

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

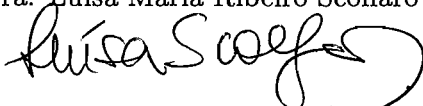
Estrutura de Bandas de Heteroestruturas Semicondutoras Dopadas Tipo-p


Sara Cristina Pinto Rodrigues

Orientadora: Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva (Universidade Federal da Bahia)
Prof. Dr. Guennadii Michailovich Goussev (Instituto de Física da USP)
Prof. Dr. Guo Qiang Hai (Instituto de Física da USP de São Carlos)
Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima (Universidade do Estado do Rio de Janeiro)
Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro (Instituto de Física da USP)



p/ 
Prof. Armando Corbani Ferraz
residente da Comissão de Pós Graduação

Tese apresentada ao
Instituto de Física da Universidade
de São Paulo para a obtenção do
título de Doutor em Ciências.

Trabalho financiado
pela Fapesp
-2001-

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3565

ed. 1

SBI-IFUSP



305M810T3565

537.622
R696
D
esc. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Rodrigues, Sara Cristina Pinto

Estrutura de Bandas de Heteroestruturas
Semicondutoras Dopadas Tipo-p. São Paulo, 2001.

Tese (Doutoramento) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Departamento de Física dos
Materiais e Mecânica

Orientador: Profa. Dra. Luísa Maria Ribeiro Scolfaro
Área de Concentração: Física do Estado Sólido

Unitermos: 1. Método **k.p** ; 2. Heteroestrutura;
3. Estrutura de Bandas; 4. tipo p;
5. Nitretos de arsenetos.

USP/IF/SBI-049/2001

À minha mãe e meu Capitão Rodrigo



“Encontramos uma estranha pegada na orla do desconhecido. Desenvolvemos teorias profundas, uma após a outra, para explicar sua origem. Por fim, conseguimos reconstruir a criatura que fez a pegada. E ora vejam! Ela é nossa própria pegada.”

Sir Arthur Stanley Eddington

Agradecimentos

Os meus mais sinceros agradecimentos

à Profa Dra. Luísa M. R. Scolfaro que foi mais que uma orientadora durante todos os anos em que estive com ela. O meu muito obrigada por tudo que aprendi e pela constante atenção e paciência durante a realização deste trabalho.

ao Prof. Dr. Guilherme M. Sipahi pelas discussões, pela atenção e pela grande colaboração no desenvolvimento deste trabalho. O meu muito obrigada pela amizade constante.

ao Prof. José Roberto Leite pelas conversas, discussões e sugestões de grande importância para este trabalho.

à Lara e ao Sandro, pelos dados fornecidos e principalmente pela amizade.

ao Dr. Dmitri Beliaev pela inestimável ajuda nos cálculos iniciais.

aos Profs. Klaus Lischka e Donat J. As da Universität Paderborn, em Paderborn, Alemanha pelas medidas experimentais e dados fornecidos.

ao Prof. Dr. Américo Tabata pelas discussões dos dados experimentais.

ao Prof. G. H. Döhler pela calorosa recepção e valiosas discussões durante minha estadia junto ao grupo no Institut für Technische Physik da Friedrich-Alexander-Universität de Erlangen, em Erlangen, Alemanha.

ao Luis Eugenio, ao Marcelo, ao Adriano, ao Maurício, ao Ademir, ao Rafael, à Odille, e a todos os companheiros do grupo pelo carinho e assistência constantes.

à Enza por todo auxílio, principalmente na parte administrativa.

a todos os colegas do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica pela amizade e ajuda.

à minha mãe pela força e incentivo, e por um sonho realizado.

ao Rodrigo pelo amor e carinho durante todo este período.

ao Beto pela amizade sempre presente e pela inestimável ajuda com o Latex.

à Elisinha e a Shila, por serem muito prestativas e amigas.

a todos meus amigos da Física que sempre me incentivaram.

ao Dr. Mário de Lima Buzzoni por toda ajuda.

aos meus eternos amigos do CAI.

ao Prof. Rolf Enderlein *in memorium*.

Índice

Resumo	i
Abstract	iii
1 Introdução Geral	1
2 Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para Heteroestruturas no Espaço Recíproco- Autoconsistência	13
2.1 Introdução	13
2.2 Hamiltoniana para uma Partícula	14
2.3 Equação da Massa Efetiva Multibandas	14
2.4 Termo de Energia Cinética Generalizado	17
2.5 Potencial da Heteroestrutura	24
2.6 Potencial de Coulomb no Espaço Recíproco	24
2.7 Potencial de Troca-Correlação	26
2.8 Estudo da Tensão	31
2.9 Etapas do Cálculo	43
3 Aplicações em heteroestruturas derivadas de nitretos do grupo-III	47
3.1 Introdução	47
3.2 Estrutura de Bandas para o <i>bulk</i> de GaN	48
3.3 Poços Quânticos de AlGa _x N/GaN Reportados na Literatura	50
3.4 Poços Quânticos e Super-Redes Não Dopados de AlGa _x N/GaN e GaN/InGa _x N	54
3.4.1 Efeitos da Utilização de Diferentes Parâmetros de Luttinger	54
3.4.2 Efeitos da Inclusão da Tensão e da Banda de <i>Split-Off</i>	59
3.5 Poços Quânticos e Super-Redes Dopados de AlGa _x N/GaN e GaN/InGa _x N	66
3.5.1 Múltiplos Poços Quânticos de AlGa _x N/GaN e GaN/InGa _x N Dopados	68
3.5.2 Super-redes de AlGa _x N/GaN e GaN/InGa _x N Dopadas	74
3.5.3 Efeitos do Potencial de Troca-Correlação e do Potencial de Coulomb	77

4	Aplicações em Heteroestruturas Derivadas dos Arsenetos	83
4.1	Introdução	83
4.2	Poços Quânticos de AlGaAs/GaAs Reportados na Literatura	84
4.3	Poços Quânticos e Super-Redes de GaAs/InGaAs Dopados e Não Dopados	90
4.3.1	Poço Quântico de GaAs/InGaAs Não Dopado	90
4.3.2	Poço Quântico e Super-Rede de GaAs/InGaAs Dopados	92
4.3.3	Poço Quântico de AlGaAs/GaAs com Dopagem Planar tipo-p no Centro do Poço	94
5	Comparação com Resultados Experimentais	99
5.1	Introdução	99
5.2	Teoria do Cálculo do Espectro de Fotoluminescência	100
5.2.1	Matriz de Kane	100
5.2.2	Determinação da Intensidade no Espectro de Fotoluminescência .	103
5.3	Sistemas de GaN/InGaN	104
5.3.1	Mecanismos de Emissão de Luz	104
5.3.2	Espectros de Fotoluminescência	108
5.4	Sistemas de AlGaAs/InGaAs	114
5.4.1	Transições Intra-banda	114
5.4.2	Espectros de Fotoluminescência	116
6	Conclusões	119
	Apêndice A - Determinação da Hamiltoniana de <i>Strain</i> H_S	123
A.1	Banda de Condução	123
A.2	Banda de Valência	124
	Apêndice B - Determinação da Força do Oscilador	129
	Bibliografia	133
	Lista de Figuras	147
	Lista de Tabelas	156
	Lista de Artigos Publicados	159
	Anexos dos Artigos Publicados	161

