



Universidade Federal Rural de Pernambuco

Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

**Estudo das propriedades eletrônicas e
ópticas em Semicondutores Magnéticos
Diluídos (SMDs) do grupo III-V baseados
em arsenetos**

Jefferson Augusto de Oliveira Galindo

Dissertação de Mestrado
Recife

2 de março de 2018

Universidade Federal Rural de Pernambuco

Departamento de Física

Jefferson Augusto de Oliveira Galindo

**Estudo das propriedades eletrônicas e ópticas em
Semicondutores Magnéticos Diluídos (SMDs) do grupo III-V
baseados em arsenetos**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientadora: *Profa. Dra. Sara Cristina Pinto Rodrigues*

Recife

2 de março de 2018

*Aos meus pais José Givanildo e Marilane Aparecida e ao
meu irmão Valter Gustavo.*

Agradecimentos

Os meus mais sinceros agradecimentos

à Profa. Dra. Sara Cristina Pinto Rodrigues, minha orientadora, que sem ela, não haveria possibilidade alguma de eu ter encarado essa jornada. Pela enorme paciência, apoio e ensinamento ao longo desses dois anos.

aos meus familiares pela paciência, incentivo, atenção e amor incondicional durante todo esse período.

à Gizele Andrade e Alexandre Lins pelos 6 anos de apoio e amizade e principalmente paciência.

aos amigos Julio Cesar e Helder Moura pela parceria na pesquisa e pelas importantíssimas lições no laboratório.

aos amigos da academia, principalmente a Galileu Gênesis, Jaiver Chicangana, Tiago Queiroz, Felipe Assis, Felipe César, Ayrton Andrey, Bárbara Carvalho, Isaac Saturno e Tiago Verçosa que foram meus companheiros da graduação e da pós graduação e a todos os outros que participaram dessa jornada.

aos meus companheiros de casa José Marcione e Antonio Ariclesio pelas ótimas conversas e pelos momentos de descontração que, sem eles, minha sanidade estaria em sérios apuros.

aos meus professores da graduação e do mestrado, principalmente Jandrews Lins, Adauto de Souza, Anderson Barbosa, Fernando Moraes, Jonas Romero e Viviane Oliveira pela amizade e pelas valiosas lições, meu muito obrigado.

ao professor Dr. Kléber Fernando Rodrigues pela amizade, fé, confiança e incentivo na minha carreira acadêmica, lhe devo um grande favor meu amigo.

aos meus amigos Márcio Wênio, Diego Fellipp, Ruann Oliveira, Fernando Henrique, José Emanuel e Francisco Carlos pelas décadas de amizade, brigas e incentivo.

e a todos que cruzaram meu caminho e me fizeram chegar até aqui, meus mais sinceros

agradecimentos.

O único homem que está isento de erros é aquele que não arrisca acertar.

—ALBERT EINSTEIN

Resumo

Desde o descobrimento do fenômeno de magneto-resistência-gigante (GMR - sigla em inglês) nos anos 80, houve um grande avanço em relação as propriedades eletrônicas e óticas em materiais magnéticos. A ideia de utilizar nanoestruturas magnéticas para manipular o *spin* de portadores para armazenamento e leitura informação fez surgir uma nova área: a spintrônica. A partir disso, pesquisadores vêm estudando a utilização de Semicondutores Magnéticos Diluídos (SMDs) para obter essas características em dispositivos eletrônicos. A utilização de ligas do grupo III-V dopadas com Mn se mostraram muito promissoras, principalmente por terem sido registrados experimentalmente sistemas com alta temperatura de Curie (T_C). Nesse trabalho estudamos as características óticas e eletrônicas de SMDs baseados no grupo III-V, onde analisamos poços quânticos dopados tipo-p compostos por $AlGaAs/(n \times InAlGaAs/InAlGaAs : MT)$ e $InAlAs/InGaAs/InAs : MT$, onde MT é o metal de transição. Para isso, utilizamos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para calcular a estrutura de bandas dentro do formalismo 6×6 de Luttinger-Kohn e 8×8 de Kane. Os cálculos são resolvidos autoconsistentemente resolvendo simultaneamente a Equação de Poisson e a Equação da Massa Efetiva de multibandas. A partir desse método, foram estudadas as densidades de carga de *spins*, as polarizações totais, as energias das transições eletrônicas e espectros de fotoluminescência teóricos e a variação destas grandezas com diversos parâmetros, como as larguras das camadas magnéticas, não magnéticas, do número de camadas magnéticas, entre outros. Também estudamos os efeitos da variação da porcentagem de tensão nesses sistemas. Em todos os casos o objetivo principal é verificar quais combinações de parâmetros nos fornecem polarização máxima, além de analisar as transições eletrônicas envolvidas, bem como investigar a influência de todos os potenciais envolvidos nos cálculos destas grandezas. Esses resultados se mostram importantes para o desenvolvimento de novos dispositivos *spintrônicos*.

Abstract

Since the discovery of the Giant Magnetoresistance (GMR) phenomenon in the 80 years, there was a great advance in the electronic and optical properties in magnetic materials. The idea of using magnetic nanostructures to manipulate the spin of carriers for storage and reading information has given rise to a new area: the *spintronics*. From this, scientists has been studying the use of Diluted Magnetic Semiconductors (DMS) to obtain these properties in electronic devices. The use of Mn doped alloys of group III-V showed very promising, mainly due experimental systems with high Curie temperature (T_C). In this work we study the optical and electronic characteristics of DMSs based on group III-V, where we analyzed p-type doped quantum wells composed by $AlGaAs/(n \times InAlGaAs/InAlGaAs : TM)$ and $InAlAs/InGaAs/InAs : TM$, where TM is the transition metal. For this, we use the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method to calculate the band structure within the 6×6 Luttinger-Kohn and 8×8 Kane formalisms. The calculations are solved by self-consistently solving both the Poisson equation and the multiband Effective Mass Equation. From this method, spins charge densities, total polarizations, electronic transitions energies and theoretical photoluminescence spectra were studied, as well as, the variation of these quantities with several parameters, such as magnetic and non magnetic layers widths, the number of magnetic layers, among others. These results are important for the development of new spintronic devices.

CAPÍTULO 1

Introdução

No decorrer das últimas décadas, a possibilidade de utilização do *spin* para armazenagem e processamento de informação, ou ainda o surgimento da computação quântica fez surgir um novo campo da física: a *Spintrônica* [1]. Essa área de estudo se concentra na utilização do grau de liberdade de *spin* em nanoestruturas magnéticas, de modo que a armazenagem da informação, bem como o seu transporte são integrados em um único material. Isso só foi possível graças a descoberta do fenômeno da magneto-resistência-gigante (GMR, sigla em inglês para *Giant Magnetoresistance*) [2]. O fenômeno é observado em heteroestruturas de material ferromagnético alternada com material não-magnético (Fe e Cr, por exemplo) [2–4]. Quando o material é crescido na ausência de um campo magnético externo, a magnetização das camadas ferromagnéticas adjacentes é antiparalela. Isso causa um aumento muito grande da resistência no sistema. Já o crescimento do material na presença de um campo externo faz com que a magnetização das camadas magnéticas adjacentes sejam dadas na mesma direção e, nesse caso, a resistência têm um valor pequeno. A GMR é justamente o efeito de aumento ou diminuição drástica da resistência do sistema causada pela alteração do ordenamento da magnetização das suas camadas ferromagnéticas, que nos primeiros casos estudados teve diferença entre as resistências dos dois sistemas da ordem de 75% [3].

Algumas aplicações relativas a spintrônica já foram construídas, como por exemplo, sensores de campo magnético utilizando GMR e sensores para indústria e cabeças de leitura de disco rígido [5,6]. Outras ainda estão sendo investigadas, como as memórias MRAM (*Magnetoresistive Random Access Memory*), cabeças de leitura de *spin* [7–9], etc. Alguns dos itens pesquisados envolvem a Spintrônica aplicada aos semicondutores, como os *spin*-FETs (*Spin-polarized Field Effect Transistors*), *spin*-LEDs (*Spin-polarized light-emmiting diodes*), *spin*-lasers, detectores de fotoemissão na faixa infravermelho, isoladores em guias de onda e outros [10–19]. A junção entre spintrônica e semicondutores se mostra muito promissora, já que une as ca-

racterísticas dos materiais magnéticos (controle de corrente por manipulação de *spin* e não volatilidade) com o potencial dos semicondutores, possibilitando a junção entre a capacidade de armazenamento de informação, detecção, lógica e comunicação em um único chip, tomando o lugar de vários componentes de uma só vez [11, 12, 14].

A principal característica que leva os pesquisadores a investir no desenvolvimento de dispositivos baseados em semicondutores magnéticos está diretamente ligada à não-volatilidade, ou seja, o sistema não perde informação quando a fonte de energia elétrica é desligada. Isso possibilita uma alta velocidade de processamento de dados, causando uma diminuição significativa na quantidade de energia necessária se comparado aos dispositivos semicondutores convencionais e permitindo que um maior número de componentes sejam colocados em uma mesma área. Materiais com essas características vêm sendo estudados nas últimas duas décadas e são denominados Semicondutores Magnéticos Diluídos (SMDs) [1, 20, 21].

O método para construção de SMDs consiste, *a priori*, em substituir íons da rede cristalina de semicondutores convencionais por íons magnéticos, geralmente com a camada *3d* incompleta, produzindo momentos magnéticos localizados na matriz semicondutora [22]. A principal característica dos SMDs é a sua propriedade magnética. Um dos objetos de estudo mais importantes nessa área é a busca por materiais com alta temperatura de Curie (T_C) associada à um bom controle das propriedades magnéticas do SMD. A temperatura de Curie é a temperatura para qual um material perde suas propriedades magnéticas na ausência de um campo magnético externo, tornando-se paramagnético [23].

O estudo dos SMDs tiveram início a partir da década de 80, com foco no estudo de estruturas do tipo II-IV, como o CdTe, HgTe e ZnSe dopados com Mn [24]. A evolução das técnicas do crescimento dos cristais, como o método de epitaxia por feixe molecular (MBE, sigla em inglês para *Molecular Beam Epitaxy*) e deposição metal-orgânica por vapor químico (MOCVD, sigla para *Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*), permitiu que em 1984 fosse criada uma super-rede de CdTe, através da técnica MBE por Kolodziejski *et al.* [25]. Utilizando o mesmo método, Harris e seus colaboradores cresceram uma super-rede de HgTe em 1986 e um ano depois, em 1987, Chu *et al.* cresceram a primeira super-rede de HgTe [26, 27]. Recentemente, foi comprovada emissão de radiação na faixa de Terahertz em em poços quânticos de SMDs

compostos de CdTe:Mn [28].

Nos anos seguintes, graças a técnica de crescimento por epitaxia molecular em baixas temperaturas (LTMBE - *Low Temperature Molecular Beam Epitaxy*) começaram a ser feitos estudos relativos aos semicondutores do grupo III-V [29]. O crescimento de SMDs dopados com Mn baseados em arsenetos, como a criação de amostras de InAs em 1989 e GaAs em 1996, crescidos sobre um substrato de GaAs foram relatados por Ohno *et al.* [30,31]. Nos dois casos, foi observado o comportamento ferromagnético em baixas temperaturas. O aumento da T_C nos semicondutores baseados em arsenetos ainda é objeto de estudo importante e, desde a criação desse tipo de SMD, houve muito progresso. Foram observadas $T_C > 330$ K para filmes finos e camadas de pontos quânticos de InAs [32, 33] e em outro estudo, foi medida $T_C = 173$ K para poços de AlAs:Mn [34].

Mais recentemente, começaram a ser analisadas ligas ternárias e quaternárias baseadas em arsenetos, como por exemplo, InGaAs, InAlAs e InAlGaAs e testadas suas possibilidades para dispositivos eletrônicos de altas e baixas frequências [15, 35, 36]. A utilização dessas ligas se mostraram promissoras. Já foi comprovado, inclusive, o ferromagnetismo em uma temperatura de Curie de 300 K para InGaAs:Mn crescido em um substrato de InGaAs [37]. Além disso, com a liga quaternária de InAlGaAs, foi desenvolvido um fotocátodo de emissão polarizada que conseguiu polarização de 92% [38] e foi criado um dispositivo de emissão *laser* funcional a uma temperatura de Curie de 130 K, apresentando frequência de 3,8 Terahertz (10^{12} Hz) [39].

A nossa proposta de trabalho é analisar as características ópticas e eletrônicas de SMDs baseados em arsenetos do grupo III-V, mais especificamente estudar super-redes de múltiplos poços quânticos com a seguinte composição AlGaAs / ($n \times$ InAlGaAs / InAlGaAs:MT) / AlGaAs, em que n representa o número de camadas magnéticas, MT é a sigla para metal de transição (Fe, Cr, V, Mn). A estrutura cristalina estudada é do tipo *zincblende*.

O principal problema é calcular os estados e as energias na banda de valência para um sistema dopado tipo-p, objeto de estudo desse trabalho. O tipo de dopagem, em semicondutores, depende de qual substância estamos inserindo na rede cristalina. A dopagem do tipo-p ocorre quando são substituídos alguns átomos da rede original por outros com um elétron a menos na banda de valência, gerando uma lacuna. A dopagem tipo-n, por sua vez, ocorre quando inseri-

mos átomos na rede cristalina com um elétron a mais na banda de valência. A dopagem altera significativamente as propriedades eletrônicas em um semiconductor. Os semicondutores tipo-p, como possuem três tipos de portadores (buracos) na valência, têm uma complexidade maior se comparados aos semicondutores tipo-n, que apresenta apenas um tipo de portador (elétron) na banda de condução. Nesse trabalho, a dopagem é dada pela substituição de átomos de In, Al ou Ga por íons de MT na liga quaternária InAlGaAs, portanto tipo-p.

Para resolução do problema, utilizaremos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para o cálculo da estrutura de bandas considerando o tipo de dopagem e levando em conta vários efeitos, tais como: tensão (*strain*), potencial magnético e os potenciais de interação de muitos corpos do sistema (troca-correlação e potencial Coulombiano) [40].

Os cálculos do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ serão desenvolvidos dentro do modelo 6×6 de Luttinger e Kohn para determinação da banda de valência [41]. Como iremos discutir o espectro de fotoluminescência teórico para descrição das propriedades óticas do sistema, se faz necessário incorporar a banda de condução nos cálculos. Para isso, será utilizado o modelo 8×8 de Kane [42] que leva em conta os estados da banda de condução e de valência. Os cálculos são resolvidos autoconsistentemente resolvendo simultaneamente a Equação de Poisson e a Equação de Massa Efetiva de multibandas. Serão mostrados as densidades de carga de *spins* polarizados, as polarizações totais, as energias das transições eletrônicas e espectros de fotoluminescência teóricos, analisando a variação destas grandezas com diversos parâmetros, tais como largura das camadas magnéticas e não magnéticas, variação do número de camadas magnéticas, entre outros. Para os sistemas aqui estudados, iremos analisar os efeitos da variação do tensionamento nas transições eletrônicas e nos espectros de fotoluminescência teóricos e como ela atua em conjunto com a variação das porcentagens de In e Al nos poços quânticos.

Em relação ao estudo das variações de tensionamento, estas já foram realizadas em sistemas de InAlAs/InGaAs em MOSFETs (*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*), e os resultados mostraram um aumento de 70% da mobilidade dos elétrons com o aumento de 1,5% de tensão [43, 44]. Outro estudo mostrou o efeito da variação de tensão devido à aplicação de pressão externa na direção de crescimento em heteroestruturas do tipo II-VI / III-V, e analisou como são alterados as energias dos *gaps* das heteroestruturas, a fotoreflexância e separação

dos estados de buracos leves e pesados, mostrando a possibilidade de ajuste experimental do tensionamento em heteroestruturas [45]. No nosso trabalho o objetivo será verificar quais sistemas obtêm polarização máxima e quais são as combinações de concentrações de In e Al e da tensão que permitam que isso aconteça. Essa informação é importante para a fabricação de dispositivos eletrônicos [46].

Os capítulos a seguir estão organizados da seguinte maneira: o Capítulo 2 trata da descrição da teoria da perturbação para o caso não degenerado até segunda ordem e a partir disso, discutiremos como podem ser obtidos os autoestados e autoenergias através do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. No Capítulo 3 descrevemos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ no modelo 6×6 de Luttinger e Kohn para heteroestruturas, o Hamiltoniano total H e seus componentes: o termo de energia cinética generalizado, H_0 ; o potencial produzido pela diferença dos *gaps* de cada material, V_{HET} ; o potencial devido à interação coulombiana, V_C ; o potencial de troca-correlação, devido à interação entre os diferentes portadores V_{XC} ; o potencial de tensão V_S , causado à diferença entre os parâmetros de rede dos materiais que compõem a super-rede e o potencial magnético provocado pela distribuição de impurezas magnéticas e sua interação com os portadores livres, V_{MAG} . Ainda no Capítulo 3 será descrito o formalismo 8×8 de Kane e como são obtidos os espectros de fotoluminescência teóricos. No Capítulo 4 serão apresentados os resultados das simulações computacionais dos sistemas com múltiplos poços quânticos de AlGaAs / ($n \times$ InAlGaAs / InAlGaAs:MT) / AlGaAs e quais são as consequências eletrônicas e óticas da alteração de alguns parâmetros, como: o número de camadas magnéticas n , as concentrações de In e Al nos poços, da largura dos poços e barreiras e do tensionamento. Ainda nesse capítulo será feita a comparação do espectro de fotoluminescência teórico com o trabalho experimental desenvolvido por Terent'ev *et al.* em 2015 [47]. Por fim, serão discutidas as conclusões do trabalho no Capítulo 5.

Fundamentação Teórica

2.1 Teoria da Perturbação

Os primeiros estudos de estruturas de bandas em semicondutores, feitos a partir da Equação de Massa Efetiva (EME), foram realizados por Luttinger e Kohn em 1955 [41]. Nesse trabalho, os autores construíram a EME para estados da banda de valência e apresentaram os parâmetros de Luttinger, que têm fundamental importância para a determinação das massas efetivas dos portadores. Posteriormente, Kane [42] incluiu em seus cálculos a banda de condução e, utilizando-se do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, construiu a estrutura de bandas para o Si e o Ge. A solução da EME pode ser encontrada através do uso da teoria da perturbação nos casos degenerado ou não degenerado [48]. Todos os cálculos desenvolvidos aqui são feitos a partir das Referências [48–50]. Considerando o limite em que a teoria da perturbação é válida, ou seja, considerando que os potenciais perturbativos são muito menores que o potencial cristalino, podemos utilizar a teoria da perturbação não degenerada para buscar a solução da EME. Para que isso seja feito, precisamos encontrar o potencial perturbativo do sistema e acrescentá-lo ao Hamiltoniano não perturbado. Partindo da equação de autovalores de *Schrödinger*, temos:

$$H_0|\phi_n\rangle = \epsilon_n|\phi_n\rangle, \quad (2.1)$$

onde H_0 é o Hamiltoniano não perturbado, ϵ_n é o autovalor e $|\phi_n\rangle$ é o autoestado para o autovalor ϵ_n . Contudo, o nosso interesse aqui é resolver a equação *Schrödinger* com o Hamiltoniano perturbado H :

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (2.2)$$

aqui $|\psi_n\rangle$ é o autoestado para o Hamiltoniano perturbado H e E_n é o seu autovalor correspondente. Podemos reescrever o Hamiltoniano como:

$$H = H_0 + V_{per}, \quad (2.3)$$

sendo V_{per} é o potencial responsável pela perturbação no sistema. Agora fazemos V_{per} igual a λV_{per} :

$$H = H_0 + \lambda V_{per}, \quad (2.4)$$

onde λ é um parâmetro contínuo real. O λ , a princípio, indica a intensidade da perturbação no sistema, sendo o valor $\lambda = 0$ o sistema não perturbado e $\lambda = 1$ totalmente perturbado, ou seja, assumimos que a perturbação no sistema possa ser controlada. No final dos cálculos, retornaremos o valor de λ para 1. O método da perturbação baseia-se na expansão dos autovalores de energia E_n e seus autovetores $|\psi_n\rangle$ em potências de λ , da seguinte maneira:

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots, \quad (2.5)$$

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

onde $|\psi_n^0\rangle$ e $E_n^0 = \epsilon_n$ são os autovetores e as autoenergias não perturbadas. Substituindo (2.4), (2.5) e (2.6) em (2.2), obtemos:

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda V_{per})(|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots) = \\ (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots), \end{aligned} \quad (2.7)$$

e reagrupando os termos com o mesmo grau em λ :

$$H_0 |\psi_n^0\rangle = \epsilon_n |\psi_n^0\rangle, \quad (2.8)$$

$$H_0 |\psi_n^1\rangle - \epsilon_n |\psi_n^1\rangle = E_n^1 |\psi_n^0\rangle - V_{per} |\psi_n^0\rangle, \quad (2.9)$$

$$H_0|\psi_n^2\rangle - \varepsilon_n|\psi_n^2\rangle = E_n^1|\psi_n^1\rangle - V_{per}|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle. \quad (2.10)$$

Podemos agora obter o termo de correção pra energia de primeira ordem. Fazendo o produto interno de $\langle\psi_n^0|$ na equação (2.9), de modo que a equação pra E_n^1 se torna:

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|V_{per}|\psi_n^0\rangle, \quad (2.11)$$

e essa é a equação para correção de energia de primeira ordem. Para obtermos a correção de primeira ordem para a função de onda, devemos reescrever (2.9) como segue:

$$(H_0 - \varepsilon_n)|\psi_n^1\rangle = -(V_{per} - E_n^1)|\psi_n^0\rangle. \quad (2.12)$$

Agora supomos que $|\psi_n^1\rangle$ possa ser escrita como uma combinação linear de $|\psi_n^0\rangle$, pois $|\psi_n^0\rangle$, constitui um conjunto completo de funções ortonormais. Portanto, reescrevendo $|\psi_n^1\rangle$, obtemos:

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} C_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle, \quad (2.13)$$

onde o termo da somatória para $m = n$ não precisa ser incluído, pois como $C_n^{(n)} = 0$ garantimos que a função $|\psi_n\rangle$ de (2.5) seja normalizada. Podemos observar que até a primeira ordem em λ ¹:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle + \lambda(\langle\psi_n^1|\psi_n^0\rangle + \langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle) + \lambda^2(\dots) + \dots, \quad (2.14)$$

e como as funções de onda não perturbadas $|\psi_n^0\rangle$ são ortonormais, podemos concluir que o primeiro termo é 1 e que $\langle\psi_n^1|\psi_n^0\rangle = \langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = 0$, contanto que $|\psi_n^1\rangle$ não tenha componentes $|\psi_n^0\rangle$.

Nosso objetivo é determinar quem são os coeficientes $C_m^{(n)}$ para assim podermos escrever a primeira correção pra função de onda. Podemos substituir a equação (2.13) em (2.12) e obter:

¹Aqui consideramos o coeficiente de $|\psi_n^0\rangle$ igual a 1 em (2.5)

$$\sum_{m \neq n} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) C_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle = -(V_{per} - E_n^1) |\psi_n^0\rangle. \quad (2.15)$$

Tomando o produto interno com $|\psi_n^1\rangle$, temos:

$$\sum_{m \neq n} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) C_m^{(n)} \langle \psi_n^1 | \psi_m^0 \rangle = -\langle \psi_n^1 | V_{per} | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_n^1 | E_n^1 | \psi_n^0 \rangle. \quad (2.16)$$

Para o caso em que $l \neq n$ temos que o segundo termo do lado direito de (2.16) é igual a zero e ficamos com

$$(\varepsilon_m - \varepsilon_n) C_m^{(n)} = -\langle \psi_n^1 | V_{per} | \psi_m^0 \rangle, \quad (2.17)$$

$$C_m^{(n)} = \frac{\langle \psi_n^1 | V_{per} | \psi_m^0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}, \quad (2.18)$$

e, portanto

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^1 | V_{per} | \psi_m^0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} |\psi_m^0\rangle. \quad (2.19)$$

Agora nos resta encontrar a correção para as energias de segunda ordem, E_n^2 . Para isso, tomamos o produto interno de $|\psi_n^0\rangle$ em (2.10), de modo a obter:

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | V_{per} | \psi_n^1 \rangle - E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle, \quad (2.20)$$

contudo, como $|\psi_n^1\rangle$ é descrita por (2.13) que leva em conta todos os estados em que $m \neq n$, o segundo termo de (2.20) se torna nulo, restando apenas:

$$E_n^2 = \langle \psi_n^0 | V_{per} | \psi_n^1 \rangle, \quad (2.21)$$

e utilizando (2.19), obtemos:

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^0 | V_{per} | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | V_{per} | \psi_m^0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}, \quad (2.22)$$

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | V_{per} | \psi_n^0 \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} \quad (2.23)$$

Encontradas as correções de primeira e segunda ordem para as energias e a função de onda perturbada de primeira ordem, podemos fazer $\lambda = 1$ nas equações (2.5) e (2.6) e, finalmente, expressar as correções até a segunda ordem para a energia e até a primeira para o autoestado como segue:

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | V_{per} | \psi_n^0 \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |\psi_m^0\rangle + \dots, \quad (2.24)$$

$$E_n = \epsilon_n + \langle \psi_n^0 | V_{per} | \psi_n^0 \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | V_{per} | \psi_n^0 \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} + \dots, \quad (2.25)$$

A seguir, iremos descrever o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ a partir do caso não degenerado da teoria da perturbação discutido até aqui.

2.2 Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

A suposição da existência de bandas de energia em cristais nos permite estudar as características óticas e eletrônicas em sólidos. Alguns métodos para construção da estrutura de bandas foram desenvolvidos ao longo de décadas e duas vertentes são atualmente mais utilizadas: a teoria do funcional de densidade (DFT - *Density Functional Theory*), que parte de primeiros princípios da teoria quântica (*ab initio*), sem recorrer a parâmetros experimentais; e os métodos empíricos e semi-empíricos, que dependem de parâmetros que são determinados experimentalmente [51]. Entre os métodos empíricos está, por exemplo, o método de pseudopotencial e no método semi empírico temos o $\vec{k} \cdot \vec{p}$ que dependem de um conjunto de dados experimentais para a calcular as estruturas eletrônicas. O método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ é particularmente conveniente para estudar as características óticas e sistemas com um número de partículas relativamente grande se comparado com sistemas de algumas moléculas com custos computacionais relativamente baixos. Além disso, usando esse método pode-se obter expressões analíticas para a dispersão de bandas e massas efetivas geralmente em torno de um ponto de alta simetria (ponto Γ , onde

$k_x = k_y = k_z = 0$) [48] e incluir nos cálculos diversos efeitos físicos, como campos magnéticos intrínsecos, campos magnéticos externos, *strain*, campos elétricos, campos piezoelétricos, troca-correlação, etc. A partir desse método também é possível estudar estruturas de bandas de sistemas complexos, como os *quantum dots*, *quantum wires* e calcular, além disso, os espectros de fotoluminescência teóricos para heteroestruturas e SMDs, que é o objetivo do nosso estudo.

