraremos

as variações da concentração de nitrogênio para os casos em que: $y = 1,2\%$, $y = 2,0\%$, $y = 2,8\%$, $y = 3,3\%$ e $y = 4,5\%$. Estes resultados consistem no caso em que, alteramos o valor do parâmetro de rede (no programa), da liga, para que o valor do pico da energia de transição fosse o mais próximo possível do valor encontrado experimentalmente [15].

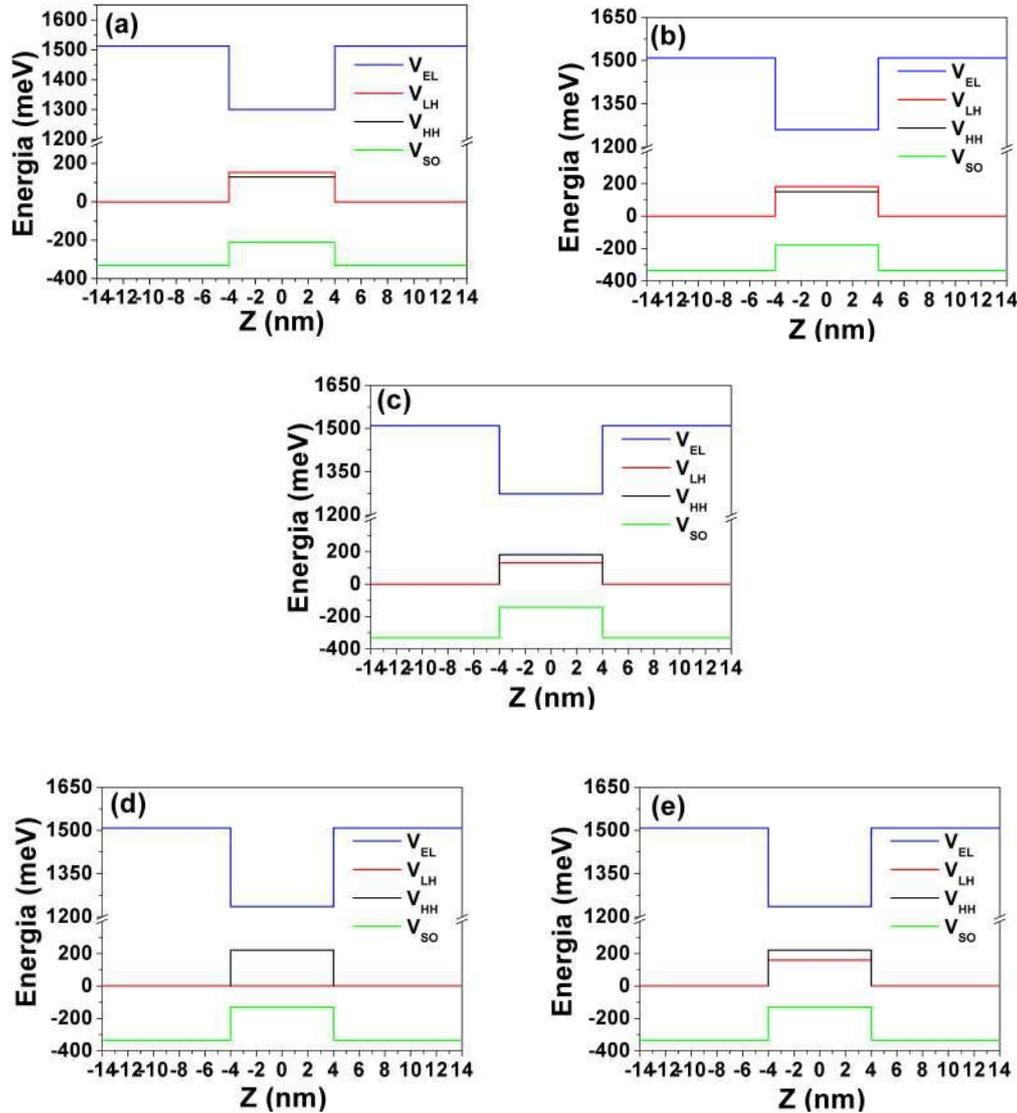


Figura 3.3: Perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, não dopado com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$, (c) $y = 2,8\%$, (d) $y = 3,3\%$ e (e) $y = 4,5\%$.

Em nosso trabalho, tivemos que reduzir o valor do parâmetro de rede e em outras análises tivemos que aumentar o mesmo, devido ao fato de que, para valores de $1,2\% \leq y < 2,8\%$ a tensão do sistema apresentava um caráter distendido, para valores $2,8\% \leq y \leq 4,5\%$, a tensão tinha caráter comprimida.

É importante observamos que comparando os gráficos da figura 3.3, há, de fato,

uma redução no *gap* nestes sistemas, o que ficará melhor evidenciado quando analisarmos os espectros de fotoluminescência teóricos. Também podemos perceber que nas figuras 3.3a e 3.3b, o estado fundamental é o buraco leve, o que caracteriza a tensão nessas concentrações ser do tipo distendida. Nas figura 3.3c, 3.3d e 3.3e, as energias de transições eletrônicas, passam a ter como estado fundamental o buraco pesado, isso devido ao efeito de tensionamento do tipo biaxial comprimido, que está ligado à diferença dos parâmetros de rede entre $GaAs$ e o $GaAs_{1-y}N_y$. Note que em 3,3%, ocorre o alinhamento para a banda de buraco leve, fato indicado nos dados experimentais [15]. O posicionamento de V_{LH} é fundamental e influencia significativamente a estrutura de bandas para o buraco pesado. Isso será observado melhor na seção 3.2.3.

Na próxima seção, apresentaremos os espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAsN$, sem dopagem.

3.2.2 Espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$

Na Figura 3.4 são apresentados, os espectros de fotoluminescência teórico à $T = 2 K$ para estudo do $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem e tensionado. A largura da barreira e do poço valem: $d_1 = 20 nm$ e $d_2 = 8 nm$, respectivamente, para os valores de $y = 1,2\%$, $2,0\%$, $2,8\%$, $3,3\%$ e $4,5\%$.

De acordo com a figura 3.4 é possível observar que para concentrações de y compreendidas entre $1,2\% \leq y \leq 2,8\%$, há um deslocamento dos picos para estados de menor energia, na direção do vermelho (*red-shift*). É importante destacar que, as energias de transições eletrônicas referente ao primeiro nível de elétron ($E1$) para o primeiro nível de buraco leve ($LH1$), $E1 - LH1$, ocorrem para as concentrações de $1,2\% \leq y \leq 2,0\%$, já que a tensão é distendida. Para $y = 2,8\%$, como a tensão é comprimida, temos o primeiro nível de elétron ($EL1$) para o primeiro nível de buraco pesado ($HH1$), $E1 - HH1$. Com concentrações acima de $2,8\%$, inicia-se um deslocamento dos picos (energia de transição eletrônica entre os níveis $E1 - HH1$) para estados de maior energia, em direção ao azul (*blue-shift*). O comportamento nestes espectros se deve basicamente a influência da tensão, advinda do parâmetro de rede, figura 3.2, e do potencial de cisalhamento, figura 3.1b, que influencia fortemente os estados de ocupação. Na próxima seção, analisaremos a estrutura de bandas desses mesmos sistemas

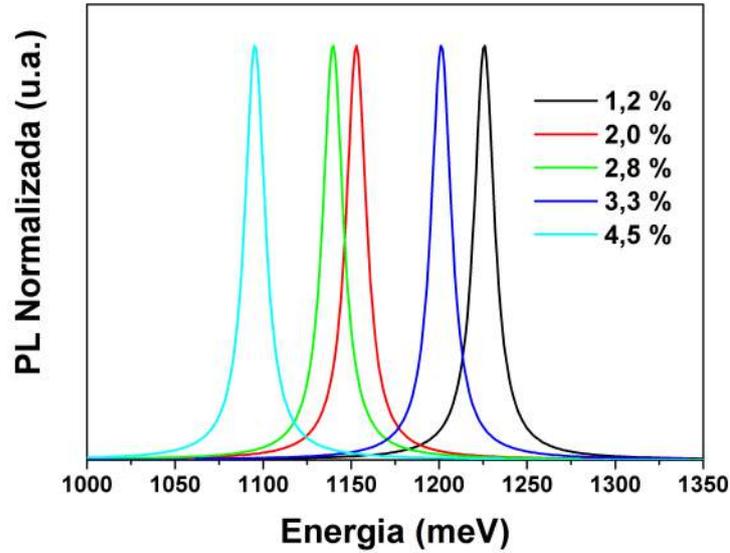


Figura 3.4: Espectros de fotoluminescência teórico à $T = 2 K$ para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, não dopado com $d_1 = 20 nm$, $d_2 = 8 nm$, $y = 1,2\%$ (curva preta), $y = 2,0\%$ (curva vermelha), $y = 2,8\%$ (curva verde), $y = 3,3\%$ (curva azul) e $y = 4,5\%$ (curva ciano).

3.2.3 Estrutura de bandas para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$

A seguir são apresentados as estruturas de bandas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, para os mesmos sistemas estudados na seção 3.2. Os estados de ocupação são indicados.

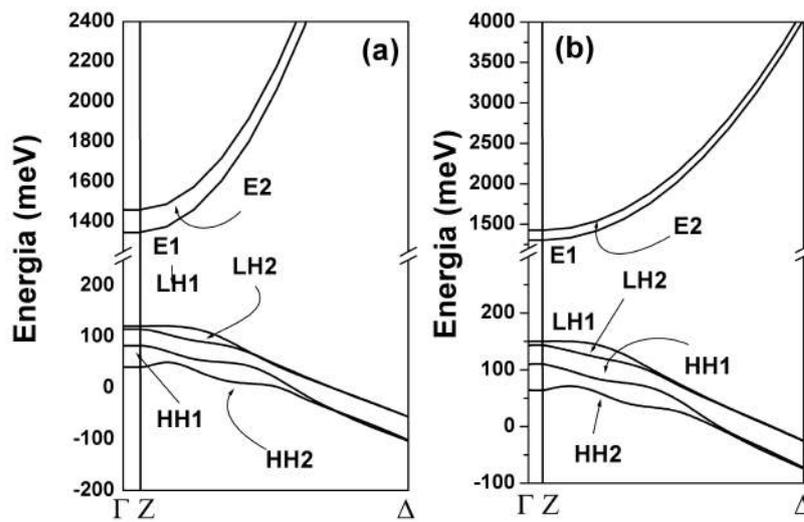


Figura 3.5: Estrutura de bandas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com tensão distendida, não dopado, $d_1 = 20 nm$ e $d_2 = 8 nm$, (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$.

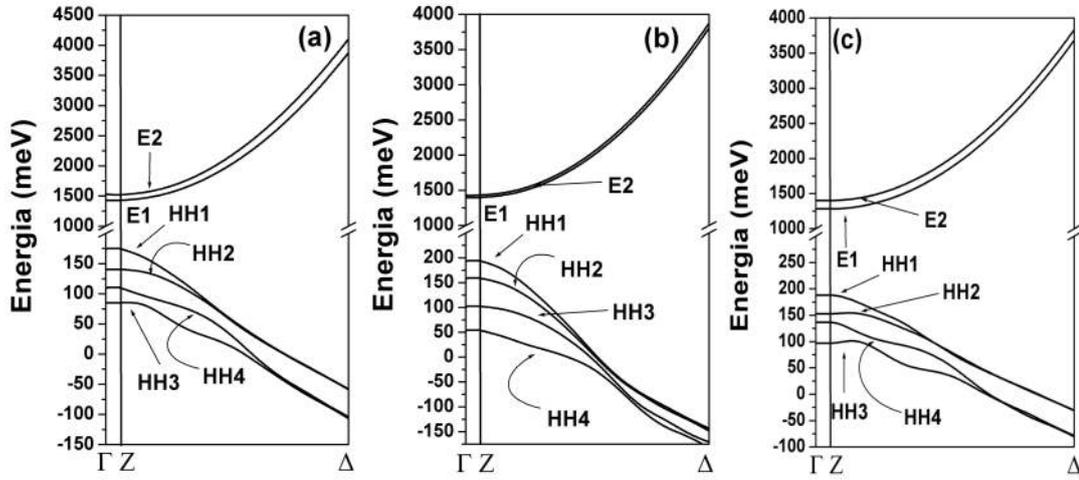


Figura 3.6: Estrutura de bandas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com tensão comprimida, não dopado, $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, (a) $y = 2,8\%$, (b) $y = 3,3\%$ e (c) $y = 4,5\%$.

Analisando a estrutura de bandas para as concentrações de nitrogênio que variam de 1,2% à 4,5%, temos uma forte não parabolicidade nas bandas de valência, justificadas pelos termos não nulos fora da diagonal da matriz de potencial da energia cinética, ou seja, a forte interação entre os diferentes buracos. Isto não é observado para a banda de condução, já que todos os termos fora da diagonal são nulos e portanto, as curvas são parabólicas, como esperado. Podemos observar que predominantemente os estados de buracos leves estão presentes em $y = 1,2\%$ e $y = 2,0\%$. Para $y \geq 2,8\%$ o domínio são os estados de buracos pesados. Novamente isso se deve aos tipos de tensões presentes nestes sistemas. A seguir apresentaremos nossas análises acerca dos espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem, mas sob influência de um campo elétrico externo.

3.2.4 Sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem e sob influência de campo elétrico externo

Nesta seção, apresentamos os resultados obtidos para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem, mas submetido a presença de um campo elétrico externo, na direção de crescimento do material, de módulo igual a $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$ [64].

As larguras de barreira e poço são $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$ e as concentrações de nitrogênio presente na liga variam de acordo com os seguintes valores: $y = 1,2\%$; $2,0\%$; $2,8\%$; $3,3\%$ e $4,5\%$.

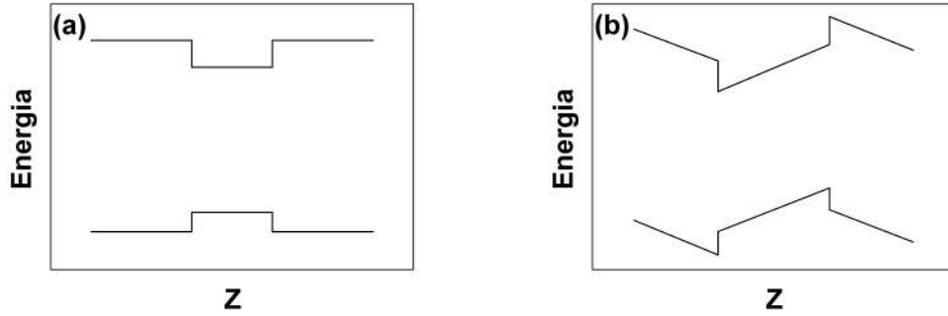


Figura 3.7: Representação esquemática para o perfil de potencial, (a) sem o campo elétrico e (b) com o campo elétrico.