Resumo

Neste trabalho iremos apresentar a teoria autoconsistente $\vec{k} \cdot \vec{p}$ aplicada a heteroestruturas dopadas tipo-p que resolve a Hamiltoniana 6×6 de Luttinger-Kohn, generalizada para tratar diferentes materiais, juntamente com a equação de Poisson na representação de ondas planas. A generalização do termo de energia cinética é inserido explicitamente na Hamiltoniana de Luttinger-Kohn levando em conta os efeitos de diferentes materiais, através da inclusão de conjuntos distintos de parâmetros de Luttinger e considerando os elementos adicionais na matriz, da Hamiltoniana de Luttinger-Kohn e que não aparecem naquela para homoeestruturas. O método é aplicado ao estudo pioneiro da estrutura de sub-bandas e minibandas de valência de heteroestruturas com dopagem tipo-p envolvendo semicondutores nitretos do grupo-III cúbicos. Heteroestruturas de compostos III-V derivados do GaAs também são estudadas, com o objetivo principal de testar o método generalizado e sua implementação no programa. Especificamente, iremos obter soluções autoconsistentes da equação da massa efetiva de multibandas e da equação de Poisson para poços quânticos e super-redes de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ e $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ na fase cúbica, bem como para heteroestruturas de $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, variando a concentração de aceitadores, o perfil de dopagem, o período da super-rede e a composição da liga x . Os efeitos de troca-correlação, dentro da aproximação da densidade local, são levados em conta para o gás de buracos bidimensional formado dentro do poço. Analisaremos os efeitos na banda de valência das heteroestruturas quando considerarmos diferentes parâmetros de Luttinger (associados a materiais distintos). Mostraremos que para descrever corretamente os sistemas envolvendo nitretos é fundamental incluir a banda de *split-off*, os efeitos de tensão devidos ao descasamento de parâmetros de rede e os efeitos de troca-correlação. Iremos verificar que quando utilizamos um conjunto de parâmetros adequados que especificam a heteroestrutura, podemos obter uma densidade alta de gás de buracos bidimensional, particularmente para os sistemas de poços quânticos e super-redes baseados nos nitretos. Apresentaremos também comparações de nossos resultados com dados experimentais obtidos de fotoluminescência para sistemas de $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ e de fotoluminescência e absorção para $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ observando um bom acordo e mostrando que este trabalho serve como um guia para futuras

experiências.

Abstract

In this work we present a self-consistent $\vec{k} \cdot \vec{p}$ theory of p-doped semiconductor heterostructures which solves the full six-band Luttinger-Kohn Hamiltonian, generalized to treat different materials, in conjunction with the Poisson equation in a plane-wave representation. The generalization of the kinetic energy term is performed by taking into account explicitly in the Luttinger-Kohn Hamiltonian the effects of different materials through the inclusion of distinct sets of Luttinger parameters and by considering the corresponding additional Luttinger-Kohn matrix elements, not present in the one-material based homostructures. The method is applied to the pioneering study of the valence sub-bands and minibands structures of p-type doped heterostructures involving cubic nitride semiconductors of the group-III. Heterostructures of III-V compounds derived from GaAs are also studied, with the main aim of testing the generalized method and its implementation in the program. Self-consistent solutions of the multiband effective-mass-Poisson equations are obtained for several $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ and $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ quantum wells and superlattices in the cubic phase, as well as for $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructures, in which acceptor doping concentration and its profile, SL period, and the alloy content x are varied. Exchange-correlation effects within the formed two-dimensional hole gas are taken into account in the local density approximation. The role played by the use of different Luttinger parameters (associated with the distinct materials) in the hole bands of the heterostructures is analyzed. The inclusion of the spin-orbit split-off band and strain, as well as the exchange-correlation effects are shown to be fundamental for the correct description of the systems. Particularly for the nitride-derived quantum wells and superlattices, it is shown that high-density two-dimensional hole gases can be formed if adequate design parameters are employed. We also compare our results with the experimental data obtained from photoluminescence spectra for the $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and photoluminescence and absorption spectra for the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, observing a good agreement and showing that this work can be used as a guide for future experiments.

Capítulo 1

Introdução Geral

Nas últimas décadas tem sido grande o interesse em se estudar a aplicabilidade do conceito de heteroestrutura semicondutora em dispositivos optoeletrônicos e de transporte. Para isso é necessário compreender as propriedades bidimensionais nestes sistemas, que são caracterizadas pelo confinamento de portadores somente numa dada direção, a de crescimento [1]. Todavia, existem atualmente outros sistemas de baixa dimensionalidade que envolvem uma dimensão, por exemplo os *quantum wires* ou até mesmo dimensão zero, como os *quantum dots* [1,2]. Porém estaremos interessados aqui, apenas em sistemas bidimensionais, como os poços quânticos, poços delta-dopados (*delta-doping*), heterojunções, etc. Uma das formas de se estudar estas estruturas é analisando suas propriedades eletrônicas. Para isso é necessário aplicar um método que determine as estruturas de bandas de condução e valência. Um dos métodos que vêm sendo utilizado com bastante sucesso é o $\vec{k} \cdot \vec{p}$, usando o modelo 6×6 de Luttinger-Kohn [3] para determinar a banda de valência e o modelo de Kane 8×8 [4] que também inclui a banda de condução. Enquanto a determinação dos estados confinados na banda de condução de sistemas dopados tipo-n envolve apenas um tipo de portador (os elétrons), advindos normalmente de uma banda de condução parabólica, os estados da banda de valência em sistemas dopados tipo-p envolvem toda a complexidade do topo desta banda, com diferentes tipos de portadores. Na literatura existem diversos trabalhos que utilizam o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para homoestruturas dopadas tipo-p, e que foram desenvolvidos no grupo do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) do IFUSP [5–11]. Para heteroestruturas de poços quânticos não dopados e dopados tipo-p o que existe na literatura muitas vezes é incipiente e não leva em conta de forma completa todos os efeitos envolvidos, como tensionamento devido à diferença de parâmetros de rede, inclusão das bandas de buracos pesados, leves e de *split-off*, e o acoplamento entre elas, a diferença de materiais nas camadas envolvidas, efeitos de muitos corpos tais como troca-correlação quando há cargas no sistema, entre

outros [12–31]. Dentro deste contexto, torna-se necessário um método mais completo para determinar a estrutura de bandas de valência de heteroestruturas dopadas tipo-p para qualquer configuração de potencial (poço quadrado, poço com dopagem-delta, barreira com dopagem-delta, etc) e que considere todos os efeitos existentes no sistema. Este é o principal objetivo deste trabalho. Desenvolvemos um método geral para o cálculo da estrutura de bandas de buracos em heteroestruturas envolvendo dopagem tipo-p, e aplicamos a alguns sistemas de compostos semicondutores. O presente trabalho finaliza um antigo projeto de nosso grupo de ter um método que permita acessar de forma realística a estrutura de sub-bandas e minibandas de heteroestruturas semicondutoras envolvendo vários materiais em que existe uma dopagem tipo-p presente. Contrário à presença de um gás de elétrons bidimensional nestas estruturas, que tem sido estudada com sucesso nos últimos anos [32–38], a presença de um gás de buracos nas mesmas representa um desafio cujo progresso tem sido muito mais lento. A complexidade da banda de valência nestas estruturas acarreta dificuldades na implementação do processo de autoconsistência e no tratamento dos efeitos de muitos corpos (troca-correlação) para um gás de buracos com três características diferentes. Como veremos no decorrer deste trabalho, segundo nosso conhecimento, apenas um grupo até agora divulgou resultados autoconsistentes mais completos para poços quânticos de AlGaAs/GaAs com dopagem tipo-p, produzida por planos delta-dopados com berílio, e incluindo efeitos de troca-correlação no gás de buracos com dois tipos de portadores [12, 13]. A nossa proposta, por outro lado, difere daquela dos trabalhos do grupo mencionado no sentido de que nosso formalismo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ é desenvolvido no espaço recíproco, utilizando-se, portanto, uma base de funções de ondas planas. Ondas planas são particularmente desejáveis por duas razões: i) o operador de energia cinética é expresso originalmente nessa base, e ii) a equação de Poisson se transforma numa expressão algébrica simples quando escrita na mesma. Ainda, podemos nos valer do desenvolvimento já realizado e implementado no grupo para tratar os efeitos de troca-correlação num gás de buracos com três tipos de portadores, buracos pesados, leves e de *split-off*, o qual representa o operador correspondente ao termo de troca-correlação também em uma base de ondas planas [8, 9].