Este método pode ser desenvolvido em torno de alguns argumentos. O primeiro é que o potencial dentro do cristal seja periódico, de modo que as soluções para a equação de *Schrödinger* para um elétron obedeça ao teorema de Bloch [51]:

$$\phi_{v\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.26)$$

onde v é o índice da banda de energia, $u_{v\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função com a periodicidade da rede e \vec{k} é um vetor da rede recíproca pertencente à primeira zona de Brillouin. A partir dessa função de onda, assumimos que atue no sistema apenas um potencial cristalino $V(\vec{r})$ de modo que, se substituirmos (2.26) na equação de *Schrödinger*, obtemos:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] \phi_{v\vec{k}}(\vec{r}) = E_{v\vec{k}} \phi_{v\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.27)$$

onde \hat{p} é o operador momento $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. Aplicando \hat{p} duas vezes na função de Bloch, obtêm-se

$$\begin{aligned} (\hat{p})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) &= (-i\hbar\nabla)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \hbar\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(-i\hbar\nabla)u_{v\vec{k}}(\vec{r}), \\ (\hat{p}^2)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) &= (-i\hbar\nabla)^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= (-i\hbar\nabla) \left[\hbar\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(-i\hbar\nabla)u_{v\vec{k}}(\vec{r}) \right] \\ &= \hbar^2\vec{k}^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}) + 2\hbar\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(-i\hbar\nabla)u_{v\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(-i\hbar\nabla)^2 u_{v\vec{k}}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (2.28)$$

que substituindo na equação (2.27), obtemos:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m_0} \right] u_{v\vec{k}}(\vec{r}) = E_{v\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.29)$$

e podemos escrever a expressão final como:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{v\vec{k}}(\vec{r}) = E_{v\vec{k}} u_{v\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.30)$$

No ponto $k_0 = (0, 0, 0)$, a equação (2.30) se torna:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] u_{v0}(\vec{r}) = \varepsilon_{v0} u_{v0}(\vec{r}). \quad (2.31)$$

Desde que as funções $u_{v\vec{k}}$ sejam periódicas, (2.31) se torna mais fácil de se resolver do que (2.30), além de poderem ser expandidas para qualquer ponto k_0 . Se a equação (2.31) for resolvida, encontramos as funções $u_{n0}(\vec{r})$ e as energias ε_{n0} e podemos utilizá-las como base para a teoria de perturbação fazendo $V_{per} = \frac{\hbar\vec{k} \cdot \vec{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ serem o potencial perturbado. Esse método é conhecido como método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. A teoria da perturbação funciona para valores de potenciais pequenos, se comparados ao valor das energias não perturbadas. Isso nos leva a afirmar que esse método funciona para pequenos valores de \vec{k} , próximos a um ponto de alta simetria (até 10% da Zona de Brillouin) [48].

Reescrevendo os autovalores de energia E_v e as autofunções $|\psi_v\rangle$ em termos da teoria da perturbação, utilizando os potenciais perturbados de (2.30), obtemos:

$$E_v = \varepsilon_{v0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{v' \neq v} \frac{|\langle u_{v0} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{v'0} \rangle|^2}{E_{v0} - E_{v'0}}, \quad (2.32)$$

$$|\Psi_v\rangle = u_{v0} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{v' \neq v} \frac{\langle u_{v0} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{v'0} \rangle}{E_{v0} - E_{v'0}} u_{v'0}. \quad (2.33)$$

Os termos de correção segunda ordem na expressões que envolvem k^2 se anulam, devido a ortonormalidade dos estados $|u_{v'0}\rangle$ e $|u_{v0}\rangle$ e os termos de primeira ordem para as expressões que envolvem o produto $\vec{k} \cdot \vec{p}$ se anulam em ambas expressões (2.32) e (2.33). Podemos também escrever as energias para valores pequenos de k da seguinte maneira:

$$E_v = \varepsilon_{v0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.34)$$

de modo que m^* é definida como a **massa efetiva** da banda v . Fisicamente, a massa efetiva é a massa que o portador apresenta quando a estrutura cristalina está sujeita campo externo (elétrico ou magnético) que age sobre os portadores. E podemos escrever uma expressão para a massa efetiva para o caso não degenerado como segue:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2 k^2} \sum_{v' \neq v} \frac{|\langle u_{v0} | \vec{k} \cdot \vec{p} | u_{v'0} \rangle|^2}{E_{v0} - E_{v'0}}. \quad (2.35)$$

O estudo a partir do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ não degenerado pode ser utilizado quando há alguma quebra de simetria que cause uma não-degenerescência das bandas ou para sistemas que já possuem essa característica. Quando há estados degenerados, como no caso aqui estudado para estruturas *zincblende*, se faz necessária utilização de teoria de grupos para escrevermos as funções de onda no espaço dos momentos para tais estruturas. Esses trabalhos já foram realizados e estão além do escopo desse estudo. Mais detalhes podem ser encontrados nas referências [41, 42, 48, 52] cujos Hamiltonianos serão apresentados no capítulo seguinte.

No próximo capítulo serão descritas os potenciais considerados no Hamiltoniano principal e serão discutidas as condições para utilização do método nas simulações de super-redes.

CAPÍTULO 3

Metodologia

3.1 Hamiltoniano para uma Partícula

Neste capítulo serão descritos todos os termos do Hamiltoniano proposto para esse trabalho, levando em conta a descrição teórica de super-redes e heteroestruturas. O Hamiltoniano total é mostrado abaixo:

$$H = H_0 + V_{HET} + V_C + V_{XC} + V_S + V_{MAG} \quad (3.1)$$

onde serão descritos todos os componentes do Hamiltoniano, sendo estes: o Hamiltoniano de energia cinética, H_0 ; o potencial quadrado criado pela diferença de materiais que formam a super-rede, V_{HET} ; o potencial causado pelas interações eletrostáticas entre os portadores, V_C ; o potencial de troca-correlação, V_{XC} ; o potencial de tensão (*strain*) devido ao descasamento dos parâmetros de rede entre os materiais da heteroestrutura, V_S e o potencial de interação magnética, V_{MAG} , que é da ordem de $50 - 200 meV$.

Para esse Hamiltoniano, podemos escrever a equação de *Schrödinger* da seguinte maneira:

$$H\psi_{v\vec{k}}(\vec{r}) = E_v\psi_{v\vec{k}}(\vec{r}), \quad (3.2)$$

em que \vec{k} é um vetor da primeira zona de Brillouin (ZB). Fazendo $\psi_{v\vec{k}}(\vec{r}) = \langle s\vec{r} | v\vec{k} \rangle$, com a função de onda obedecendo o teorema de Bloch e s sendo o *spin*, podemos escrever o Hamiltoniano dado por (3.1) como:

$$(H = H_0 + V_{HET} + V_C + V_{XC} + V_S + V_{MAG})\psi_{v\vec{k}}(\vec{r}) = E_v\psi_{v\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.3)$$

A equação acima é resolvida autoconsistentemente. As etapas do cálculo serão descritas na

seção (3.11). A próxima seção descreve as heteroestruturas e super-redes semicondutoras.

3.2 Heteroestruturas e Super-redes

Quando uma estrutura de materiais semicondutores com características diferentes é crescida em camadas sequenciais, a denominamos heteroestrutura. A diferença entre os materiais nas camadas permite, na maioria dos casos, obter um maior controle sobre os fenômenos que ocorrem em uma determinada região [53]. A super-rede é o sistema em que as camadas se tornam muito estreitas e são repetidas periodicamente pelos materiais que formam as barreiras e os poços. Nossos cálculos baseiam-se na análise de uma super-rede de poços quadrados infinita, crescida na direção $\langle 001 \rangle$. A representação esquemática da super-rede é mostrada na figura 3.1 e foi proposta por Tsu e Esaki em 1970 [54].

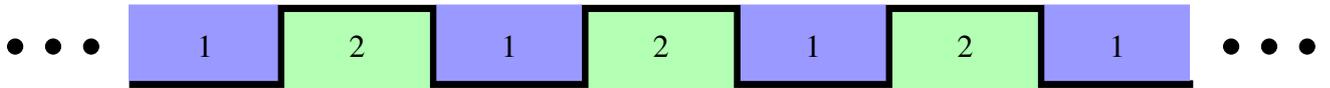


Figura 3.1 Representação esquemática de uma super-rede na banda de valência para dois tipos diferentes de materiais, 1 e 2.

As estruturas estudadas aqui têm simetria *zincblende* [48]. Desse modo, iremos abordar o problema a partir de uma célula unitária da super-rede. A célula unitária da super-rede é do tipo tetragonal que, se assumirmos um número η de camadas crescidas na direção $\langle 001 \rangle$, é descrita pelos seguintes vetores primitivos [40]:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{e}_x - \hat{e}_y), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{e}_x + \hat{e}_y), \quad \vec{a}_3 = d\hat{e}_z, \quad (3.4)$$

em que a é o parâmetro de rede do material volumétrico (*bulk*), \vec{a}_j ($j = 1, 2, 3$) são os vetores primitivos, $d = \frac{\eta a}{2}$ é o período da super rede e η é um número inteiro, que como dito anteriormente, define o número de camadas que compõem a célula unitária da super-rede. Assumindo que a super-rede infinita pode ser descrita em termos de uma região finita sujeita à periodi-

cidade, podemos descrever a região em termos de vetores apropriados. Podemos fazer isso tomando um determinado número de pontos em uma dada direção do espaço, definindo uma rede de pontos periódica. Escrevemos o número de pontos em cada direção a partir de números inteiros G_{\parallel} nas direções \hat{x} e \hat{y} e G_{\perp} na direção \hat{z} . Assim, podemos expandir qualquer vetor da rede como $G_{\parallel}\vec{a}_1$, $G_{\parallel}\vec{a}_2$ e $G_{\perp}\vec{a}_3$. Os os vetores primitivos no espaço recíproco são dados por:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{e}_x - \hat{e}_y), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{e}_x + \hat{e}_y), \quad \vec{b}_3 = \left(\frac{4\pi}{\eta a}\right)\hat{e}_z \quad . \quad (3.5)$$

A partir disso, podemos afirmar que o volume da célula unitária da estrutura será $\Omega_0 = a^3/4$. O volume da região de periodicidade é dado por $G_{\parallel}^2 G_{\perp} \eta \Omega_0$ que pode ser escrito como:

$$\Omega = G_{\parallel}^2 G_{\perp} \eta \Omega_0 = G_{\parallel}^2 G_{\perp} \frac{da^2}{2}. \quad (3.6)$$

Os vetores de onda \vec{k} só podem assumir valores definidos pela relação:

$$\vec{k} = \frac{k_1}{G_{\parallel}}\vec{b}_1 + \frac{k_2}{G_{\parallel}}\vec{b}_2 + \frac{k_3}{G_{\perp}}\vec{b}_3 \quad , \quad (3.7)$$

onde k_1 , k_2 e k_3 são números inteiros. A seguir, apresentaremos o formalismo da equação da massa efetiva na base de ondas planas.

3.3 Equação da Massa Efetiva (EME)

Uma maneira de se resolver a equação de *Schrödinger* (3.3) é utilizando o formalismo 6×6 desenvolvido por Luttinger e Kohn [41]. Dentro desse modelo, para um material *bulk* no ponto de alta simetria $\Gamma(\vec{k} = 0)$, temos seis funções: quatro degeneradas no topo da banda de valência, buracos leves e pesados, com simetria Γ_8 , que na base $|jm_j\rangle$ são indexados por $j = \frac{3}{2}$ e $m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ e duas funções degeneradas, buracos *split-off* com simetria Γ_7 , com $j = \frac{1}{2}$ e $m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$. As representações da estrutura de bandas para estruturas cúbicas e da primeira Zona de Brillouin são mostradas na figura 3.2.

As funções de onda para um cristal com simetria *zincblende* estão de acordo com o teorema

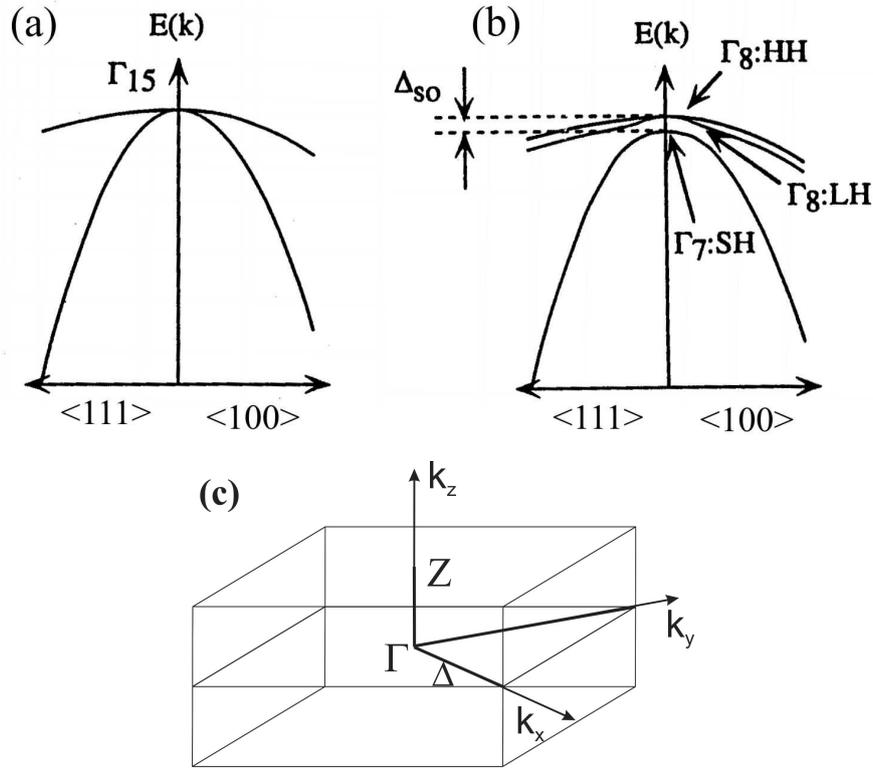


Figura 3.2 Representação esquemática da estrutura de bandas de valência para materiais cúbicos ao longo das direções $\langle 111 \rangle$ e $\langle 100 \rangle$ (a) sem acoplamento *spin-órbita* e (b) com acoplamento *spin-órbita*. HH, LH e SH(SO) são as bandas de buraco pesado, buraco leve e *split-off*, respectivamente. A separação da energia Δ_{SO} devida a interação *spin-órbita* é indicada. Em (c) temos a representação esquemática da primeira Zona de Brillouin para a super-rede de poços quânticos. Figuras extraídas da Referência [40].

de Bloch. As funções de Luttinger-Kohn são escritas como:

$$\langle \vec{r}_s | jm_j \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \langle \vec{r}_s | jm_j \rangle, \quad (3.8)$$

onde Ω é o volume da célula unitária *bulk*. Considerando a periodicidade da super-rede, temos:

$$\langle \vec{r}_s | jm_j \vec{k} K \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\vec{k} + K\vec{e}_z)\vec{r}} \langle \vec{r}_s | jm_j \rangle, \quad (3.9)$$

onde

$$\langle \vec{r}_s | jm_j \vec{k} K \rangle \equiv \langle \vec{r}_s | jm_j \vec{k} + K\vec{e}_z \rangle. \quad (3.10)$$

Utilizando esta base, podemos escrever as autofunções da super-rede do seguinte modo:

$$\langle \vec{r}_s | \vec{v}_{\vec{k}} \rangle = \sum_{jm_j\vec{k}K} \langle jm_j\vec{k}K | \vec{v}_{\vec{k}} \rangle \langle \vec{r}_s | jm_j\vec{k}K \rangle. \quad (3.11)$$

A equação (3.2) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \sum_{j'm'_jK'} \langle jm_j\vec{k}K | H_0 + V_{HET} + V_C + V_{XC} + V_S + V_{MAG} | j'm'_j\vec{k}K' \rangle \langle j'm'_j\vec{k}K' | \vec{v}_{\vec{k}} \rangle \\ = E(\vec{k}) \langle jm_j\vec{k}K | \vec{v}_{\vec{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

A partir da equação (3.12) acima, analisaremos cada uma das contribuições. Isto será discutido nas próximas seções.

3.4 Termo de Energia Cinética Generalizado

Para uma heteroestrutura, diferentemente do que acontece com homoestruturas, na matriz de energia cinética existem termos externos à diagonal principal em relação aos vetores da super-rede \vec{K}^1 e \vec{K}' , devido à diferença de materiais nessas estruturas. No método aqui utilizado, a EME é representada em termos de ondas planas, a diferença entre os parâmetros do operador de energia cinética não é expressa pelas suas condições de contorno, mas justamente pelos elementos fora da diagonal principal na matriz de energia cinética com relação a \vec{K} e \vec{K}' . Apresentaremos aqui as matrizes de energia cinética de Luttinger-Kohn e Kane para a energia cinética.

3.4.1 Matriz de Luttinger-Kohn

Dentro do formalismo 6×6 de Luttinger-Kohn (LK), o operador de energia cinética, H_0 é dado por [52]:

¹O vetor da super-rede é definido como um vetor no espaço recíproco com período da super-rede dado por $\vec{K} = \frac{2\pi}{d}l$, em que l é um inteiro

$$\begin{pmatrix} \hat{Q}(z) & \hat{S}(z) & \hat{R}(z) & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}(z) & -i\sqrt{2}\hat{R}(z) \\ \hat{S}^*(z) & \hat{T}(z) & 0 & \hat{R}(z) & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}(z) \\ \hat{R}^*(z) & 0 & \hat{T}(z) & -\hat{S}(z) & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^*(z) & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) \\ 0 & \hat{R}^*(z) & -\hat{S}^*(z) & \hat{Q}(z) & -i\sqrt{2}\hat{R}^*(z) & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^*(z) \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^*(z) & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}(z) & i\sqrt{2}\hat{R}(z) & \frac{1}{2}(\hat{Q}(z) + \hat{T}(z)) - \Delta(z) & 0 \\ i\sqrt{2}\hat{R}^*(z) & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^*(z) & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}(z) & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q}(z) + \hat{T}(z)) - \Delta(z) \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

onde $\hat{Q}(z), \hat{R}(z), \hat{S}(z)$ e $\hat{T}(z)$ são operadores diferenciais

$$\hat{Q} = -\frac{1}{2m_0} [\hbar^2 (\gamma_1(z) + \gamma_2(z)) (k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z)) \hat{p}_z \hat{p}_z] \quad (3.14)$$

$$\hat{T} = -\frac{1}{2m_0} [\hbar^2 (\gamma_1(z) - \gamma_2(z)) (k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1(z) + 2\gamma_2(z)) \hat{p}_z \hat{p}_z] \quad (3.15)$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2m_0} 2i\sqrt{3} (k_x - ik_y) \gamma_3(z) \hat{p}_z \quad (3.16)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [\gamma_2(z) (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3(z) k_x k_y] \quad (3.17)$$

e Δ é a energia do desdobramento de *spin-órbita*. γ_1, γ_2 e γ_3 são os parâmetros de Luttinger e m_0 é a massa do elétron. Os parâmetros de Luttinger são obtidos da literatura [40, 52, 55]

Uma heteroestrutura é formada, como mencionado anteriormente, por camadas de diferentes materiais. Os parâmetros dependentes de z na matriz acima nos mostram justamente isso, eles variam de acordo a região do sistema (materiais diferentes têm parâmetros diferentes. Para que isso seja levado em conta, utilizaremos um parâmetro de massa efetiva $f(z)$ ao longo de uma super-rede de período d composta por n materiais. Os detalhes de como é obtida a expressão final dos termos da Hamiltoniana de energia cinética (3.18) abaixo, pode ser encontrada no Apêndice A.

$$\langle jm_j K | H_0 | j' m'_j K' \rangle =$$

$$\begin{pmatrix} \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{2}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} \\ \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}-\hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} \\ \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S} & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}-\hat{T}) \\ 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2}\hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}-\hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} & i\sqrt{2}\hat{R} & \frac{1}{2}(\hat{Q}+\hat{T})-\hat{\Delta} & 0 \\ i\sqrt{2}\hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}-\hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q}+\hat{T})-\hat{\Delta} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

onde \hat{Q} , \hat{T} , \hat{S} e \hat{R} são dados por

$$\hat{Q} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n (\gamma_1^i + \gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 + k_y^2) + K^2 \sum_{i=1}^n (\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right] \quad (3.19)$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n (\gamma_1^i - \gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 + k_y^2) + K^2 \sum_{i=1}^n (\gamma_1^i + 2\gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right] \quad (3.20)$$

$$\hat{S} = i \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\sqrt{3}}{d} (k_x - ik_y) K \sum_{i=1}^n \gamma_3^i (z_i - z_{i-1}) \quad (3.21)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\sqrt{3}}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n \gamma_2^i (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 - k_y^2) - 2i \left(\sum_{i=1}^n \gamma_3^i (z_i - z_{i-1}) \right) k_x k_y \right] \quad (3.22)$$

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n \Delta_i (z_i - z_{i-1}) \quad (3.23)$$

para $K' = K$, e

$$\begin{aligned} \hat{Q} = & \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{1}{d} \times \\ & \left\{ \left[(\gamma_1^n + \gamma_2^n) - (\gamma_1^1 + \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} + \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ & \left. + \left[(\gamma_1^n - 2\gamma_2^n) - (\gamma_1^1 - 2\gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] KK' \right\} \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} = & \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{1}{d} \times \\ & \left\{ \left[(\gamma_1^n - \gamma_2^n) - (\gamma_1^1 - \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ & \left. + \left[(\gamma_1^n + 2\gamma_2^n) - (\gamma_1^1 + 2\gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} + 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] KK' \right\} \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\sqrt{3}}{d} (k_x - ik_y) \frac{(K' + K)}{(K' - K)} \left[(\gamma_3^n - \gamma_3^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \hat{R} = & \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{\sqrt{3}}{d} \times \left\{ \left[(\gamma_2^n - \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_2^i - \gamma_2^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 - k_y^2) - \right. \\ & \left. - 2i \left[(\gamma_3^n - \gamma_3^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] k_x k_y \right\} \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\hat{\Delta} = -i \frac{1}{d(K' - K)} \left[(\Delta_n - \Delta_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\Delta_i - \Delta_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] \quad (3.28)$$

para $K' \neq K$.

Para o caso de dois materiais ($n=2$), geralmente os casos mais comuns nos sistemas de poços quânticos e super-redes, as expressões acima se resumem a

$$\begin{aligned} \hat{Q} = & -\frac{\hbar^2}{2m_0d} \{ [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) + (\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] (k_x^2 + k_y^2) + \\ & + K^2 [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) - 2(\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] \} \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} = & -\frac{\hbar^2}{2m_0d} \{ [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) - (\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] (k_x^2 + k_y^2) + \\ & + K^2 [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) + 2(\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] \} \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\hat{S} = -i \frac{\hbar^2}{2m_0d} 2\sqrt{3}K (\gamma_3^1 d_1 + \gamma_3^2 d_2) (k_x - ik_y) \quad (3.31)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0d} \sqrt{3} [(\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2) (k_x^2 - k_y^2) - 2i (\gamma_3^1 d_1 + \gamma_3^2 d_2) k_x k_y] \quad (3.32)$$

$$\Delta(z) = \frac{1}{d} (\Delta_1 d_1 + \Delta_2 d_2) \quad (3.33)$$

onde d_1 e d_2 são as larguras da barreira e do poço, respectivamente (ver Figura ??). Para $K' = K$ e,

$$\hat{Q} = \frac{-i\hbar^2}{2m_0(K-K')d} \left[1 - e^{i(K-K')d_1} \right] \left[(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) + (\gamma_2^2 - \gamma_2^1) \right] (k_x^2 + k_y^2) + KK' \left[(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) - 2(\gamma_2^2 - \gamma_2^1) \right] \quad (3.34)$$

$$\hat{T} = \frac{-i\hbar^2}{2m_0(K-K')d} \left[1 - e^{i(K-K')d_1} \right] \left[(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) - (\gamma_2^2 - \gamma_2^1) \right] (k_x^2 + k_y^2) + KK' \left[(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) + 2(\gamma_2^2 - \gamma_2^1) \right] \quad (3.35)$$

$$\hat{S} = -\frac{\hbar^2\sqrt{3}}{2m_0(K-K')d} \left[1 - e^{i(K-K')d_1} \right] (\gamma_3^2 - \gamma_3^1) (k_x - ik_y) (K + K') \quad (3.36)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2 i}{2m_0(K-K')d} \sqrt{3} \left[1 - e^{i(K-K')d_1} \right] \left[(\gamma_2^2 - \gamma_2^1) (k_x^2 - k_y^2) - 2i(\gamma_3^2 - \gamma_3^1) k_x k_y \right] \quad (3.37)$$

$$\Delta(z) = -\frac{i}{(K-K')d} (\Delta_2 - \Delta_1) \left[1 - e^{i(K-K')d_1} \right] \quad (3.38)$$

para $K' \neq K$.

As expressões (3.18)-(3.28) descrevem a matriz de energia cinética a partir do formalismo LK.