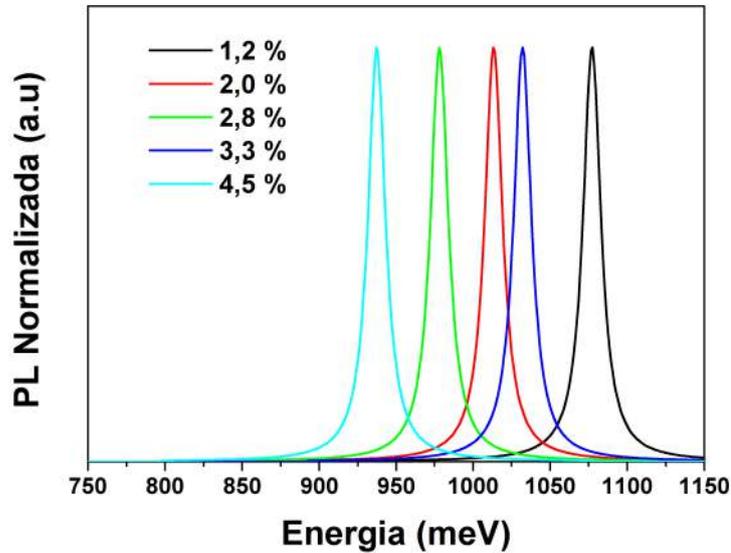


Figura 3.8: Espectros de fotoluminescência teórico a $T = 2 \text{ K}$ para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, sem dopagem, campo elétrico externo de módulo igual a $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$ e com variando de $y = 1,2\%$ (curva preta), $y = 2,0\%$ (curva vermelha), $y = 2,8\%$ (curva verde), $y = 3,3\%$ (curva azul) e $y = 4,5\%$ (curva ciano).

Na figura 3.7 é mostrada esquematicamente o perfil de potencial para o poço quântico sem influência do campo elétrico 3.7a e com a influência do campo elétrico 3.7b. Note, neste último caso, que os estados ficam mais localizados e isso explica o fato de que as

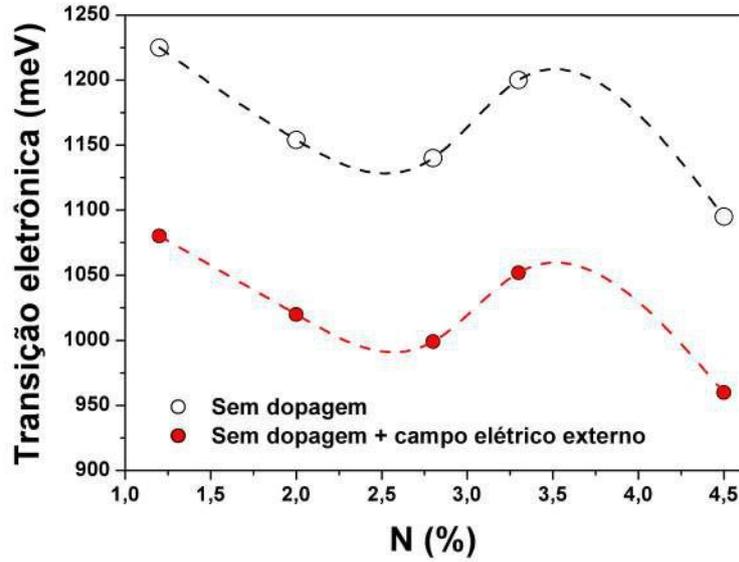


Figura 3.9: Energias de transições eletrônicas para o sistema de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem influência do campo elétrico externo (curva preta) e com a influência do campo elétrico externo (curva vermelha).

energias de transições eletrônicas são menores. Isto é importante para um estudo nas regiões do infravermelho com comprimentos de ondas maiores. Apesar dos efeitos de campo elétrico nestes sistemas, os estados permanecem os mesmos daqueles descritos para os sistemas não dopados e sem campo elétrico. Os picos, que se referem a energia de transição eletrônica do primeiro estado de elétron e o primeiro estado de buraco, seguem com a mesma nomenclatura da seção 3.2.2.

Na figura 3.8, percebemos que o sistema de $GaAs_{1-y}N_y$, submetido a presença do campo elétrico externo, aplicado na direção de crescimento do material, faz com que as energias de transições eletrônicas sejam bem menores, ou seja, os níveis de energia estão se aproximando do fundo do poço, se comparadas as energias de transições eletrônicas do mesmo sistema, sem a influência do campo elétrico.

Podemos comparar o comportamento das energias de transições eletrônicas do sistema

$GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ sem a influência do campo elétrico externo e submetido a influência do campo elétrico externo, se analisarmos a figura 3.9. Tal figura representa as primeiras energias de transições eletrônicas para cada caso, ou seja, a curva preta representa o sistema sem campo, a curva vermelha representa o sistema na presença do campo. No-

vamente é comprovado o fato de que a presença do campo elétrico diminui as energias de transições eletrônicas. Na próxima seção, apresentaremos nossas análises para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopados e sob influência de um campo elétrico externo.

3.3 Sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ dopados

Nesta seção, analisamos os cálculos realizados para sistemas dopados de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, levando em consideração os efeitos de tensão na liga e com a aplicação de um campo elétrico. Apresentamos os perfis de potenciais para todos os portadores de carga, no qual E_F , representa o nível de Fermi, posteriormente, apresentaremos os espectros de fotoluminescência teóricos.

3.3.1 Perfis de Potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopado e sob influência de campo elétrico externo

Apresentamos nesta seção os perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com largura de barreira e poço iguais a $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, respectivamente, além de possuir concentração de cargas, $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ e campo elétrico externo de módulo, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$.

Podemos perceber que a presença de um campo elétrico externo faz os níveis de energia ficarem mais localizados e portanto as energias de transições eletrônicas são menores, se comparados aos sistemas sem dopagem e sem ação do campo elétrico externo, devido ao *efeito Stark*, já descrito anteriormente. Observamos, como já foi mencionado nos casos sem dopagem, que há uma mudança do tipo de portador no estado fundamental. Para valores menores que 2,8%, temos como primeiro estado ocupado o buraco leve, já para valores maiores ou iguais a 2,8% o estado fundamental é o buraco pesado. Na próxima seção, apresentaremos os espectros de fotoluminescência para estes sistemas dopados.

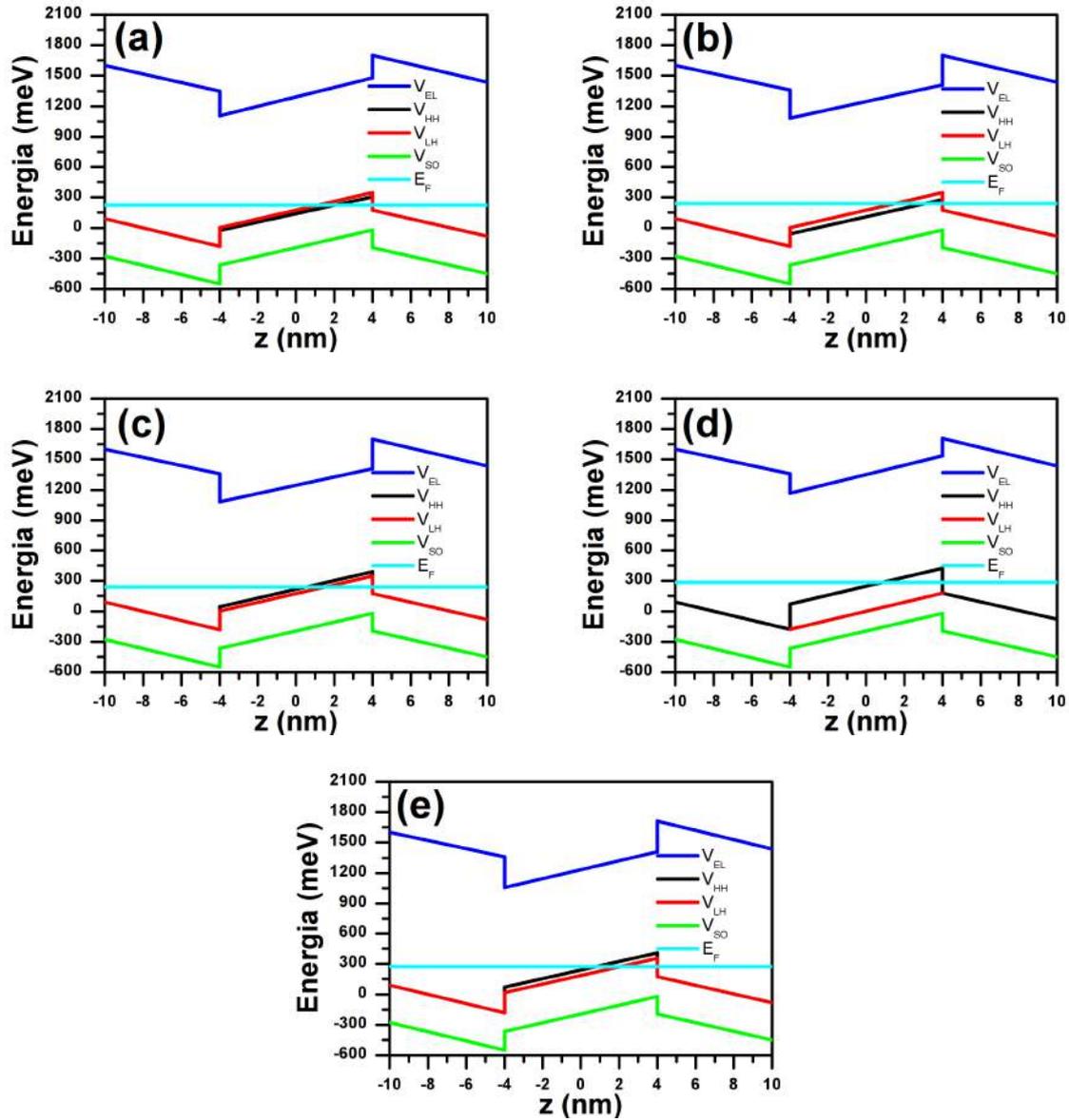


Figura 3.10: Perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$, (c) $y = 2,8\%$, (d) $y = 3,3\%$ e (e) $y = 4,5\%$.

3.3.2 Espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$

Apresentamos os espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, concentração de nitrogênio variando de 1,2% a 4,5%, submetido a presença de um campo elétrico externo de módulo igual a $4,646 \text{ MV/m}^2$ e $T = 2 \text{ K}$. Admitimos três concentrações: $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Nas figuras 3.11a, 3.11b e 3.11c, destacamos primeiramente que, independente

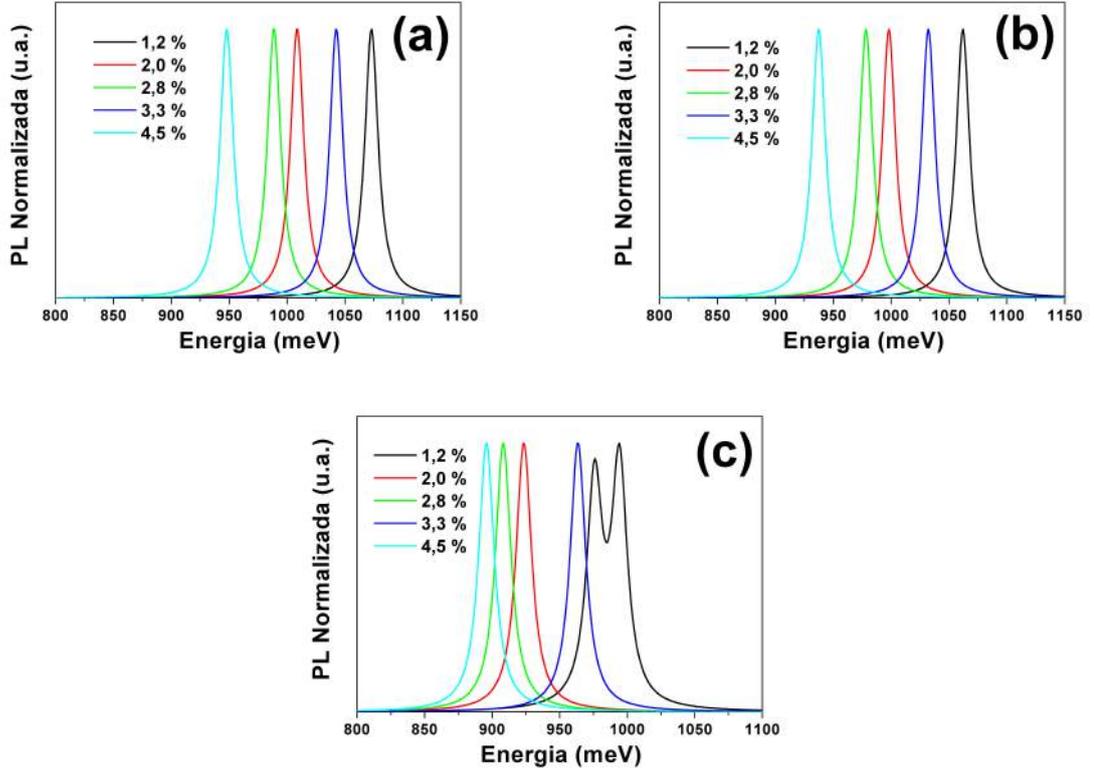


Figura 3.11: Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2\text{ K}$ para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 8\text{ nm}$, (a) $1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$, (b) $1,0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e (c) $1,0 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ e $|\vec{E}| = 4,646\text{ MV/m}$.

do sistema ser dopado, os estados de ocupação são os mesmos referentes aos casos sem dopagem estudados na seção 3.2.2. Comparando uma mesma concentração de nitrogênio, não temos diferença de tensão, a diferença que ocorre é devido a dopagem que modifica a distribuição de cargas. O aumento da concentração de N_A , faz com que as energias de transições eletrônicas sejam cada vez menores. Ainda acerca desse sistema, ressaltamos o comportamento em 3.11a e 3.11b, no qual os espectros são praticamente os mesmos, tal resultado já era esperado, pois a dopagem para estes casos é relativamente baixa. Todavia na figura 3.11c, os deslocamentos dos picos são mais evidentes, pois a concentração de cargas para esse sistema é alta ($\sim 10^{19}\text{ cm}^{-3}$). Além disso, observamos duas energias de transições eletrônicas para $y = 1,2\%$. Este comportamento é devido ao aumento da probabilidade de ocupação dos estados. Na figura 3.12 apresentamos a energia de transição eletrônica, referente a E1 - HH1 ou E1 - LH1 em função da concentração de nitrogênio. Para $1,2\% \leq y \leq 2,8\%$ temos um *red-shift* na energia devido a tensão distendida. Acima de $y = 2,8\%$, a energia de transição eletrônica aumenta, pois a tensão passa a ser com-

primida. Para $y = 4,5\%$ a energia de transição eletrônica diminui novamente e isto está relacionado aos efeitos de confinamento quântico, associado aos parâmetros não lineares que determinam a tensão.