Enfocamos, nas aplicações apresentadas no presente trabalho, heteroestruturas derivadas dos nitretos do grupo-III cúbicos, uma vez que são materiais de grande interesse atualmente na área de semicondutores, como descreveremos a seguir. Por outro lado, o grupo do LNMS tem estado envolvido na caracterização experimental e teórica dos nitretos do grupo-III, especialmente na fase cúbica, fato que torna o estudo desenvolvido neste trabalho de importância fundamental para a melhor compreensão das propriedades eletrônicas destes sistemas. Apresentamos também aplicações do método à heteroestruturas derivadas dos arsenetos, incluindo alguns testes de reprodução de outros resultados da

literatura para sistemas tipo AlGaAs/GaAs, bem como resultados pioneiros para poços quânticos e super-redes de GaAs/InGaAs envolvendo dopagem tipo-p. Além disso, mostramos também o resultado obtido para um poço de AlGaAs/GaAs com uma dopagem tipo-delta no centro do poço, ressaltando assim, a possibilidade de estudar qualquer perfil de potencial.

Os nitretos do grupo-III vêm sendo considerados sistemas promissores para aplicações em dispositivos semicondutores desde 1970, principalmente para o desenvolvimento de LEDs (*Light Emission Diodes*) nas regiões de comprimentos de onda curto [25, 39–44]. Em vários aspectos isto é importante, pois é possível obter todas as cores do espectro visível e aplicá-los, por exemplo, em visores (*displays*). Além disto, a utilização destes LEDs também é importante em impressoras *lasers*, no armazenamento de informações em alta densidade (CDs, DVDs, HDs, etc) e comunicação sob a água. Hoje em dia existe o interesse em criar transistores de alta potência e alta temperatura para sistemas de transmissão de energia, motores de automóveis, veículos elétricos e para o desenvolvimento e fabricação de sistemas para controle de aviões [39].

Semicondutores do grupo IV e III-V convencionais não são adequados para a elaboração e fabricação de dispositivos optoeletrônicos na região do azul-ultra-violeta do espectro. As energias dos *gaps* não são suficientemente grandes. Dispositivos eletrônicos baseados em GaAs não podem ser usados em alta temperatura. Os nitretos do grupo-III, nitreto de alumínio (AlN), nitreto de gálio (GaN) e nitreto de índio (InN), são particularmente adequados para aplicações nestas áreas. Os *gaps* são grandes e geralmente diretos, para o GaN, por exemplo, a energia do *gap* varia entre 3,2-3,4 eV [25, 43]. Desta maneira estes materiais, por terem energia do *gap* grande e forte ligação química, podem ser usados em dispositivos de emissão de luz no violeta, azul e verde e para transistores de alta temperatura. A partir das ligas destes sistemas, AlGaN e InGaN, é possível modular a energia do *gap* e conseqüentemente a emissão num dado comprimento de onda. Os poços quânticos podem ser fabricados usando AlGaN ou GaN na barreira e GaN ou InGaN como camadas ativas. Isto é importante porque a tecnologia de heteroestruturas utilizada na fabricação de super-redes é essencial para fabricar dispositivos modernos. Os poços quânticos de InGaN são indispensáveis para dispositivos de emissão de luz porque a incorporação de uma pequena quantidade de In na camada ativa de GaN aumenta consideravelmente a eficiência de luminescência. Semicondutores do grupo II-VI, como por exemplo ZnSe, também possuem energia de *gap* adequados para dispositivos de comprimentos de onda curtos, porém o tempo de vida útil em *lasers*, por exemplo, é bem pequeno e até hoje não são comerciais.

Dopagens dos nitretos do grupo-III com doadores e aceitadores têm sido realizadas. As mobilidades de elétrons e buracos no GaN são razoáveis, embora não sejam tão al-

tas quanto no GaAs. Outra propriedade dos nitretos é quanto a sua boa condutividade térmica. Os dispositivos baseados nos nitretos do grupo-III podem não apenas operar em altas temperaturas como em ambientes hostis. Além disso, dispositivos de alta potência necessitam de uma tensão de ruptura alta. O GaN tem uma tensão de ruptura aproximadamente oito vezes maior do que o GaAs e quinze vezes maior do que o Si. Todas estas características mostram porque os semicondutores nitretos do grupo-III surgem como materiais importantes para a optoeletrônica e para dispositivos de alta potência e alta temperatura [39, 40].

As primeiras tentativas de sintetizar o GaN foram feitas por Juza e Hahn em 1938 [39, 40], onde produziram pequenos filetes de GaN. Grimmeiss e Koelmans [45] em 1959 utilizaram a mesma técnica para produzir pequenos cristais de GaN e medir o espectro de fotoluminescência. Maruska e Tietjen [46] em 1969 utilizaram a técnica de deposição química por vapor (*Chemical Vapor Deposition-CVD*) para depositar uma camada de larga área de GaN sobre safira. Neste período, todas as amostras de GaN fabricadas tinham uma concentração de elétrons elevada, mesmo quando não intencionalmente dopadas [25, 41]. Acreditava-se que os doadores eram vacâncias de nitrogênio, porém mais tarde este modelo foi questionado e foi proposto o oxigênio como doador (Seifert *et al.* 1983) [47]. As experiências de Maruska e Tietjen impulsionaram as pesquisas no GaN. Em 1972 Pankove, Miller e Berkeyheiser produziram o primeiro LED azul [25, 48]. O dispositivo consistia de Metal/GaN:Zn (isolante)/n-GaN (M:i:n) que podia emitir luz no azul, verde, amarelo ou vermelho dependendo da concentração de Zn. Em 1973, Maruska *et al.* [49] foram os primeiros a usar Mg ao invés de Zn num diodo M:i:n e obter emissão de luz no violeta. Até o fim dos anos setenta, a qualidade do GaN não era muito boa. Os resultados de medidas óticas e elétricas não eram reprodutíveis. Isto atrasou o progresso da pesquisa em nitretos do grupo-III. Somente em 1983 que foram crescidas camadas de boa qualidade por Yoshida *et al* [50]. Eles mostraram que se uma camada *buffer* é crescida entre o filme de GaN e o substrato de safira, a qualidade das camadas (filmes) melhora. A este método de crescimento chamamos de “duas etapas”. Este método foi investigado e aperfeiçoado por Amano *et al.* em 1988/1989 [51, 52], onde também obtiveram pela primeira vez a condutividade tipo-p em GaN, porém bastante baixa. Akasaki *et al.* também mostraram que o Mg é um aceitador com uma energia de ativação igual a 160 meV [53].