3.4.2 Matriz de Kane

Agora iremos apresentar a matriz de energia cinética dentro do formalismo de Kane, que leva em conta também a banda de condução. No modelo 8×8 desenvolvido por Kane [42, 55], o Hamiltoniano $\langle jm_j K | H_0 | j' m' K' \rangle$ não perturbado é descrito como segue:

$$\langle jm_j K | H_0 | j' m'_j K' \rangle =$$

$$\begin{bmatrix} \hat{E}_g + \hat{A}k^2 & 0 & i\hat{P}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_- & 0 & i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z & \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_- \\ 0 & \hat{E}_g + \hat{A}k^2 & 0 & -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_+ & i\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & -\hat{P}_- & i\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z \\ -i\hat{P}_- & 0 & \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_- & \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S} & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) \\ 0 & -\hat{P}_+ & 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2}\hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z & -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_- & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z & i\sqrt{2}\hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) \end{bmatrix}, \quad (3.39)$$

sendo que os operadores \hat{Q} , \hat{T} , \hat{S} e \hat{R} foram definidos nas equações (3.14) - (3.17). Os termos extras são dados por:

$$\hat{A}(z)k^2 = A(k_x^2 + k_y^2) + \hat{p}_z^\dagger \frac{A}{\hbar^2} \hat{p}_z, \quad (3.40)$$

$$\hat{E}_g(z) = E_g, \quad (3.41)$$

$$\hat{P}_\pm = P(k_x \pm ik_y), \quad (3.42)$$

$$\hat{P}_z = \frac{1}{2\hbar} \left(\hat{p}_z^\dagger P + P \hat{p}_z \right), \quad (3.43)$$

onde m_e^* é a massa efetiva do elétron, $A = \frac{\hbar^2}{m_e^*}$ é o parâmetro de massa efetiva dos elétrons da banda de condução, $E_g(z)$ é a energia do *gap* entre as bandas de condução e valência no ponto Γ e $\hat{P} = i\left(\frac{\hbar}{m_0}\right)\langle c|p_x|x\rangle$ é o elemento de matriz de momentos entre estados. Além disso, precisamos considerar também novos parâmetros de Kane, dados por:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \gamma_1^L - \frac{1}{3} \frac{E_p}{E_g} \\
\gamma_2 &= \gamma_2^L - \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_g} \\
\gamma_3 &= \gamma_3^L - \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_g},
\end{aligned} \tag{3.44}$$

onde γ_1^L , γ_2^L e γ_3^L são os parâmetros de Luttinger e $E_p = (\frac{2m_0}{\hbar^2})P^2$ é a energia de Kane. Podemos generalizar as expressões as expressões (3.40)-(3.43) para n materiais, da seguinte maneira:

$$\hat{A}k^2 = k^2 \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n A_i (z_i - z_{i-1}) \tag{3.45}$$

$$\hat{E}_g = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n E_{g_i} (z_i - z_{i-1}) \tag{3.46}$$

$$\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{d} (k_x \pm k_y) \sum_{i=1}^n P_i (z_i - z_{i-1}) \tag{3.47}$$

$$\hat{P}_z = \frac{1}{d} K \sum_{i=1}^n P_i (z_i - z_{i-1}) \tag{3.48}$$

para $K' = K$, e

$$\hat{A}k^2 = -i \frac{1}{d} \frac{(k_x^2 + k_y^2 + KK')}{(K' - K)} \left[(A_n - A_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (A_i - A_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] \tag{3.49}$$

$$\hat{E}_g = -i \frac{1}{d} \frac{1}{(K' - K)} \left[(E_{g_n} - E_{g_1}) + \sum_{i=1}^{n-1} (E_{g_i} - E_{g_{i+1}}) e^{i(K' - K)z_i} \right] \tag{3.50}$$

$$\hat{P}_{\pm} = -i \frac{1}{d} \frac{(k_x \pm ik_y)}{(K' - K)} \left[(P_n - P_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (P_i - P_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] \tag{3.51}$$

$$\hat{P}_z = -i \frac{1}{2d} \frac{(K + K')}{(K' - K)} \left[(P_n - P_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (P_i - P_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] \tag{3.52}$$

para $K' \neq K$.

Reduzindo estas expressões para dois materiais ($n = 2$), pois serão os casos a serem estudados aqui, temos,

$$\hat{A}k^2 = \frac{1}{d}k^2(A_1d_1 + A_2d_2) \quad (3.53)$$

$$\hat{E}_g = \frac{1}{d}(E_{g_1}d_1 + E_{g_2}d_2) \quad (3.54)$$

$$\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{d}(k_x \pm ik_y)(P_1d_1 + P_2d_2) \quad (3.55)$$

$$\hat{P}_z = \frac{1}{d}K(P_1d_1 + P_2d_2), \quad (3.56)$$

para $K' = K$ e,

$$\hat{A}k^2 = -\frac{i(k_x^2 + k_y^2 + KK')}{(K' - K)d}(A_2 - A_1) \left[1 - e^{(K' - K)d_1} \right], \quad (3.57)$$

$$\hat{E}_g = -\frac{i}{(K' - K)d}(E_{g_2} - E_{g_1}) \left[1 - e^{(K' - K)d_1} \right], \quad (3.58)$$

$$\hat{P}_{\pm} = -\frac{i(k_x \pm ik_y)}{(K' - K)d}(P_2 - P_1) \left[1 - e^{(K' - K)d_1} \right], \quad (3.59)$$

$$\hat{P}_z = -\frac{i(K + K')}{(K' - K)2d}(P_2 - P_1) \left[1 - e^{(K' - K)d_1} \right], \quad (3.60)$$

para $K' \neq K$.

A matriz de Kane é particularmente interessante pra esse estudo, pois leva em conta o estados das bandas de condução e valência, importante para a determinação do espectro de fotoluminescência teórico, como será mostrado na seção 3.10. A seguir será apresentado o potencial da Heteroestrutura.

3.5 Potencial da Heteroestrutura

Nas Heteroestruturas é considerado o potencial quadrado gerado pela diferença das energias dos *gaps* dos materiais. A descontinuidade da banda de valência pode ser representada na forma matricial:

$$\langle jm_j\vec{k}K | V_{HET} | j'm'_j\vec{k}K' \rangle = \langle K | V_{HET} | K' \rangle \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}. \quad (3.61)$$

Essa matriz é diagonal em relação aos termos jm_j e $j'm'_j$ [52]. Os termos $\langle K | V_{HET} | K' \rangle$ são os coeficientes de Fourier de V_{HET} na direção de crescimento z .

3.6 Potencial de Coulomb

O potencial de Coulomb, é dado pelo potencial de Hartree devido à distribuição dos buracos livres, $p(\vec{r})$, e o potencial devido à distribuição de aceitadores ionizados, N_A . O potencial de Coulomb é obtido a partir da solução da equação de Poisson

$$\nabla^2 V_C(\vec{r}) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} [N_A(\vec{r}) + p(\vec{r})], \quad (3.62)$$

onde ϵ é a constante dielétrica.

Utilizando a transformada de Fourier da equação de Poisson, temos:

$$\langle jm_jK | V_C | j'm'_jK' \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} \frac{1}{|K - K'|^2} \langle K | p(z) - N_A(z) | K' \rangle, \quad (3.63)$$

No método utilizado nesse trabalho, os elementos da matriz de Coulomb são dadas no espaço recíproco da seguinte maneira:

$$\langle jm_j\vec{k}K | V_C | j'm'_j\vec{k}K' \rangle = \langle K | V_C | K' \rangle \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}. \quad (3.64)$$

Como podemos observar a matriz acima é diagonal. Os elementos fora da diagonal prin-

principal se anulam para estados de Bloch $|jm_j\rangle$ diferentes, devido ao fato de propormos que a energia potencial de Coulomb é suave na escala atômica [40]. Para obter os coeficientes de Fourier da distribuição de buracos, $\langle K|p(z)|K'\rangle$, escrevemos a distribuição de buracos em termos das componentes $\langle \vec{r}s|\vec{v}\vec{k}\rangle$ do seguinte modo:

$$p(\vec{r}) = \sum_s \sum_{\substack{\text{Estados} \\ \text{vazios}}} |\langle \vec{r}s|\vec{v}\vec{k}\rangle|^2. \quad (3.65)$$

O segundo somatório é realizado sobre todos os estados não ocupados. Reescrevendo a densidade de probabilidade dos portadores na base das funções dadas na equação (3.11), temos que

$$\begin{aligned} |\langle \vec{r}s|\vec{v}\vec{k}\rangle|^2 &= \sqrt{\Omega} \sum_{j'm'_j} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j\vec{k}K''|\vec{v}\vec{k}\rangle \langle \vec{v}\vec{k}|j'm'_j\vec{k}K'''\rangle \\ &\times \langle z|K''-K'''\rangle \langle jm_j\vec{k}|\vec{r}s\rangle \langle \vec{r}s|j'm'_j\vec{k}\rangle. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Para removermos as flutuações espaciais na escala atômica de comprimentos, devemos tomar a média da expressão acima dentro da célula unitária do material *bulk* e a partir disso, realizar a soma sobre as diferentes coordenadas de *spin* [40]. Essa média é diagonal em j, j', m_j e m'_j e seus elementos são dados por:

$$\sum_s |\langle \vec{r}s|\vec{v}\vec{k}\rangle|^2 = \sqrt{\Omega} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j\vec{k}K''|\vec{v}\vec{k}\rangle \langle \vec{v}\vec{k}|jm_j\vec{k}K'''\rangle \langle z|K''-K'''\rangle. \quad (3.67)$$

Portanto, podemos reescrever a distribuição de cargas dada na equação (3.65) ao longo da direção z como:

$$p(z) = \sqrt{\Omega} \sum_{\substack{|\vec{v}\vec{k}\rangle \\ \text{vazios}}} \sum_{jm_j K'' K'''} \langle jm_j \vec{k} K'' | \vec{v}\vec{k} \rangle \langle \vec{v}\vec{k} | jm_j \vec{k} K''' \rangle \langle z | K'' - K''' \rangle . \quad (3.68)$$

Na representação de ondas planas,

$$\langle K | p | K' \rangle = \frac{1}{\Omega} P(K - K'), \quad (3.69)$$

onde,

$$P(K) = \sum_{\substack{|\vec{v}\vec{k}\rangle \\ \text{vazios}}} \sum_{jm_j K''} \langle jm_j \vec{k} K'' | \vec{v}\vec{k} \rangle \langle \vec{v}\vec{k} | jm_j \vec{k} K'' - K \rangle. \quad (3.70)$$

Consideramos também que a carga total dentro de uma célula unitária é nula, devido à neutralidade de carga, levando à relação:

$$\langle K | N_A | K \rangle - \langle K | p | K \rangle = 0. \quad (3.71)$$

A concentração de aceitadores ionizáveis N_A irá assumir valores de 1×10^{18} , 1×10^{19} e $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, que são valores comumente encontrados na literatura [47, 56]. Na próxima seção será discutido o potencial de troca-correlação que será considerado nos cálculos.

3.7 Potencial de Troca-Correlação

A interação entre os buracos pesados, buracos leves e de *split-off*, no qual todas as bandas estão acopladas, precisa ser considerado no cálculo das energias, por causa do problema de muitos corpos a ser resolvido. Aqui utilizaremos a parametrização para um gás de elétrons homogêneo, generalizada para um gás de buracos livres proposta por Hedin-Lundqvist [57], que dependem das ocupações p_{hh} (buracos pesados), p_{lh} (buracos leves) e p_{soh} (buracos *split-off*). As densidades de cada estado são dadas por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(E)_{hh} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{hh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}, \\
\mathcal{D}(E)_{lh} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{lh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}, \\
\mathcal{D}(E)_{so} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{so}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - \Delta},
\end{aligned} \tag{3.72}$$

onde \bar{m}_{hh} , \bar{m}_{lh} e \bar{m}_{so} são as massas isotrópicas do buraco pesado, leve e de *split-off*, respectivamente. A justificativa para utilizarmos as massas isotrópicas aqui surge do fato de não considerarmos que o efeito de "entortamento" das bandas interfira na interação de troca-correlação significativamente. Obtemos as ocupações de cada portador integrando as densidades até o potencial químico local $\mu(z)$, obtendo [55]:

$$\begin{aligned}
p_{hh} &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{hh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \mu(z)^{\frac{3}{2}} \\
p_{lh} &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{lh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \mu(z)^{\frac{3}{2}} \\
p_{so} &= 0,
\end{aligned} \tag{3.73}$$

onde que p_{hh} , p_{lh} e p_{so} são as ocupações de buracos pesados, leves e de *split-off*, respectivamente. O potencial químico é determinado pela densidade total de buracos:

$$p(z) = p_{hh}(z) + p_{lh}(z) + p_{so}(z). \tag{3.74}$$

que se torna

$$p(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right) \mu(z)^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{so}^{\frac{3}{2}} (\mu(z) - \Delta)^{\frac{3}{2}} \right]. \tag{3.75}$$

Se o potencial químico for menor do que o desdobramento spin-órbita, Δ , não haverá estados ocupados de buracos *split-off* e $p(z)$ se reduz a expressão:

$$p(z) = p_{hh}(z) + p_{lh}(z). \quad (3.76)$$

Assim:

$$p(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right) \mu(z)^{\frac{3}{2}}. \quad (3.77)$$

Discutindo ainda o caso para $\mu(z) < \Delta$ temos:

$$\begin{aligned} p_{hh} &= \frac{\bar{m}_{hh}^{3/2}}{\bar{m}_{hh}^{3/2} + \bar{m}_{lh}^{3/2}} p(z)^{3/2} \quad , \\ p_{lh} &= \frac{\bar{m}_{lh}^{3/2}}{\bar{m}_{hh}^{3/2} + \bar{m}_{lh}^{3/2}} p(z)^{3/2} \quad . \end{aligned} \quad (3.78)$$

Para o caso em que $\mu(z) > \Delta$ não é possível encontrar uma expressão analítica para as ocupações de buracos. Se considerarmos a ocupação de buracos *split-off* muito menor que a soma das ocupações dos buracos pesados e leves, podemos aproximar (3.75) como:

$$\mu(z) = \frac{(3\pi)^{\frac{2}{3}}}{2} \hbar^2 \left[\left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}} \left(p(z) - p_{so}^0 \right)^{\frac{2}{3}} \right], \quad (3.79)$$

onde

$$p_{so}^0(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{so}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{2} \hbar^2 \left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}} p(z)^{\frac{2}{3}} - \Delta \right] \quad (3.80)$$

é a população de buracos de *split-off*. Contudo, nos casos estudados aqui, Δ é grande o suficiente para desprezarmos os efeitos de ocupação de estados *split-off*, fazendo com que as aproximações desenvolvidas em (3.73) sejam válidas.

Com as expressões acima em mãos, podemos agora introduzir as expressões da parametrização desenvolvida por Hedin-Lundvist para escrever os termos do potencial de troca-correlação. Essa parametrização foi originalmente desenvolvida para elétrons e foi generalizada para buracos [40, 55]. O potencial de troca-correlação para os buracos, dentro desse

modelo, é escrito como:

$$V_{XC}^{hh} = -\frac{e^2}{2\varepsilon a_B^{*hh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s^{hh}} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon a_B^{*hh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0.0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{hh}} \right) \quad (3.81)$$

$$V_{XC}^{lh} = -\frac{e^2}{2\varepsilon a_B^{*lh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s^{lh}} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon a_B^{*lh}} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0.0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{lh}} \right) \quad (3.82)$$

$$V_{XC}^{so} = -\frac{e^2}{2\varepsilon a_B^{*so}} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s^{so}} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon a_B^{*so}} \left(\frac{2}{\pi\alpha} \right) 0.0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{so}} \right) \quad (3.83)$$

onde:

$$a_B^{*q} = \varepsilon \left(\frac{m_0}{m_q^*} \right) a_B^q \quad , \quad (3.84)$$

$$r_s^q = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^{*q})^3 p_q \right]^{-\frac{1}{3}} \quad , \quad (3.85)$$

$$R_s^q = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^{*q})^3 p(z) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad , \quad (3.86)$$

onde $q = hh, lh, so$ e p_q e p dados pelas expressões (3.77), (3.78) e (3.80) e ε é a constante dielétrica do material.

Os primeiros termos do lado direito das três equações (3.81) - (3.83) acima, descrevem a interação de troca entre os portadores do mesmo tipo e o segundo termo (expressão que envolve o logaritmo) descreve a troca entre portadores de tipos diferentes. A partir disso, podemos escrever a matriz de troca correlação em relação a base $|jm_j\rangle$ como [40, 55]:

$$\langle jm_j\vec{k} | V_{XC} | j'm'_j\vec{k} \rangle = \begin{pmatrix} Q_{XC} & S_{XC} & R_{XC} & 0 & 0 & 0 \\ S_{XC}^* & T_{XC} & 0 & R_{XC} & 0 & 0 \\ R_{XC}^* & 0 & T_{XC} & -S_{XC} & 0 & 0 \\ 0 & R_{XC}^* & -S_{XC}^* & Q_{XC} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{XC}^{so} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{XC}^{so} \end{pmatrix}, \quad (3.87)$$

onde

$$Q_{XC} = \frac{1}{4} [V_{XC}^{hh} + 3V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + V_{XC}^{hh} \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \quad (3.88)$$

$$T_{XC} = \frac{1}{4} [3V_{XC}^{lh} + V_{XC}^{hh}] \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + V_{XC}^{lh} \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \quad (3.89)$$

$$R_{XC} = -\frac{\sqrt{3}}{4} [V_{XC}^{hh} - V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x - ik_y}{k} \right)^2, \quad (3.90)$$

$$S_{XC} = i\frac{\sqrt{3}}{4} [V_{XC}^{hh} - V_{XC}^{lh}] \left(\frac{(k_x - ik_y)k_z}{k^2} \right), \quad (3.91)$$

$$Q_{XC}^{so} = V_{XC}^{so}. \quad (3.92)$$

A matriz (3.87) é diagonal se V_{hh} e V_{lh} são iguais. Contudo, esses potenciais são bem diferentes, pois as densidades dos buracos são diferentes. Podemos ainda observar que esta matriz é aplicada a um gás de buracos homogêneo da banda de valência com simetria Γ_8 . A característica de não-homogeneidade é introduzida por meio da aproximação de densidade local, contida nas expressões (3.81) - (3.83). Na prática, os termos para buracos *split-off* são desprezados, como dito antes. Desse modo, podemos reescrever (3.87) com uma dependência em z , que fazemos ter uma representação no espaço recíproco, $\langle jm_jK | V_{XC} | j'm'_jK' \rangle$, que será escrita como:

$$\langle jm_j \vec{k} K | V_{XC} | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \begin{pmatrix} \langle K | Q_{XC} | K' \rangle & \langle K | S_{XC} | K' \rangle & \langle K | R_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 & 0 \\ \langle K | S_{XC} | K' \rangle^* & \langle K | T_{XC} | K' \rangle & 0 & \langle K | Q_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 \\ \langle K | R_{XC} | K' \rangle^* & 0 & \langle K | T_{XC} | K' \rangle & -\langle K | S_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle K | R_{XC} | K' \rangle^* & -\langle K | S_{XC} | K' \rangle^* & \langle K | Q_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle K | Q_{XC}^{so} | K' \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \langle K | Q_{XC}^{so} | K' \rangle \end{pmatrix}, \quad (3.93)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle K | Q_{XC} | K' \rangle &= \frac{1}{4} \left[\langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle + 3 \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle \right] \times \\ &\times \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + \langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.94)$$

$$\begin{aligned} \langle K | T_{XC} | K' \rangle &= \frac{1}{4} \left[3 \langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle + \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle \right] \times \\ &\times \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.95)$$

$$\langle K | R_{XC} | K' \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{4} \left[\langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle - \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle \right] \left(\frac{k_x - ik_y}{k} \right)^2, \quad (3.96)$$

$$\langle K | S_{XC} | K' \rangle = i \frac{\sqrt{3}}{4} \left[\langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle - \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle \right] \left(\frac{(k_x - ik_y) k_z}{k^2} \right), \quad (3.97)$$

$$\langle K | Q_{XC}^{so} | K' \rangle = \langle K | V_{XC}^{so} | K' \rangle, \quad (3.98)$$

com V_{XC}^q dados pelas expressões (3.81)-(3.83)

Na próxima seção iremos discutir o potencial de tensão, que terá papel importante nesse trabalho.

3.8 Hamiltoniano de tensão (*Strain*)

A atuação da tensão nas propriedades eletrônicas e óticas dos semicondutores foi investigada por décadas e se tornou muito importante para o entendimento da estrutura de bandas desses materiais [40]. Ao crescer um cristal semiconductor sobre um substrato, como por exemplo uma heteroestrutura, ocorre um descasamento dos parâmetros de rede do cristal semiconductor e do substrato. Essa diferença produz uma força de tensionamento mecânica que causa uma deformação no material. A deformação e, por conseguinte, o efeito tensão será maior quanto maior for a diferença dos parâmetros de rede, que podemos definir como:

$$\frac{\delta a}{a} = \frac{a_2 - a_1}{a_1} \quad (3.99)$$

onde a_1 e a_2 são os parâmetros de rede do substrato e da camada epitaxial, respectivamente. Se δa for menor que 0,1% não existe tensionamento. Se δa estiver entre 0,1% e 2% a tensão começa a afetar a estrutura de bandas e, acima de 2% a estrutura de bandas é seriamente modificada [40].

De modo geral, o tensionamento pode atuar na estrutura de dois modos: compressivo ou distensor. No caso compressivo, o parâmetro de rede da camada epitaxial é menor que o do substrato e no caso distensor ocorre o oposto. Estudaremos aqui estruturas cúbicas, *zincblende*, o tensionamento ocorre de forma biaxial, compressivo ou distensor, que pode ser descrito pela soma da tensão hidrostática com a componente uniaxial, sendo que a direção da componente uniaxial seja oposta a uma das componentes hidrostáticas, como mostrado na figura 3.3:

Para descrever quantitativamente a deformação em um cristal, precisamos imaginar que três vetores ortogonais unitários \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} fazem parte de um sólido. Após o sólido sofrer uma deformação uniforme, os vetores unitários originais têm seus comprimentos e orientações alterados, transformando-se em novos vetores \vec{x}' , \vec{y}' e \vec{z}' . A relação dos antigos eixos com os novos pode

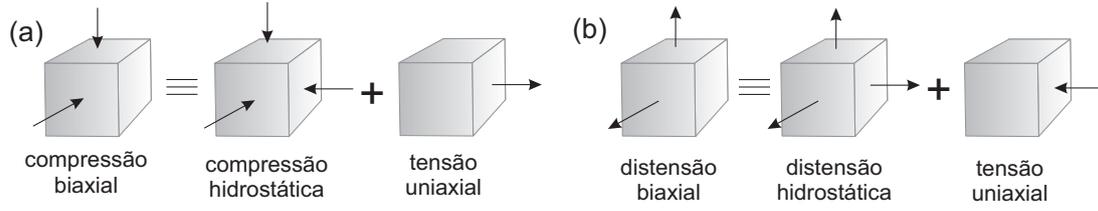


Figura 3.3 Representação esquemática, em materiais cúbicos, de uma camada biaxialmente tensionada nos casos de: (a) compressão e (b) distensão. Figura adaptada da Referência [40].

ser descrita pelo seguinte sistema de equações [51]:

$$\vec{x}' = (1 + \varepsilon_{xx})\hat{x} + \varepsilon_{xy}\hat{y} + \varepsilon_{xz}\hat{z} \quad (3.100)$$

$$\vec{y}' = \varepsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{y} + \varepsilon_{yz}\hat{z} \quad (3.101)$$

$$\vec{z}' = \varepsilon_{zx}\hat{x} + \varepsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \varepsilon_{zz})\hat{z} \quad (3.102)$$

A deformação do sistema é definida pelos coeficientes $\varepsilon_{\alpha\beta}$, com $\alpha, \beta = x, y$ ou z . Podemos com isso analisar o efeito do alongamento sobre um ponto \vec{r} que se encontra inicialmente localizado no espaço por:

$$\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (3.103)$$

Após um alongamento uniforme, o novo vetor é dado por:

$$\vec{r}' = x\vec{x}' + y\vec{y}' + z\vec{z}' \quad (3.104)$$

O vetor do deslocamento causado pela deformação é:

$$\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}' = x(\hat{x} - \vec{x}') + y(\hat{y} - \vec{y}') + z(\hat{z} - \vec{z}') \quad (3.105)$$

e portanto, de acordo com (3.100) - (3.102), podemos reescrever \vec{R} como:

$$\vec{R} = (x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{yx} + z\varepsilon_{zx})\hat{x} + (x\varepsilon_{xy} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{zy})\hat{y} + (x\varepsilon_{xz} + y\varepsilon_{yz} + z\varepsilon_{zz})\hat{z} \quad (3.106)$$

que podemos reescrever em termos de novas funções $u(\vec{r})$, $v(\vec{r})$ e $w(\vec{r})$, da forma:

$$\vec{R} = u(\vec{r})\hat{x} + v(\vec{r})\hat{y} + w(\vec{r})\hat{z} \quad (3.107)$$

Assim, podemos definir as componentes da deformação como:

$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}; \quad \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}; \quad \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}; \quad (3.108)$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}; \quad \epsilon_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}; \quad \epsilon_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}; \quad (3.109)$$

Com as componentes da deformação em mãos, nós podemos calcular a tensão, definida como força por unidade de área, no sólido. A tensão pode ser expressa em termos de nove componentes $\sigma_{\alpha\beta}$, em que $\alpha, \beta = x, y$ ou z , com α indicando a direção da força e β indica a normal ao plano ao qual a força é aplicada. Em uma estrutura cúbica, de nosso interesse aqui, a quantidade de componentes de tensão é reduzida de nove para seis, pra satisfazer a condição de que a aceleração angular e, conseqüentemente, faz com que o torque total seja nulo em cada célula cúbica unitária do sólido. Nesse caso, temos $\sigma_{yz} = \sigma_{zy}$, $\sigma_{zx} = \sigma_{xz}$ e $\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$. Pela lei de Hooke, podemos escrever as componentes de tensão como combinações lineares das componentes da deformação, construindo um tensor de deformação, que definimos por:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix}, \quad (3.110)$$

onde C_{kl} são as constantes de rigidez elásticas que tem dimensões de força/área ou energia/volume. Considerando uma simetria cúbica, só existem três constantes de rigidez elásticas

independentes e se reduzem a matriz [51] [48]:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zy} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{22} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{32} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.111)$$

No estudo desenvolvido aqui, a camada epitaxial é biaxialmente tensionada no plano do substrato. Consideramos aqui que o crescimento do cristal ocorre na direção z , $\langle 001 \rangle$, ou seja, haverá uma componente de *strain* paralela ao plano xy , ϵ_{\parallel} , determinada como função do parâmetro de rede do material 1 (substrato) e do material 2 (camada epitaxial), da seguinte maneira:

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_2 - a_1}{a_1}. \quad (3.112)$$

O crescimento do cristal sendo na direção $\langle 001 \rangle$ implica que os termos mistos da expressão (3.111) serão zero, por condições de simetria. Assim sendo, a matriz pode ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \end{pmatrix}. \quad (3.113)$$

Como a tensão é biaxial no plano xy , como mencionado anteriormente, nós consideramos uniformes e de mesma magnitude os deslocamentos no plano $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel}$ e também as tensões $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{\parallel}$. O deslocamento na direção z definimos por $\epsilon_{zz} = \epsilon_{\perp}$ e como não existe componente de tensão na direção z , temos $\sigma_{zz} = \sigma_{\perp} = 0$. Podemos obter ϵ_{\perp} em termos de ϵ_{\parallel} resolvendo (3.113):

$$\epsilon_{\perp} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon_{\parallel}. \quad (3.114)$$

Agora que obtemos o tensor de *strain*, podemos aplicar a teoria do potencial de deformação

para calcular os efeitos da tensão. A Hamiltoiana da tensão é calculada a partir da teoria de perturbação de primeira ordem, que em geral pode ser escrito por:

$$H_{ij}^{\alpha\beta} = \sum_{ij} D_{ij}^{\alpha\beta} \varepsilon_{ij}, \quad (3.115)$$

onde D_{ij} é o operador de deformação que transforma-se sob operações de simetria. Os termos $D_{ij}^{\alpha\beta}$ são os elementos da matriz na base α e β que representa uma base de funções no cristal na ausência da perturbação causada pelo tensionamento elástico. O número de elementos desta matriz pode ser reduzido de modo semelhante ao caso das constantes elásticas. Contudo, para os potenciais de deformação essa redução é dependente da simetria das funções de onda dos estados de bandas de condução e valência. Os detalhes de como são encontradas as hamiltonianas de *strain* nas bandas de valência e de condução estão descritos no Apêndice B.