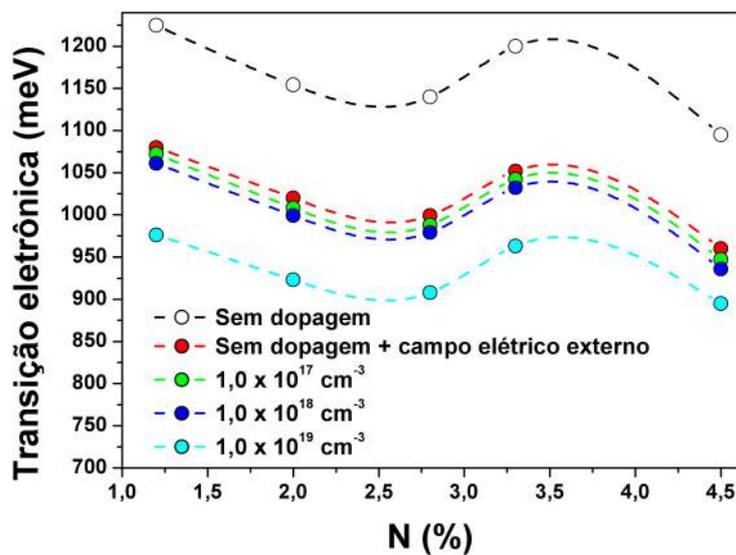


Figura 3.12: Comparação das energias de transições eletrônicas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, sem dopagem e com dopagem, todos submetidos a presença do campo elétrico externo.

A seguir, apresentaremos os espectros de fotoluminescência teóricos para os sistemas dopados, analisados aqui.

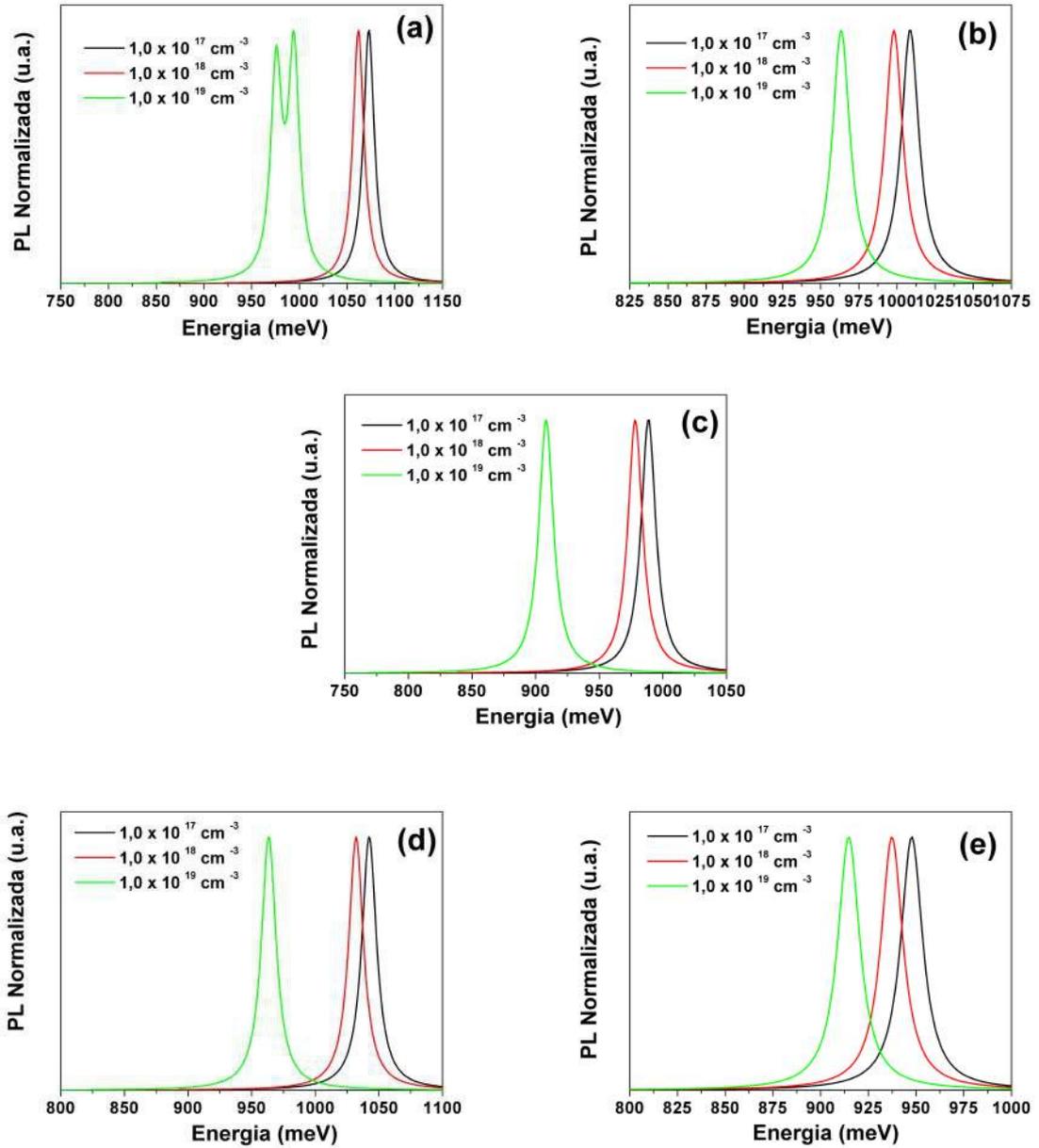


Figura 3.13: Espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$, (c) $y = 2,8\%$, (d) $y = 3,3\%$, (e) $y = 4,5\%$ e N_A igual a $1,0 \times 10^{17} cm^{-3}$ (curva preta), $1,0 \times 10^{18} cm^{-3}$ (curva vermelha) e $1,0 \times 10^{19} cm^{-3}$ (curva verde)

Analisando o comportamento da figura 3.13, percebemos que, independente da concentração de nitrogênio, as energias de transições eletrônicas tornam-se cada vez menores conforme aumentamos a concentração de aceitadores, N_A . O que está relacionado a influência dos potenciais relativos às cargas do sistema (*potencial de Coulomb e potencial de troca-correlação*). Uma análise melhor da figura 3.13 pode ser feita através da

figura 3.14, a qual identificamos as primeiras energias de transições eletrônicas referentes a cada concentração de nitrogênio e para cada concentração de carga, vale ressaltar que, para cada concentração de y , os estados fundamentais continuam sendo os mesmos dos casos analisados na seção 3.2.2. Analisando a figura 3.14, fica evidente que, os efeitos de tensão continuam sendo os mesmos aos dos sistemas sem dopagem, pois de 1,2% a 2,8%, continuamos identificando um *red-shift*, de 2,8% a 3,3%, observamos um *blue-shift*, já que para está situação o sistema tem o alinhamento da banda de buraco leve exatamente em 3,3%, já em 3,3% a 4,5%, percebemos um *red-shift*, fato que se justifica pela estrutura de bandas do buraco pesado, estar sendo fortemente influenciada pela estrutura de bandas do buraco leve, como mencionado na seção 3.2.1.

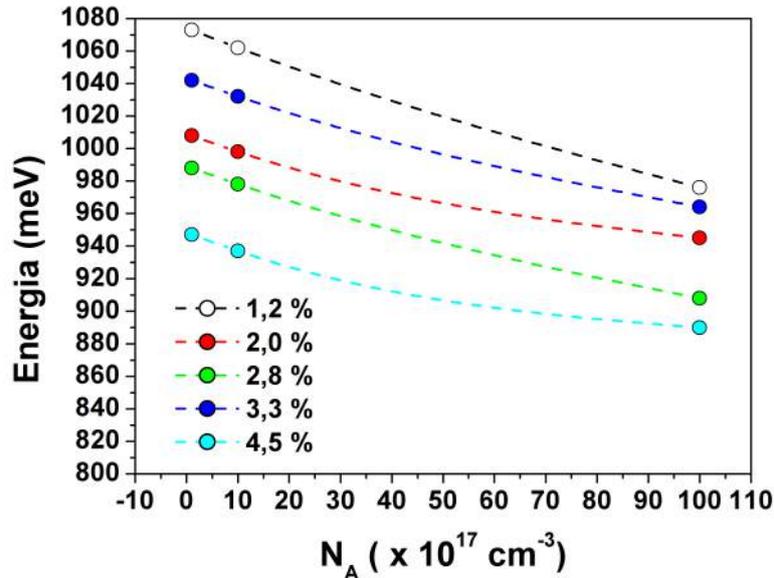


Figura 3.14: Energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-x}N_x$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, dopados e submetidos a presença de um campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$. No qual $y = 1,2\%$ (curva preta), $y = 2,0\%$ (curva vermelha), $y = 2,8\%$ (curva verde), $y = 3,3\%$ (curva azul) e $y = 4,5\%$ (curva ciano).

Apresentamos, na figura 3.15, os espectros de fotoluminescência teóricos para os sistemas aqui apresentados, no qual, verificamos o comportamento do sistema com o aumento da temperatura de $T = 2 \text{ K}$ a $T = 300 \text{ K}$. Observamos na figura 3.15, que os picos dos espectros, se deslocam para o sentido do vermelho com o aumento da temperatura, efeito já esperado, devido à renormalização do *gap*, em virtude da correção de Varshni [60], descrito na seção 2.5. Ainda acerca da figura 3.15, identificamos que para as concentração

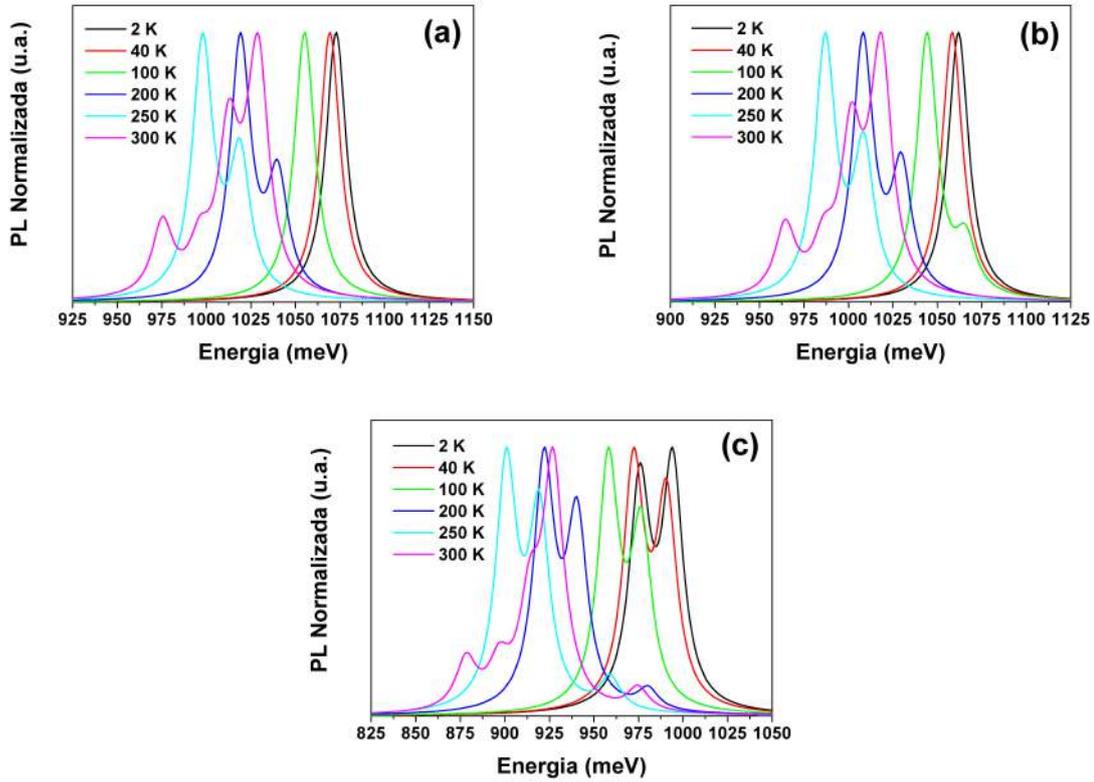


Figura 3.15: Espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAs_{0,988}N_{0,012}$, dopado, sob influência de campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, no qual variou-se (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e (c) $1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

de $y = 1,2\%$ o sistema possui tensão distendida, logo a primeira energia de transição eletrônica (pico) é E1 - LH1, para temperaturas de 2 K a 300 K . Vale salientar que para as figuras 3.15a e 3.15b, considerando a temperatura de 200 K e 250 K , percebemos o surgimento de dois picos referente aos estados E1 - LH1 e E1 - LH2. No entanto para 300 K , os quatro primeiros picos de energia de transição eletrônica são E1 - LH1, E1 - LH2, E1 - LH3 e E1 - LH4. Na figura 3.15c, percebemos que de 2 K a 100 K há dois picos energias de transições eletrônicas, referente aos estados E1 - LH1 e E1 - LH2. Para 200 K e 250 K , há três energias de transições eletrônicas, referente aos estados E1 - LH1, E1 - LH2 e E1 - LH3. E por fim, para 300 K , identificamos 5 picos de energias de transições eletrônicas, referente aos estados E1 - LH1, E1 - LH2, E1 - LH3, E1 - LH4 e E1 - LH5.

Além do mais, à medida que a temperatura aumenta, há uma maior probabilidade de termos mais estados ocupados, de acordo com a distribuição de *Fermi-Dirac*, conseqüentemente, existirá um maior número de picos, ou seja, verificamos que há maior

probabilidade das energias de transições eletrônicas surgirem.