Como mencionado anteriormente, a tecnologia de heteroestruturas é a mais importante para fabricar LEDs [54–59], diodos lasers (LDs) [59–61] e a família dos FETs (*Field Effect Transistors*) [62, 63]: como os HFETs (*Heterostructure Field Effect Transistors*) [64, 65], MESFETs (*Metal Semiconductor Field Effect Transistors*), MODFETs (*Modulation-Doped Field Effect Transistors*) [66], JFET (*Junction Field Effect Transis-*

tors) [67], etc. As primeiras estruturas de camadas de AlGaIn foram crescidas por Khan *et al.* [68] em 1990 e por Itoh *et al.* [69] em 1991 e as primeiras estruturas de GaN/InGaIn foram crescidas por Nakamura *et al.* em 1993 [70]. Os estudos realizados com microscopia eletrônica revelaram que a concentração de defeitos nas melhores camadas epitaxiais ainda era muito grande, cerca de 10^7 vezes maior do que o valor obtido atualmente, que é de aproximadamente $10^3/cm^2$.

Amano *et al.* [51] em 1989 já tinham produzido o primeiro LED de GaN de junção p-n, mas somente na metade da década de 90 que Nakamura e seus colegas na *Nichia Laboratories* conseguiram produzir LEDs que emitissem no azul e verde de forma que fossem comercializados [70]. O primeiro FET em GaN também foi fabricado ao mesmo tempo, ou seja em 1993 [71]. A partir daí, foram realizadas diversas investigações e melhorias, em LEDs, LDs e FETs baseados no GaN [25, 39–41, 55–64, 66, 67, 72–75], inclusive estudos para determinar o melhor substrato para crescimento [25, 39, 41, 73]. Os substratos mais utilizados para crescimento destes materiais são a safira (Al_2O_3), 6H-SiC, ZnO, LiGaO₂ e mais recentemente tem se discutido a utilização do AlN como substrato, uma vez que possui alta condutividade térmica [76]. As principais técnicas de crescimento para estas estruturas são: MOCVD (*Metalorganic Chemical Vapor Deposition*) [25, 40, 77], MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) [39, 41, 73, 74, 78–85], MOVPE (*Metalorganic Vapor Phase Epitaxy*) [41, 60, 86–88] e HVPE (*Hydride Vapor Phase Epitaxy*) [40, 41, 73], esta última inclusive foi uma das primeiras técnicas a ser empregada para o crescimento do GaN nas décadas de 60 e 70. Atualmente as mais utilizadas são MOVPE e MBE.

Ao contrário dos semicondutores III-V, como o GaAs e InP com estrutura *zinblende* (cúbica), a fase termodinamicamente mais estável do AlN, GaN e InN, é a estrutura wurtzita hexagonal (fase- α). Além da fase- α , existe uma fase- β (cúbica) metaestável com a estrutura *zinblende* e a fase *rock-salt*, obtida somente em condições de alta pressão. A fase metaestável, *zinblende*, contudo, pode ser estabilizada pelo crescimento heteroepitaxial [79, 84, 89, 90].

Ambas estruturas, wurtzita e *zinblende*, quando crescidas para formarem poços quânticos, super-redes, heterojunções, etc, apresentam tensão, criando uma deformação (*strain*) no sistema, resultante do descasamento dos parâmetros de rede dos materiais. Nos nitretos, este descasamento é grande o suficiente para afetar a estrutura eletrônica do sistema [39, 73].

Quanto à estrutura wurtzita, esta ainda apresenta uma peculiaridade, a polarização. A polarização nestes sistemas é de dois tipos: a polarização espontânea e a polarização piezoelétrica [39, 40, 73, 91–93]. Os efeitos de polarização espontânea aparecem devido à própria simetria do sistema [92]. Quanto aos efeitos do campo piezoelétrico, estes surgem devido à presença da tensão originária do descasamento dos parâmetros de rede [94], pois

sob o efeito da pressão haverá um deslocamento dos átomos [72]. Podemos notar que mesmo na ausência da tensão, haverá o campo devido à polarização espontânea. Estes campos irão afetar o potencial resultante na heteroestrutura, possibilitando a existência de um gás bidimensional de elétrons (*two-Dimensional Electron Gas*- 2DEG) ou buracos (*two-Dimensional Hole Gas*- 2DHG) confinado dentro da região do poço [75,95–101]. Nas estruturas cúbicas crescidas na direção $\langle 001 \rangle$, devido a simetria, não há a existência destes campos, ainda que sob o efeito de tensão.

Uma vez realizado o crescimento de estruturas de nitretos, o próximo passo foi a dopagem nestes sistemas. Como já relatado antes, as primeiras amostras crescidas de GaN eram não intencionalmente dopadas tipo-n. Em 1995, Gaskill *et al.* [102], observaram que os resultados obtidos para amostras não dopadas e intencionalmente dopadas eram muito similares, indicando que a magnitude de compensação dos doadores era a mesma. Alguns doadores foram propostos, como o oxigênio [103], porém foi mostrado depois que, a dopagem feita com o oxigênio diminui a condutividade a partir de $x = 0,4$ em ligas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [104]. Desta forma o dopante tipo-n mais comum utilizado até hoje é o Si. Através do controle da dopagem de Si em GaN, é possível obter uma larga faixa de concentrações (10^{17} cm^{-3} a 10^{19} cm^{-3}) [105–109], o que é importante do ponto de vista de dispositivos [67,78]. Diversos estudos têm sido realizados desde então, tanto experimentalmente [62,65,110–113], como teoricamente [38,63,66,72,114]. Do ponto de vista experimental, as principais técnicas para as medidas das propriedades dos elétrons em semicondutores, como sua massa efetiva m^* e tempo de colisão τ , são as oscilações de *Shubnikov-de Haas* (SdH) [111] e ressonância ciclotrônica [110]. As oscilações de SdH, no entanto, somente são observadas para campos magnéticos altos, devido à qualidade ainda pobre do cristal. Como consequência, pouco se sabe sobre propriedades básicas destes materiais, como valores de massas efetivas de elétrons e buracos. Aprimorando as técnicas de crescimento, descritas anteriormente, é possível obter heteroestruturas (AlGaN/GaN) de alta qualidade com oscilações de SdH bem definidas, mesmo a campos baixos (2 T) [111]. A escolha do substrato no crescimento destas estruturas é crucial para aumentar a mobilidade [65] e a condutividade eletrônica [112]. Outro ponto importante nas propriedades de transporte é quanto à polarização piezoelétrica, presente nas estruturas wurtzita, que está relacionada diretamente com a tensão. Analisando um sistema de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, para $x = 0,22$, dopado tipo-n, foram estudadas as influências da largura da barreira (AlGaN) e do *spacer* (separação entre a região dopada na barreira e o poço) na mobilidade e, conseqüentemente, na densidade do 2DEG. Quando as barreiras se tornam parcialmente relaxadas, a mobilidade e a densidade do 2DEG diminuem drasticamente, mostrando que a polarização é o principal fator para determinar a densidade do gás de elétrons bidimensional [113]. Diversos cálculos teóricos também foram realiza-

dos para determinar o potencial e os estados eletrônicos nestes sistemas tipo-n, através das soluções autoconsistentes das equações de Poisson e Schrödinger [63, 66, 72, 96, 97] e também utilizando a aproximação de Thomas-Fermi [114]. Destes resultados observa-se que quando se consideram cargas no sistema, estas geram um campo elétrico que compensa o campo piezoelétrico, tornando o potencial em alguns casos praticamente *flat* (plano) [72, 75, 95, 96, 115].