De um modo geral podemos escrever as contribuições hidrostáticas da valência e da condução como sendo:

$$H_{hid}^v = a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (3.116)$$

$$H_{hid}^c = a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (3.117)$$

onde utilizando (3.114), temos:

$$H_{hid} = H_{hid}^c + H_{hid}^v$$

$$H_{hid} = a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = 2\varepsilon_{\parallel} a_g \left(1 - 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right), \quad (3.118)$$

em que:

$$a_g = a_c + a_v. \quad (3.119)$$

O termo a_g é a soma do potencial de deformação hidrostático da banda de condução (a_c) com o potencial de deformação hidrostático da banda de valência (a_v).

Os termos que estamos interessados desde o início são justamente os segundos termos do lado direito de cada equação da (B.19) até (B.26) (vide apêndice B). Estes são as componentes

da matriz de *strain* uniaxial, que podemos escrever como:

$$H_{uniaxial} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & -i\sqrt{2}\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & -i\sqrt{2}\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2}\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2}\varepsilon & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.120)$$

que para simplificar a notação, escrevemos:

$$\varepsilon \equiv b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right), \quad (3.121)$$

onde b é o potencial de deformação de cisalhamento da banda de valência para simetria de *strain* tetragonal e ε_{\parallel} é o descasamento dos parâmetros de rede relativo. Nesse trabalho utilizaremos a notação de *Bir-Pikus* para o potencial de deformação. Há várias outras notações na literatura, dentre elas a notação de *Klener-Roth* que também é amplamente utilizada [58]. Portanto agora podemos escrever de forma geral o potencial de tensão total:

$$V_S = H_{hid} + H_{uniaxial} \quad (3.122)$$

De um modo geral, podemos perceber que a tensão aumenta a energia do *gap* no caso compressivo e diminui no caso distensor. Outro papel importante da tensão está diretamente ligado aos estados ocupados nos sistemas. Mesmo não considerando o efeito de desdobramento de *spin-órbita* o tensionamento provoca uma quebra na degenerescência dos estados de buracos leves e pesados, causada pela deformação nas estruturas das bandas de condução e valência. Analisando (3.112) nos casos compressivo e distensor, temos que ε_{\parallel} pode ser positivo ou negativo, alterando a forma do Hamiltoniano (3.120). Essa alteração faz com que os estados os potenciais V_{HH} , V_{LH} e V_{SOH} sofram um deslocamento, que no caso compressivo (ε_{\parallel} positivo) temos $V_{HH} = V + \varepsilon$, $V_{LH} = V - 2\varepsilon$ e $V_{SOH} = V + \varepsilon$. A representação esquemática da separação dos estados são mostrados na figura 3.4 [40].

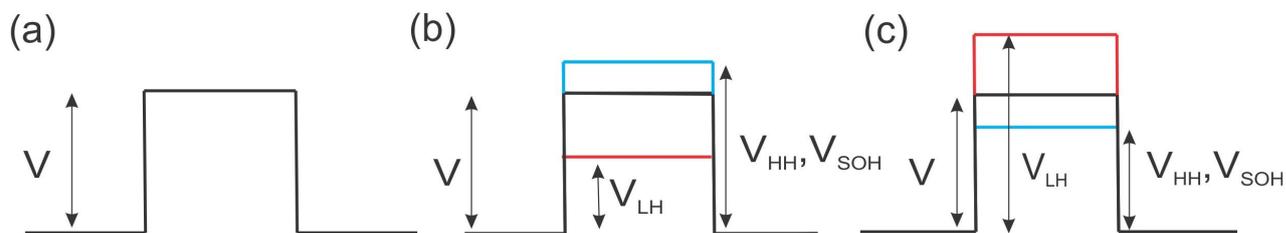


Figura 3.4 Representação esquemática do potencial de portadores para a banda de valência (a) sem tensão (b) com tensão compressiva e (c) com tensão distensiva. As linhas representam o potencial sem tensão (linha preta), potencial de buracos pesados e *split-off* (linha azul), potencial de buracos leves (linha vermelha).

Os sinais se invertem no caso distensivo, devido ao sinal do ϵ_{\parallel} ser negativo e esse deslocamento altera a ocupação dos estados para um determinado tipo de portador, dependendo do tipo de tensionamento [40]. Em todos os casos aqui estudados a tensão é comprimida. No próximo capítulo analisaremos casos onde a tensão é variável, ou seja, sistemas parcialmente tensionados. Isto é o que geralmente ocorre experimentalmente ao se fabricar determinada amostra [43–45, 58].

A seguir será discutida a interação magnética dos buracos da rede com os íons magnéticos do metal de transição.

3.9 Interação Magnética

O objeto de estudo dos SMDs são as interações entre os elétrons, os íons magnéticos e os buracos do sistema e ainda não há um consenso sobre qual modelo é mais adequado para explicar tais interações. Essa interação ocorre, basicamente, devido à eletrostática entre os portadores e ao princípio de exclusão de Pauli. Alguns estudos foram feitos em arsenetos com base no modelo RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida), como por exemplo, sistemas de Ga(Mn)As, AlGa(Mn)As e InGa(Mn)As e acredita-se que esse modelo pode explicar bem as interações nesses sistemas [59–61]. Os elétrons que estão localizados na camada *d* ou *f* incompleta interagem com os portadores (elétrons e buracos) livres no material, também interagindo

com outros íons magnéticos. A interação entre os elétrons das camadas s e p do material e os elétrons d dos íons magnéticos é chamada de interação de troca. Existem vários modelos que discutem como as trocas acontecem, e podemos enfatizar os seguintes: Troca Direta (*Heisenberg Direct Exchange*) que consiste numa interação direta entre dois *spins* localizados; e a troca indireta (*Indirect Exchange*) que é a interação entre os *spins* dos elétrons nas camadas d ou f e os portadores livres. Abaixo discutiremos as duas interações de troca e apresentaremos o modelo utilizado neste trabalho, que é uma adaptação do modelo de RKKY que descreve o sistema a temperaturas próximas da temperatura de Curie e com densidade de íons baixas (menor que 15%) [59,60].

3.9.1 Troca Direta

A interação de troca direta acontece entre dois *spins* localizados, em que a diferença entre os estados simétricos e antissimétricos (singleto e tripleto, respectivamente) é caracterizada pela Hamiltoniana de Heisenberg [62]:

$$H_{Hs} = -J_{ex}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (3.123)$$

onde \vec{S}_1 e \vec{S}_2 são os vetores de troca e J_{ex} é a integral de troca dada por:

$$J_{ex} = \int \int \phi_s^*(\vec{r}_1)\phi_t^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_s(\vec{r}_2)\phi_t(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (3.124)$$

onde ϕ_s e ϕ_t são as funções de onda do estado singleto e tripleto, respectivamente.

3.9.2 Troca Indireta

A interação de troca indireta, por sua vez, é caracterizada pela interação das impurezas magnéticas adicionadas na rede com os portadores livres do material, em que os portadores livres são os responsáveis pela interação entre os elétrons das camadas d ou f dos íons magnéticos. A interação pode ser tanto ferromagnética (troca direta entre os elétrons das camadas d e os elétrons da banda s e p) quanto antiferromagnética (dada pela hibridização dos elétrons da

banda d e íons ou elétrons próximos). O modelo RKKY [63–65] descreve a interação indireta em temperaturas próximas a Temperatura de Curie dos materiais e para concentrações de impurezas magnéticas baixas (menor que 15%). Como falado anteriormente, já foram estudados os efeitos ferromagnéticos de SMDs dopados para Ga(Mn)As, InGa(Mn)As e AlGa(Mn)As com boa concordância com a teoria. O modelo que será utilizado nesse estudo é baseado no modelo RKKY e foi desenvolvido por Cunha Lima *et al.* [59, 60] e será descrito a seguir.

3.9.3 Interação Magnética no Modelo Confinado de Luttinger-Kohn

A interação entre os buracos livres e os momentos magnéticos localizados nas camadas é descrita pelo termo abaixo:

$$V_{MAG}(\vec{r}) = -I \sum_i \vec{s}(\vec{r}) \cdot \vec{S}(\vec{R}_i) \delta(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (3.125)$$

onde I é o termo da interação $sp - d$, \vec{S} é o *spin* das impurezas magnéticas localizadas na posição \vec{R}_i , que são oriundos de um elétron ocupando um orbital d obedecendo a regra de Hund e \vec{s} é o vetor de momento do portador livre na posição \vec{r} . Nenhuma hibridização é considerada, pelo fato desse efeito ser muito pequeno se comparado com a separação de energia das bandas. Em $T = 0K$ podemos fazer a aproximação de assumir que todos os momentos magnéticos estão localizados, causando assim uma independência do *spin* das impurezas, \vec{S} , da sua localização \vec{R}_i . Assim, podemos reescrever (3.125) como:

$$V_{MAG}(\vec{r}) = -I \vec{s}(\vec{r}) \cdot \vec{S} \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i). \quad (3.126)$$

O δ acima representa que só há interação quando o elétron estiver muito próximo do íon magnético, de modo que podemos expressar a soma de todas as contribuições δ da interação como uma densidade dependente da posição dos íon magnéticos, já que o somatório em (3.126) só depende deles. Ficamos, portanto, com a seguinte expressão:

$$V_{MAG}(\vec{r}) = -I \vec{S} \cdot \vec{s}(\vec{r}) \rho_i(\vec{r}). \quad (3.127)$$

Em um material com dopagem magnética, não se pode dizer onde está localizado o íon magnético, apesar de \vec{R}_i determinar um ponto da rede. Esse problema pode ser contornado se considerarmos uma distribuição homogênea de íons magnéticos, de modo que, a densidade ρ_i pode ser aproximada para xN_0 , onde x é a porcentagem de íons que são substituídos efetivamente pelos íons magnéticos e N_i é o número total de íons. No nosso caso, onde analisamos heteroestruturas, devem ser considerados nos cálculos a existência de camadas magnéticas ou não. Para isso pode-se multiplicar o potencial por uma função $g(z)$ que seja igual a 1 quando z pertencer a uma camada magnética e 0 caso contrário. Adicionando $g(z)$, substituindo s e utilizando a relação $\vec{s} = \frac{\vec{\sigma}}{2}$, onde $\vec{\sigma}$ é dada em termos das matrizes de Pauli $\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}$, obtemos:

$$V_{MAG}(\vec{r}) = -\frac{I}{2} \vec{S} \cdot \vec{\sigma} x N_i g(z), \quad (3.128)$$

O vetor \vec{S} na equação acima, ainda pode ser substituído pela média da magnetização total $\langle \vec{M} \rangle$, de modo que a expressão final para o potencial magnético é dada por:

$$V_{MAG}(\vec{r}) = -\frac{I}{2} \vec{M} \cdot \vec{\sigma} x N_i g(z). \quad (3.129)$$

Essa é a expressão final do potencial magnético que será utilizado nesse trabalho. O termo I , que é a pela integral de troca da interação $sp-d$ é substituído por $N_0\beta$ para a banda de valência, e de $N_0\alpha$ para a banda de condução. Nesse trabalho utilizaremos os valores de $N_0\alpha = 0,2$ eV e $N_0\beta = -1,2$ eV, que são os valores para o GaAs [66].

O próximo passo é definir a matriz de interação magnética. Podemos construí-la a partir da base $|j, m_j\rangle$ mostrada em (B.13) para representar os estados Γ_7 e Γ_8 , a mesma base foi utilizada para descrever o Hamiltoniano de Tensão (V_S (ver apêndice B)). A partir disso, podemos considerar a magnetização ocorrendo paralelamente às interfaces, $\vec{M}_{\parallel} = M_x \hat{i} + M_y \hat{j}$, e perpendicular ao plano, $\vec{M}_{\perp} = M_z \hat{k}$, em que M_z está na direção do crescimento. Os elementos da matriz magnética são dados pelos termos calculados de $\langle jm_j | V_{mag} | j'm'_j \rangle$, para cada camada de SMD. Analisando o produto escalar $\vec{M} \cdot \vec{\sigma}$, podemos observar que:

$$\vec{M}_\perp \cdot \vec{\sigma} |\uparrow\rangle = M_z |\uparrow\rangle, \quad (3.130)$$

$$\vec{M}_\perp \cdot \vec{\sigma} |\downarrow\rangle = -M_z |\downarrow\rangle, \quad (3.131)$$

$$\vec{M}_\parallel \cdot \vec{\sigma} |\uparrow\rangle = (M_x + iM_y) |\downarrow\rangle = M_+ |\downarrow\rangle, \quad (3.132)$$

$$\vec{M}_\parallel \cdot \vec{\sigma} |\downarrow\rangle = (M_x - iM_y) |\uparrow\rangle = M_- |\uparrow\rangle. \quad (3.133)$$

Utilizando (3.129) e as equações (3.130) - (3.133), podemos construir a matriz LK do potencial magnético no ponto Γ , como:

$$V_{MAG} = -\frac{x}{6} N_0 \beta \begin{pmatrix} 3M_z & 0 & i\sqrt{3}M_- & 0 & \sqrt{6}M_- & 0 \\ 0 & -3M_z & 0 & -i\sqrt{3}M_+ & 0 & -\sqrt{6}M_+ \\ -i\sqrt{3}M_+ & 0 & M_z & 2iM_- & 2i\sqrt{2}M_z & -\sqrt{2}M_- \\ 0 & i\sqrt{3}M_- & -2iM_+ & -M_z & \sqrt{2}M_+ & -2i\sqrt{2}M_z \\ \sqrt{6}M_+ & 0 & -2i\sqrt{2}M_z & \sqrt{2}M_- & -M_z & iM_- \\ 0 & -\sqrt{6}M_- & -\sqrt{2}M_+ & 2i\sqrt{2}M_z & -iM_+ & M_z \end{pmatrix}. \quad (3.134)$$

Podemos reescrever (3.134) na base apresentada anteriormente:

$$\langle jm_j \vec{k} K | V_{MAG} | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \langle \vec{k} K | V_{mag}^{jm_j; j' m'_j} g(K' - K) | \vec{k} K' \rangle, \quad (3.135)$$

sendo que $g(K' - K)$ é uma integral dada por:

$$g(K' - K) = \frac{1}{d} \int_0^d e^{-iKz} g_z e^{iK'z} dz, \quad (3.136)$$

que é calculada em uma camada de SMD de largura d . O mesmo procedimento realizado para encontrar (3.134) para a banda de valência, pode ser realizada para encontrar a representação matricial para a banda de condução e o resultado é mostrado abaixo:

$$V_{MAG} = -\frac{x}{6}N_0\alpha \begin{pmatrix} M_z & 0 \\ 0 & -M_z \end{pmatrix}. \quad (3.137)$$

Essas matrizes são utilizadas para inclusão da interação magnética no cálculo autoconsistente. A discussão a seguir será relativa ao cálculo do espectro de fotoluminescência teórico.

3.10 Espectro de Fotoluminescência Teórico

Existem vários métodos de caracterização de um material. Uma das maneiras mais utilizadas em sólidos consiste no estudo das propriedades óticas de determinado material. O espectro de luminescência está entre os métodos óticos mais utilizados em semicondutores. O fenômeno de luminescência acontece a partir da recombinação radiativa espontânea de pares elétron-buraco numa amostra, pois a medida de energia de fotoemissão nos fornece as diferenças de energia dos estados recombinantes. Esse método se torna uma boa ferramenta para determinação das propriedades gerais de um semicondutor [55].

Para determinação da estrutura de bandas do material, se faz necessário a utilização do Hamiltoniano 8×8 de Kane, porque precisamos conhecer os estados de elétrons e buracos simultaneamente. Essa matriz foi descrita na seção 3.4. A partir dos termos da matriz de Kane, podemos obter a EME, dada por 3.12, calculando os estados da banda de condução e de valência. Com os estados calculados pode-se calcular a intensidade do espectro de fotoluminescência teórico, que será descrito no tópico seguinte.

3.10.1 Determinação da Intensidade do Espectro de Fotoluminescência

A expressão para a intensidade de fotoluminescência é dada de forma geral pela seguinte expressão [40, 52, 55]:

$$I(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{c} \frac{e^2}{m_0c^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{n_e} \sum_{n_q} f_{n_en_q}(\vec{k}) N_{n_e\vec{k}} [1 - N_{n_q\vec{k}}] \times \frac{\gamma_{n_e\vec{k}n_q\vec{k}}}{\pi [E_{n_e}(\vec{k}) - E_{n_q}(\vec{k}) - \hbar\omega]^2 + \gamma_{n_e\vec{k}n_q\vec{k}}^2}, \quad (3.138)$$

e é a carga do elétron, m_0 a massa de repouso do elétron, ω é a frequência da radiação incidente, E_{n_e} e E_{n_q} , com $q = hh, lh$ e soh , são as energias dos estados para elétrons e buracos, $\gamma_{n_e\vec{k}n_q\vec{k}}$ é o alargamento da transição, n_e e n_q são os estados associados às transições. Os termos $N_{n_e\vec{k}}$ e $[1 - N_{n_q\vec{k}}]$ são as probabilidades de ocupação para os elétrons e buracos, respectivamente, dados pela expressão:

$$N_{n_e\vec{k}} = \frac{1}{e^{[E_F - E_{n_e}(\vec{k})]/k_B T} + 1} \quad (3.139)$$

e para buracos

$$[1 - N_{n_q\vec{k}}] = \frac{1}{e^{[E_F - E_{n_q}(\vec{k})]/k_B T} + 1}, \quad (3.140)$$

onde E_F é a energia de Fermi e k_B é a constante de Boltzmann. A expressão para a força do oscilador é dada por:

$$f_{n_en_q}(\vec{k}) = \frac{2}{m_0} \sum_{\sigma_e\sigma_q} \frac{|\langle n_e\sigma_e\vec{k} | p_x | n_q\sigma_q\vec{k} \rangle|^2}{E_{n_e}(\vec{k}) - E_{n_q}(\vec{k})}, \quad (3.141)$$

sendo p_x o momento de dipolo na direção x , $\langle n_e\sigma_e\vec{k} |$ é o estado inicial, $|n_q\sigma_q\vec{k}\rangle$ o estado final, σ_e e σ_q determinam os valores de *spin* para elétrons e buracos [67].

A última consideração a ser feita é a correção da energia do *gap*, que varia com a temperatura, através da fórmula de Varshni [68]:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\vartheta T^2}{T + \zeta}, \quad (3.142)$$

onde E_g é a energia do *gap* que pode ser direta ou indireta para uma determinada temperatura (T), E_0 é o valor da energia do *gap* para $T = 0K$, ϑ e ζ são as constantes de correção para cada tipo de material. As constantes utilizadas para correção dos materiais estudados aqui estão dados na tabela abaixo [69]:

Tabela 3.1 Parâmetros para InAs, AlAs e GaAs.

Parâmetros	$\vartheta(meV/K)$	$\zeta(K)$	$E_0(eV)$
InAs	0.276	93	0.417
AlAs	0.885	530	3.099
GaAs	0.5405	204	1.519

Para as ligas utilizadas nesse trabalho, interpolamos linearmente os parâmetros. A interpolação é definida no capítulo seguinte, além disso, estudaremos os resultados das simulações realizadas utilizando todas as ferramentas teóricas discutidas até aqui para a a liga quaternária InAlGaAs de SMD.

3.11 Etapas do Cálculo Autoconsistente

O cálculo, *a priori*, resolve autoconsistentemente as Equações de Massa Efetiva (EME) e de Poisson e converge quando a diferença entre dois valores consecutivos do potencial e da Energia de Fermi calculadas têm uma diferença menor que $0,1meV$. O número necessário de interações para que isso ocorra são entre 30 e 40 interações. A primeira etapa do cálculo se dá pela construção do potencial gerado pelas cargas fixas, em que os parâmetros numéricos necessários para resolução da EME são inseridos e lidos para cada material, tais como: os parâmetros de Luttinger ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$), o período da super rede (d), parâmetro de rede (a), a energia do *gap* dos materiais (E_g), as constantes elásticas (C_{11} e C_{12}) e o número de aceitadores ionizados (N_A), por exemplo. Após isso, são construídas as matrizes H_0 , V_{HET} , V_C , V_{XC} , V_S e V_{MAG} de acordo com as seções descritas acima. Feito isso, o Hamiltoniano é diagonalizado para obtenção dos autovalores e autovetores. Calculada a ocupação dos estados é determinada a Energia de Fermi do sistema e a distribuição de cargas através da solução da equação de Poisson. A etapa seguinte é calcular a nova carga no sistema, recalculando os potenciais de Coulomb e de

troca-correlação. O potencial de saída se torna o de entrada e o cálculo é repetido até que os potenciais convirjam. Com o cálculo convergido, é realizado o mapeamento das linhas $\Gamma - Z$ e $\Gamma - \Delta$ em função da energia no espaço recíproco. As funções de onda, e a distribuição de cargas também são fornecidas. A Figura (3.5) mostra esquematicamente como funciona todas as etapas do cálculo.

No capítulo seguinte apresentaremos os resultados e as discussões das simulações realizadas utilizando esse método, bem como quais são os parâmetros fornecidos para as ligas de SMDs quaternárias do grupo III-V, com base nos arsenetos.

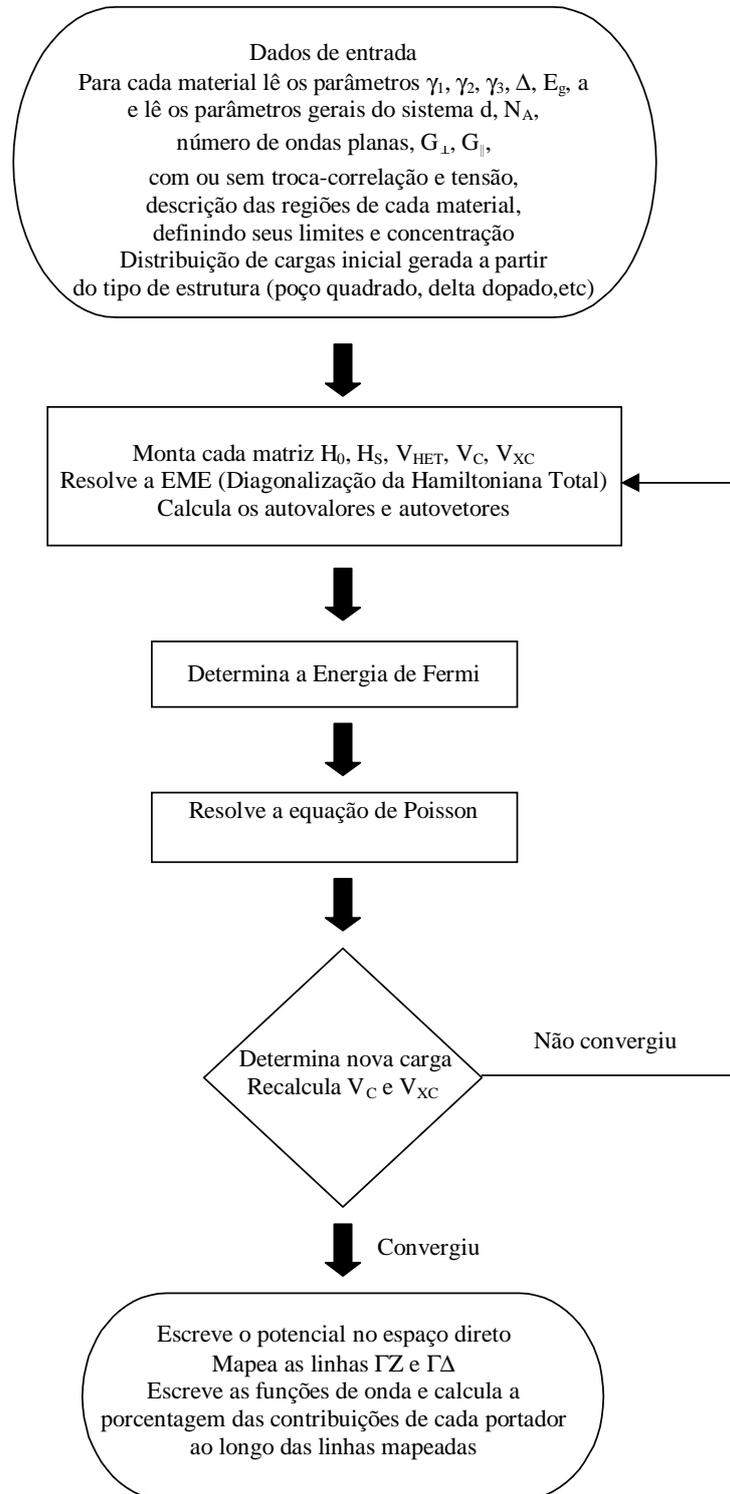


Figura 3.5 Diagrama esquemático do cálculo autoconsistente para determinação da estrutura de bandas de valência, adaptado de [40]

Resultados e Discussões

Neste capítulo discutiremos os resultados dos cálculos para a densidade de cargas de *spins down* e *up*, transições eletrônicas, perfis de potenciais, polarização e como estes são alterados pela variação do tensionamento, da concentração de portadores e das larguras das camadas magnéticas e não magnéticas nos sistemas de múltiplos poços quânticos de $Al_{0,4}Ga_{0,6}As / (In_xAl_yGa_{1-x-y}As / n \times In_xAl_yGa_{1-x-y}As : MT)$, em que os índices x e y indicam as concentrações de cada elemento da liga. Aqui também realizaremos uma comparação do método computacional utilizado nesse trabalho com o trabalho experimental realizado por Tarent'ev *et al.* [47] em poços de $InAlAs / InGaAs / InAs : MT$.