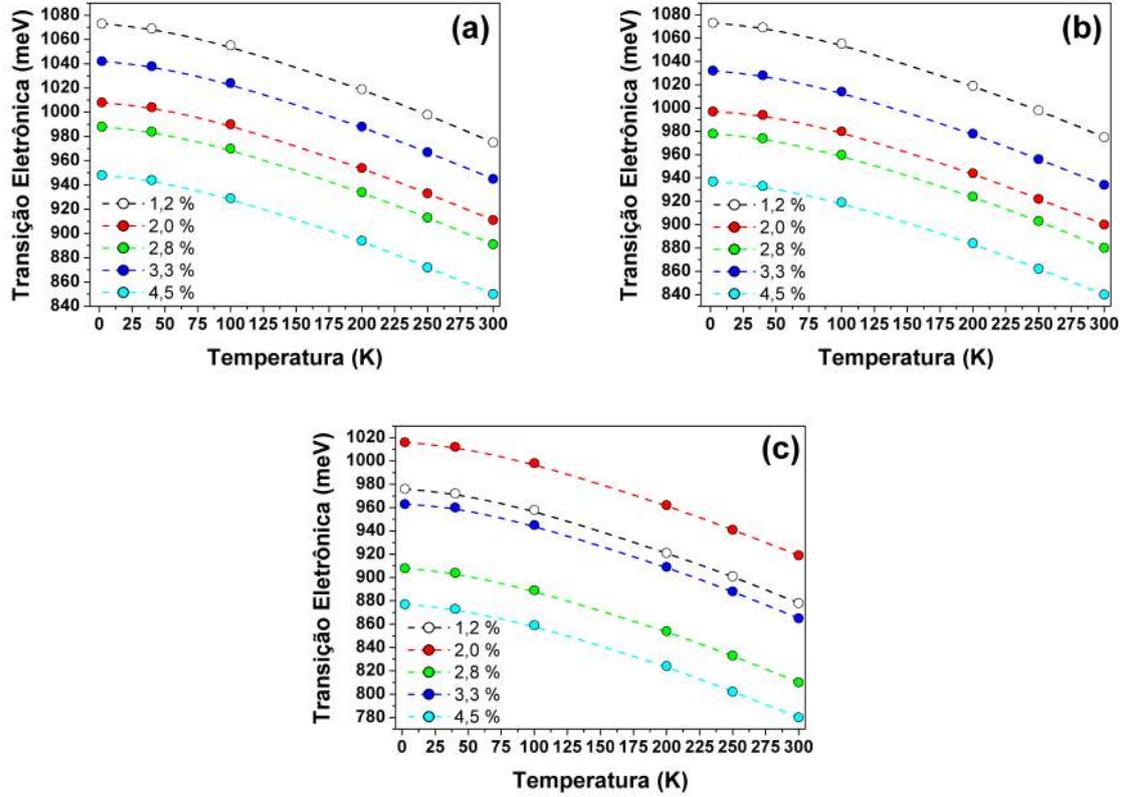


Figura 3.16: Energias de transições eletrônicas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopado, sob influência de campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, no qual variou-se (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e (c) $1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. $x = 1,2 \%$ (curva preta), $x = 2,0 \%$ (curva vermelha), $x = 2,8 \%$ (curva verde), $x = 3,3 \%$ (curva azul) e $x = 4,5 \%$ (curva ciano).

Na figura 3.16, identificamos que, para as concentrações de $y = 1,2\%$ e $y = 2,0\%$, como já mencionado anteriormente, a tensão é do tipo distendida, as primeiras energias de transições eletrônicas são E1 - LH1, para as temperaturas de 2 K a 300 K . Para as concentrações de $y = 2,8\%$ a $y = 4,5\%$, temos tensão do tipo comprimida, logo as primeiras energias de transições eletrônicas são E1 - HH1. Novamente temos um deslocamento para o vermelho com o aumento da temperatura, que como já explicado antes, está relacionado a renormalização da energia do *gap*. Também observamos um deslocamento para o vermelho ou azul conforme aumentamos a concentração de nitrogênio devido a efeitos de tensão explicados anteriormente.

Agora, nas figuras 3.17a e 3.17b apresentamos o comportamento da energia de

transição eletrônica do sistema de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, submetido a presença de um campo elétrico de módulo igual a $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$ e y variando de 1,2% à 4,5%, no qual, variamos o tamanho da barreira de 10 nm à 26 nm, mantendo o tamanho do poço em 8 nm, logo em seguida, variamos o tamanho do poço de 2 nm à 20 nm, mantendo o tamanho da barreira em 20 nm, respectivamente.

Na figura 3.17a, percebemos que a medida que o tamanho da barreira é aumentado, mantendo o poço fixo, faz com que os poços interajam menos entre si, ou seja, as energias de transições eletrônicas tornam-se cada vez maiores, resultado já esperado e característico de um sistema de *poços não interagentes*. Já na figura 3.17b, percebemos o comportamento inverso, a medida que o tamanho do poço é aumentado, fixando o tamanho da barreira, as energias de transições eletrônicas tornam-se cada vez menores, devido ao fato de que o sistema admite um regime de *poços interagentes*. Estes comportamentos explicam os deslocamentos para o vermelho ou azul nas figuras 3.17a e 3.17b.

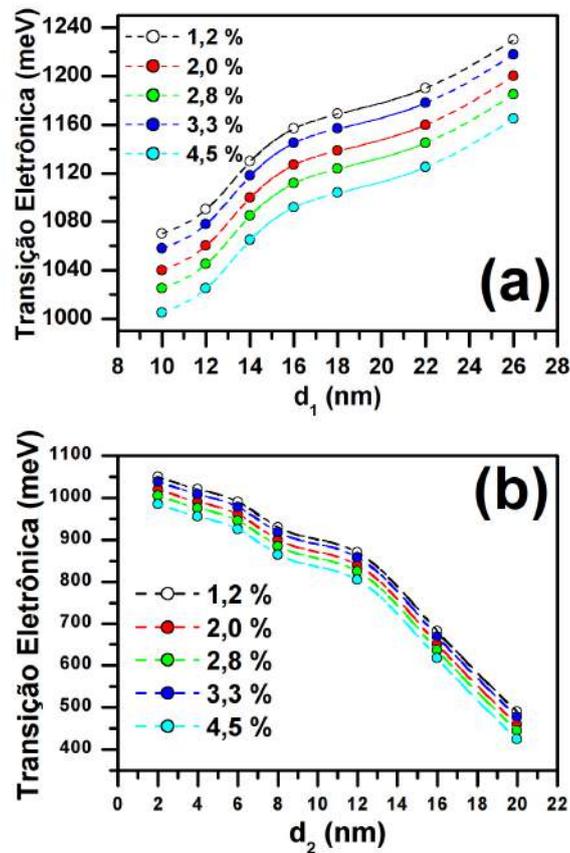


Figura 3.17: Energias de transições eletrônicas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, sob influência de campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, com (a) $d_2 = 8 \text{ nm}$ e $d_1 = 10 \text{ nm}$ à 26 nm , (b) $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 2 \text{ nm}$ à 20 nm .

Na próxima seção, apresentaremos os resultados obtidos para as ligas quaternárias de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$.

Ligas quaternárias de $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

Este capítulo é destinado a descrição de como foram realizadas as análises, acerca da liga quaternária de $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, para sistemas não dopados, sistemas dopados e sistemas sob influência de campo elétrico externo aplicado na direção de crescimento do material, em seguida, apresentaremos os resultados que encontramos: perfis de potenciais e espectros de fotoluminescência teórico para vários sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$.

	GaAs	InAs	GaN	InN
γ_1	6,98	20	2,96	3,77
γ_2	2,06	8,5	0,9	1,33
γ_3	2,93	9,2	1,2	1,6
Δ (eV)	0,341	0,39	0,017	0,003
a (Å)	5,653	6,058	4,55	5,03
$m_{hh}^*(m_0)$	0,34	0,35	0,85	0,84
$m_{lh}^*(m_0)$	0,094	0,026	0,22	0,16
$m_{so}^*(m_0)$	0,172	0,146	0,34	0,244
ϵ	12,9	15,15	9,7	15,34
a_g (eV)	-8,33	-6,08	-8,5	-12,984
b (eV)	-2	-1,8	-1,6	-1,2
C_{11} (GPa)	122,1	83,3	293	187,4
C_{12} (GPa)	56,6	45,3	159	125

Tabela 4.1: Parâmetros do cristal para o $GaAs$, $InAs$, GaN e o InN extraídos da literatura [15,61-63].

Na tabela 4.1, apresentamos os parâmetros que utilizamos para realização de nossos cálculos para o $GaAs$, $InAs$, GaN e o InN , sendo que estes dados foram fornecidos de artigos teóricos e experimentais. As grandezas desta tabela já foram descritas no capítulo 3.

Vale salientar que todos os parâmetros aqui apresentados foram interpolados linearmente, com excessão da energia do gap . Apresentamos na equação 4.1 como foram feitas essas interpolações lineares:

$$P(x, y) = (1 - x)(1 - y)GaAs + x(1 - y)InAs + y(1 - x)GaN + xyInN, \quad (4.1)$$

onde $P(x; y)$ representa o resultado obtido da interpolação linear do parâmetro escolhido, onde x varia de 3% a 20% e y varia de 1,2% a 4,5%, e representam as concentrações de índio e nitrogênio, respectivamente.

Para a energia do gap buscamos obter informações dos artigos teóricos e experimentais, para tal usamos os gráficos 4.1a e 4.1b, onde os mesmos foram obtidos a partir das referências 4, 14, 15 e 64, respectivamente, no qual representam o comportamento da energia do gap em função da concentração de nitrogênio.

A junção dos gráficos 4.1a e 4.1b foi necessária, pois não tínhamos nenhuma referência que descrevia o comportamento da energia do gap para a liga quaternária de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ em função da concentração de índio. Para tal, na figura 4.1c, apresentamos uma estimativa do comportamento da energia do gap para a liga quaternária de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$. Em todos os três casos, 4.1a, 4.1b e 4.1c, construímos uma curva ajustada, que melhor descrevia o comportamento dos pontos em cada caso.

Na próxima seção, apresentaremos os resultados obtidos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, sem dopagem e sob influência de campo elétrico externo.

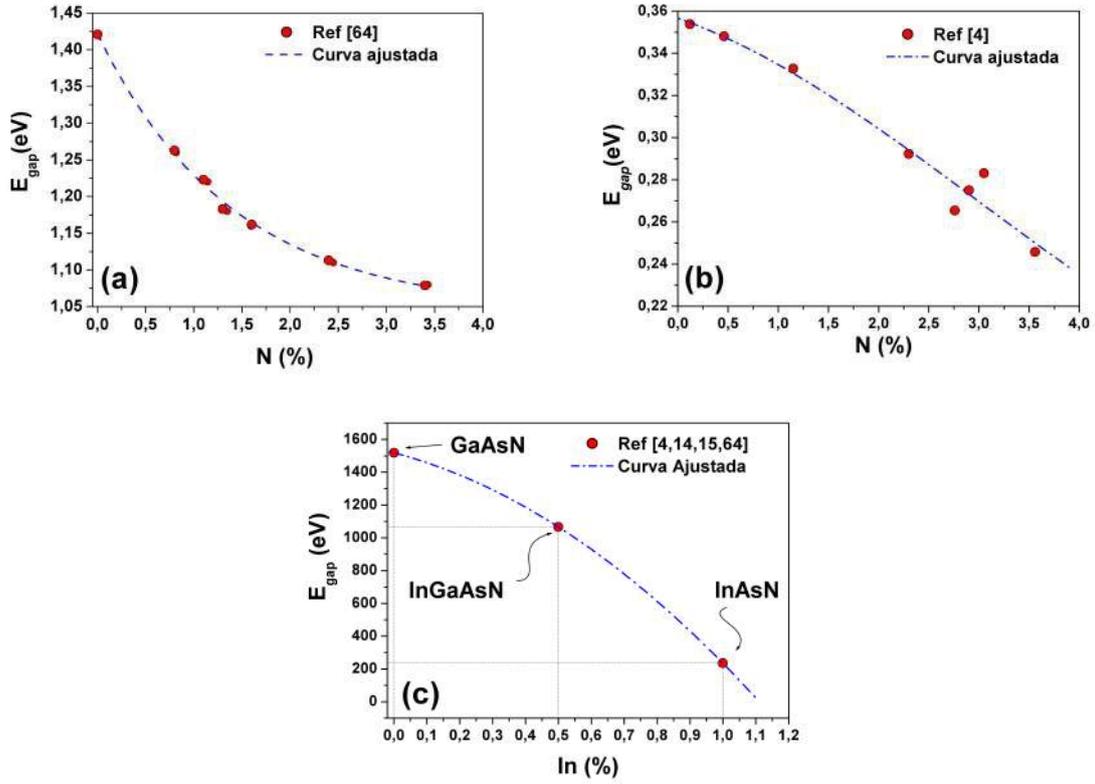


Figura 4.1: Comportamento da energia do *gap* para os sistemas de: (a) $GaAs/In_xGa_{1-x}N$, (b) $GaAs/InAs_{1-y}N_y$ e (c) $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N$.

4.1 Sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ não dopados

Nesta seção, apresentamos os resultados obtidos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, sem dopagem, submetido a presença de um campo elétrico externo de módulo igual a $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, correspondendo a largura da barreira e do poço, respectivamente.

4.1.1 Espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ não dopados

Na figura 4.2 apresentamos os espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, no qual a concentração de índio é fixa em 3,0% e a concentração de nitrogênio é variada de 1,2% a 4,5%. Podemos observar que com o aumento de nitrogênio, a energia de transição eletrônica diminui. Isto ocorre devido ao fato da tensão ficar mais comprimida. Apesar da inserção de ni-

trogênio causar uma tensão distendida nas ligas de $GaAs_{1-y}N_y$, isto não ocorre nas ligas de $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, pois a presença do índio modifica o parâmetro de rede, de forma a manter os sistemas sempre com tensão comprimida. Assim teremos sempre como estado fundamental o buraco pesado. Logo as primeiras energias de transições eletrônicas apresentadas correspondem a E1 - HH1.