Em relação à dopagem tipo-p, seu controle é fundamental para melhorar o desempenho de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, bem como de dispositivos baseados em transporte. Nos nitretos, a dopagem tipo-p pode ser feita inserindo elementos da coluna II, como o Zn, Cd, Mg e Be substitucionalmente ao cátion para formar aceitadores simples [25]. O dopante mais utilizado atualmente é o Mg, todavia outro aceitador que vem sendo proposto é o C que substitui o N e dá origem a um nível aceitador possivelmente mais raso [39, 116, 117]. Entretanto, todos estes elementos formam aceitadores relativamente profundos, na faixa de 0,1–0,2 eV acima do topo da banda de valência, para materiais tipo *bulk* [83, 100, 118–123]. Ainda outro problema referente à dopagem tipo-p é quanto à concentração residual (*background*) de elétrons ser alta, da ordem de 10^{17} cm^{-3} . Acredita-se que isto se deve à incorporação de grandes quantidades de vacâncias de nitrogênio [25].

Várias técnicas têm sido utilizadas para aumentar a eficiência da dopagem tipo-p, utilizando múltiplos poços quânticos e super-redes alternando-se camadas de GaN e AlGaN ou InGaN. Nas estruturas wurtzita, estas técnicas possibilitaram obter energias de ionização do nível aceitador mais baixas, aumentando a condutividade tipo-p em várias ordens de magnitude [100, 119, 121]. Nestes estudos também foi demonstrada a existência da formação do gás bidimensional de buracos (2DHG) dentro do poço, que é induzido pela polarização espontânea e polarização piezoelétrica, como já mencionado antes [75, 98–101]. Da mesma maneira que ocorre para a dopagem tipo-n, o campo piezoelétrico é compensado pelo campo gerado pelas cargas, tornando o potencial menos inclinado [75, 98, 100, 101, 115, 121]. Ainda nestas estruturas, dopadas com Mg, as concentrações alcançam valores de 10^{17} cm^{-3} a 10^{19} cm^{-3} [39, 124]. Ao contrário dos materiais hexagonais, as estruturas cúbicas dopadas tipo-p, originam 2DHG, mesmo na ausência de campos piezoelétricos. Além disso as estruturas cúbicas apresentam algumas vantagens em relação às estruturas wurtzita do ponto de vista experimental tais como: facilidade de clivagem da estrutura [41, 88, 125, 126], maior controle da dopagem seja tipo-p ou tipo-n [41, 83, 84] e a energia do *gap* é menor na fase cúbica do que na fase wurtzita, facilitando alcançar as regiões de comprimentos de onda verde-azul, utilizando um x menor para a liga [41, 81, 89].

Outro ponto interessante a mencionar para ambas estruturas é que, como bem sabido,

através de fotoexcitação ou injeção de corrente é possível gerar densidades de cargas, mesmo em poços não dopados. Em sistemas wurtzita, por exemplo, esta densidade de cargas afetará o campo piezoelétrico e conseqüentemente as propriedades óticas do sistema [26, 28, 98, 115, 127–133].

Cabe ressaltar aqui outro aspecto importante particularmente nas ligas derivadas dos nitretos, a separação de fase [134–136]. A separação de fase surge das propriedades termodinâmicas de um dado sistema, assumindo estar em equilíbrio termodinâmico. A conseqüência desta separação de fase, no processo de crescimento, é a formação de regiões na liga onde temos uma fase rica no elemento que forma a liga e uma fase pobre neste. Nosso grupo, do LNMS, tem estado envolvido com o entendimento desta questão, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Foi mostrado teoricamente [134, 136] e confirmado experimentalmente [135] para a liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ que, na região onde se encontra a fase rica, podemos ter a formação dos chamados *quantum dots* (QDs), que serão responsáveis pela emissão de luz. Porém quando as camadas estão tensionadas, esta separação de fase é suprimida ou é muito pequena, de forma que não há uma fase rica e uma fase pobre, e não há portanto formação de QDs [137]. Todos estes aspectos serão discutidos nos Capítulos sub-seqüentes em maiores detalhes. Veremos que existe uma controvérsia ainda grande sobre a origem das transições eletrônicas observadas experimentalmente e portanto esta não está totalmente bem estabelecida [138, 139].

Do ponto de vista teórico, as propriedades eletrônicas dos nitretos binários do grupo-III têm sido estudadas tanto na estrutura wurtzita como na *zincblende*, através de vários métodos: *tight-binding* [140–142], pseudopotencial empírico e *ab initio* [143–152], LMTO (*Linearized Muffin-Tin Orbital*) [153–156] e LAPW (*Linear Augmented Plane-Wave*) [157, 158]. No tratamento de estruturas de poços quânticos e super-redes, o método comumente utilizado é o $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [26–29, 128, 159–165]. Os estados da banda de condução são simples de serem calculados pois possuem um único tipo de portador, os elétrons (banda isotrópica). Diferentemente da banda de condução, na banda de valência, devemos considerar os diferentes portadores: buracos pesados, buracos leves e buracos de *split-off*. Nos nitretos, como a energia de desdobramento de *spin-órbita* é muito pequena, cerca de 14 meV para o GaN [157], a banda de *split-off* irá influenciar a estrutura da banda de valência, e portanto deverá ser considerada. Esta influência é tão grande que os estados de buracos de *split-off* estarão fortemente acoplados com os estados de buracos leves em todos os sistemas [26, 27, 148, 160, 162, 166]. Além da influência dos buracos de *split-off*, ainda existe outro fator que contribui, que é a energia de desdobramento do topo da banda de valência devido ao campo cristalino, que também é pequena nos nitretos, cerca de 72 meV para o GaN [162]. Porém este só aparecerá nas estruturas wurtzita devido a sua mais baixa simetria (C_{6v}) em relação aos materiais cúbicos (T_d) [25, 29, 73, 159, 162].

Para determinar a estrutura de bandas de buracos, levando-se em conta as considerações descritas acima, diversos autores utilizam Hamiltonianas 6×6 de Luttinger-Kohn (LK) [25–29, 166] e Bir-Pikus (BP) [25, 29, 128, 133, 159, 160, 162–165, 167], para materiais cúbicos e hexagonais, respectivamente. Nestes cálculos, a equação da massa efetiva (EME) de multibandas de LK e BP é resolvida através de uma equação matricial, usando um conjunto apropriado de funções auxiliares ou ondas planas como base. Além disso cabe ressaltar aqui que todos os cálculos mencionados foram feitos para sistemas não dopados, e incluem ou não a tensão. Em nenhum destes trabalhos, contudo, foi estudado o efeito das diferenças entre os parâmetros de massa efetiva entre os dois materiais que formam a heteroestrutura. Em todos os cálculos reportados este aspecto foi desprezado, os autores consideram um único material, na maioria dos casos o GaN, para todos os parâmetros. Este será um dos aspectos a serem abordados neste trabalho, mostrando a importância e as modificações na estrutura de bandas quando se considera este fato [166].