Podemos ver na figura 4.1 abaixo a representação esquemática do perfil de potencial de uma heteroestrutura na banda de valência, com três barreiras magnéticas e quatro não magnéticas, para um determinado tipo de portador.

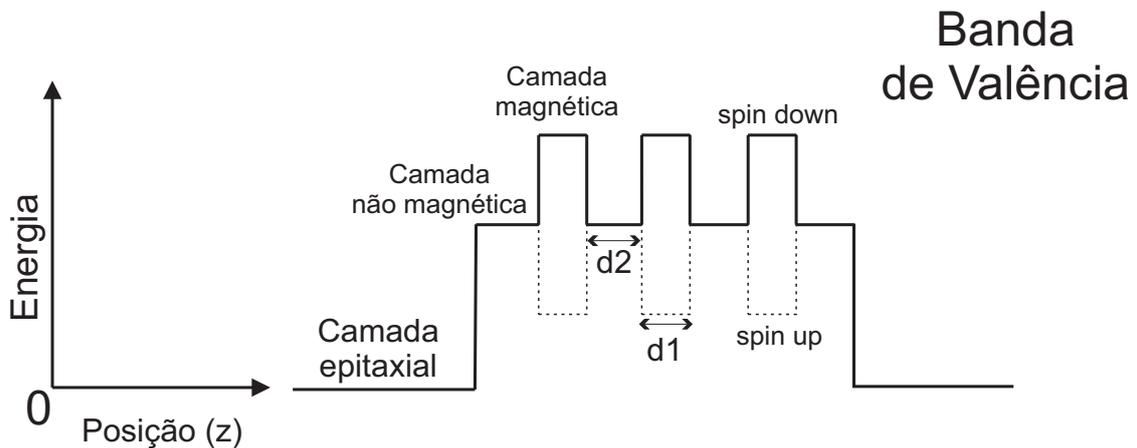


Figura 4.1 Representação esquemática do perfil de potencial para um dado portador na banda de valência, no qual temos dois materiais semicondutores distintos magnéticos e não magnéticos crescidos na direção z . Estão representados também os potenciais para *spins down* (linhas sólidas) e *up* (linhas tracejadas).

Nesse modelo, d_1 representa a largura da camada magnética e d_2 a largura da não-magnética.

A figura mostra esquematicamente o perfil de confinamento de *spins up* e *down*. Para o perfil apresentado na figura, vemos que o confinamento portadores do tipo *spin up* se dá nas regiões não-magnéticas e para os portadores tipo *spin down* nas regiões magnéticas. esse comportamento pode variar dependendo do sinal da matriz magnética, ou seja, a distribuição de cargas polarizadas depende do sistema analisado.

Como descrito na Seção (3.8), para todas as simulações descritas aqui, o tensionamento, quando considerado, será do tipo compressor. Isso ocorre porque a constante de rede, a , do poço é sempre maior que o da barreira.

Tabela 4.1 Parâmetros do cristal para InAs, AlAs e GaAs. Dados extraídos da Referência [69]

Parâmetros	InAs	AlAs	GaAs
γ_1	20	3,76	6,98
γ_2	8,5	0,82	2,06
γ_3	9,2	1,42	2,93
$E_g(eV)$	0,418	3,099	1,519
$a(\text{Å})$	6,058	5,661	5,653
$C_{11}(GPa)$	83,3	125	122,1
$C_{12}(GPa)$	45,3	53,4	56,6
$b(eV)$	-1,8	-2,3	-2
$m_{hh}^*(m_0)$	0,35	0,752	0,34
$m_{lh}^*(m_0)$	0,026	0,160	0,094
$m_{soh}^*(m_0)$	0,146	0,2882	0,172
$m_e^*(m_0)$	0,026	0,15	0,067
$\Delta(meV)$	390	280	341
κ	15,15	10,06	12,90
$a_g(eV)$	-6,08	-8,11	-8,33

A concentração de cada liga altera os parâmetros utilizados na simulação. O cálculo dos novos parâmetros utiliza os valores da tabela (4.1) e segue a interpolação linear:

$$P_{Liga} = x \times P_{InAs} + y \times P_{AlAs} + (1 - x - y) \times P_{GaAs}, \quad (4.1)$$

onde P_{InAs} , P_{AlAs} e P_{GaAs} indicam os parâmetros do InAs, AlAs e GaAs, respectivamente, e P_{Liga} indica o parâmetro calculado para liga que será utilizada. O conjunto de parâmetros que pode ser construído pela interpolação pode representar ligas como InAlAs, InGaAs, AlGaAs, InAlGaAs, entre outras combinações dependendo dos valores considerados em x e y .

Os parâmetros da tabela são os seguintes: γ_1 , γ_2 e γ_3 são os parâmetros de Luttinger; Δ é o desdobramento de *spin-órbita*; a o parâmetro de rede; E_g a energia do *gap*; C_{11} e C_{12} as constantes elásticas do material; b é o potencial de cisalhamento da banda de valência; m_e^* , m_{hh}^* , m_{lh}^* e m_{soh}^* são as massas efetivas do elétron, dos buraco pesado, leve e de *split-off*, respectivamente, em função da massa do elétron livre (m_0); κ é a constante dielétrica do material e $a_g = a_c + a_v$ é a soma do potencial de deformação hidrostático da banda de condução com o potencial de deformação da banda de valência.

4.1 Sistemas de

$$Al_{0,4}Ga_{0,6}As/(In_xAl_yGa_{1-x-y}As/n \times In_xAl_yGa_{1-x-y}As : MT)$$

4.1.1 Estudo da Densidade de Cargas

Neste tópico estudamos o efeito da variação do número de camadas magnéticas n , da quantidade de aceitadores ionizáveis, N_A e das concentrações de In e Al nos sistemas de $Al_{0,4}Ga_{0,6}As/(In_xAl_yGa_{1-x-y}As/n \times In_xAl_yGa_{1-x-y}As : MT)$ na densidade de cargas. Aqui analisamos os efeitos da mudança de n , que muda o perfil de potencial para *spins up* e *down* dependendo do sinal da matriz magnética apresentada na seção (3.9) para a banda de valência, bem como da sua localização espacial. Os números utilizados para n aqui foram 2, 4, 6 e 8. Além disso, também apresentamos os resultados relativos à mudança das larguras dos poços, d_1 , e das barreiras, d_2 . Antes de passarmos para esta análise faremos uma breve explicação sobre os efeitos dos potenciais autoconsistentes no potencial total, pois a partir disto poderemos obter uma interpretação mais clara destes resultados.

O entortamento do potencial (*bending*) na banda de valência depende muito das interações de troca-correlação e coulombiana. Essas interações competem entre si, fazendo com que as densidades de cargas sejam distribuídas de acordo com o potencial que está atuando mais fortemente no sistema. Isso é mostrado esquematicamente nas figuras 4.2 e 4.3. Nessas figuras são apresentados os perfis quando o potencial repulsivo é dominante na interação, figura 4.2 (a),

e quando o potencial atrativo se sobrepõe ao repulsivo na figura 4.2 (b). O comportamento dos dois potenciais somados dão origem ao potencial resultante, mostrados na figura 4.3, em que temos o potencial atrativo (linha pontilhada) (a), repulsivo (linha tracejada) (c) e o potencial total resultante das interações (linha sólida) (b). A energia de Fermi (linha azul) também é mostrada nas figuras 4.2 e 4.3, e no nosso caso, os estados ocupados na banda de valência para portadores do tipo buraco estão acima dessa energia.

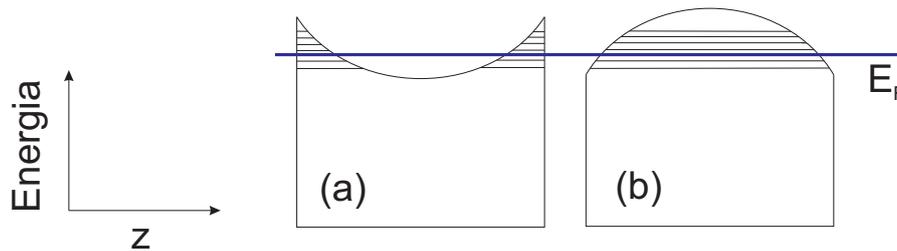


Figura 4.2 Em (a) temos a representação esquemática de como é o perfil de potencial repulsivo, e em (b) a representação do perfil atrativo. Aqui E_F representa a energia de Fermi e as linhas sólidas representam os níveis de energia. Figura extraída da Referência [53].

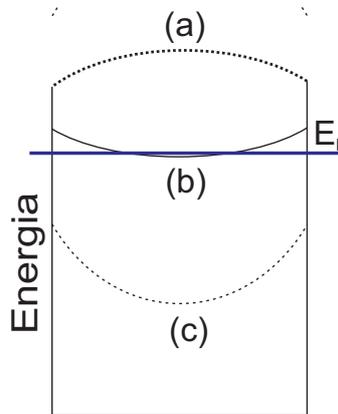


Figura 4.3 Representação esquemática do potencial resultante da competição entre o potencial (a) repulsivo (interação coulombiana) com (c) o atrativo (interação troca-correlação) e o potencial resultante (b) representa o potencial total. Também é indicado o nível de Fermi (linha azul). Figura extraída da Referência [70].

A figura 4.4 mostra a densidade de cargas de *spin*, D_S , nos sistemas com n variável, para *spins up* e *down*. Foi utilizado $x = 10\%$, $y = 20\%$, $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$ e 10% de MT. Podemos perceber em 4.4 (a) e (b) que há uma tendência para as cargas com *spin down* se acumularem nos poços centrais. Um efeito totalmente oposto acontece em (c) e (d),

em que praticamente toda a carga se localiza nas duas camadas magnéticas mais externas. Nos dois primeiros casos temos uma predominância do potencial atrativo que, dado o aumento do número de camadas magnéticas no sistema, se torna menos significativo do que o potencial de repulsão, dominante em (c) e (d).

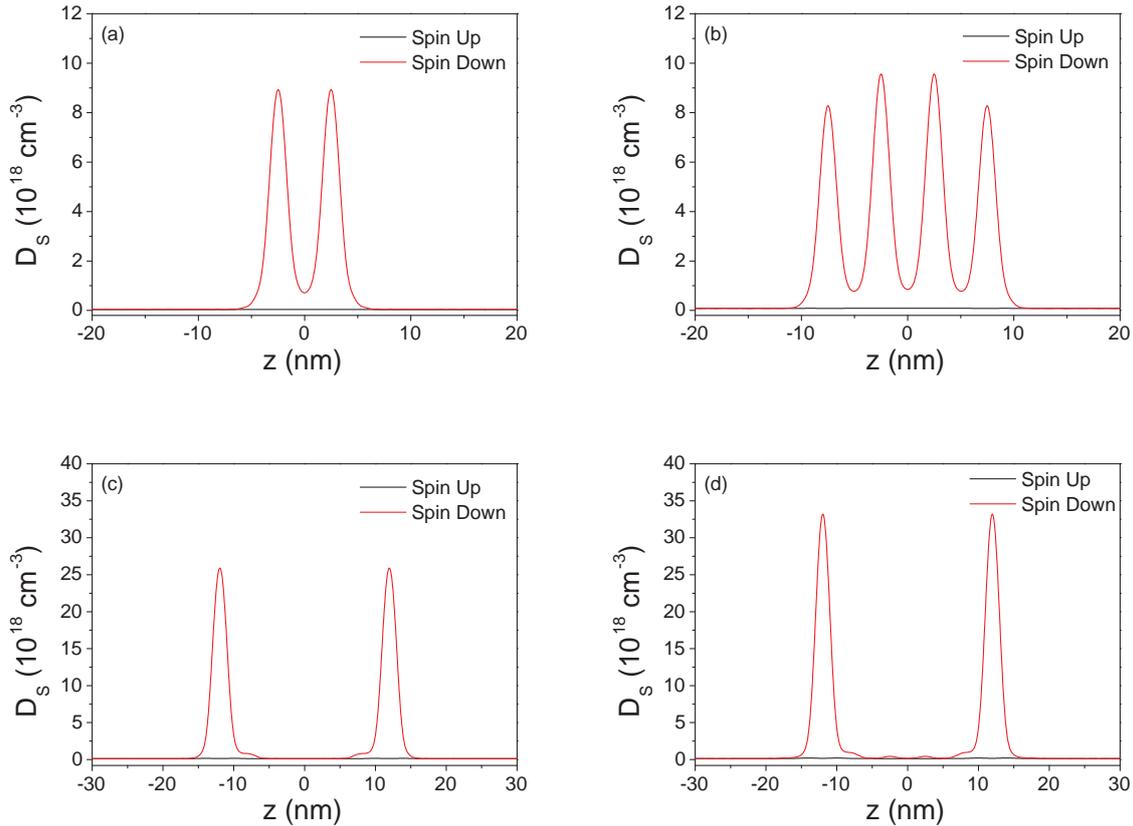


Figura 4.4 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ relativa à variação do número de camadas magnéticas, (a) $n = 2$, (b) $n = 4$, (c) $n = 6$ e (d) $n = 8$.

O curioso aqui é justamente o comportamento da carga com $n = 6$ e 8 . Isso pode ser explicado quando consideramos o caso em que o *bending* causado no potencial total, devido ao potencial de repulsão, é tão forte que só permite a ocupação dos estados nas bordas do poço, como é representado na figura 4.2 (a), levando a um confinamento de *spins down* nos poços mais externos do sistema. Podemos notar também que não há ocupação de estados com *spins up*, nesses casos. Isso se deve ao fato de estarmos utilizando a matriz magnética, que separa os

estados *up* e *down*, permitindo aqui que haja apenas ocupação dos portadores do tipo *down*.

Agora iremos analisar o mesmo sistema da figura 4.4, contudo, estudaremos como a variação de N_A altera a distribuição de cargas nos sistemas. Na figura 4.5 temos $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e podemos ver uma diferença significativa entre estes resultados e os anteriores. Nesse caso, podemos perceber que temos um perfil repulsivo para $n = 4$, mesmo que muito levemente. Esse comportamento se torna mais evidente para $n = 6$ e 8 e para essa densidade de aceitadores, diferente do caso anterior, existe ocupação nas camadas mais internas dos sistemas.

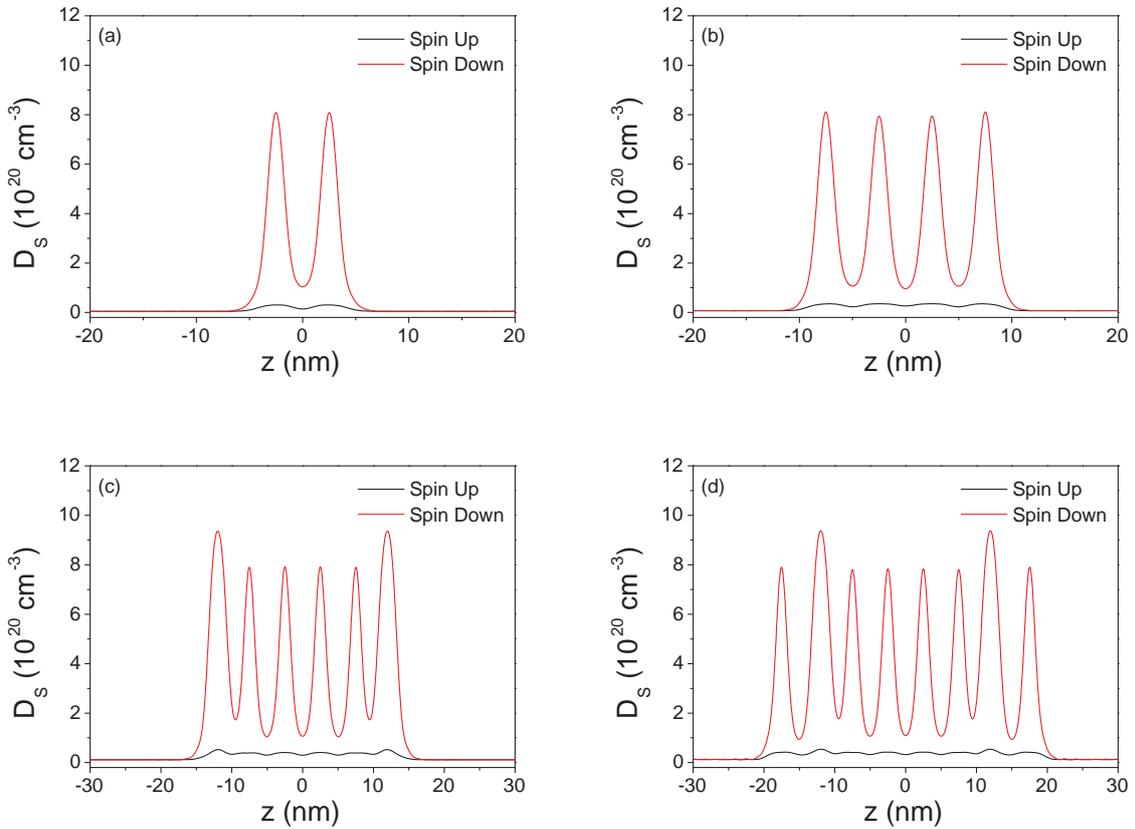


Figura 4.5 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$ e $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ relativa à variação do número de camadas magnéticas, (a) $n = 2$, (b) $n = 4$, (c) $n = 6$ e (d) $n = 8$.

Como incorporamos mais carga no sistema como um todo, temos uma diminuição da energia de Fermi em relação ao topo da barreira de Coulomb na banda de valência, que é nosso referencial (zero de energia) [40]. Isso permite que haja ocupação das camadas mais internas,

mesmo com o *bending* causado pelo potencial repulsivo. A quantidade maior de carga no sistema também pode explicar o comportamento repulsivo em geral. Quanto mais carga o sistema tem, maior é a interação Coulombiana entre os portadores.

Apresentamos na figura 4.6 a mesma configuração dos sistemas acima, mas variamos a concentração de In para $x = 30\%$ e mantivemos fixo a de Al em $y = 20\%$. O esquema é igual ao da figura 4.4, com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$ e 10% de MT.

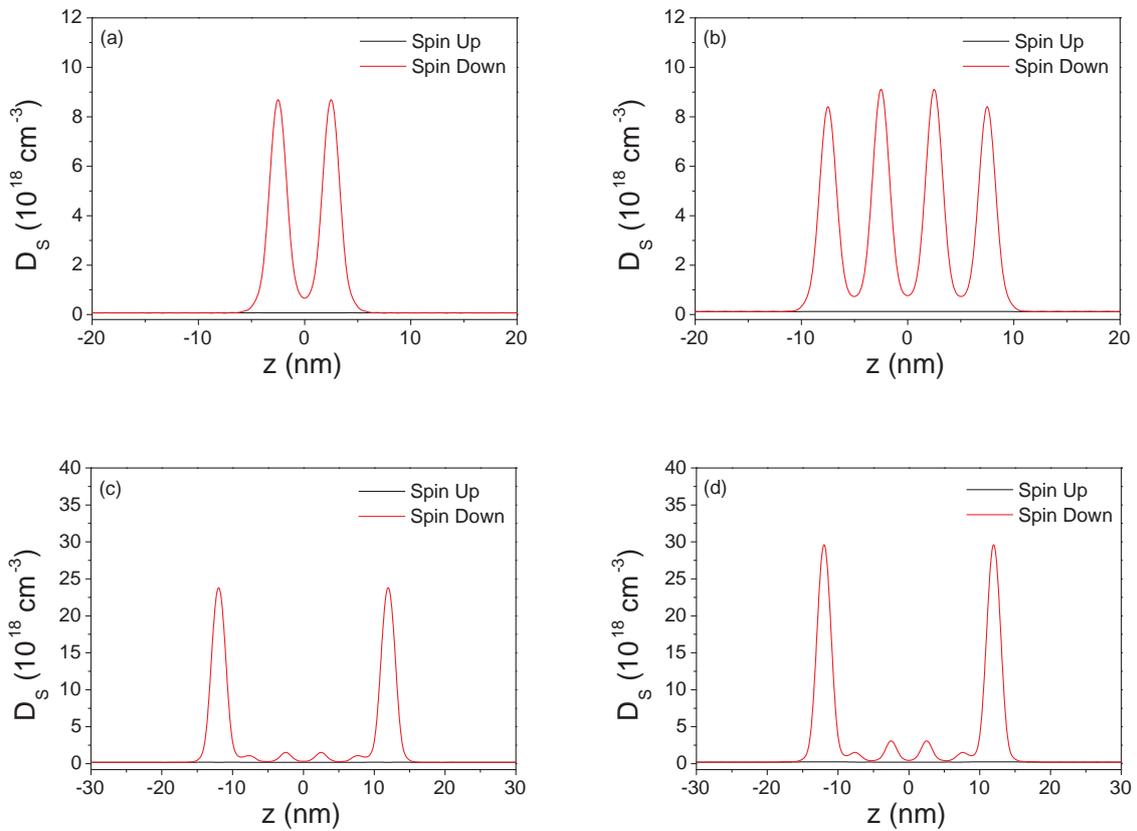


Figura 4.6 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 30\%$, $y = 20\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT e com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ relativa à variação do número de camadas magnéticas, (a) $n = 2$, (b) $n = 4$, (c) $n = 6$ e (d) $n = 8$.

Podemos perceber que os resultados em (a) e (b) são praticamente idênticos aos da figura 4.4 e que a diferença dos resultados em (c) e (d) para os sistemas anteriores é que agora temos ocupação de carga nas barreiras centrais para $n = 6$ e 8 . A interpolação leva em conta a energia de *gap* dos diferentes materiais. Com o aumento da porcentagem de In, temos um diminuição

da energia do *gap* do sistema em conjunto com uma forte atuação da tensão. Ambos os efeitos aprofundam as barreiras, aumentando o número de estados ocupados, sendo que nos casos abordados aqui todas as ocupações são de buracos pesados. Aqui a causa desse comportamento é que o potencial magnético gera uma barreira da ordem de 80 meV (para 10% de MT) para *spins down*.

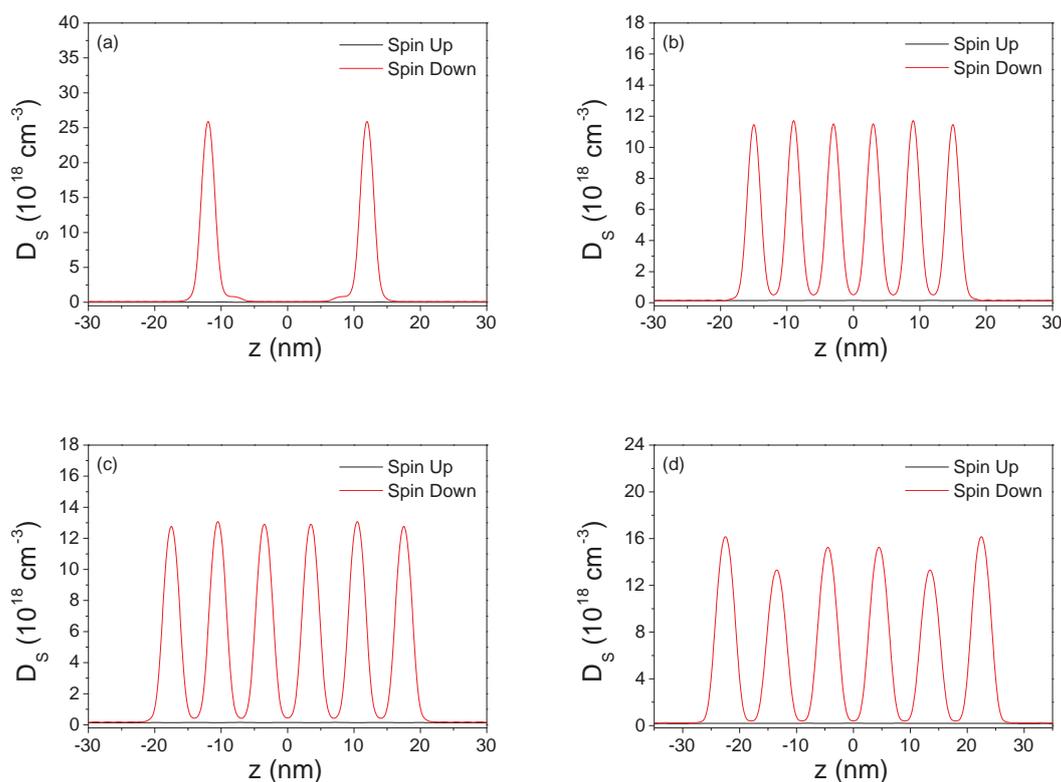


Figura 4.7 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$, $d_2 = 3\text{ nm}$, variando a espessura da camada magnética $d_1 = 2, 3, 4\text{ nm}$ e 6 nm , com 10% de MT e com $N_A = 1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$.

Na figura 4.7 apresentamos os resultados para o cálculo de D_S , onde variamos a largura do poço magnético d_1 em 2, 3, 4 e 6 nm. Os outros parâmetros foram mantidos fixos em $d_2 = 3\text{ nm}$, $N_A = 1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, $n = 6$ e uma concentração de metal de transição $MT = 10\%$.

As concentrações de Al e In, são 10% e 20%, respectivamente. O comportamento da figura (a) foi explicado quando discutimos a figura 4.4 (a). Na figura 4.7 (b) e (c) percebemos que a carga se distribui quase uniformemente nos poços, visto que o perfil de distribuição das cargas

apresenta um perfil levemente repulsivo. A interação repulsiva é mais significativa na figura 4.7 (d), na média. Podemos explicar isso pela interação entre os poços magnéticos, que como estamos aumentando consideravelmente a largura dos mesmos, esperamos que a interação entre eles se dê mais fortemente. Além disso, com o aumento da largura do poço temos um aumento considerável de carga bidimensional nestes sistemas. Todos estes fatores contribuem para que tenhamos um potencial mais repulsivo com o aumento da largura das camadas magnéticas.