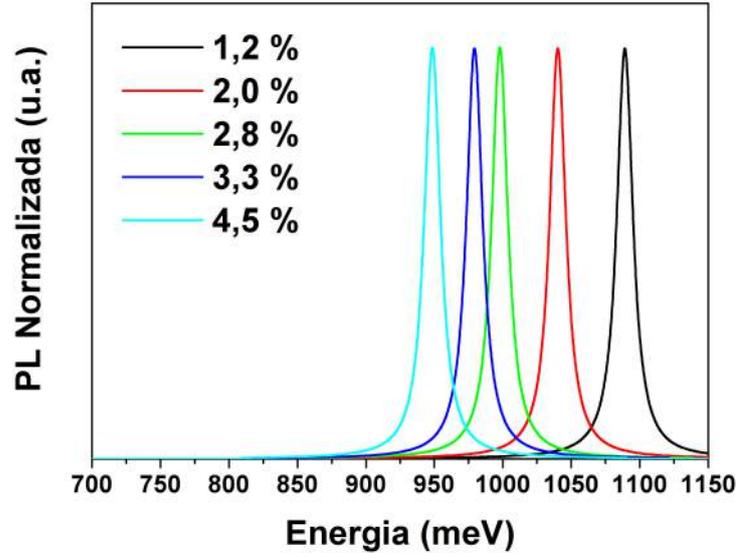


Figura 4.2: Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2$ K para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, sem dopagem, sob influência de campo elétrico externo, no qual $x = 3,0\%$ e y varia em: 1,2%; 2,0%; 2,8%; 3,3% e 4,5%.

Na figura 4.3, apresentamos os espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, sem dopagem e submetido a presença de um campo elétrico externo, a concentração de nitrogênio é fixa em 1,2% e a concentração de índio aumenta de 3,0% a 20,0%, observamos que, com o aumento da concentração de índio, como ocorrido com o sistema da figura 4.2, as energias de transições eletrônicas diminuem.

A explicação para este comportamento se deve ao fato de que com o aumento da concentração de índio, este aumenta a tensão no sistema e diminui a energia do *gap*, isso força os níveis de energia a ficarem cada vez mais profundos, e as energias de transições ficarem menores. Acerca da figura 4.4, mostramos os sistemas de $GaAs_{1-y}N_y$, com concentrações de 1,2%, 2,0%, 2,8%, 3,3% e 4,5% e comparamos aos casos do $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$.

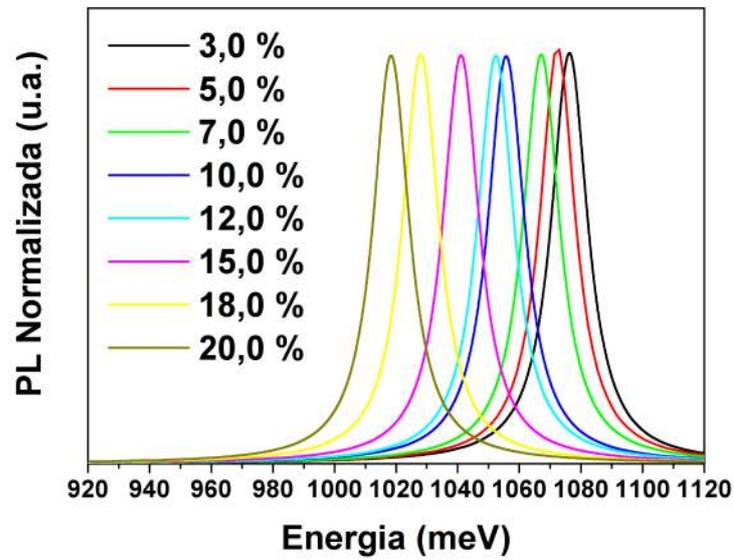


Figura 4.3: Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2$ K para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, sem dopagem, sob influência de campo elétrico externo, no qual $y = 1,2\%$ e x varia em: 3,0%, 5,0%, 7,0%, 10,0%, 12,0%, 15,0%, 18,0% e 20,0%.

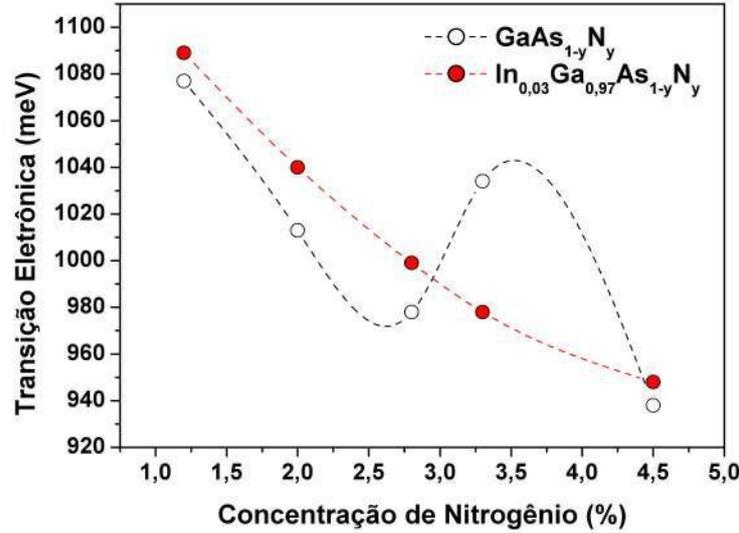


Figura 4.4: Energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/In_{0,03}Ga_{0,97}As_{1-y}N_y$ (curva preta) e $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem, sob influência de campo elétrico externo, no qual y varia de 1,2% a 4,5%, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$ em ambos os casos.

Podemos observar que, em média, as energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ são menores, se comparadas com as energias de transições eletrônicas do $GaAs/In_{0,03}Ga_{0,97}As_{1-y}N_y$. Além do mais, de $y = 1,2\%$ a $y = 3,3\%$, o sistema de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ apresenta um *blue-shift* considerável, devido ao fato de que para essa concentração, o estado fundamental deixa de ser LH e passa a ser HH. No entanto, o sistema de $GaAs/In_{0,03}Ga_{0,97}As_{1-y}N_y$, não apresenta esse comportamento, o que se explica pelo fato de o estado fundamental já estar bem definido, HH.

Na próxima seção, apresentaremos nossas análises realizadas para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, dopados, submetidos a um campo elétrico externo.

4.2 Sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ dopados

Os cálculos a serem apresentados foram realizados em sistemas dopados de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, levando em consideração os efeitos de tensão e de dopagem

com campo elétrico ao longo da direção de crescimento. A largura do poço foi de $d_2 = 8 \text{ nm}$ e a largura da barreira foi de $d_1 = 20 \text{ nm}$. Primeiramente, variamos a concentração de índio e logo em seguida, para concentração de nitrogênio, utilizamos os valores de: 1,2%; 2,0%; 2,8%; 3,3%; 4,5%, uma concentração fixa de índio em 3,0%, além da dopagem, N_A , na qual utilizamos três valores $1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, e da aplicação de um campo elétrico externo de módulo, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$.

Apresentamos os perfis de potenciais para todos os portadores de carga e, posteriormente, apresentaremos os espectros de fotoluminescência teóricos.

4.2.1 Perfis de potenciais para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

Nesta seção, apresentamos os perfis de potenciais para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$. Analisamos, a princípio, os casos no qual x varia de: 5,0%; 7,0%; 10,0%; 12,0%; 15,0%; 18,0%; 20,0%, com $y = 1,2\%$, fixamos a largura da barreira em $d_1 = 20 \text{ nm}$ e largura do poço em $d_2 = 8 \text{ nm}$.

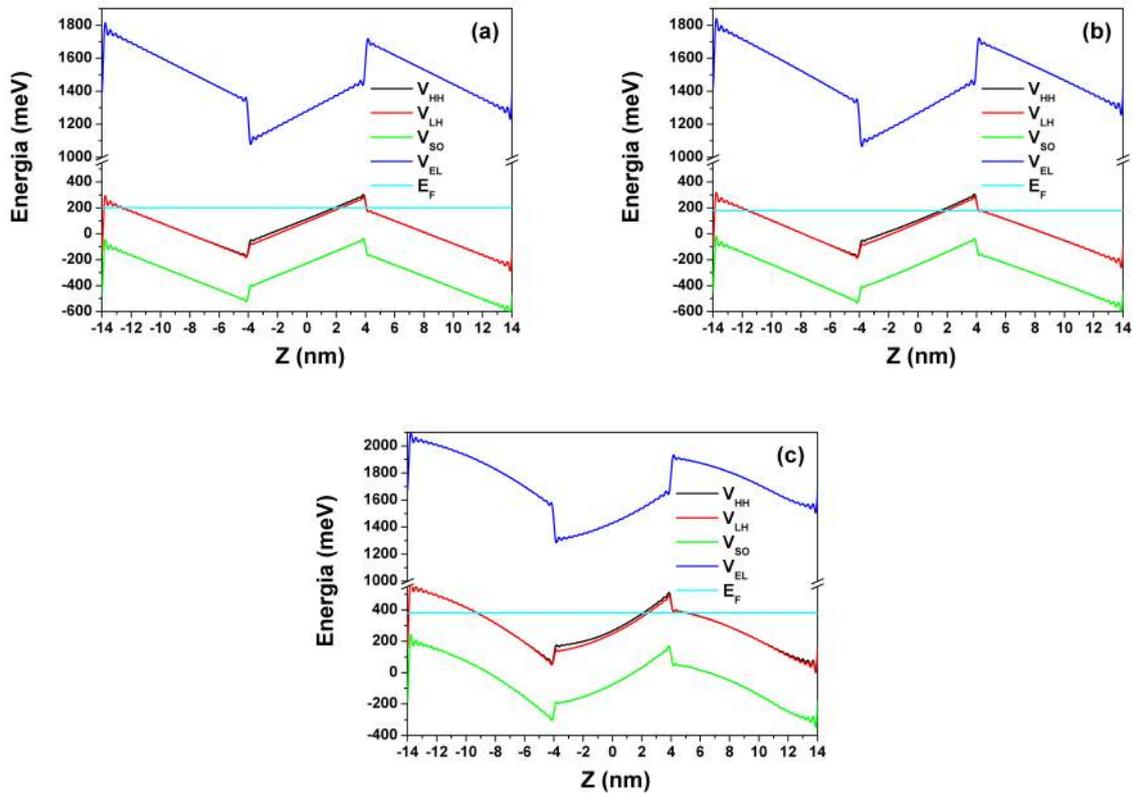


Figura 4.5: Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 5,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F).

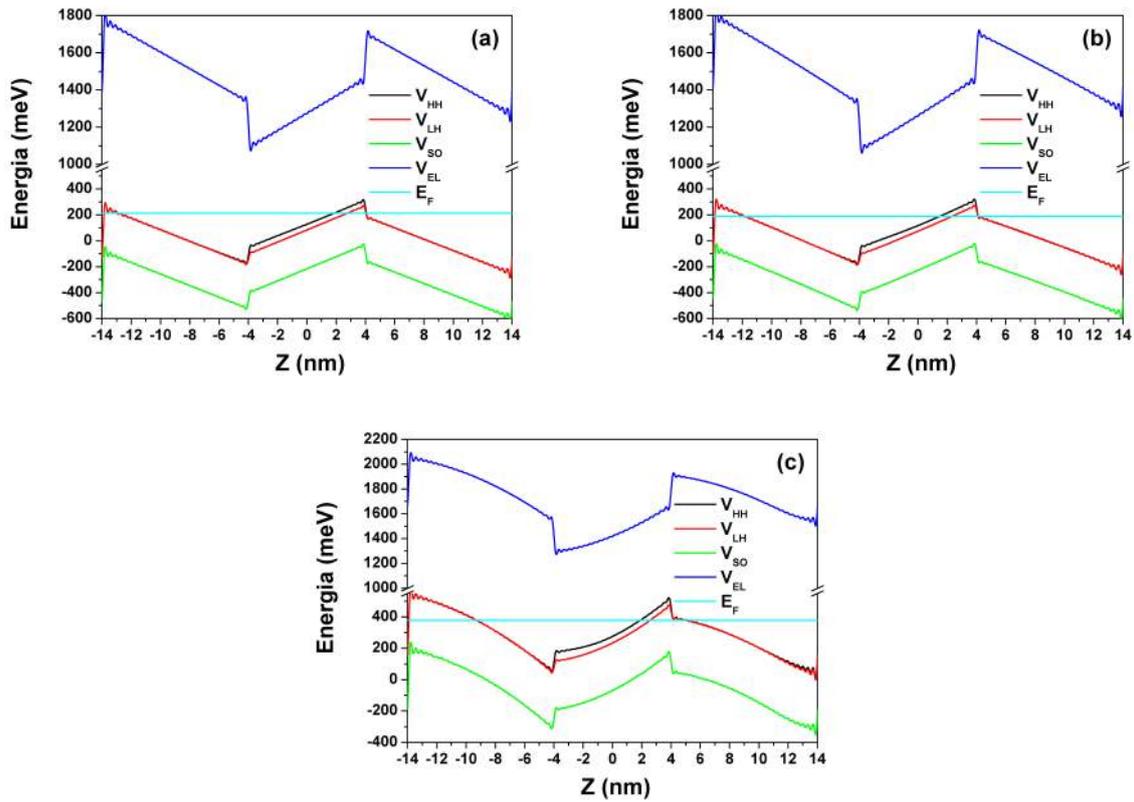


Figura 4.6: Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 10,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F).

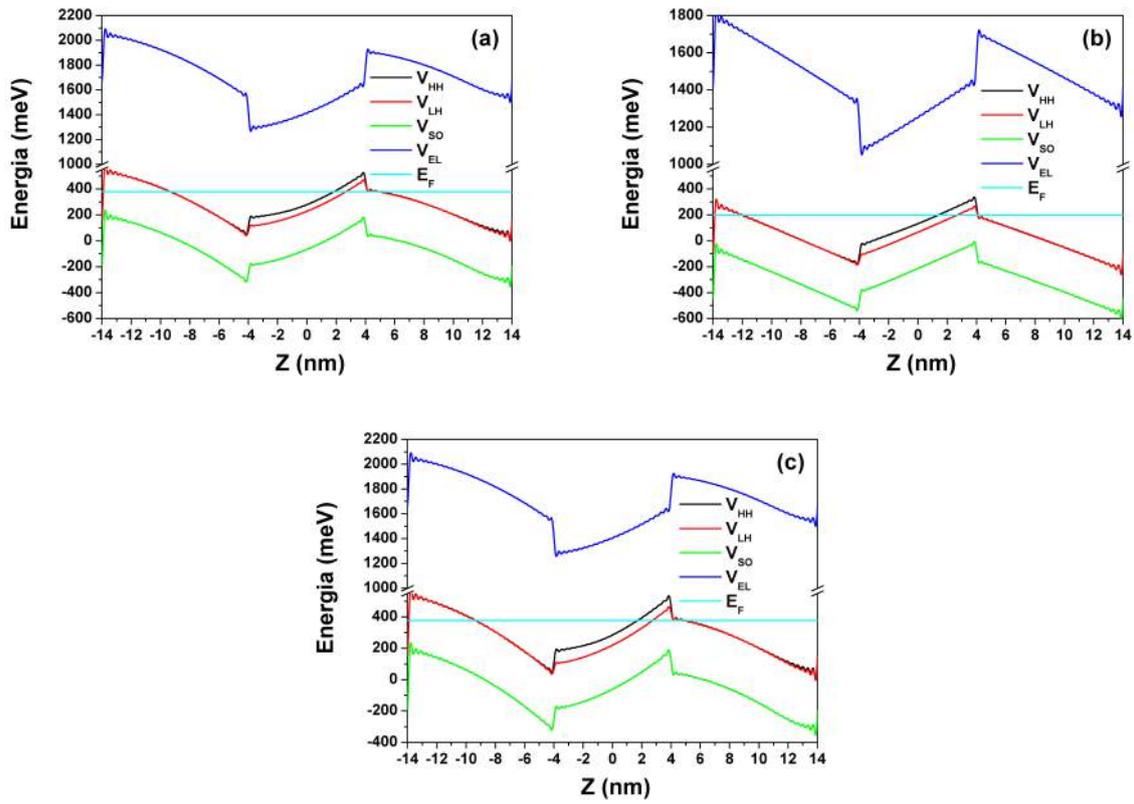


Figura 4.7: Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 15,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F).