Para os sistemas dopados tipo-p, os únicos cálculos efetuados são para estruturas wurtzita, como heterojunções de AlGaIn/GaN [99] ou poços quânticos [95] e super-redes [123] de AlGaIn/GaN. Todavia em alguns destes cálculos foi adotado o modelo de uma única banda para a estrutura da banda de valência [95, 99], e não existem até o momento cálculos efetuados para heteroestruturas de GaN/InGaIn. Nos nitretos, a massa efetiva do buraco pesado é grande, desta forma espera-se que os níveis ocupados sejam de buracos pesados. Entretanto, os estados de buracos leve e *split-off* influenciam na banda de buracos pesados, e não podem ser desprezados, uma vez que podem alterar o resultado final da estrutura de bandas [166, 168–170]. Quanto aos efeitos de muitos corpos, tais como troca e correlação também devem ser considerados em sistemas com 2DHG, pois podem modificar significativamente a banda de valência do sistema [168–171]. Iremos fazer todas estas considerações em nosso trabalho.

Neste trabalho desenvolvemos um método autoconsistente de cálculo da estrutura da banda de valência de heteroestruturas envolvendo diferentes materiais e dopadas tipo-p, dentro da teoria $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e do modelo 6×6 de LK, à partir de uma extensão do método já desenvolvido no grupo do LNMS para sistemas δ -doping em homoeestruturas [5–11]. A EME de multibandas generalizada é resolvida junto com a equação de Poisson para a densidade de cargas dos portadores na representação de ondas planas. Nos cálculos são incluídos efeitos de troca-correlação dentro do 2DHG, como já feito em estudos anteriores [8, 172, 173] e efeitos de tensão. O método é aplicado para calcular as estruturas de bandas de valência de poços quânticos e super-redes de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ e $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com diferentes perfis de dopagem tipo-p.

Como mencionado no início, as aplicações do método generalizado neste trabalho tiveram como enfoque principal os materiais nitretos. Porém, também serão apresen-

tados resultados da aplicação do método à heteroestruturas de outros compostos III-V, como poços quânticos e super-redes de AlGaAs/GaAs e GaAs/InGaAs. Mostramos o quanto é importante considerar a diferença das massas efetivas e efeitos de tensão dos materiais, principalmente nos sistemas que envolvem In. Na literatura existem alguns cálculos de poços quânticos e super-redes de materiais IV e III-V, dopados e não dopados, utilizando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Entre estes sistemas estão: InGaAs/InGaAsP [14], AlGaAs/GaAs [14–19], AlGaAs/InGaAs [20], GaAs/InGaP [19], InGaAs/InP [18, 21], Si/SiGe [22, 23], Ge/SiGe [24] e GaAs/InGaAs [174–176]. Todos estes sistemas são importantes na fabricação e desempenho de dispositivos semicondutores. Diversas aproximações são feitas nos cálculos mencionados, da mesma forma como descrito para os nitretos, algumas delas podendo alterar a estrutura de bandas de valência, mesmo quando desprezada a banda de *split-off* em alguns casos, pois a energia de desdobramento de *split-off* é alta na maioria dos arsenetos. Como mencionamos no início desta introdução, os únicos cálculos autoconsistentes mais completos foram realizados por Kemerink *et al.* num poço duplo assimétrico de AlGaAs/GaAs dopado tipo-p na barreira [12] e em múltiplos poços delta-dopados de AlGaAs/GaAs [13]. O modelo utilizado nestes cálculos é o 4×4 de LK, incluindo a não parabolicidade no plano $x - y$ (perpendicular à direção de crescimento) e efeitos de troca-correlação para o 2DHG.

O trabalho a ser apresentado encontra-se dividido da seguinte forma: O Capítulo 2 refere-se à descrição da abordagem teórica utilizada, onde é descrito o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dentro do modelo 6×6 de Luttinger-Kohn para homoestruturas. A seguir é mostrada a extensão do método para heteroestruturas não dopadas e dopadas, considerando a diferença dos parâmetros de Luttinger. Também são abordados neste capítulo os efeitos de tensão e sua inclusão no método. Este capítulo é completado por um apêndice (Apêndice A) mostrando a determinação do termo referente ao *strain* (deformação) da Hamiltoniana.

O Capítulo 3 mostra as aplicações do método para heteroestruturas cúbicas derivadas dos nitretos do grupo-III. Serão analisados em poços quânticos e super-redes de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ e $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ os efeitos da utilização de diferentes parâmetros de Luttinger, da inclusão da banda de *split-off* e efeitos de tensão. Apresentaremos resultados para sistemas dopados e não dopados, mostrando o comportamento das estruturas de bandas e perfis de potencial. Várias quantidades serão variadas, tais como, período da super-rede, concentração de aceitadores, larguras do poço e barreira, composição da liga x e descontinuidade das bandas de valência e bandas de condução. Desta forma analisaremos as condições necessárias para a existência do 2DHG, de grande interesse para os grupos experimentais que projetam as estruturas para os dispositivos. Dentro deste contexto também mostraremos a importância da inclusão dos efeitos de troca-correlação para uma descrição correta, realística, dos sistemas.

No Capítulo 4 apresentaremos os resultados da aplicação do método para heteroestruturas envolvendo arsenetos, AlGaAs/GaAs e GaAs/InGaAs. Serão abordados alguns sistemas já estudados, cujos resultados se encontram na literatura, os quais tomamos como testes. Serão mostrados estruturas de sub-bandas e minibandas de valência e perfis de potencial para heteroestruturas de poços quânticos e super-redes dos arsenetos mencionados com diferentes formas de dopagem tipo-p, modulada (na barreira), no poço, e delta-dopada. Mostraremos a importância dos efeitos da diferença dos parâmetros de Luttinger nestes sistemas, bem como da tensão e dos efeitos de troca-correlação. Além disso, apresentaremos resultados para um poço de AlGaAs/GaAs com dopagem tipo delta no centro do poço, mostrando que o método pode ser aplicado a qualquer tipo de dopagem.

No Capítulo 5 apresentaremos as comparações de nossos resultados teóricos para transições eletrônicas e espectros de luminescência com dados experimentais para poços quânticos de GaN/In_xGa_{1-x}N não dopados, variando a largura do poço e considerando as barreiras largas o suficiente para que o sistema esteja isolado. Analisaremos as transições eletrônicas e compararemos com o espectro de fotoluminescência recentemente obtido pelo grupo da Universidade de Paderborn, na Alemanha, e pelo grupo do LNMS no IFUSP. Discutiremos também as origens destas transições eletrônicas. Além disso, iremos efetuar comparações de resultados obtidos por nós para poços de GaAs/InGaAs com espectros de absorção, fornecidos na literatura, para transições intra-banda, bem como espectros de fotoluminescência. Este capítulo é completado por um apêndice (Apêndice B) mostrando a determinação da força do oscilador utilizada para o cálculo do espectro de fotoluminescência teórico.

No Capítulo 6 apresentaremos as conclusões e faremos as considerações finais, mostrando que o método desenvolvido pode ser aplicado a qualquer sistema, com qualquer configuração de potencial, envolvendo qualquer tipo de material e para outras direções de crescimento, além da $\langle 001 \rangle$. Também veremos que para descrevermos as propriedades das heteroestruturas, é necessário considerarmos diversos fatores, tais como a tensão, a inclusão de todas as bandas (buracos pesados, leves e de *split-off*), a diferença dos materiais (parâmetros de Luttinger) e os efeitos de troca-correlação para sistemas onde há cargas, e que não podem ser desprezados nos cálculos. Além disso também faremos previsões futuras sobre a aplicabilidade do método para outros sistemas, como, por exemplo, heteroestruturas crescidas em outras direções ($\langle n11 \rangle$) e aquelas envolvendo a fase wurtzita.