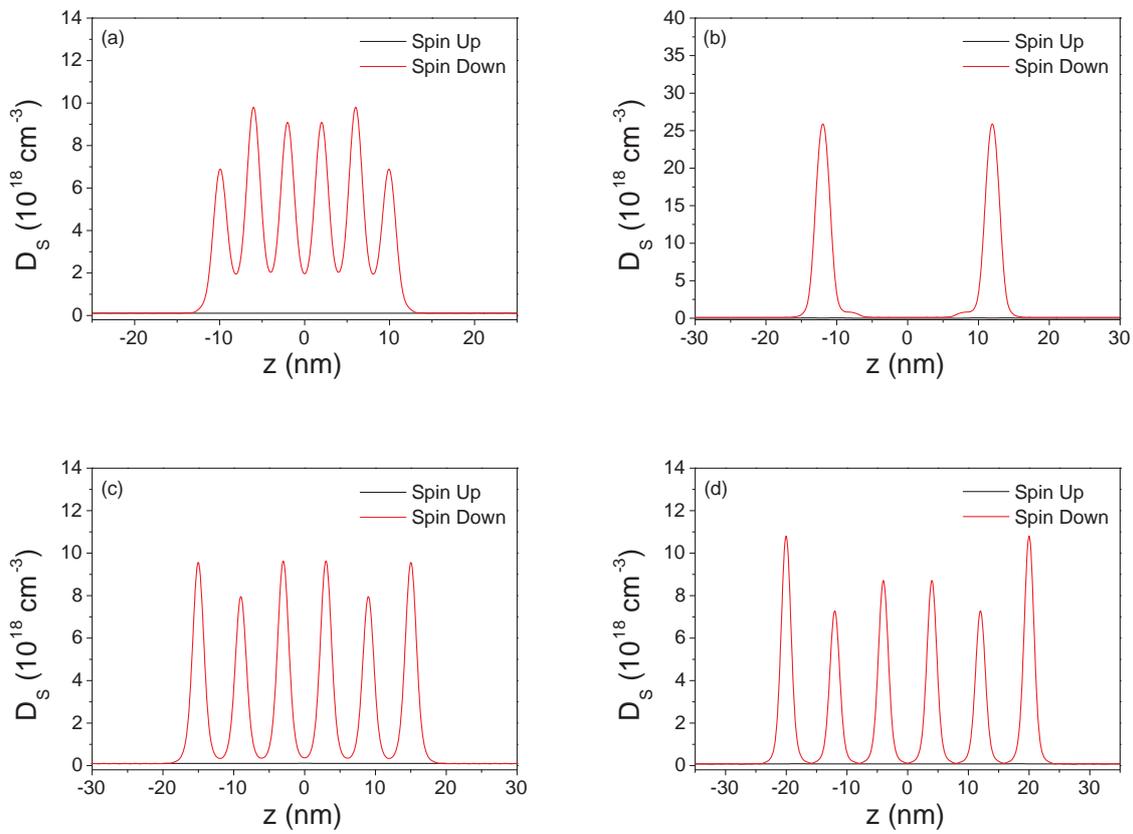


Figura 4.8 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, variando a espessura da camada não magnética $d_2 = 2, 3, 4 \text{ nm}$ e 6 nm , com 10% de MT e com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$.

A figura 4.8, apresenta um arranjo semelhante ao anterior, só que dessa vez estamos alterando a largura da barreira não-magnética. As concentrações de In e de Al se mantêm fixas em 10% e 20%, novamente. A distribuição de cargas em 4.8 (a), na média é um potencial atrativo. Em 4.8 (b), temos o mesmo caso dos sistemas anteriores 4.7 (a) e 4.4 (a) que já foi

discutido. Em 4.8 (c) e (d) também temos predominância da interação repulsiva. Observamos uma clara mudança da distribuição de cargas de *spins* relacionado diretamente aos potenciais autoconsistentes envolvidos.

Outra maneira de analisarmos de forma mais geral a distribuição de carga de *spins* é analisando como a polarização se comporta em relação à variação de concentrações de In e Al. Mostraremos aqui o resultado de simulações feitas para sistemas com $n = 6$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT e $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. A polarização total, \mathcal{P} , é calculada do seguinte modo:

$$\mathcal{P} = \frac{N_{\downarrow} - N_{\uparrow}}{N_{\downarrow} + N_{\uparrow}}, \quad (4.2)$$

onde N_{\downarrow} indica a densidade de cargas com *spins down* e N_{\uparrow} de *spins up*.

Na figura 4.9 mostramos a distribuição bidimensional de cargas de *spins* (N_{2D}) e a polarização total para a concentração de Al fixa em 20% e a concentração de In variando em 10%, 20% e 30%. Na outra situação investigada e apresentada na figura 4.10, a concentração de In está fixa em 10% e a de Al variando em 20%, 30% e 40%. No primeiro caso, que corresponde a figura 4.9 (a), temos que a polarização total diminui quando é aumentada a concentração de In no sistema. Isso pode ser explicado pela tensão no sistema. Com o aumento da concentração de In, aumentamos a diferença entre os parâmetros de rede da barreira e do poço. Essa diferença é a responsável pelo aumento ou diminuição da tensão no sistema e no caso investigado a tensão aumenta. Como já citamos anteriormente, a tensão faz com que o poço seja mais profundo para buracos pesados, predominantes nestes sistemas. Isso permite uma ocupação maior de estados. Associada a tensão, temos os potenciais autoconsistentes que fazem a energia de Fermi se aproximar mais em direção ao topo da barreira de Coulomb, aumentando assim a ocupação de estados de *spins up*. Na figura 4.9 (b) apresentamos a polarização que mostra uma queda com o aumento da % de In como esperado.

O oposto acontece na figura 4.10 (a). Esse resultado nos mostra que com o aumento da concentração de Al, y , temos menos estados com *spin up* ocupados, isso pode ser explicado novamente pelos mesmos fatores explicados antes. Neste caso temos uma diminuição da tensão, pois com o aumento de Al, os parâmetros de rede do poço e barreira se tornam mais próximos. Assim teremos barreiras menos profundas e ocupação de menos estados. Adicionado a isso

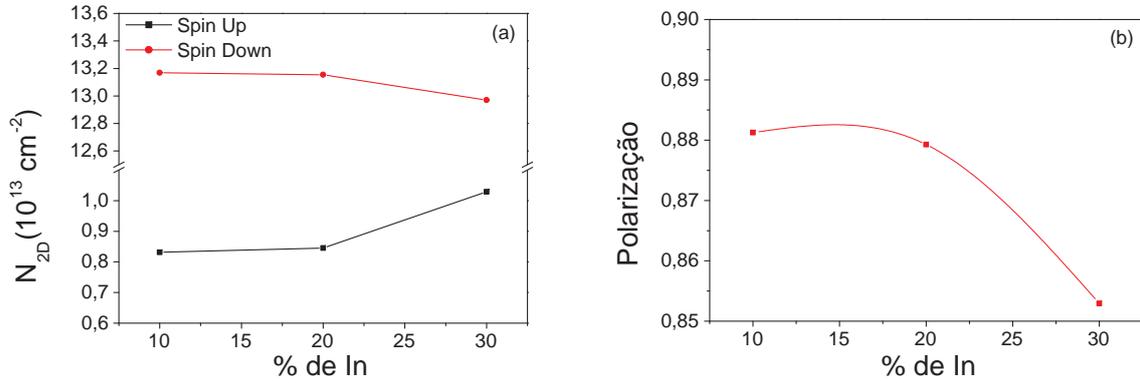


Figura 4.9 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down* e *up* e (b) polarização relativas à variação de $x = 10\%$, 20% , 30% com y fixo em 20% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$.

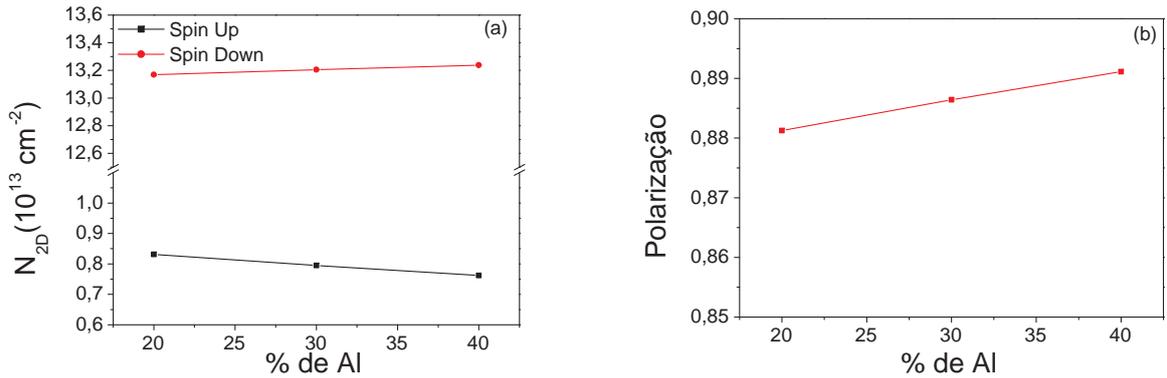


Figura 4.10 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down* e *up* e (b) polarização relativas à variação de $y = 20\%$, 30% , 40% com x fixo em 10% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$.

temos os potenciais autoconsistentes que agora fazem o nível de Fermi se afastar em relação ao nosso referencial (topo da barreira de Coulomb), diminuindo assim a ocupação de estados de *spins up*. O comportamento da polarização total pode ser visto em 4.10 (b), exibindo também, um aumento da polarização conforme aumentamos a concentração de Al no sistema.

Iremos a seguir analisar os resultados do ponto de vista óptico, estudando as transições eletrônicas e espectros de fotoluminescência teóricos nestas nanoestruturas magnéticas.

4.1.2 Estudo da Fotoluminescência

Nesta parte estudaremos os mesmos sistemas descritos anteriormente, todavia discutiremos os espectros de fotoluminescência teóricos para três situações: variando N_A , variando a temperatura e por último veremos como a variação da porcentagem da tensão altera os espectros. Esse último será discutido mais detalhadamente na próxima seção.

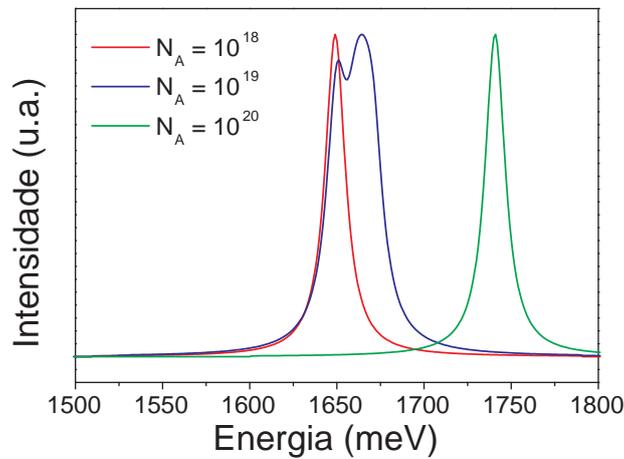


Figura 4.11 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2 \text{ K}$ para o sistema com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ variando $N_A = 1 \times 10^{18}, 1 \times 10^{19}$ e $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

A figura 4.11 acima mostra os espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2 \text{ K}$ para diferentes valores de N_A para o sistema com as concentrações de In e Al em $x = 10\%$ e $y = 20\%$, respectivamente, valores fixos de $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, $n = 6$ e 10% de MT. O primeiro ponto a ser observado é que há um desvio para o azul (*blue-shift*), ou seja, os primeiros picos do espectro se deslocam para valores de energia mais altos quando aumentamos o número de aceitadores ionizáveis no sistema. As transições aqui são do estado fundamental do elétron com *spin down* para o estado fundamental do buraco pesado *down*, $E_{1\downarrow}-HH_{1\downarrow}$. Esse deslocamento ocorre devido aos potenciais autoconsistentes, pois os potenciais tornam-se mais repulsivos com o aumento de N_A fazendo com que os estados sejam deslocados para o topo da barreira de Coulomb, aumentando assim as transições eletrônicas. A exceção ocorre para $N_A = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ em que temos um segundo pico que é dada pela recombinação do estado $E_{1\downarrow}$ com o

segundo estado de buracos pesados $HH_{2\downarrow}$. Novamente a razão se deve ao *bending* do potencial que neste caso é menos repulsivo comparado com $N_A = 1 \times 10^{20} cm^{-3}$, permitindo uma segunda transição.

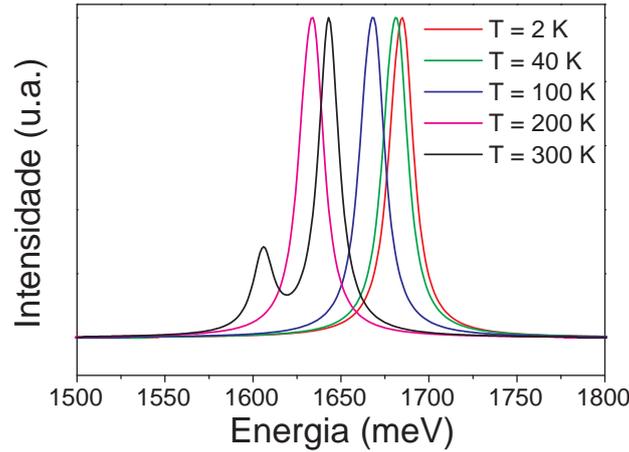


Figura 4.12 Espectros de fotoluminescência teóricos para os sistemas com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ variando a temperatura em $T = 2 K, 40 K, 100 K, 200 K$ e $300 K$. Os outros parâmetros são $N_A = 1 \times 10^{18} cm^{-3}$, $d_1 = 2 nm$, $d_2 = 3 nm$, $n = 6$ e 10% de MT.

Outro ponto importante é analisar como a temperatura influencia a fotoluminescência nestas estruturas. A figura 4.12 mostra como se comporta os espectros de fotoluminescência em relação ao aumento da temperatura para $T = 2 K, 40 K, 100 K, 200 K$ e $300 K$. O sistema aqui é o mesmo analisado na figura 4.11, com $x = 10\%$ e $y = 20\%$, mas nesse caso temos $N_A = 1 \times 10^{18} cm^{-3}$. A primeira vista podemos perceber que ocorre um desvio para o vermelho (*red-shift*), que é o deslocamento dos primeiros picos de menores energias em direção a região do vermelho (menores energias). Isso se dá principalmente pela correção do *gap* em função da temperatura de acordo com Varshni [68], como descrito na seção (3.10). Essa correção é maior quanto maior for a temperatura, logo isso pode explicar o deslocamento das energias no sistema. O fator responsável pelo segundo pico que aparece para $T = 300 K$ é que com o aumento da temperatura aumentamos a probabilidade de transição em outros estados. A transição eletrônica aqui é $E1 \downarrow - HH_{2\downarrow}$ que corresponde ao primeiro nível de elétron *down* e segundo nível de buraco pesado *down* ocupados.

4.1.3 Estudo da Tensão

Uma das análises importantes desse trabalho é verificar como a tensão atua nesses sistemas. Todo sistema composto de camadas de algum material depositado sobre um substrato é mais ou menos tensionado e esse tensionamento depende do método de crescimento utilizado e da diferença dos parâmetros de rede dos materiais que compõem uma determinada estrutura [71]. Investigar quais são as consequências da variação de tensionamento nos sistemas é importante para estudarmos como as transições eletrônicas e os os espectros de fotoluminescência se comportam com essa variação. Estudos experimentais já foram realizados para ver como a variação da tensão afeta as propriedades eletrônicas de semicondutores, bem como foram feitos muitos estudos sobre o crescimento de materiais tensionados [43, 44, 71]. O estudo de tensão variável aqui pode servir de base para estudos experimentais com amostras que não apresentam 100% de descasamento, devido a algum defeito causado pelos métodos de crescimentos de amostras, por exemplo.

Partindo da mesma configuração da figura 4.12, fizemos uma alteração no parâmetro de rede da seguinte maneira: consideramos o parâmetro de rede do substrato e do poço para o sistema totalmente tensionado como sendo o 100% e a partir disso fizemos um cálculo simples de quanto devemos alterar no parâmetro de rede da barreira para que o sistema tenha apenas 20% de tensionamento, ou nenhum tensionamento, por exemplo. Assim calculamos o novo parâmetro que deverá ser considerado na barreira do sistema para que tenha a quantidade de tensão desejada, usando a seguinte expressão:

$$a_{\text{barreira novo}} = a_{\text{poço}} - [(\text{porcentagem de tensão}) \times (a_{\text{poço}} - a_{\text{barreira}})]. \quad (4.3)$$

onde $a_{\text{barreira novo}}$ é o novo valor do parâmetro de rede que será utilizado nos cálculos da matriz de tensão, $a_{\text{poço}}$ e a_{barreira} são os valores originais dos parâmetros de rede do poço e da barreira, respectivamente. É fácil de perceber que se utilizarmos 0% de tensionamento teremos que o parâmetro de rede da barreira na matriz de tensão será igual ao do poço, e como os termos da matriz dependem diretamente da diferença entre os parâmetros de rede da barreira e poço, a contribuição do tensionamento nas energias finais serão zero. Todos os casos analisados

aqui tem tensionamento do tipo compressivo, já que o parâmetro do substrato é sempre menor que o do poço. Mostraremos inicialmente como essa alteração muda o perfil do espectro de fotoluminescência para o sistema com $x = 10\%$, $y = 20\%$ e $N_A = 1 \times 10^{18} cm^{-3}$. A figura abaixo descreve exatamente esse arranjo.

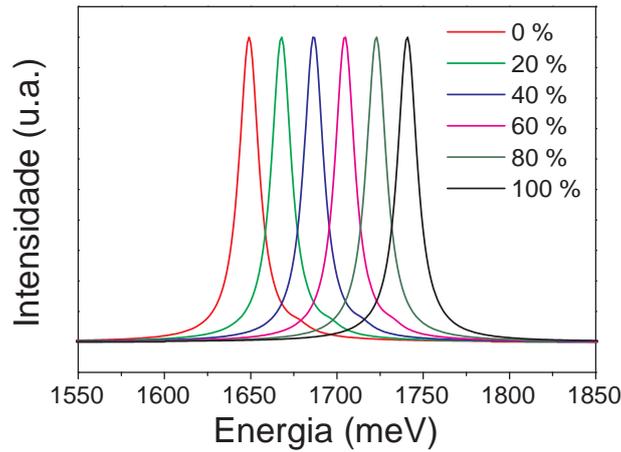


Figura 4.13 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2$ K para os sistemas com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ e tensão variando em 0% , 20% , 40% , 60% , 80% e 100% . Nesse caso, $d_1 = 2$ nm, $d_2 = 3$ nm, $N_A = 1 \times 10^{18} cm^{-3}$, $n = 6$ com 10% de MT.

Podemos perceber que há um *blue-shift* na energia com o aumento do tensionamento no sistema. O tensionamento hidrostático provoca um deslocamento rígido no valor do *gap* do sistema, fazendo com, que no caso compressivo, aumente as energias do *gap*. Contudo, a profundidade dos poços é alterada pela tensão uniaxial, que neste caso, aprofunda o poço para buracos pesados, que são os únicos que tem ocupação nos sistemas investigados. O resultado aqui é que a soma da tensão hidrostática com a uniaxial aumenta o valor da energia das transições eletrônicas, explicando o deslocamento dos picos para o azul. Todas as transições eletrônicas para estes casos são dadas por $E_{1\downarrow} - HH_{1\downarrow}$.

Nesse ponto mostraremos como a presença de tensionamento altera a distribuição de cargas de *spins* e conseqüentemente as energias das transições eletrônicas dos sistemas estudados. Os parâmetros que variamos aqui são as concentrações x e y e vemos como a porcentagem de tensão se manifesta nos resultados dos cálculos. Para todos os sistemas temos uma concen-

tração de aceitadores de $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, $n = 6$ e 10% de MT.

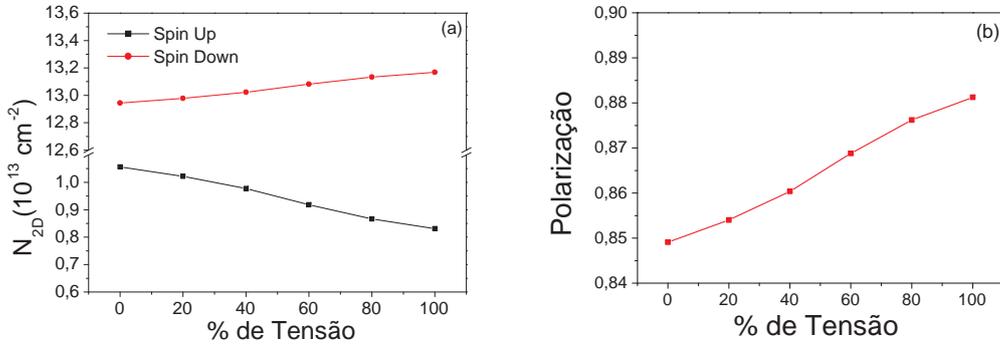


Figura 4.14 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down e up* e (b) polarização relativas à $x = 10\%$, $y = 20\%$ variando tensão em 0%, 20%, 40%, 60%, 80% e 100%. Os outros parâmetros são $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$.

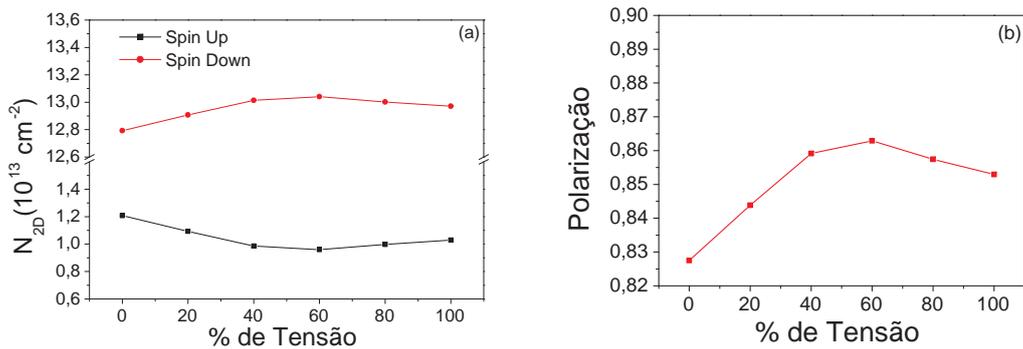


Figura 4.15 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down e up* e (b) polarização relativas à $x = 30\%$ e $y = 20\%$ variando tensão em 0%, 20%, 40%, 60%, 80% e 100%. Os outros parâmetros são $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$.

As figuras 4.14 e 4.15, mostram os resultados para N_{2D} e a polarização total em função da porcentagem de tensão para sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$ e $x = 30\%$ e $y = 20\%$, respectivamente.

Nas figuras 4.14 (a) e (b) podemos notar que o aumento da tensão separa as curvas de *spins up e down* no sistema, aumentando a polarização quase linearmente. A polarização é calculada pela equação 4.2. Quando a diferença entre os parâmetros de rede do poço e do substrato aumenta, aumenta também a diferença de N_{2D} para *spins down e up*. A razão se deve ao fato

de que ao aprofundarmos o poço com o aumento da tensão temos mais estados ocupados, tanto para *spins up* quanto *down*. Todavia, o que define se estados *down* e *up* serão mais ou menos ocupados é o posicionamento do nível de Fermi. Neste caso o nível de Fermi se desloca para valores mais altos de energia (em direção ao fundo do poço), permitindo que menos estados *up* sejam ocupados.

Em 4.15 temos o sistema com concentrações de In e Al fixas em $x = 30\%$ e $y = 20\%$. Podemos observar em 4.15 o mesmo comportamento de 4.14, contudo isso só é válido para valores de tensionamento menores que 60%. Para valores mais altos que 60% temos uma queda dos valores de N_{2D} para *spins down* e um aumento para estados *up*. Podemos observar também uma queda na polarização. Seguindo o mesmo raciocínio do caso da figura 4.14, o que ocorre aqui é que a energia de Fermi diminui (caminha para o topo da barreira de Coulomb) e como temos uma concentração de In mais alta, temos um aumento do tensionamento no sistema. O deslocamento do nível de Fermi permite que estados *up* que não estavam ocupados, sejam ocupados para valores altos da porcentagem de tensão. Isso é causado principalmente por causa dos potenciais autoconsistentes que definem a posição do nível de Fermi e da distribuição de cargas nos sistemas.

Outra análise a ser feita é de como o tensionamento afeta as transições eletrônicas para valores de x e y diferentes. A figura 4.16 exhibe justamente isso. Em 4.16 (a) temos as transições eletrônicas em função do tensionamento para diferentes concentrações de $y = 20\%$, 30% e 40% .

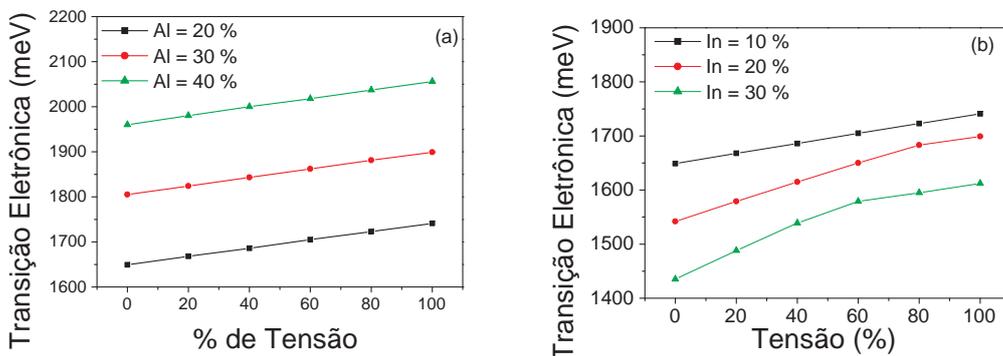


Figura 4.16 Transições eletrônicas para (a) $x = 10\%$ fixo e $y = 20\%$, 30% e 40% ; (b) $x = 10\%$, 20% e 30% com $y = 20\%$; variando tensão em 0% , 20% , 40% , 60% , 80% e 100% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2\text{nm}$, $d_2 = 3\text{nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}$ e $n = 6$.

Cada curva representa uma concentração de Al diferente e em cada uma está sendo variada a tensão. A concentração de In em 4.16 (a) é mantida fixa em $x = 10\%$. Podemos perceber que há um *blue-shift* na energia para os três valores de concentração de Al, sendo que a diferença entre os sistemas com e sem tensionamento para cada curva é de cerca de 50 – 60 meV. Como dito anteriormente, isso pode ser explicado pelo potencial de tensão, que conforme aumenta, desloca as energias para valores mais altos. Em 4.16 (b) temos o mesmo tipo de análise, só que mantendo fixa a concentração de Al, em $y = 20\%$ e cada curva representa um valor para a concentração de In, que toma valores de $x = 10\%$, 20% e 30% .