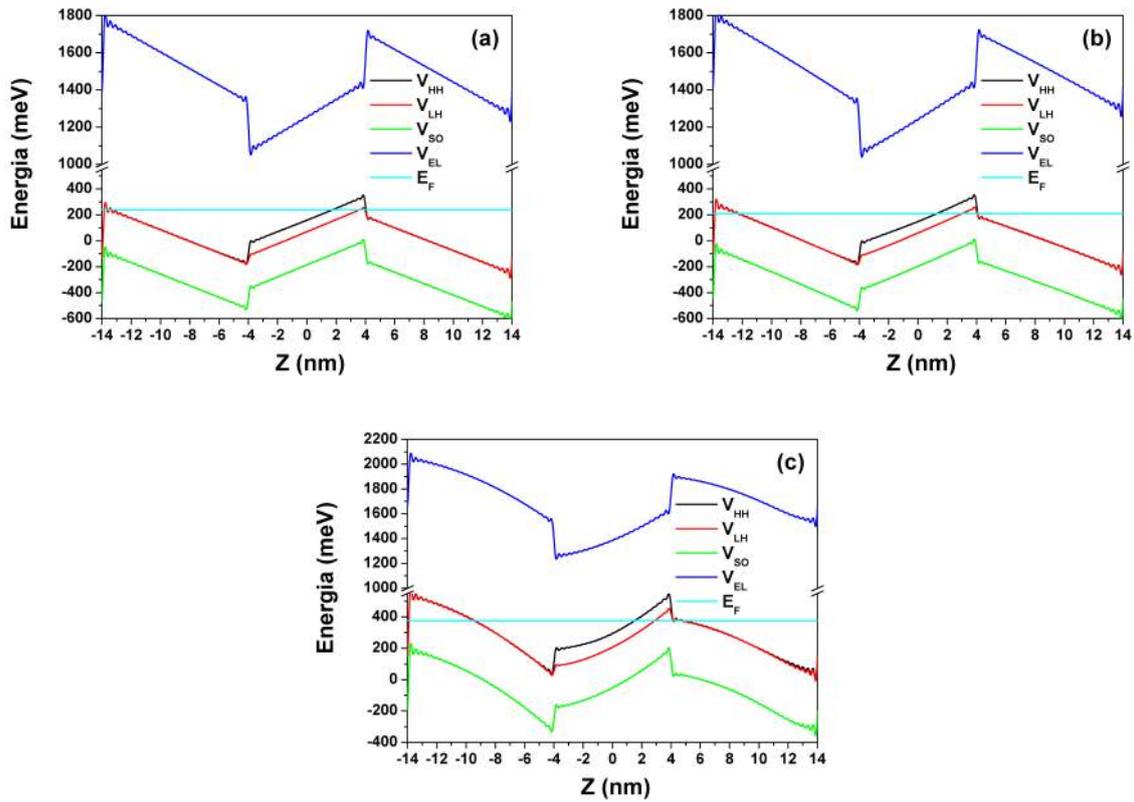


Figura 4.8: Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 20,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F).

É importante destacar o comportamento da tensão em cada um dos sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ estudados (figuras 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8). A medida que a concentração de índio aumenta, a tensão do sistema torna-se maior, além do mais, nas figuras 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8, notamos que com o aumento da concentração de cargas, temos o surgimento de um *bending*, característico de sistema dopados e mais evidente em sistemas com altas concentrações de aceitados, no caso $\sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Neste contexto é importante observarmos qual potencial é mais expressivo, se é o potencial de Coulomb ou se é o potencial de troca-correlação, tal comportamento fica melhor evidenciado quando analisamos a figura 4.9. Para altas concentrações, como nos casos em que a dopagem é da ordem de 10^{19} cm^{-3} , considerando que $x = 5,0\%$ e $y = 1,2\%$, o potencial de Coulomb (potencial caracterizado como repulsivo) é sempre o mais relevante.

No entanto, para as concentrações da ordem de 10^{17} cm^{-3} e 10^{18} cm^{-3} há uma competição entre o potencial de Coulomb e o potencial de troca-correlação. É importante destacarmos que, para a concentração de 10^{17} cm^{-3} fica evidente que o potencial de troca-correlação é o mais expressivo, em 10^{18} cm^{-3} há praticamente uma igualdade entre o potencial de Coulomb e o potencial troca-correlação ($V_C \approx V_{XC}$), e por fim, para a concentração de 10^{19} cm^{-3} , fica claro que o potencial de Coulomb é o mais significativo.

Note que o campo elétrico não foi computado aqui, para uma melhor análise dos efeitos dos potenciais de Coulomb e troca-correlação. Além disso, o efeito do campo elétrico será o mesmo para os sistemas investigados. Na próxima seção, apresentaremos os espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$.

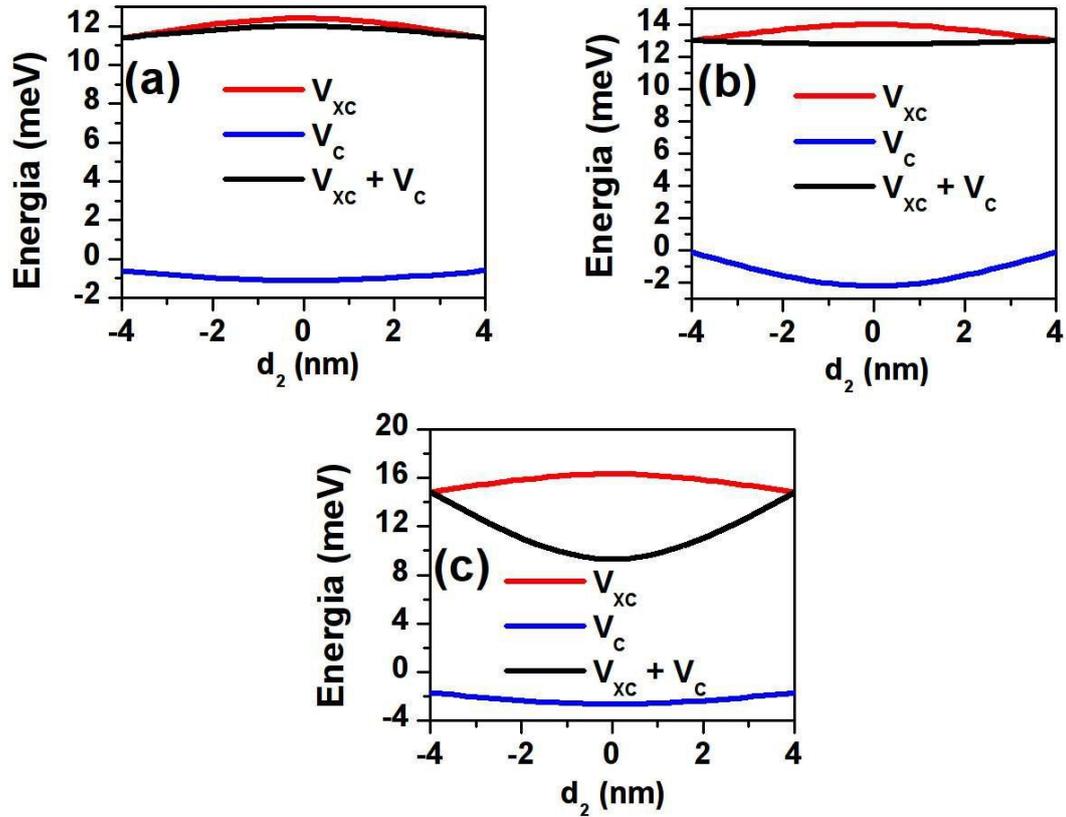


Figura 4.9: Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 5,0\%$ e $y = 1,2\%$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta indica a soma do potencial de coulomb com o potencial de troca-correlação ($V_{XC} + V_C$), a linha vermelha indica o potencial de troca-correlação (V_{XC}) e a linha azul indica o potencial de Coulomb (V_C).

4.2.2 Espectros de fotoluminescência para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

Nesta seção investigamos os espectros de fotoluminescência teóricos à 2 K , para os mesmos sistemas descritos em 4.2.

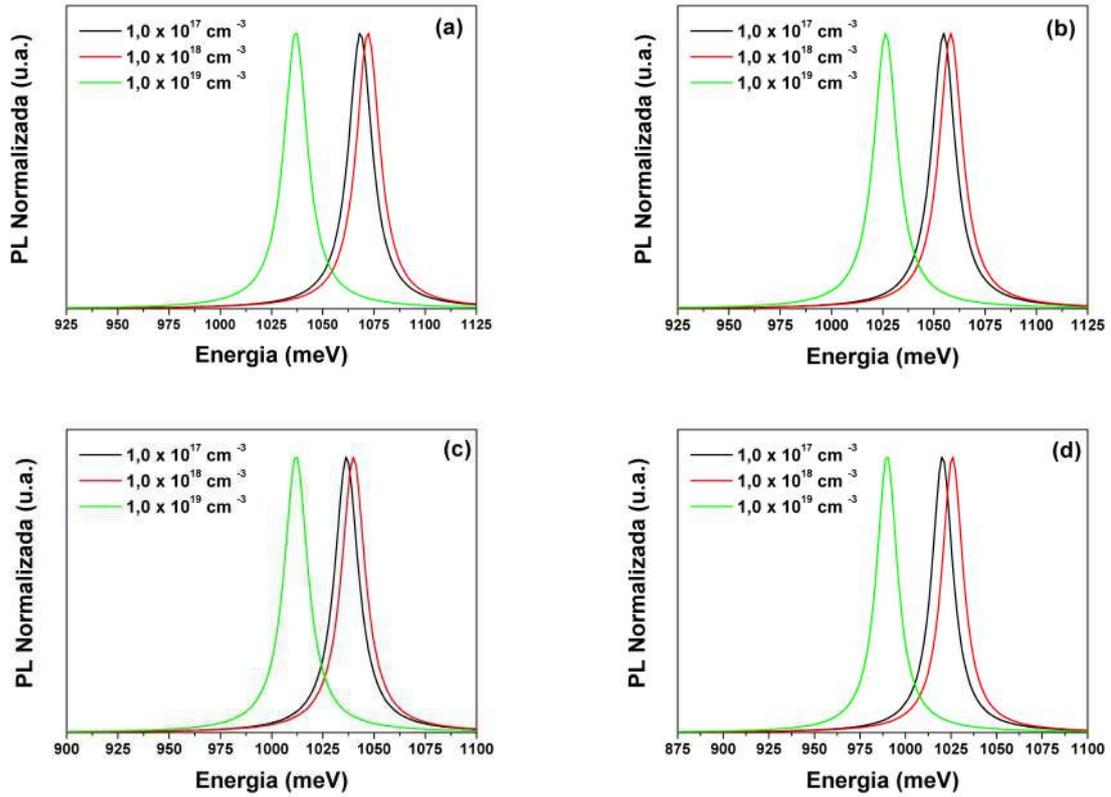


Figura 4.10: Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2 K$ para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 nm$ e $d_2 = 8 nm$, (a) $x = 5\%$, (b) $x = 10\%$, (c) $x = 15,0\%$ e (d) $x = 20,0\%$. A linha preta, a linha vermelha e a linha verde representam, respectivamente, $N_A = 1,0 \times 10^{17} cm^{-3}$; $1,0 \times 10^{18} cm^{-3}$; $1,0 \times 10^{19} cm^{-3}$, sob influência de campo elétrico externo.

É importante destacarmos que, em todas as energias de transições eletrônicas, o estado fundamental é o buraco pesado, além do mais, na figura 4.10, percebemos que para as concentrações de $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, o potencial de *troca-correlação* é o mais expressivo (figura 4.9a). Ainda acerca da figura 4.10, para a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, há um pequeno deslocamento ($\sim 8 \text{ meV}$) da energia de transição eletrônica no sentido do azul, se comparada a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, que está ligado ao fato de que, para tal concentração, o potencial de Coulomb e o potencial de troca-correlação estão praticamente alinhados, ou seja, estão se compensando (figura 4.9b) [47], já que os efeitos de tensão são os mesmos, quando comparamos concentrações de x e y fixas e apenas alteramos a concentração de N_A . Para concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, nas figuras 4.10a a 4.10d, percebemos que as energias de transições eletrônicas se deslocam mais para o vermelho, isso quando comparado as outras concentrações, isto está relacionado a dopagem modificar a forma como as cargas se distribuem dentro do sistema, acentuando o *bending* e diminuindo as energias de transições eletrônicas.

Na figura 4.11a, apresentamos o comportamento detalhado dos primeiros picos das energias de transições eletrônicas para os sistemas estudados nas figuras 4.10a a 4.10d, comparando aos casos em que não tínhamos a dopagem do sistema. Todos os resultados estão relacionados a primeira energia de transição eletrônica E1 - HH1.

Percebemos que há uma tendência das energias de transições eletrônicas diminuírem para o caso em que variamos a concentração de índio de $3,0\% \geq x \geq 20,0\%$, o que está ligado ao fato de que com o aumento de In, a tensão comprimida aumenta e aproxima os níveis de energia (E1 - HH1) para o fundo do poço. O deslocamento para o vermelho conforme aumenta N_A também foi observado e a explicação já foi dada acima.