Capítulo 2

Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para Heteroestruturas no Espaço Recíproco-Autoconsistência

2.1 Introdução

Os primeiros cálculos de estrutura de bandas envolvendo o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ foram realizados por Kane [4] para cristais de Si e Ge, onde a interação *spin-órbita* é considerada na estrutura de bandas de valência. Mais tarde Kane [177] inclui a banda de condução, possibilitando tratar semicondutores com *gap* pequeno de forma mais realística. Todavia, a base para o trabalho de Kane foi a teoria desenvolvida previamente por Luttinger e Kohn [3], onde foi apresentada a equação da massa efetiva (EME) para estados da banda de valência e introduzido os chamados parâmetros de Luttinger. Estes parâmetros estão diretamente relacionados com as massas efetivas dos portadores. Desde então inúmeros trabalhos foram feitos utilizando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, para determinar a estrutura de bandas em diversos materiais [5–29, 166, 168–171, 178–184].

Neste trabalho utilizaremos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para estruturas *zincblende* no espaço recíproco, uma vez que trataremos de sistemas envolvendo nitretos cúbicos e sistemas derivados dos arsenetos.

Em trabalhos previamente desenvolvidos pelo grupo do LNMS do IFUSP o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ foi descrito com detalhes dentro dos modelos de Kane e de Luttinger-Kohn, para homoestruturas semicondutoras [5–11, 172, 173, 182, 183, 185]. Desta forma, iremos apresentar resumidamente o método para homoestruturas e apresentar a extensão do mesmo para heteroestruturas semicondutoras, onde consideraremos a diferença entre os parâmetros de Luttinger no poço e na barreira, efeitos de *spin-órbita* e de tensão. A seguir mostra-

remos a teoria $\vec{k} \cdot \vec{p}$ autoconsistente, dentro do modelo de Luttinger-Kohn, com o termo de energia cinética generalizado para a EME multibandas, para casos não tensionados e tensionados, e como os potenciais autoconsistentes são obtidos. Utilizaremos o modelo completo de Kane apenas na determinação teórica do espectro de fotoluminescência que será apresentada no Capítulo 5. Nos sistemas que estudaremos nos Capítulos 3 (nitretos) e 4 (arsenetos), a energia do *gap* é grande o suficiente para desprezarmos a banda de condução. Portanto utilizaremos o modelo 6×6 de Luttinger-Kohn para estes cálculos.

2.2 Hamiltoniana para uma Partícula

A Hamiltoniana de uma partícula H para uma heteroestrutura dopada tipo-p é dada por

$$H = H_0 + H_S + V_{HET} + V_A + V_H + V_{XC}, \quad (2.1)$$

onde H_0 é o termo de energia cinética descrito pela generalização da Hamiltoniana $\vec{k} \cdot \vec{p}$, $H_{\vec{k} \cdot \vec{p}}$ [5–8, 182, 183]; H_S é o termo de *strain* que surge devido ao descasamento dos parâmetros de rede entre as camadas da heteroestrutura; V_{HET} é o potencial quadrado de descontinuidade das bandas; V_H é o potencial de Hartree devido à distribuição de buracos livres, V_A é o potencial devido à distribuição de aceitadores ionizados e V_{XC} é o potencial de troca-correlação, obtido dentro da aproximação do funcional de densidade local (LDA) [7, 172]. Desta maneira podemos escrever a equação de Schrödinger da seguinte forma:

$$H\Psi_{\nu\vec{k}} = E\Psi_{\nu\vec{k}}, \quad (2.2)$$

onde ν é o índice da banda de energia ν e \vec{k} é o vetor de onda da primeira zona de Brillouin (ZB) da heteroestrutura. A função de onda $\Psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r}s | \nu\vec{k} \rangle$ obedece ao teorema de Bloch [184].

2.3 Equação da Massa Efetiva Multibandas

Assumiremos em nossos cálculos uma super-rede infinita de poços quadrados ao longo da direção $\langle 001 \rangle$ coincidente com o eixo z . Uma representação esquemática da super-rede é apresentada na Figura 2.1(a), onde d_1 é a largura da barreira e d_2 é a largura do poço. Na parte (b) da Figura 2.1, mostramos a primeira zona de Brillouin da super-rede, que descreveremos com maior detalhe adiante.

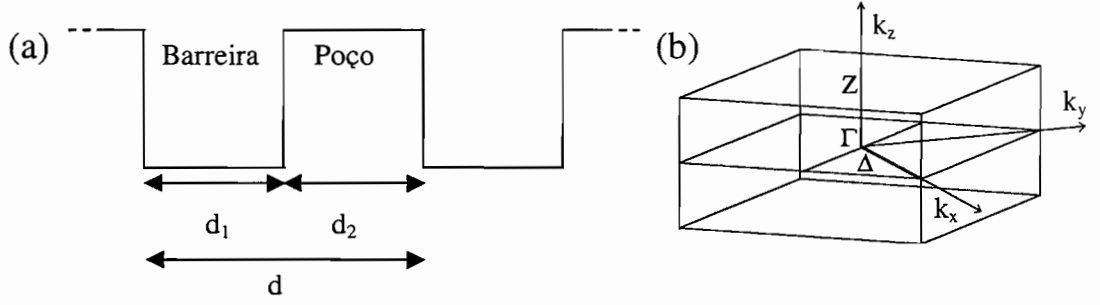


Figura 2.1: Representação esquemática (a) do período da super-rede de poços quânticos, onde d_1 é a largura da barreira e d_2 é a largura do poço e (b) da primeira zona de Brillouin (ZB) da super-rede de poços quânticos.

A EME multibandas na formulação de Luttinger-Kohn é representada em relação a um conjunto base de ondas planas [5–8,182,183] com vetores de onda $K = (2\pi/d)l$ (onde l é um inteiro e d é o período da super-rede) iguais aos vetores recíprocos da super-rede. As linhas e colunas da Hamiltoniana 6×6 de Luttinger-Kohn referem-se as autofunções de Bloch $|jm_j\vec{k}\rangle$ das bandas de buracos pesados, leves e *split-off*.

Dentro do modelo de Luttinger-Kohn para o material volumétrico (*bulk*) temos seis funções, quatro degeneradas no topo da banda de valência, buracos leves e pesados com simetria Γ_8 e indexados como $j = 3/2$, $m_j = 3/2; 1/2; -1/2; -3/2$ e duas funções degeneradas de buracos *split-off* com simetria Γ_7 , indexadas como $j = 1/2$, $m_j = 1/2; -1/2$. As funções de Luttinger-Kohn são dadas por

$$\langle \vec{r}s | jm_j\vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \langle \vec{r}s | jm_j \rangle, \quad (2.3)$$

onde s é a coordenada de spin e Ω é o volume da célula unitária do *bulk*. Levando em conta a periodicidade da super-rede, temos

$$\langle \vec{r}s | jm_j\vec{k}K \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\vec{k}+K\vec{e}_z)\vec{r}} \langle \vec{r}s | jm_j \rangle, \quad (2.4)$$

onde

$$\langle \vec{r}s | jm_j\vec{k}K \rangle \equiv \langle \vec{r}s | jm_j\vec{k} + K\vec{e}_z \rangle. \quad (2.5)$$

Nesta base podemos escrever as autofunções da super-rede como

$$\langle \vec{r}s \mid \nu \vec{k} \rangle = \sum_{jm_j K} \langle jm_j \vec{k} K \mid \nu \vec{k} \rangle \langle \vec{r}s \mid jm_j \vec{k} K \rangle. \quad (2.6)$$

A equação (2.2) toma a seguinte forma

$$\begin{aligned} \sum_{j'm'_j K'} \langle jm_j \vec{k} K \mid H_0 + H_S + V_{HET} + V_A + V_H + V_{XC} \mid j'm'_j \vec{k} K' \rangle \langle j'm'_j \vec{k} K' \mid \nu \vec{k} \rangle \\ = E(\vec{k}) \langle jm_j \vec{k} K \mid \nu \vec{k} \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

O potencial de Coulomb, dado pela contribuição de V_H e V_A , é obtido a partir da solução da equação de Poisson

$$\nabla^2 V_C(\vec{r}) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} [N_A(\vec{r}) + p(\vec{r})], \quad (2.8)$$

onde ϵ é a constante dielétrica, $p(\vec{r})$ é a distribuição de buracos livres e $N_A(\vec{r})$ é a distribuição de aceitadores ionizados.