O comportamento de 4.16 (b) é semelhante ao observado em 4.16 (a) e ambos apresentam um aumento geral da energia de transição com a tensão. Contudo, podemos notar que em 4.16 (b) a diferença do sistema não tensionado para o sistema totalmente tensionado em cada curva é de cerca de 150 meV, se manifestando mais fortemente quanto maior o valor de x . Isso nos mostra que quando temos uma concentração maior de In no sistema, analisando apenas a curva de cor verde em 4.16 (b), por exemplo, ele passa a ser cada vez mais tensionado, devido a maior diferença entre os parâmetros de rede da barreira e do poço. Assim podemos afirmar que a concentração de In é o principal responsável pelo tensionamento nos sistemas desse tipo, provocando uma grande mudança nas transições eletrônicas conforme aumentamos a tensão nos sistemas. Todas as transições aqui são do tipo $E_{1\downarrow} - HH_{1\downarrow}$.

4.2 Comparação com Resultados Experimentais

Um ponto importante de qualquer modelo teórico é compará-lo com resultados experimentais. Nesse trabalho nós simulamos o sistema experimental feito por Terent'ev *et al.* [47], que faz um estudo magneto-ótico em poços quânticos de SMDs do grupo III-V dopados com Mn, analisando o efeito Zeeman nesse sistema. Contudo, nosso objetivo é reproduzir o espectro de fotoluminescência para o sistema $In_{0,75}Al_{0,25}As/In_{0,75}Ga_{0,25}As/InAs : Mn$.

Os autores fabricaram amostras de heteroestruturas assimétricas de poços quânticos por Epitaxia por Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy* - MBE) crescidas na direção $\langle 001 \rangle$

com a seguinte forma: uma barreira de $In_{0,75}Al_{0,25}As$ de 11 nm de espessura, seguida por outra barreira de $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ de 2 nm, um poço de $InAs$ dopado com Mn de largura igual a 4 nm e por fim uma barreira de $In_{0,75}Ga_{0,25}As$ com 13,5 nm de espessura. O poço de $InAs$ é tensionado compressivamente. As amostras foram crescidas sobre uma camada tampão (*buffer*) de $In_xAl_{1-x}As$ em que x é aumentado passo a passo de 0,05 até 0,75 sobre $1\ \mu m$ de camada. Essa camada *buffer* é crescida dessa maneira para que sejam fabricadas amostras livres de defeitos e com um substrato praticamente livre de tensionamento. Por fim, temos uma *cap layer* de $InAlAs$ de 36 nm que cobre a heteroestrutura.

Foram utilizadas duas maneiras diferentes de dopagem de Mn, A e B. A representação esquemática de como foram crescidas as amostras A e B podem ser observadas na figura 4.17 abaixo.

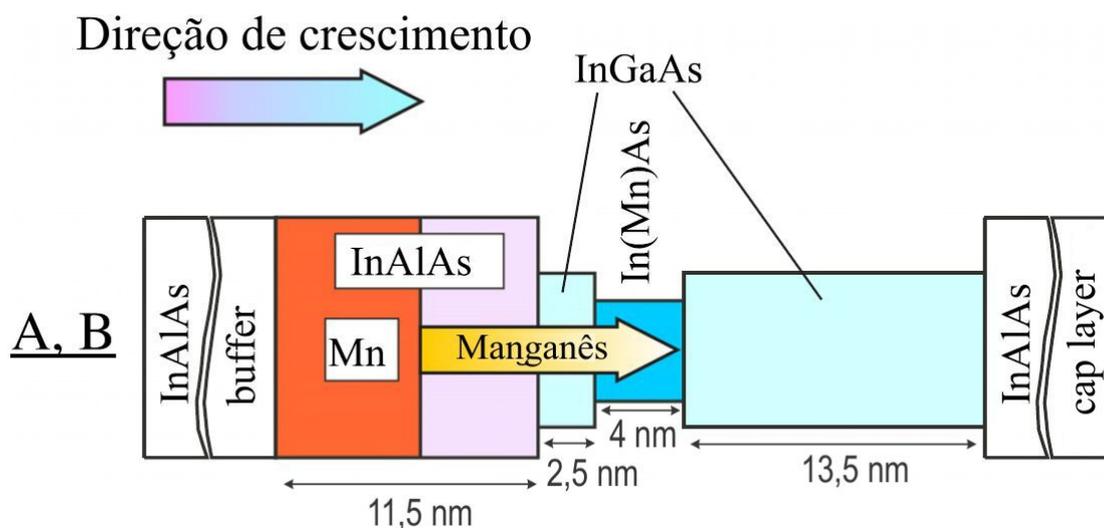


Figura 4.17 Representação esquemática das amostras A e B. As dimensões são dadas em nm. Figura extraída da Referência [47].

A técnica de dopagem de Mn na amostra A consistiu em inserir através da célula de efusão Mn a uma temperatura a uma temperatura igual a $852^{\circ}C$. Na amostra B foi feito o mesmo processo à baixa temperatura da célula de efusão, sendo aqui igual a $653^{\circ}C$. As técnicas de dopagem levaram à uma concentração aproximada de $n_{Mn} = 2 \times 10^{20} cm^{-3}$ no poço de $InAs$. Os resultados das medidas experimentais das amostras A e B do espectro de fotoluminescência podem ser vistas abaixo:

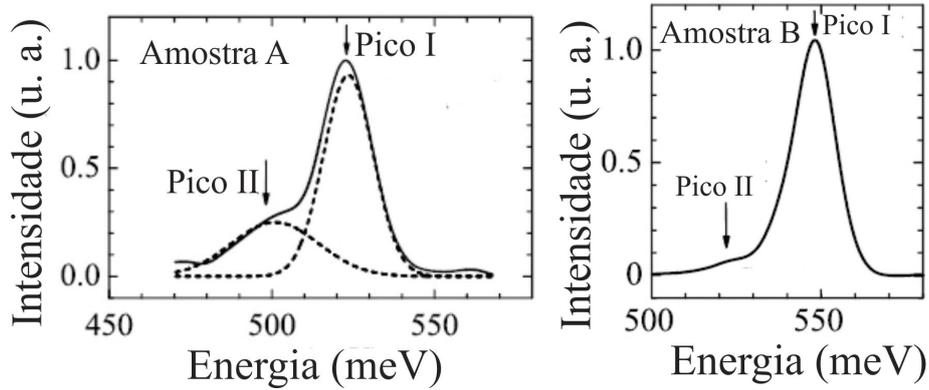


Figura 4.18 Espectros de fotoluminescência a $T = 2$ K para as amostras A e B, respectivamente. Figura adaptada da Referência [47].

O pico I da figura 4.18, referente à amostra A, está localizado em aproximadamente 524 meV, enquanto o pico I da segunda medida, amostra B, está localizado em aproximadamente 545 meV. A explicação para o primeiro pico se dá pela recombinação radiativa de elétrons e buracos pesados ocupando os estados fundamentais ($E_1 - HH_1$). O segundo pico, indicado em cada uma das amostras, apresenta um *red-shift* em relação ao pico I. Isso ocorre devido ao nível aceitador das impurezas de Mn, que cria estados aceitadores com uma diferença de cerca de 24 meV para o pico principal de cada uma das amostras. Em ambos os casos as medidas foram feitas com campo magnético externo nulo, $B = 0$, à uma temperatura de $T = 2$ K. Aqui levaremos em conta apenas o pico I para comparação com nossos resultados, já que os cálculos teóricos não levam em conta a contribuição dos estados aceitadores.

Na simulação teórica do sistema, consideramos uma super-rede a partir da heteroestrutura descrita na figura 4.17, com exceção das camadas mais externas (camadas *buffer* e *cap layer*). Além disso, fizemos a concentração de portadores $N_A = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $T = 2$ K e tensão compressiva no poço de *InAs*, valores que estão de acordo com o estudo experimental. Os parâmetros utilizados foram os da tabela (4.1) obedecendo a interpolação linear dada na equação (4.1). Na figura 4.19 está o resultado do espectro de fotoluminescência teórico da simulação feita para o sistema experimental.

Para obter esse resultado utilizamos os valores de $\alpha N_0 = 0,5$ eV e $\beta N_0 = -1,0$ eV para o *InAs* [66, 72]. Podemos perceber que a diferença entre o pico I do resultado da simulação

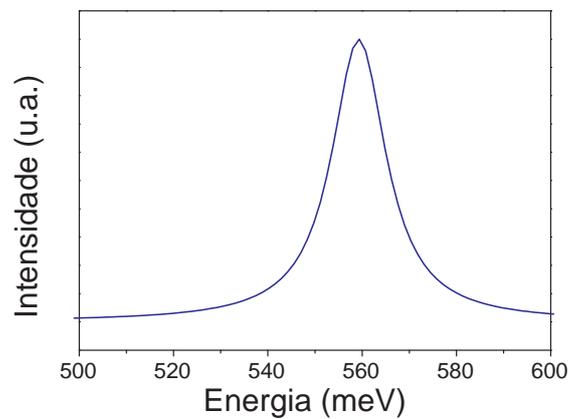


Figura 4.19 Espectro de fotoluminescência teórico a $T = 2 K$ para os sistemas experimentais realizados no estudo [47].

computacional e o pico I da amostra A é de cerca de 30 meV. Para a amostra B, a diferença é de aproximadamente 10 meV. O pico da figura 4.19 é descrito pela recombinação de estados de elétrons com buracos pesados, ambos no estado fundamental com *spin down* ($E_{1\downarrow} - HH_{1\downarrow}$), estando de acordo com o resultado obtido no estudo experimental. Desta forma, podemos afirmar que obtivemos um resultado em boa concordância ao experimental, sendo que pequenos ajustes nos parâmetros, tais como tensão, por exemplo, podem dar conta da pequena diferença entre as energias.

No próximo capítulo iremos discutir as conclusões pertinentes nesse trabalho a partir de todos os resultados mostrados nesse capítulo, com o intuito de publicar artigos em revistas na área referente.

CAPÍTULO 5

Conclusões

Neste trabalho foram analisadas as propriedades de sistemas de DMS do grupo III-V compostos por $AlGaAs/(InAlGaAs/n \times InAlGaAs : MT)$ e $InAlAs/(InGaAs/InAs : MT)$ a partir da resolução autoconsistente da Equação de Massa Efetiva de multibandas juntamente com a equação de Poisson dentro do formalismo 6×6 de Luttinger-Kohn e 8×8 de Kane. A partir desse formalismo estudamos nanoestruturas magnéticas dopadas tipo-p e foram determinadas as distribuições de cargas de *spins*, os espectros de fotoluminescência teóricos e as transições eletrônicas nesses sistemas.

Nos primeiros cálculos realizados para os sistemas baseados em $AlGaAs/(InAlGaAs/n \times InAlGaAs : MT)$ investigamos a distribuição de cargas de *spins*, D_S , nos sistemas onde variamos o número de camadas magnéticas n em 2, 4, 6, e 8, a concentração de portadores N_A em $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, a largura dos poços d_1 em 2 nm, 3 nm, 4 nm e 6 nm, das barreiras d_2 em 2 nm, 3 nm, 4 nm e 6 nm e a concentração de In assumiu valores de $x = 10\%$ e $x = 30\%$. A concentração de Al em todos os estes casos foi mantida fixa em $y = 20\%$ e a concentração de MT fixa em 10%.

Com exceção de um caso particular ($N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$), independentemente do conjunto de parâmetros que foram alterados, todos os sistemas apresentaram polarização máxima, isto é, todos os estados ocupados tinham uma única orientação de *spin*, sendo estes apenas estados *down*. O sistema com $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ não apresentou polarização máxima, mas a maioria dos portadores de carga estão orientados com *spin down* (87% - 89%). Outra questão é referente ao acúmulo de cargas nas bordas para concentrações de aceitadores, N_A mais altas. A razão para todos estes fatos está na competição entre os potenciais de Coulomb e troca-correlação, cuja combinação de ambos determinará o potencial final, bem como o posicionamento do nível de Fermi. Nos sistemas em que obtivemos polarização máxima, temos dois canais distintos de transporte de informação, devido a separação dos *spins up* e *down*, que é um dos requisitos

básicos para construção dos chamados filtros de *spin*.

Em seguida foram feitos cálculos para a mesma liga quaternária, só que dessa vez investigamos como a variação das concentrações de In e Al nos sistemas alteravam a distribuição bidimensional de cargas de *spin*, N_{2D} , e a polarização em cada caso. Estudamos a variação da concentração de In e de Al separadamente, de duas maneiras: primeiramente fixamos a concentração de Al em $y = 20\%$ e variamos a de In em valores de $x = 10\%, 20\%$ e 30% ; depois mantivemos a concentração de In fixa em $x = 10\%$ e variamos a concentração de Al em $y = 20\%, 30\%$ e 40% . Os outros parâmetros aqui foram mantidos fixos em $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $n = 6$, $MT = 10\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$ e $d_2 = 3 \text{ nm}$. Os resultados nos mostraram que quando aumentamos a concentração de In no sistema, temos uma redução da ocupação de estados com *spin down* e um aumento na ocupação de estados *up*, diminuindo a polarização nesse caso. O resultado oposto ocorre para a variação de Al. Para esse caso, temos mais estados *spin down* e menos *up*, aumentando a polarização quando aumentamos a concentração de Al. Ambos os comportamentos podem ser explicados pelos efeitos de tensão e dos potenciais autoconsistentes.

Após serem estudados os efeitos da variação de parâmetros na distribuição de cargas de *spins*, analisamos os efeitos dessa mudança dos parâmetros nos espectros de fotoluminescência teóricos de alguns sistemas. Para esse estudo criamos arranjos onde variamos $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, 10^{19} cm^{-3} e 10^{20} cm^{-3} e a temperatura para valores de $T = 2 \text{ K}, 40 \text{ K}, 100 \text{ K}, 200 \text{ K}$ e 300 K . Os outros parâmetros aqui foram mantidos fixos em $x = 10\%$, $y = 20\%$, $n = 6$, $MT = 10\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$ e $d_2 = 3 \text{ nm}$. O *blue shift* na energia com o aumento de N_A se deve novamente as contribuições dos potenciais de troca correlação e Coulomb, inclusive o surgimento de um segundo pico para $N_A = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Para o caso em que variamos a temperatura, o *red shift* na energia ocorre devido a renormalização da energia do *gap*.

Além das análises já discutidas, nesse trabalho também foi realizado o estudo de como a variação da porcentagem de tensão afeta a distribuição de cargas de *spins*, espectros de fotoluminescência teóricos e transições eletrônicas em vários arranjos. Para isso modulamos a porcentagem de tensão de $0, 20\%, 40\%, 60\%, 80\%$ e 100% do valor sem alteração. Sistemas com valores de $x = 10\%, 20\%, 30\%$, $y = 20\%, 30\%, 40\%$, $n = 6$, $MT = 10\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$ e $d_2 = 3 \text{ nm}$

foram simulados para o estudo da tensão.

A variação da tensão nos espectros de fotoluminescência a $T = 2K$ para o sistema com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ nos mostrou que temos um *blue-shift* nos valores de energia de cada pico quando aumentamos a porcentagem de tensão. Esse resultado surge da soma dos potenciais de tensão (hidrostático e uniaxial) que aumentam de modo geral o valor da energia do *gap* do sistema, deslocando os picos para valores mais altos de energia. Para esse mesmo sistema ($x = 10\%$ e $y = 20\%$), obtivemos resultados da distribuição de cargas de *spins* que nos mostram que com o aumento da tensão temos um aumento da população de *spins down* e da polarização total. Para $x = 30\%$ e $y = 20\%$ o comportamento é o mesmo até 60% de tensão, após este valor temos uma queda na polarização. A razão se deve a efeitos de tensão e principalmente os potenciais autoconsistentes envolvidos que definem o posicionamento do nível de Fermi e ocupações dos estados de *spin up* e *down*.

Em todos os casos estudados, a definição da máxima polarização e mudanças nas transições eletrônicas se deve a distribuição de cargas e posicionamento do nível de Fermi. Todos estes diretamente afetados pelos potenciais de Coulomb, troca-correlação, magnético e de tensão.

As transições eletrônicas para a tensão variável foram calculadas para valores diferentes das concentrações de In e Al. Em ambos os casos temos um *blue shift* na energia com o aumento da porcentagem de tensão. Sendo mais evidente para os sistemas com variação de In. Novamente a razão se deve a efeitos de tensão combinados com os outros potenciais envolvidos que definem as ocupações.

Nesse trabalho também comparamos os resultados dos cálculos realizados para sistemas de poços quânticos de $InAlAs/(InGaAs/InAs : MT)$ com resultados experimentais encontrados na literatura. No nosso estudo comparamos o espectro de fotoluminescência teórico a $T = 2K$ com o obtido experimentalmente e o resultado dos cálculos apresentou uma boa concordância com o sistema experimental com diferença de 30 e 10 meV para as duas amostras A e B, respectivamente. A diferença pode ser ajustada modificando parâmetros, especialmente os de tensão.

Desta forma, os resultados obtidos nesse trabalho podem ser utilizados para descrever de forma realística as propriedades óticas e de transporte para sistemas de SMDs, podendo servir

de guia para futuros experimentos com o objetivo de desenvolver novos dispositivos *spintrônicos*.

A partir de todos os resultados obtidos, pretendemos publicar em revistas relevantes da área e prosseguir os estudos aprofundando a análise das distribuições de cargas de *spin* e transições eletrônicas em estruturas assimétricas.

Determinação das Hamiltoniana de energia cinética

A seguir apresentaremos como são obtidas as expressões para as Hamiltonianas de energia cinética que foram utilizadas nesse trabalho. As expressões são desenvolvidas dentro do formalismo 6×6 de Luttinger Kohn (LK) considerando os n materiais diferentes que compõem a heteroestrutura.

Para que seja levado em conta os diferentes materiais que formam a heteroestrutura, precisamos utilizar um parâmetro de massa efetiva $f(z)$ ao longo de uma super-rede de periodo d composta por n materiais. Dentro do formalismo 6×6 , o parâmetro $f(z)$ assume um certo valor para uma determinada região do sistema e pode ser escrito como:

$$f(z) = \begin{cases} f_1 & d_0 \leq z \leq d_1 \\ f_2 & d_1 \leq z \leq d_2 \\ f_3 & d_2 \leq z \leq d_3 \\ \vdots & \\ f_n & d_{n-1} \leq z \leq d_n \end{cases} \quad \text{onde : } \begin{cases} d_0 = -\frac{d}{2} \\ d_n = \frac{d}{2} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Para que o termo de energia cinética possa ser escrito em termos de ondas planas, se faz necessário expressar o operador momento $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ também em termos das ondas planas. Como o momento e os parâmetros de Luttinger variam de acordo com a direção do crescimento, precisamos determinar suas relações de comutação e simetrizar os operadores. Tomando um operador de forma geral $f(z)\hat{p}_i\hat{p}_j$ ($i, j = x, y, z$) em um operador hermiteano, devemos substituí-lo de acordo com a relação

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

onde p_j é a componente j do operador momento.

Se i e j são independentes de z , a função $f(z)$ comuta com os operadores, portanto:

$$f(z) \Rightarrow f(z). \quad (\text{A.3})$$

para um dos operadores dependentes de z , digamos $j = z$, por exemplo, teremos:

$$f(z)\hat{p}_z \Rightarrow \frac{1}{2} \left[f(z)\hat{p}_z + \hat{p}_z^\dagger f(z) \right]. \quad (\text{A.4})$$

e para $i = j = z$ temos que,

$$f(z)\hat{p}_z\hat{p}_z \Rightarrow \hat{p}_z^\dagger f(z)\hat{p}_z. \quad (\text{A.5})$$

Feito isso, podemos determinar os elementos da matriz (3.13) a partir dos operadores \hat{Q} , \hat{R} , \hat{S} e \hat{T} , considerando a simplificação:

$$\langle jm_j\vec{k}K|H_0|j'm'_j\vec{k}K'\rangle = \langle K|H_0|K'\rangle \delta_{m_j m'_j} \delta_{j j'}, \quad (\text{A.6})$$

em que $K = K + k_z$ e $K' = K' + k_z$, devido à periodicidade em z . Podemos finalmente escrever as relações para os operadores simetrizados:

$$\langle K|f(z)|K'\rangle = \frac{1}{d} \left[\int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{iK'z} dz \right], \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} \langle K|\frac{1}{2} [p_z^\dagger f(z) + f(z)p_z]|K'\rangle &= \frac{1}{d} \left\{ \int_0^d e^{-iKz} \frac{1}{2} [p_z^\dagger f(z) + f(z)p_z] e^{iK'z} dz \right\} \\ &= \frac{\hbar(K'+K)}{2d} \int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{iK'z} dz \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

e

$$\langle K|p_z^\dagger f(z)p_z|K'\rangle = \frac{1}{d} \int_0^d e^{-iKz} p_z^\dagger f(z)p_z e^{iK'z} dz = \frac{\hbar^2}{d} KK' \int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{iK'z} dz, \quad (\text{A.9})$$

lembrando que $|K\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{iKz}$. Podemos analisar as integrais de duas maneiras distintas: quando elas têm os mesmos K 's e quando eles são diferentes. As três expressões acima dependem do valor da integral $\int_0^d f(z) e^{i(K-K')z} dz$ que deve ser determinada para os casos $K = K'$ e $K \neq K'$.

Para $K' = K$, temos

$$\int_0^d f(z) e^{i(K-K)z} dz = \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}). \quad (\text{A.10})$$

Para $K' \neq K$, a integral é dada por:

$$\int_0^d f(z) e^{i(K'-K)z} dz = -i \frac{1}{(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right]. \quad (\text{A.11})$$

Podemos agora substituir as expressões (A.10) e (A.11) nas equações (A.7), (A.8) e (A.9) e obter, para $K' = K$

$$\langle K | f(z) | K \rangle = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}) \quad (\text{A.12})$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [p_z f(z) + f(z) p_z] | K \rangle = \frac{\hbar K}{d} \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}) \quad (\text{A.13})$$

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K \rangle = \frac{\hbar^2 K^2}{d} \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}), \quad (\text{A.14})$$

e para $K' \neq K$

$$\langle K | f(z) | K' \rangle = -i \frac{1}{d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (\text{A.15})$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [p_z^\dagger f(z) + f(z) p_z] | K' \rangle = -i \frac{\hbar (K + K')}{2d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (\text{A.16})$$

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K' \rangle = -i \frac{\hbar^2}{d} \frac{KK'}{(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right]. \quad (\text{A.17})$$

Substituindo as expressões obtidas para os operadores na matriz de energia cinética (3.13), seus termos podem ser reescritos como:

$$\langle jm_j K | H_0 | j' m'_j K' \rangle = \begin{pmatrix} \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{2} \hat{S} & -i\sqrt{2} \hat{R} \\ \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{S} \\ \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S} & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - \hat{T}) \\ 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2} \hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}} \hat{S}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{S} & i\sqrt{2} \hat{R} & \frac{1}{2} (\hat{Q} + \hat{T}) - \hat{\Delta} & 0 \\ i\sqrt{2} \hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - \hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{S} & 0 & \frac{1}{2} (\hat{Q} + \hat{T}) - \hat{\Delta} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.18})$$

onde \hat{Q} , \hat{T} , \hat{S} e \hat{R} são dados por

$$\hat{Q} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n (\gamma_1^i + \gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 + k_y^2) + K^2 \sum_{i=1}^n (\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right] \quad (\text{A.19})$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n (\gamma_1^i - \gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 + k_y^2) + K^2 \sum_{i=1}^n (\gamma_1^i + 2\gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right] \quad (\text{A.20})$$

$$\hat{S} = i \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\sqrt{3}}{d} (k_x - ik_y) K \sum_{i=1}^n \gamma_3^i (z_i - z_{i-1}) \quad (\text{A.21})$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\sqrt{3}}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n \gamma_2^i (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 - k_y^2) - 2i \left(\sum_{i=1}^n \gamma_3^i (z_i - z_{i-1}) \right) k_x k_y \right] \quad (\text{A.22})$$

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n \Delta_i (z_i - z_{i-1}) \quad (\text{A.23})$$

para $K' = K$, e

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{1}{d} \times \\ &\left\{ \left[(\gamma_1^n + \gamma_2^n) - (\gamma_1^1 + \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} + \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ &\left. + \left[(\gamma_1^n - 2\gamma_2^n) - (\gamma_1^1 - 2\gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] KK' \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{1}{d} \times \\ &\left\{ \left[(\gamma_1^n - \gamma_2^n) - (\gamma_1^1 - \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ &\left. + \left[(\gamma_1^n + 2\gamma_2^n) - (\gamma_1^1 + 2\gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} + 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] KK' \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\sqrt{3}}{d} (k_x - ik_y) \frac{(K' + K)}{(K' - K)} \left[(\gamma_3^n - \gamma_3^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (\text{A.26})$$

$$\hat{R} = \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{\sqrt{3}}{d} \times \left\{ \left[(\gamma_2^n - \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_2^i - \gamma_2^{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] (k_x^2 - k_y^2) - 2i \left[(\gamma_3^n - \gamma_3^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] k_x k_y \right\} \quad (\text{A.27})$$

$$\hat{\Delta} = -i \frac{1}{d} \frac{1}{(K' - K)} \left[(\Delta_n - \Delta_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\Delta_i - \Delta_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right] \quad (\text{A.28})$$

para $K' \neq K$. Essas são as expressões encontradas na seção (3.4).

Determinação da Matriz de Tensão (*Strain*)

A seguir determinaremos formalmente a Hamiltoniana de *Strain* H_S para a Banda de Condução e de Valência.