Na figura 4.11b, apresentamos o comportamento dos primeiros picos de energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/In_{0,03}Ga_{0,97}As_{1-y}N_y$, no qual foi variado a concentração de nitrogênio no intervalo de $1,2\% \geq y \geq 4,5\%$. Observamos que a medida que a concentração de y aumenta, as energias de transições eletrônicas tornam-se cada vez menores, fato justificado pelo fato do nitrogênio aumentar a tensão do sistema.

Destacamos também que, as energias de transições eletrônicas são menores para a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, se compararmos às concentrações de $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ e $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, pela mesma razão já descrita: os potenciais de Coulomb e troca-correlação.

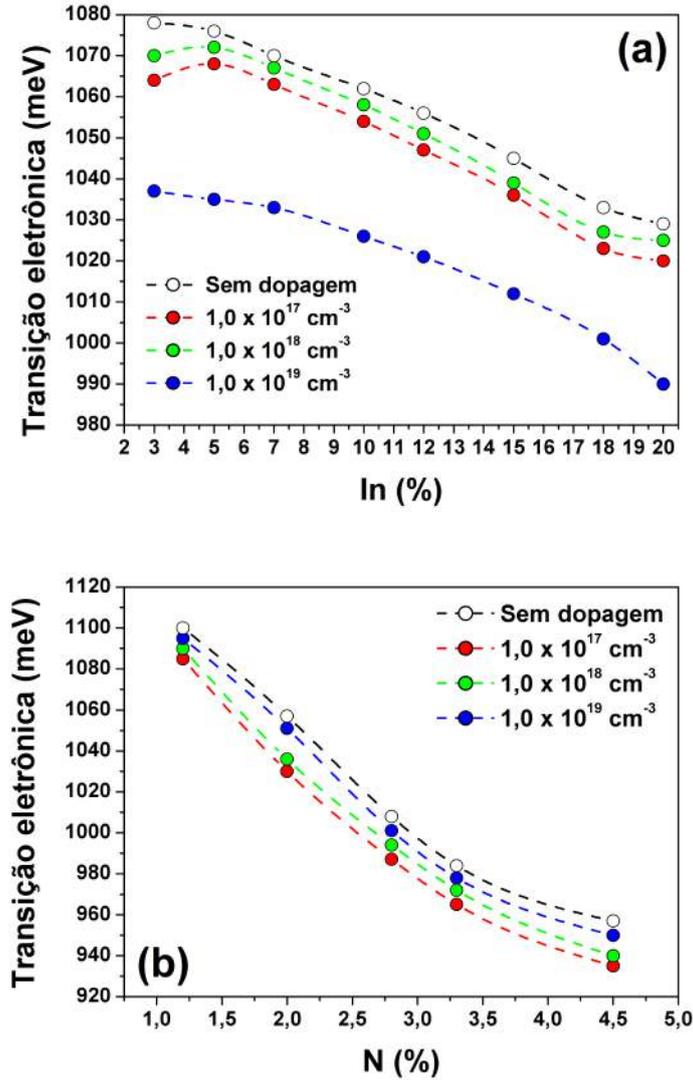


Figura 4.11: Energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, com (a) $y = 1,2\%$, $3,0\% \leq x \leq 20,0\%$, $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, (b) $x = 3,0\%$, $1,2\% \leq y \leq 4,5\%$, $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$. A curva preta representa os casos sem dopagem, a curva vermelha a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, a curva verde a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e a curva azul representa a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Na próxima seção, apresentaremos as conclusões referentes a todo trabalho.

Analisando os espectros de fotoluminescência dos sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem e sem a influência do campo elétrico externo, percebemos que há uma redução significativa na energia do *gap*, devido a efeitos da tensão biaxial distendida, temos um *red-shift* ou *blue-shift* à medida que a concentração de nitrogênio aumenta de 1,2% a 4,5%. Destacamos também, o comportamento distendido da tensão para concentrações de nitrogênio no intervalo de $1,2\% \leq y < 2,8\%$, e comprimido, para $2,8\% \leq y \leq 4,5\%$. Vale salientar que em $y = 3,3\%$, percebemos o aumento da energia de transição eletrônica, devido ao fato de termos o alinhamento do buraco leve, na banda de valência. Para as concentrações de $3,3 < y \leq 4,5\%$, temos que a energia de transição eletrônica diminui, o que está ligado a influência que a estrutura de bandas do buraco leve, exerce sobre a estrutura de bandas do buraco pesado, mesmo tendo os efeitos da tensão biaxial comprimida preponderante sobre o sistema. Continuando o nosso estudo em relação à energia do *gap*, é importante comentarmos que esse foi um dos parâmetros mais difíceis para os nossos cálculos, pois exigiu um longo tempo de procura e ajuste que estivessem de acordo com dados experimentais. Com relação aos perfis de potenciais, é importante observar que para nosso estudo foi necessário, mesmo após a interpolação linear entre os parâmetros do $GaAs$ e do GaN , um ajuste nos valores do parâmetro de rede da liga, para as concentrações de nitrogênio relacionadas ($y = 1,2\%, 2,0\%, 2,8\%, 3,3\%$ e $4,5\%$), visando a proximidade com valores de energias de transições eletrônicas, tendo como base os artigos experimentais. Ainda sobre o sistema mencionado anteriormente, destacamos os espectros de fotoluminescência teóricos à $T = 2 K$. É importante observar que com o aumento da concentração de nitrogênio de 1,2% a 2,0%, o estado fundamental é o buraco leve e observamos o surgimento de um *red-shift*, já que para este intervalo de

concentração o sistema tende a ficar menos tensionado. Para as concentrações 2,0% a 3,3%, o estado fundamental é o buraco leve, até concentrações abaixo de 2,8% e buraco pesado para concentrações acima de 2,8%. Além do mais, identificamos o surgimento de um *blue-shift*, já que para essas concentrações a tensão torna-se cada vez maior. Por fim, de 3,3% a 4,5%, o estado fundamental é o buraco pesado, como já mencionado, e destacamos o surgimento de um *red-shift*, como explicado anteriormente, essa característica se dá pela influência que a estrutura de bandas do buraco leve exerce sobre a estrutura de bandas do buraco pesado.

Acerca dos perfis de potenciais para os sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem, mas submetido a presença de um campo elétrico externo, observamos que há o surgimento do chamado *efeito Stark*, o qual faz os níveis de energia ficarem mais localizados, e portanto as energias de transições eletrônicas são menores, se comparadas às energias de transições eletrônicas de sistemas sem ação do campo elétrico externo. Vale salientar que, independente da presença do campo elétrico, o estado fundamental referente a cada concentração de nitrogênio, continua sendo o mesmo dos casos sem a presença do campo elétrico externo. Todavia, como há campo elétrico externo presente no sistema, os estados ocupados não apresentam mais degenerescência, pois a simetria do sistema é alterada (quebrada).

Em relação aos sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopados e submetidos a presença de um campo elétrico externo, percebemos que para as concentrações de $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ e $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, as energias de transições eletrônicas são praticamente as mesmas, devido ao fato da concentração de cargas ser relativamente baixa. No entanto, para a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, percebemos que as energias de transições eletrônicas são bem menores, se comparadas as energias de transições dos mesmos sistemas analisados, com as concentrações menores de N_A já mencionadas, isso se justifica pelo fato de que a dopagem altera a distribuição de cargas do sistema, formando um *bending* mais acentuado, o que está forçando os níveis de energia a se aproximarem do fundo do poço. Agora, se compararmos as energias de transições eletrônicas do $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, em todas as análises aqui realizadas, percebemos que de todos os sistemas, o que possui as menores energias de transições eletrônicas, são os sistemas e que estão submetidos a presença de um campo elétrico, pois a localização dos seus níveis de energia estão bem mais próximos do fundo do poço. Ainda acerca do $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopado e com

campo elétrico, a influência da temperatura gera uma probabilidade maior das energias de transições eletrônicas ocorrerem ou seja, há mais estados ocupados, fato que se explica pela *distribuição de Fermi-Dirac*, além dos mais, percebemos que os picos de energia de transição eletrônica se deslocam no sentido do vermelho, efeito já esperado, devido à renormalização do *gap*, em virtude da *correção de Varshni*. Acerca das dimensões do sistema que estamos investigando, percebemos que, fixando a largura da barreira e aumentando a largura do poço, as energias de transições tornam-se cada vez menores, fato já esperado, pois a medida que a largura do poço aumenta, ocorre o chamado: *regime de poços interagentes*, no qual os poços interagem mais entre si, o que faz os níveis de energia se aproximarem mais do fundo do poço. No entanto, se fixarmos a largura do poço e aumentarmos a largura da barreira, ocorre o comportamento inverso.

Analisando o sistema de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, dopado e submetido a presença de um campo elétrico externo, destacamos que, independente da análise, o estado fundamental é o buraco pesado, pois a presença do In, faz com que o sistema admita uma tensão sempre do tipo comprimida. Acerca dos espectros de fotoluminescência teórico com $T = 2 K$, percebemos que se fixarmos a concentração de $x = 3,0\%$ e variarmos a concentração de $y = 1,2\%$ a $y = 4,5\%$, as energias de transições eletrônicas tornam-se cada vez menores, *red-shift*, pois mesmo o sistema sendo já comprimido, a presença do nitrogênio aumenta ainda mais o tensionamento, fazendo com que os níveis de energia se aproximem do fundo do poço. Vale salientar que, se compararmos as energias de transições eletrônicas dos sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com as energias de transições eletrônicas dos sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, para as concentrações de $y = 1,2\%$ a $y = 4,5\%$, percebemos que em média, as energias de transições eletrônicas do $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ são menores, devido ao tensionamento ser maior. Já para o caso em que, a concentração de $y = 1,2\%$ e a concentração de x varia de $3,0\%$ a $20,0\%$, observamos que as energias de transições eletrônicas diminuem, pois o aumento da concentração de índio, também está aumentando o tensionamento, o que torna os níveis de energia mais próximos do fundo do poço.

Acerca dos perfis de potenciais, é importante mencionar que, à medida que aumentamos a concentração de cargas, o *bending* torna-se mais pronunciado, isso pode ser justificado pela distribuição de cargas. Além disso, a configuração dos perfis de potenciais dos portadores de cargas, está relacionada ao fato de termos o potencial de Coulomb

e o potencial de troca-correlação em constante disputa, sendo mais significativo o potencial de troca-correlação para os casos em que $N_A \sim 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Para os casos em que $N_A \sim 10^{18} \text{cm}^{-3}$, observamos que o potencial de Coulomb e o potencial de troca-correlação estão em equivalência, ou seja, ocorre quando a magnitude da contribuição dos potenciais envolvidos (Coulomb e troca-correlação) é praticamente a mesma e para os casos em que $N_A \sim 10^{19} \text{cm}^{-3}$, verificamos que o potencial de Coulomb é o mais expressivo. A partir dos resultados aqui apresentados esperamos que estes sirvam de referência para experimentos futuros e esclareçam diversas questões relacionadas aos fenômenos ópticos nestes sistemas. Certamente isto será fundamental no desenvolvimento de novos dispositivos opto-eletrônicos.

Lista de Figuras

2.1	Representação das interações das forças externas que atuam num corpo. . .	18
2.2	Representação do tensor de tensão [56].	19
2.3	(a) Corda esticada com deformação Δx . (b) Corda esticada com deformação Δx e descolamento Δu	20
2.4	Representação das deformações em 3D, dentro de um corpo sólido [56]. . .	20
2.5	Esquema do descasamento e casamento de dois materiais com parâmetros de rede diferentes. [5]	23
2.6	Representação da (a) tensão de compressão biaxial e (b) a distensão biaxial [5].	23
2.7	Representação esquemática do potencial de portadores da banda de valência (BV) (a) sem tensão; (b) com tensão hidrostática distensora e (c) com tensão hidrostática e uniaxial distensora. V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos leves e V_{SO} é o potencial de buracos de <i>split-off</i>	24
2.8	Representação esquemática do potencial de portadores da banda de valência (BV) (a) sem tensão; (b) com tensão hidrostática compressiva e (c) com tensão hidrostática e uniaxial compressiva. V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos leves e V_{SO} é o potencial de buracos de <i>split-off</i>	24
2.9	Diagrama esquemático autoconsistente para determinação das propriedades do material.	31

3.1	(a) Comportamento da energia do <i>gap</i> em função da concentração de nitrogênio [14] e (b) comportamento do potencial de deformação de cisalhamento em função da concentração de nitrogênio [15].	34
3.2	Comportamento do parâmetro de rede em função da concentração de nitrogênio.	34
3.3	Perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, não dopado com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$, (c) $y = 2,8\%$, (d) $y = 3,3\%$ e (e) $y = 4,5\%$	36
3.4	Espectros de fotoluminescência teórico à $T = 2$ K para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, não dopado com $d_1 = 20$ nm, $d_2 = 8$ nm, $y = 1,2\%$ (curva preta), $y = 2,0\%$ (curva vermelha), $y = 2,8\%$ (curva verde), $y = 3,3\%$ (curva azul) e $y = 4,5\%$ (curva ciano).	38
3.5	Estrutura de bandas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com tensão distendida, não dopado, $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$	38
3.6	Estrutura de bandas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com tensão comprimida, não dopado, $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, (a) $y = 2,8\%$, (b) $y = 3,3\%$ e (c) $y = 4,5\%$	39
3.7	Representação esquemática para o perfil de potencial, (a) sem o campo elétrico e (b) com o campo elétrico.	40
3.8	Espectros de fotoluminescência teórico a $T = 2$ K para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, sem dopagem, campo elétrico externo de módulo igual a $ \vec{E} = 4,646$ MV/m e com variando de $y = 1,2\%$ (curva preta), $y = 2,0\%$ (curva vermelha), $y = 2,8\%$ (curva verde), $y = 3,3\%$ (curva azul) e $y = 4,5\%$ (curva ciano).	40
3.9	Energias de transições eletrônicas para o sistema de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem influência do campo elétrico externo (curva preta) e com a influência do campo elétrico externo (curva vermelha).	41
3.10	Perfis de potenciais para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, $ \vec{E} = 4,646$ MV/m, $N_A = 1,0 \times 10^{17}$ cm ⁻³ , (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$, (c) $y = 2,8\%$, (d) $y = 3,3\%$ e (e) $y = 4,5\%$	43

- 3.11 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2\text{ k}$ para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 8\text{ nm}$, (a) $1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$, (b) $1,0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e (c) $1,0 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ e $|\vec{E}| = 4,646\text{ MV/m}$ 44
- 3.12 Comparação das energias de transições eletrônicas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 8\text{ nm}$, sem dopagem e com dopagem, todos submetidos a presença do campo elétrico externo. 45
- 3.13 Espectros de fotoluminescência teóricos para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$ com (a) $y = 1,2\%$, (b) $y = 2,0\%$, (c) $y = 2,8\%$, (d) $y = 3,3\%$, (e) $y = 4,5\%$ e N_A igual a $1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ (curva preta), $1,0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ (curva vermelha) e $1,0 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ (curva verde) 46
- 3.14 Energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/GaAs_{1-x}N_x$ com $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 8\text{ nm}$, dopados e submetidos a presença de um campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646\text{ MV/m}$. No qual $y = 1,2\%$ (curva preta), $y = 2,0\%$ (curva vermelha), $y = 2,8\%$ (curva verde), $y = 3,3\%$ (curva azul) e $y = 4,5\%$ (curva ciano). 47
- 3.15 Espectros de fotoluminescência teóricos para o $GaAs/GaAs_{0,988}N_{0,012}$, dopado, sob influência de campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646\text{ MV/m}$, com $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 8\text{ nm}$, no qual variou-se (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$, (b) $1,0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e (c) $1,0 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ 48
- 3.16 Energias de transições eletrônicas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, dopado, sob influência de campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646\text{ MV/m}$, com $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 8\text{ nm}$, no qual variou-se (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$, (b) $1,0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e (c) $1,0 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$. $x = 1,2\%$ (curva preta), $x = 2,0\%$ (curva vermelha), $x = 2,8\%$ (curva verde), $x = 3,3\%$ (curva azul) e $x = 4,5\%$ (curva ciano). 49
- 3.17 Energias de transições eletrônicas para o $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, com $N_A = 1,0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, sob influência de campo elétrico externo $|\vec{E}| = 4,646\text{ MV/m}$, com (a) $d_2 = 8\text{ nm}$ e $d_1 = 10\text{ nm}$ à 26 nm , (b) $d_1 = 20\text{ nm}$ e $d_2 = 2\text{ nm}$ à 20 nm 50
- 4.1 Comportamento da energia do *gap* para os sistemas de: (a) $GaAs/In_xGa_{1-x}N$, (b) $GaAs/InAs_{1-y}N_y$ e (c) $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N$ 54

- 4.2 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2$ K para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, sem dopagem, sob influência de campo elétrico externo, no qual $x = 3,0\%$ e y varia em: $1,2\%$; $2,0\%$; $2,8\%$; $3,3\%$ e $4,5\%$ 55
- 4.3 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2$ K para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, sem dopagem, sob influência de campo elétrico externo, no qual $y = 1,2\%$ e x varia em: $3,0\%$, $5,0\%$, $7,0\%$, $10,0\%$, $12,0\%$, $15,0\%$, $18,0\%$ e $20,0\%$ 56
- 4.4 Energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/In_{0,03}Ga_{0,97}As_{1-y}N_y$ (curva preta) e $GaAs/GaAs_{1-y}N_y$, sem dopagem, sob influência de campo elétrico externo, no qual y varia de $1,2\%$ a $4,5\%$, com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm em ambos os casos. 57
- 4.5 Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, $x = 5,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646$ MV/m, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17}$ cm^{-3} , (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18}$ cm^{-3} , (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19}$ cm^{-3} . A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F). 59
- 4.6 Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, $x = 10,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646$ MV/m, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17}$ cm^{-3} , (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18}$ cm^{-3} , (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19}$ cm^{-3} . A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F). 60
- 4.7 Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20$ nm e $d_2 = 8$ nm, $x = 15,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646$ MV/m, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17}$ cm^{-3} , (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18}$ cm^{-3} , (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19}$ cm^{-3} . A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F). 61

- 4.8 Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 20,0\%$ e $y = 1,2\%$, $|\vec{E}| = 4,646 \text{ MV/m}$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta, vermelha, verde, azul e ciano, representam, respectivamente, os potenciais para buraco pesado (V_{HH}), buraco leve (V_{LH}), *split-off* (V_{SO}), elétron (V_{EL}) e o nível de Fermi (E_F). 62
- 4.9 Perfis de potenciais para o $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, $x = 5,0\%$ e $y = 1,2\%$, (a) $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A linha preta indica a soma do potencial de coulomb com o potencial de troca-correlação ($V_{XC} + V_C$), a linha vermelha indica o potencial de troca-correlação (V_{XC}) e a linha azul indica o potencial de Coulomb (V_C). 64
- 4.10 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2 \text{ K}$ para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ com $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, (a) $x = 5\%$, (b) $x = 10\%$, (c) $x = 15,0\%$ e (d) $x = 20,0\%$. A linha preta, a linha vermelha e a linha verde representam, repectivamente, $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; $1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, sob influência de campo elétrico externo. 65
- 4.11 Energias de transições eletrônicas para sistemas de $GaAs/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$, com (a) $y = 1,2\%$, $3,0\% \leq x \leq 20,0\%$, $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$, (b) $x = 3,0\%$, $1,2\% \leq y \leq 4,5\%$, $d_1 = 20 \text{ nm}$ e $d_2 = 8 \text{ nm}$. A curva preta representa os casos sem dopagem, a curva vermelha a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, a curva verde a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e a curva azul representa a concentração de $N_A = 1,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 67

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros do cristal para o <i>GaAs</i> e o <i>GaN</i> extraídos da literatura [14,15,61–63].	33
4.1	Parâmetros do cristal para o <i>GaAs</i> , <i>InAs</i> , <i>GaN</i> e o <i>InN</i> extraídos da literatura [15,61–63].	52

Referências Bibliográficas

- [1] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, e R. O. Carlson. *Phys. Rev. Lett.*, **9**:366, (1962).
- [2] Marshall I. Nathan, William P. Dumke, Gerald Burns, Frederick H. Dill, and Gordon Lasher. *Appl. Phys. Lett.*, **1**:62, (1962).
- [3] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, e L. R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89**:5815, (2001).
- [4] S. Kuboya, M. Kuroda, Q. T. Thieu, R. Katayama, e K. Onabe. *J. of Cryst. Growth*, **278**:254, (2005).
- [5] S.C.P. Rodrigues. *Propriedades de transporte vertical em Super-Redes de Poços delta tipo-n em GaAs*. Dissertação de Mestrado, IFUSP, São Paulo (1997).
- [6] S. C. Jain, M. Willander, e R. Van Overstraeten. *Appl. Phys. Lett.*, **87**:965, (2000).
- [7] J. Li, W. Yang, S. Li, H. Chen, e J. Kang. *J. Appl. Phys.*, **95**:151113, (2009).
- [8] X. Wang. *Ameri. Ceram. Soci. Bulletin.*, **92**:18, (2013).
- [9] M. Sato M. Weyers e H. Ando. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **31**:853, (1992).
- [10] J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M.Olson, S.R. Kurtz, e B.M. Keyes. *phys. stat. sol. b*, **195**:401, (1998).
- [11] H. Suzuki, K. Nishimura, T. Hashiguchi, K. Saito, B. Balasubramanian, S. Yamamoto, M. Inagaki, Y. Ohshita, N. Kojima, e M. Yamaguchi. *Fabrication of GaAsN homo-junction solar cells by chemical beam epitaxy*. (Intech, 2008).

- [12] T. Kitatani Y. Yazawa M. Kondow, S. Nakatsuka e M. Okai. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **35**:5711, (1996).
- [13] P. R. C. Kent e Alex Zunger. *Phys. Rev. B*, **64**:115208, (2001).
- [14] I.A.Buyanova, W.M.Chen, G. Pozina, e B. Monemar. *MRS Int. J. Nit. Semi. Res*, **2**:06, (2001).
- [15] W.M.Chen, G. Pozina, B. Monemar, H.P. Xi n, e C.W. Tu. *phys. stat. sol. b*, **216**:125, (1999).
- [16] A. Niwa, T. Kitatani, S. Watahiki, Y. Yazawa, K. Uomi, e M. Kondow. *J. Appl. Phys.*, **35**:1273, (1996).
- [17] A.A. Allerman, S.R. Kurtz, R.M. Sieg, C.H. Seager, E.D. Jones, e J.F. Klem. *Appl. Phys. Lett.*, **80**:1379, (2002).
- [18] P.C. Chang F.D. Newman N.Y. Li S.Z. Sun E. Armour H.Q. Hou e C.Monier A.G. Baca. *IEEE T. Electron Dev.*, **49**:1329, (1996).
- [19] P.C. Chang A.G. Baca X.M. Xie P.R. Sharps e H.Q. Hou N.Y. Li. *Electron. Lett.*, **36**:81, (2000).
- [20] J.S. Harris. *Semicond. Sci. Technol.*, **17**:880, (2002).
- [21] A.Y. Egorov S. Illek M. Komainda e H. Riechert B. Borchert. *Electron. Lett.*, **35**:2204, (1999).
- [22] A.G. Baca N.Y. Li P.R. Sharp H.Q. Hou J.R. Laroche e F. Ren P.C. Chang. *Appl. Phys. Lett.*, **76**:2788, (2000).
- [23] S.Y. Xie, S.F. Yoon, e S.Z. Wang. *Appl. Phys. A*, **81**:987, (2005).
- [24] S.H.Wei e A. Zunger. *Phys. Rev. Lett.*, **76**:664, (1996).
- [25] Y. Osawa e T. Saito S. Sato. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **36**:2671, (1997).
- [26] M. Kondow, K. Uomi, K. Hosomi, e T. Mozume. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **33**:L1056, (1994).

- [27] M. Kemerink, P. P. M. Thomassen, P. M. Koenraad, P. A. Bobbert, J. C. M. Henning, e J. H. Wolter. *Phys. Rev.*, **B58**:1424, (1998).
- [28] M. Kemerink, P. P. M. Thomassen, P. M. Koenraad, P. A. Bobbert, J. C. M. Henning, J. H. Wolter, e M. Henini. *Phys. Rev.*, **B53**:10000, (1996).
- [29] M. Kucharczyk e M. S. Wartak. *Superlatt. Microstruct.*, **24**:17, (1998).
- [30] B. W. Kim e A. Majerveld. *J. Appl. Phys.*, **77**:4552, (1995).
- [31] B. W. Kim, E. Mao, e A. Majerveld. *J. Appl. Phys.*, **81**:1883, (1997).
- [32] A. Liu. *Appl. Phys. Lett.*, **71**:572, (1997).
- [33] S. Ekbote, M. Cahay, e K. Roenker. *Phys. Rev.*, **B58**:16315, (1998).
- [34] J. R. Hoff, M. Razegui, e G. J. Brown. *Phys. Rev.*, **54**:10773, (1996).
- [35] S. S. Li, J. Chu, e Y. H. Wang. *Superlatt. Microstruct.*, **19**:229, (1996).
- [36] D. Ahn, S. J. Yoon, S. L. Chuang, e C. S. Chang. *J. Appl. Phys.*, **78**:2489, (1995).
- [37] R. Oberhuber, G. Zandler, e P. Vogl. *Phys. Rev.*, **B58**:9941, (1998).
- [38] S. K. Chun, D. S. Pan, e K. L. Wang. *Phys. Rev.*, **B47**:15638, (1993).
- [39] R. Winklere, M. Merkler, T. Darnhofer, e U. Rössler. *Phys. Rev.*, **B53**:10858, (1996).
- [40] J. I. Pankove e T. D. Moustakas. *Gallium Nitride (GaN) I*. (Academic Press, 1996).
- [41] D. Ahn, S. J. Yoon, S. L. Chuang, e C. S. Chang. *J. Appl. Phys.*, **79**:7731, (1996).
- [42] W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong, e J. B. Xia. *J. Appl. Phys.*, **80**:3471, (1996).
- [43] W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong, e J. B. Xia. *Solid State Commun.*, **98**:737, (1996).
- [44] Y. M. Sirenko, J. B. Jeon, B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Litlejohn, M. A. Stroscio, e G. J. Iafrate. *Phys. Rev.*, **B55**:4360, (1997).
- [45] A. C. R. Bittencourt, A. M. Cohen, e G. E. Marques. *Phys. Rev.*, **B57**:4525, (1998).
- [46] A. M. de Paula, C. R. M. de Oliveira, G. E. Marques, A. M. Cohen, R. D. Feldman, R. F. Austin, M. N. Islam, e C. L. Cesar. *Phys. Rev.*, **B59**:10158, (1999).

- [47] T. F. de Oliveira, S. C. P. Rodrigues, L. M. Scolfaro, G. M. Sipahi, and E. F. S. Júnior. *Nanoscale Research Letters*, **7**:607, (2012).
- [48] S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, G. M. Sipahi, O. C. Noriega, e J. R. Leite. *Appl. Phys. Sol.*, **234**:906, (2002).
- [49] J.M. Luttinger e W. Kohn. *Phys. Rev.*, **97**:869, (1955).
- [50] E.O. Kane. *J. Phys. Chem. Solids*, **1**:82, (1956).
- [51] L. C. L. Y. Voon e M. Willatzen. *The $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method*. (Springer-Verlag, 2009).
- [52] J. J. Sakurai e Jim Napolitano. *Mecânica Quântica Moderna*. (Bookman, 2013).
- [53] S.C.P. Rodrigues. *Estrutura de Bandas de Heteroestruturas Semicondutoras Dopadas Tipo-p*. Tese de doutorado, IFUSP (2001).
- [54] G. M. Sipahi. *Teoria do confinamento de buracos em heteroestruturas semicondutoras*. Tese de doutorado, IFUSP, São Paulo (1997).
- [55] M. Cardona e P. Y. Yu. *Fundamentals of semiconductors physics e materials properties*. (Springer, 1996).
- [56] P. V. Pavlov. *Física del Estado Solido*. (Editorial mir moscú, 1987).
- [57] T.P. Pearsall. *Straind-layer Superlattices: Physics*. (Academic Press, 1990).
- [58] T.P. Pearsall. *Straind-layer Superlattices: Physics*. (Academic Press, 1997).
- [59] G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, E. C. F. da Silva, e A. Levine. *Phys. Rev. B*, **57**:9168, (1998).
- [60] Y. P. Varshni. *Physica*, **34**:149, (1967).
- [61] A. Mascarenhas, H. P. Xin, e C. W. Tu Y. Zhang. *Phys. Rev. B*, **61**:4433, (2000).
- [62] B.G. Streetman e S. Banerjee. *Solid State Electronic Devices*. (Prentice-Hall, 200).
- [63] A. Tadjer, B. Abbar, M. Rezki, H. Aourag, e M. Certier. *J. Phys. and Chem.Solids*, **60**:419, (1999).
- [64] B. Lofti, S. Larbi, e M. Hassen. *Phys. Sci. A*, **1**:1, (2011).