B.1 Banda de Condução

Em primeiro lugar, vamos examinar o estado Γ_6 que representa o fundo da banda de condução, não levando em conta, contudo, a parte de *spin*, examinando somente a parte espacial. Este estado é tipo *s* e tem simetria cbica. O próximo passo é determinar o potencial de deformação utilizando argumentos de simetria sobre o cubo da figura abaixo. A operação que analisaremos aqui é uma rotação de 120 em torno do eixo $\langle 111 \rangle$, e obter a seguinte transformação de eixos de acordo com o sistema de coordenadas dado na figura B.1 [40].:

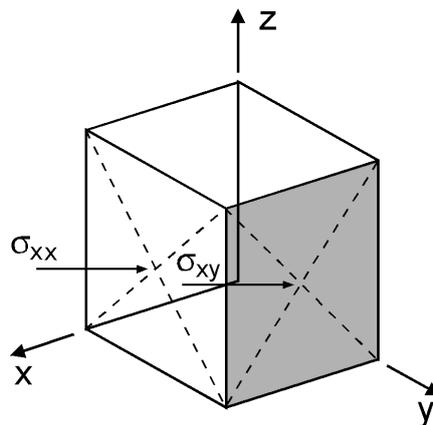


Figura B.1 Componente de tensão σ_{xx} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{x} e componente de tensão σ_{xy} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{y} . Figura extra da Referia [40].

$$\begin{aligned}
 x' &= y \\
 y' &= z \\
 z' &= x
 \end{aligned}
 \tag{B.1}$$

Aplicando essas condições aos elementos da matriz D_{ij} , obtemos:

$$\left. \begin{aligned}
 D_{xx} &= D_{z'z'} \\
 D_{yy} &= D_{x'x'} \\
 D_{zz} &= D_{y'y'}
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{xx} = D_{yy} = D_{zz}$$

(B.2)

$$\left. \begin{aligned}
 D_{xy} &= D_{z'x'} \\
 D_{zx} &= D_{y'z'} \\
 D_{yz} &= D_{x'y'}
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{xy} = D_{yz} = D_{zx}$$

Fazendo a mesma análise pra uma rotação de 90 em torno de $\langle 001 \rangle$, ficamos com a seguinte transformação:

$$\begin{aligned}
 x' &= y \\
 y' &= -x \\
 z' &= z
 \end{aligned}
 \tag{B.3}$$

Os potenciais se transformam como:

$$D_{xy} = -D_{y'x'} = -D_{x'y'} \tag{B.4}$$

E com isso, $D_{xy} = 0$, e por simetria, $D_{xy} = D_{yz} = D_{zx} = 0$. Desse modo, existe somente um potencial não nulo pro caso de simetria Γ_6 , D_{xx} e está relacionado à pressão hidrostática. O efeito da tensão nesse caso é o de produzir um deslocamento rdo na energia. Podemos reescrever o Hamiltoniano na banda de Condução da seguinte forma:

$$H_{\mathcal{E}} = a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \tag{B.5}$$

onde é usual denominar $D_{xx} = a_c$ que é o potencial hidrostático de deformação da banda de condução [58].

B.2 Banda de Valência

No caso da Banda de Valência, os estados são definidos pelos estados de base p_x , p_y e p_z . Utilizando (3.115), vamos considerar o termo H_ε^{xx} que fica [40]:

$$H_\varepsilon^{xx} = \sum_{ij} D_{ij}^{xx} \varepsilon_{ij} = \langle p_x | H_\varepsilon^{xx} | p_x \rangle, \quad (\text{B.6})$$

e, a partir disso, vamos realizar uma rotação de 90 em torno do eixo $\langle 100 \rangle$, de modo que os eixos se transformam como:

$$\begin{aligned} x' &= x \\ y' &= z \\ z' &= -y, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

de modo que, obtemos:

$$\begin{aligned} D_{xx}^{xx} &= D_{x'x'}^{x'x'} \\ \left. \begin{aligned} D_{yy}^{xx} &= D_{z'z'}^{x'x'} \\ D_{zz}^{xx} &= D_{y'y'}^{x'x'} \end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{yy}^{xx} &= D_{zz}^{xx} \\ \left. \begin{aligned} D_{xy}^{xx} &= D_{x'x'}^{x'x'} \\ D_{xz}^{xx} &= D_{x'y'}^{x'x'} \end{aligned} \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$D_{yz}^{xx} = -D_{x'y'}^{x'x'} = 0.$$

Agora examinaremos termos como H_ε^{xy} , rotacionando em torno do eixo $\langle 001 \rangle$:

$$\left. \begin{array}{l} D_{xx}^{xy} = -D_{y'y'}^{x'y'} \\ D_{yy}^{xy} = D_{x'x'}^{x'y'} \end{array} \right\} \Rightarrow D_{xx}^{xy} = -D_{yy}^{xy}. \quad (\text{B.9})$$

Se considerarmos uma reflexão através de $x = y$, podemos perceber que os termos acima serão zero e, portanto:

$$\left. \begin{array}{l} D_{zz}^{xy} = -D_{z'z'}^{x'y'} = 0 \\ D_{xz}^{xy} = -D_{y'z'}^{x'y'} \\ D_{yz}^{xy} = D_{x'z'}^{x'y'} \end{array} \right\} \Rightarrow D_{xz}^{xy} = -D_{yz}^{xy} = 0. \quad (\text{B.10})$$

Logo, os nicos potenciais de deformação que restam são definidos como:

$$\begin{aligned} D_{xx}^{xx} &= l \\ D_{zz}^{xx} &= D_{yy}^{xx} = m \\ D_{xx}^{xy} &= n \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Frequentemente utiliza-se a seguinte notação, que é mais til para a base do momento angular:

$$\begin{aligned} a_v &= \frac{l+2m}{3} \\ b &= \frac{l-m}{3} \\ d &= \frac{n}{\sqrt{3}} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

O potencial de deformação a_v está diretamente ligado à deformação hidrostática da banda de valência, que causa um deslocamento rdo na energia. Os termos b e d estão relacionados à potenciais de deformação uniaxial, conveniente para descrever *strains* de simetria tetragonal e romboédrica, respectivamente. No caso de interesse aqui, estaremos apenas analisando o caso tetragonal, pois estamos tratando de estrutura cristalinas crescidas na direção $\langle 001 \rangle$.

Temos ainda as seguintes relações, as quais já foram discutidas no começo do capítulo, na eq. (3.114) $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel}$ e $\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon_{\parallel}$.

A partir disso, iremos calcular os elementos de matriz na base do momento angular, ao invés da base p_x , p_y e p_z , uma vez que a base do momento angular é usada para descrever os estados de buracos pesados, leves e *split-off*:

$$\begin{aligned}
|3/2 \ 3/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |x + iy\rangle \\
|3/2 \ 1/2\rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}} [-2|z\rangle + |x + iy\rangle] \\
|3/2 \ -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [2|z\rangle + |x - iy\rangle] \\
|3/2 \ -3/2\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} |x - iy\rangle \\
|1/2 \ 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [|z\rangle + |x + iy\rangle] \\
|1/2 \ -1/2\rangle &= \frac{i}{\sqrt{3}} [|z\rangle + |x - iy\rangle] \quad .
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Os estados Γ_8 com $j = \frac{3}{2}$ e $m = \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}$ são chamados de estados de buracos pesados "up"(se está paralelo a) ou "down"(se antiparalelo a). Ainda com simetria Γ_8 estão os buracos leves, representados por $m = \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}$. Os estado com simetria Γ_7 são denominados buracos "split-off" com $j = \frac{1}{2}$ e $m = \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}$. Mais detalhes sobre essa notação podem ser encontrados em [52]. Usando (B.6), (B.11) e (B.13) temos que:

$$\begin{aligned}
\langle 3/2 \ 3/2 | H_\epsilon | 3/2 \ 3/2 \rangle &= \frac{1}{2} \langle p_x - ip_y | H_\epsilon | p_x + ip_y \rangle \\
&= \frac{1}{2} [\langle p_x | H_\epsilon | p_x \rangle + i \langle p_x | H_\epsilon | p_y \rangle - i \langle p_y | H_\epsilon | p_x \rangle + \langle p_y | H_\epsilon | p_y \rangle] \\
&= \frac{1}{2} [l\epsilon_{xx} + m(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + l\epsilon_{yy} + m(\epsilon_{zz} + \epsilon_{xx})] \\
&= \frac{1}{2} [\epsilon_{xx}(l + m) + \epsilon_{yy}(l + m) + 2m\epsilon_{zz}] \quad .
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Podemos notar que os termos mistos se anulam. Escrevendo a expressão acima em termos do potencial de deformação a_v, b e d obtidas a partir de (B.12), temos:

$$\begin{aligned}
l &= a_v + 2b \\
m &= a_v - b \\
n &= \sqrt{3}d
\end{aligned} \tag{B.15}$$

logo,

$$\begin{aligned}
\langle 3/2 \ 3/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ 3/2 \rangle &= \frac{1}{2} [\varepsilon_{xx}(2a_v + b) + \varepsilon_{yy}(2a_v + b) + (2a_v - 2b) \varepsilon_{zz}] \\
&= a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad . \tag{B.16}
\end{aligned}$$

Usando as relações dadas em (3.112) para $\varepsilon_{parallel}$ temos:

$$\langle 3/2 \ 3/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ 3/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right). \tag{B.17}$$

De maneira análoga, podemos determinar os outros elementos de matriz, levando em conta também a seguinte relação:

$$\langle p_z | H_\varepsilon | p_z \rangle = l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \tag{B.18}$$

temos então,

$$\langle 3/2 \ 1/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ 1/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \tag{B.19}$$

$$\langle 3/2 \ -1/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ -1/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \tag{B.20}$$

$$\langle 3/2 \ -3/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ -3/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \tag{B.21}$$

$$\langle 3/2 \ 1/2 | H_\varepsilon | 1/2 \ 1/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - i\sqrt{2}b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (\text{B.22})$$

$$\langle 3/2 \ -1/2 | H_\varepsilon | 1/2 \ -1/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - i\sqrt{2}b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad , \quad (\text{B.23})$$

e sabendo que:

$$\langle ab | H_\varepsilon | cd \rangle = \langle cd | H_\varepsilon | ab \rangle^* \quad , \quad (\text{B.24})$$

então:

$$\langle 1/2 \ 1/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ 1/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + i\sqrt{2}b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (\text{B.25})$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 | H_\varepsilon | 3/2 \ -1/2 \rangle = a_v 2\varepsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + i\sqrt{2}b\varepsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad . \quad (\text{B.26})$$

Podemos notar que o primeiro do lado direito desde (B.19) até (B.26) são idênticos. Esses termos são os termos de tensão hidrostática e irão mudar a energia do gap E_g devido ao deslocamento das bandas de condução e valência.

Lista de Figuras

- 3.1 Representação esquemática de uma super-rede na banda de valência para dois tipos diferentes de materiais, 1 e 2. 16
- 3.2 Representação esquemática da estrutura de bandas de valência para materiais cúbicos ao longo das direções $\langle 111 \rangle$ e $\langle 100 \rangle$ (a) sem acoplamento *spin-órbita* e (b) com acoplamento *spin-órbita*. HH, LH e SH(SO) são as bandas de buraco pesado, buraco leve e *split-off*, respectivamente. A separação da energia Δ_{SO} devida a interação *spin-órbita* é indicada. Em (c) temos a representação esquemática da primeira Zona de Brillouin para a super-rede de poços quânticos. Figuras extraídas da Referência [40]. 18
- 3.3 Representação esquemática, em materiais cúbicos, de uma camada biaxialmente tensionada nos casos de: (a) compressão e (b) distensão. Figura adaptada da Referência [40]. 37
- 3.4 Representação esquemática do potencial de portadores para a banda de valência (a) sem tensão (b) com tensão compressiva e (c) com tensão distensora. As linhas representam o potencial sem tensão (linha preta), potencial de buracos pesados e *split-off* (linha azul), potencial de buracos leves (linha vermelha). 42
- 3.5 Diagrama esquemático do cálculo autoconsistente para determinação da estrutura de bandas de valência, adaptado de [40] 51
- 4.1 Representação esquemática do perfil de potencial para um dado portador na banda de valência, no qual temos dois materiais semicondutores distintos magnéticos e não magnéticos crescidos na direção z. Estão representados também os potenciais para *spins down* (linhas sólidas) e *up* (linhas tracejadas). 53

- 4.2 Em (a) temos a representação esquemática de como é o perfil de potencial repulsivo, e em (b) a representação do perfil atrativo. Aqui E_F representa a energia de Fermi e as linhas sólidas representam os níveis de energia. Figura extraída da Referência [53]. 56
- 4.3 Representação esquemática do potencial resultante da competição entre o potencial (a) repulsivo (interação coulombiana) com (c) o atrativo (interação troca-correlação) e o potencial resultante (b) representa o potencial total. Também é indicado o nível de Fermi (linha azul). Figura extraída da Referência [70]. 56
- 4.4 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ relativa à variação do número de camadas magnéticas, (a) $n = 2$, (b) $n = 4$, (c) $n = 6$ e (d) $n = 8$. 57
- 4.5 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$ e $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ relativa à variação do número de camadas magnéticas, (a) $n = 2$, (b) $n = 4$, (c) $n = 6$ e (d) $n = 8$. 58
- 4.6 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 30\%$, $y = 20\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT e com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ relativa à variação do número de camadas magnéticas, (a) $n = 2$, (b) $n = 4$, (c) $n = 6$ e (d) $n = 8$. 59
- 4.7 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, variando a espessura da camada magnética $d_1 = 2, 3, 4 \text{ nm}$ e 6 nm , com 10% de MT e com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 60
- 4.8 Densidade de cargas de *spins up* e *down* para os sistemas com $x = 10\%$, $y = 20\%$, $d_1 = 2 \text{ nm}$, variando a espessura da camada não magnética $d_2 = 2, 3, 4 \text{ nm}$ e 6 nm , com 10% de MT e com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 61
- 4.9 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down* e *up* e (b) polarização relativas à variação de $x = 10\%, 20\%, 30\%$ com y fixo em 20%. Os outros parâmetros são $d_1 = 2 \text{ nm}$, $d_2 = 3 \text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 63

- 4.10 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down* e *up* e (b) polarização relativas à variação de $y = 20\%, 30\%, 40\%$ com x fixo em 10% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2\text{ nm}$, $d_2 = 3\text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 63
- 4.11 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2\text{ K}$ para o sistema com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ variando $N_A = 1 \times 10^{18}, 1 \times 10^{19}$ e $1 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$. 64
- 4.12 Espectros de fotoluminescência teóricos para os sistemas com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ variando a temperatura em $T = 2\text{ K}, 40\text{ K}, 100\text{ K}, 200\text{ K}$ e 300 K . Os outros parâmetros são $N_A = 1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, $d_1 = 2\text{ nm}$, $d_2 = 3\text{ nm}$, $n = 6$ e 10% de MT. 65
- 4.13 Espectros de fotoluminescência teóricos a $T = 2\text{ K}$ para os sistemas com $x = 10\%$ e $y = 20\%$ e tensão variando em $0\%, 20\%, 40\%, 60\%, 80\%$ e 100% . Nesse caso, $d_1 = 2\text{ nm}$, $d_2 = 3\text{ nm}$, $N_A = 1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, $n = 6$ com 10% de MT. 67
- 4.14 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down* e *up* e (b) polarização relativas à $x = 10\%$, $y = 20\%$ variando tensão em $0\%, 20\%, 40\%, 60\%, 80\%$ e 100% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2\text{ nm}$, $d_2 = 3\text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 68
- 4.15 (a) Concentração bidimensional, N_{2D} , dos *spins down* e *up* e (b) polarização relativas à $x = 30\%$ e $y = 20\%$ variando tensão em $0\%, 20\%, 40\%, 60\%, 80\%$ e 100% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2\text{ nm}$, $d_2 = 3\text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 68
- 4.16 Transições eletrônicas para (a) $x = 10\%$ fixo e $y = 20\%, 30\%$ e 40% ; (b) $x = 10\%, 20\%$ e 30% com $y = 20\%$; variando tensão em $0\%, 20\%, 40\%, 60\%, 80\%$ e 100% . Os outros parâmetros são $d_1 = 2\text{ nm}$, $d_2 = 3\text{ nm}$, com 10% de MT, $N_A = 1 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$ e $n = 6$. 69
- 4.17 Representação esquemática das amostras A e B. As dimensões são dadas em nm. Figura extraída da Referência [47]. 71
- 4.18 Espectros de fotoluminescência a $T = 2\text{ K}$ para as amostras A e B, respectivamente. Figura adaptada da Referência [47]. 72

- 4.19 Espectro de fotoluminescência teórico a $T = 2K$ para os sistemas experimentais realizados no estudo [47]. 73
- B.1 Componente de tensão σ_{xx} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{x} e componente de tensão σ_{xy} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{y} . Figura extra da Referia [40]. 85

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros para InAs, AlAs e GaAs.	49
4.1	Parâmetros do cristal para InAs, AlAs e GaAs. Dados extraídos da Referência [69]	54

Referências Bibliográficas

- [1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, and A. Y. Chtchelkan. *Science*, 294(5546):1488–1495, 2001.
- [2] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2472–2475, Nov 1988.
- [3] A. Fert. *Thin Solid Films*, 517(1):2–5, 2008.
- [4] G Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. *Physical Review B*, 39(7):4828, 1989.
- [5] S. Mao, Y. Chen, F. Liu, X. Chen, B Xu, P. Lu, M. Patwari, H. Xi, C. Chang, B. Miller, et al. *IEEE Transactions on Magnetics*, 42(2):97–102, 2006.
- [6] J. Daughton, J. Brown, E. Chen, R. Beech, A. Pohm, and W. Kude. *IEEE Transactions on Magnetics*, 30(6):4608–4610, 1994.
- [7] R. Sbiaa, H. Meng, and S.N. Piramanayagam. *Physica Status Solidi (RRL) - Rapid Research Letters*, 5(12):413–419, 2011.
- [8] R. Sbiaa, H. Meng, and S. N. Piramanayagam. *Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, 5(12):413–419, 2011.
- [9] A. Hirohata, J. Sagar, L. Lari, L. R Fleet, and V. K. Lazarov. *Applied Physics A*, 111(2):423–430, 2013.
- [10] O. Wunnicke, P. Mavropoulos, R. Zeller, P. H Dederichs, and D. Grundler. *Physical Review B*, 65(24):241306, 2002.

- [11] H. Ohno. *Science*, 281(5379):951–956, 1998.
- [12] Y. Ohno, D.K. Young, B. al Beschoten, F. Matsukura, et al. *Nature*, 402(6763):790, 1999.
- [13] I. Žutić and P. E. F. Junior. *Nature Nanotechnology*, 9(10):750–752, 2014.
- [14] A. Hirohata and K. Takanashi. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(19):193001, 2014.
- [15] F. Valmorra, G. Scalari, K. Ohtani, M. Beck, and J. Faist. *New Journal of Physics*, 17(2):023050, 2015.
- [16] Y.F. Lao, A.G.U. Perera, H.L. Wang, J.H. Zhao, Y.J. Jin, and D. H. Zhang. *Journal of Applied Physics*, 119(10):105304, 2016.
- [17] D. Wagenknecht, E. Schmoranzarová, F. Trojánek, P. Němec, and T. Ostatnický. *Journal of Applied Physics*, 122(2):023104, 2017.
- [18] S. Datta and B. Das. *Applied Physics Letters*, 56(7):665–667, 1990.
- [19] J.M. MacLaren, X.G. Zhang, W.H. Butler, and X. Wang. *Physical Review B*, 59(8):5470, 1999.
- [20] G. A. Prinz. *Science*, 282(5394):1660–1663, 1998.
- [21] D. D. Awschalom and J. M. Kikkawa. *Physics Today*, 52:33–39, 1999.
- [22] T. Dietl, D. D. Awschalom, M. Kaminska, and H. Ohno. *Spintronics*, volume 82. Academic Press, 2009.
- [23] S. M. Rezende. *Materiais e dispositivos eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 2004.
- [24] J. K. Furdyna. *Journal of Applied Physics*, 64(4):R29–R64, 1988.
- [25] L. A. Kolodziejski, T. C. Bonsett, R. L. Gunshor, S. Datta, R. B. Bylisma, W. M. Becker, and N. Otsuka. *Applied Physics Letters*, 45(4):440–442, 1984.

- [26] K. A. Harris, S. Hwang, Y. Lansari, J. W. Cook Jr, and J. F. Schetzina. *Applied Physics Letters*, 49(12):713–715, 1986.
- [27] X. Chu, S. Sivanathan, and J. P. Faurie. *Applied Physics Letters*, 50(10):597–599, 1987.
- [28] R. Rungsawang, F. Perez, D. Oustinov, J. Gómez, V. Kolkovsky, G. Karczewski, T. Wojtowicz, J. Madéo, N. Jukam, S. Dhillon, et al. *Physical Review Letters*, 110(17):177203, 2013.
- [29] H. Ohno, H. Munekata, S. Von Molnar, and L. L. Chang. *Journal of Applied Physics*, 69(8):6103–6108, 1991.
- [30] H. Munekata, H. Ohno, S. Von Molnar, A. Segmüller, L. L. Chang, and L. Esaki. *Physical Review Letters*, 63(17):1849, 1989.
- [31] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, and Y. Iye. *Applied Physics Letters*, 69(3):363–365, 1996.
- [32] M. Holub, S. Chakrabarti, S. Fathpour, P. Bhattacharya, Y. Lei, and S. Ghosh. *Applied Physics Letters*, 85(6):973–975, 2004.
- [33] A. J. Blattner and B. W. Wessels. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 20(4):1582–1585, 2002.
- [34] K. Y. Wang, R. P. Champion, K. W. Edmonds, M. Sawicki, T. Dietl, C. T. Foxon, and B. L. Gallagher. In *AIP Conference Proceedings*, volume 772, pages 333–334. AIP, 2005.
- [35] J. Wang, B. Lv, H. Mao, Q. Zhao, J. Yu, Y. Liu, Y. Zhang, Z. Zhu, and H. Xing. *Applied Physics Letters*, 91(5):052509, 2007.
- [36] S. A. Blokhin, M. A. Bobrov, N. A. Maleev, A. G. Kuzmenkov, A. V. Sakharov, A. A. Blokhin, P. Moser, J. A. Lott, D. Bimberg, and V. M. Ustinov. *Applied Physics Letters*, 105(6):061104, 2014.

- [37] S. Yoon, I. T. and Lee, H. D. Cho, Y. Shon, and T. W. Kang. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 28(10):3049–3052, 2015.
- [38] L. G. Mamaev, Y. A. and Gerchikov, Y. P. Yashin, D. A. Vasiliev, V. V. Kuzmichev, V. M. Ustinov, A. E. Zhukov, and V. S. Mikhrin. In *AIP Conference Proceedings*, volume 980, pages 85–91. AIP, 2008.
- [39] K. Ohtani, M. Beck, G. Scalari, and Jérôme Faist. *Applied Physics Letters*, 103(4):041103, 2013.
- [40] S. C. P. Rodrigues. *Estrutura de bandas de heteroestruturas semicondutoras dopadas tipo-p*. Tese de doutorado, IFUSP, São Paulo, 2001.
- [41] J. M. Luttinger and W. Kohn. *Physical Review*, 97(4):869, 1955.
- [42] E. O. Kane. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(1-2):82–99, 1956.
- [43] P. Weigele, L. Czornomaz, D. Caimi, N. Daix, M. Sousa, J. Fompeyrine, and C. Rossel. In *Ultimate Integration on Silicon (ULIS), 2013 14th International Conference on*, pages 45–48. IEEE, 2013.
- [44] C. Rossel, P. Weigele, L. Czornomaz, N. Daix, D. Caimi, M. Sousa, and J. Fompeyrine. *Solid-State Electronics*, 98:88–92, 2014.
- [45] M. Chandrasekhar and H. R. Chandrasekhar. *Philosophical Magazine B*, 70(3):369–380, 1994.
- [46] G. M. Sipahi, S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, and I. C. da Cunha Lima. *Applied Physics Letters*, 85(25):6209–6211, 2004.
- [47] Y. V. Terent’ev, S. N. Danilov, H. Plank, J. Loher, D. Schuh, D. Bougeard, D. Weiss, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, I. V. Rozhansky, et al. *Journal of Applied Physics*, 118(11):113906, 2015.
- [48] P. Y Yu and M. Cardona. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. Springer, 2010.

- [49] D. J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2016.
- [50] J. J. Sakurai and J. J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Pearson Higher Ed, 2014.
- [51] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley, 2005.
- [52] R. Enderlein and N. J. M. Horing. *Fundamentals of semiconductor physics and devices*. World Scientific, 1997.
- [53] J. L. Gomes. *Análise das propriedades eletrônicas e ópticas de semicondutores magnéticos diluídos baseados nos grupos II-VI e III-V*. Dissertação de mestrado, UFRPE, Recife, 2013.
- [54] L. Esaki and R. Tsu. *IBM Journal of Research and Development*, 14(1):61–65, 1970.
- [55] G. M. Sipahi. *Teoria do confinamento de buracos em heteroestruturas semicondutoras do tipo δ -doping*. Tese de doutorado, IFUSP, São Paulo, 1997.
- [56] M. Nishio, K. Hiwatashi, K. Saito, T. Tanaka, and Q. Guo. *Journal of Crystal Growth*, 318(1):524–527, 2011.
- [57] L. Hedin and B. I. Lundqvist. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 4(14):2064, 1971.
- [58] T. P. Pearsall. *Semiconductors and Semimetals*, 32:1–15, 1990.
- [59] S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, I. C. da Cunha Lima, G. M. Sipahi, and M. A. Boselli. *Physical Review B*, 70(16):165308, 2004.
- [60] I. C. da Cunha Lima, S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite. *Journal of Superconductivity*, 18(1):61–67, 2005.
- [61] N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. *Science*, 304(5670):565–567, 2004.
- [62] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*, volume 403. 2005.

- [63] M. A. Ruderman and C. Kittel. *Physical Review*, 96(1):99, 1954.
- [64] T. Kasuya. *Progress of Theoretical Physics*, 16(1):45–57, 1956.
- [65] K. Yosida. *Physical Review*, 106(5):893, 1957.
- [66] T. Dietl, H. Ohno, and F. Matsukura. *Physical Review B*, 63(19):195205, 2001.
- [67] S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, O. C. Noriega, J. R. Leite, T. Frey, D. J. As, D. Schikora, and K. Lischka. *Physica Status Solidi (A)*, 190(1):121–127, 2002.
- [68] Y. P. Varshni. *Physica*, 34(1):149–154, 1967.
- [69] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan. *Journal of Applied Physics*, 89(11):5815–5875, 2001.
- [70] O. F. P. Santos. *Investigação das Propriedades Eletrônicas e de Transporte em Nanoestruturas Semicondutoras*. Dissertação de mestrado, UFRPE, Recife, 2012.
- [71] D. J. Dunstan. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 8(6):337–375, 1997.
- [72] K. S. Burch, D. D. Awschalom, and D. N. Basov. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 320(23):3207–3228, 2008.
- [73] J. Szczytko, W. Mac, A. Twardowski, F. Matsukura, and H. Ohno. *Physical Review B*, 59(20):12935, 1999.
- [74] I. S. P. Marin. *Propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras magnéticas diluídas*. Dissertação de mestrado, IFUSP, São Paulo, 2007.
- [75] W. S. Patrocínio. *Análise da informação do spin dos orbitais atômicos no cálculo de propriedades de estruturas semicondutoras*. Dissertação de mestrado, IFUSC, São Paulo, 2010.
- [76] C. J. Ji, X. C. Cao, Q. F. Han, K. Qiu, F. Zhong, X. H. Li, H. T. He, J. N. Wang, and Y. Q. Wang. *Applied Physics Letters*, 90(23):232501, 2007.