Como nos propomos neste trabalho a estudar super-redes e poços quânticos de heteroestruturas de compostos semicondutores na estrutura *zincblende*, crescidos na direção $\langle 001 \rangle$, temos uma rede de Bravais tetragonal com vetores primitivos \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 definidos como:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{e}_x - \hat{e}_y), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{e}_x + \hat{e}_y), \quad \vec{a}_3 = d\hat{e}_z, \quad (2.9)$$

onde \hat{e}_x , \hat{e}_y e \hat{e}_z são os versores na direção dos eixos cúbicos, a é o parâmetro de rede do cristal e $d = (1/2)Na$ é o período da super-rede na direção de crescimento. O vetores primitivos da super-rede no espaço recíproco são:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{e}_x - \hat{e}_y), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{e}_x + \hat{e}_y), \quad \vec{b}_3 = \left(\frac{4\pi}{Na}\right)\hat{e}_z. \quad (2.10)$$

Como mencionamos anteriormente, estamos considerando uma super-rede infinita. Utilizaremos condições de contorno apropriadas para que possamos trabalhar numa região de periodicidade finita. Os vetores que definem esta região são $G_{\parallel}\vec{a}_1$, $G_{\parallel}\vec{a}_2$ e $G_{\perp}\vec{a}_3$, onde G_{\parallel} e G_{\perp} são inteiros. Uma região de periodicidade contém $G_{\parallel}^2 G_{\perp}$ células unitárias da super-rede e $G_{\parallel}^2 G_{\perp} N$ células unitárias da estrutura *zincblende*, cada uma com volume $\Omega_0 = a^3/4$. O volume da região de periodicidade é $G_{\parallel}^2 G_{\perp} N \Omega_0 = G_{\parallel}^2 G_{\perp} da^2/2$. Devido

às condições periódicas de contorno obtemos os seguintes vetores \vec{k} (veja detalhes nas Refs. [5, 7, 183]):

$$\vec{k} = \frac{k_1}{G_{\parallel}} \vec{b}_1 + \frac{k_2}{G_{\parallel}} \vec{b}_2 + \frac{k_3}{G_{\perp}} \vec{b}_3 \quad , \quad (2.11)$$

onde k_1 , k_2 e k_3 são números inteiros.

A primeira zona de Brillouin correspondente é mostrada na Figura 2.1(b).

2.4 Termo de Energia Cinética Generalizado

Para homoestruturas, a matriz de energia cinética é diagonal com relação a K, K' e seus elementos diagonais são dados pela Hamiltoniana de Luttinger-Kohn com autovetor $|\vec{k} + K\vec{e}_z\rangle$. Neste caso, os parâmetros envolvidos no operador de energia cinética são constantes. Para uma heteroestrutura, quando temos camadas de diferentes materiais isto não é verdadeiro. Se a EME de multibandas é resolvida no espaço direto, estas diferenças serão consideradas nas condições de contorno para as várias componentes da função envelope e sua primeira derivada. Estas condições de contorno são bastante discutidas na literatura devido a sua complexidade [186]. Em nosso método, onde a EME é representada em termos de ondas planas, a não homogeneidade dos parâmetros do operador de energia cinética não é expressa por suas condições de contorno, mas por elementos fora da diagonal na matriz de energia cinética com relação a K, K' .

Para o modelo 6×6 de Luttinger-Kohn o seguinte operador de energia cinética, H_0 , foi proposto e usado em muitos cálculos [184]:

$$\begin{pmatrix} \hat{Q}(z) & \hat{S}(z) & \hat{R}(z) & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}(z) & -i\sqrt{2}\hat{R}(z) \\ \hat{S}^*(z) & \hat{T}(z) & 0 & \hat{R}(z) & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}(z) \\ \hat{R}^*(z) & 0 & \hat{T}(z) & -\hat{S}(z) & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^*(z) & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) \\ 0 & \hat{R}^*(z) & -\hat{S}^*(z) & \hat{Q}(z) & -i\sqrt{2}\hat{R}^*(z) & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^*(z) \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^*(z) & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}(z) & i\sqrt{2}\hat{R}(z) & \frac{1}{2}(\hat{Q}(z) + \hat{T}(z)) - \Delta(z) & 0 \\ i\sqrt{2}\hat{R}^*(z) & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^*(z) & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q}(z) - \hat{T}(z)) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}(z) & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

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

$$\hat{Q} = -\frac{1}{2m_0} [\hbar^2 (\gamma_1(z) + \gamma_2(z)) (k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z)) \hat{p}_z \hat{p}_z] \quad (2.13)$$

$$\hat{T} = -\frac{1}{2m_0} [\hbar^2 (\gamma_1(z) - \gamma_2(z)) (k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1(z) + 2\gamma_2(z)) \hat{p}_z \hat{p}_z] \quad (2.14)$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2m_0} 2i\sqrt{3} (k_x - ik_y) \gamma_3(z) \hat{p}_z \quad (2.15)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} [\gamma_2(z)(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3(z)k_x k_y] \quad (2.16)$$

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 termos acima da matriz como podemos observar dependem de z , pois dependem (assumem valores distintos) da região aonde estamos descrevendo a heteroestrutura. Desta forma, utilizaremos um parâmetro de massa efetiva $f(z)$ ao longo de uma super-rede de período d composta de n materiais. Este parâmetro $f(z)$ assume um certo valor para uma determinada região do sistema, e que pode ser expresso como:

$$f(z) = \begin{cases} f_1 & d_0 \leq z \leq d_1 \\ f_2 & d_1 \leq z \leq d_2 \\ f_3 & d_2 \leq z \leq d_3 \\ \vdots & \\ f_n & d_{n-1} \leq z \leq d_n \end{cases} \quad \text{onde : } \begin{cases} d_0 = -\frac{d}{2} \\ d_n = \frac{d}{2} \end{cases} \quad (2.17)$$

Para descrevermos o termo de energia cinética, precisamos expressar o operador momento $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ em termos das funções de ondas planas,

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \Rightarrow \begin{cases} \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \\ \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \end{cases} \quad (2.18)$$

Como ambos operadores, os parâmetros de Luttinger e o momento variam ao longo da direção de crescimento, é necessário determinar suas relações de comutação e simetrizar os operadores. Para transformar um operador de forma geral $f(z)\hat{p}_j\hat{p}_l$ em um operador hermiteano, devemos substituí-lo de acordo com a relação

$$f(z)\hat{p}_j\hat{p}_l \rightarrow \frac{1}{2} \left[\hat{p}_j^\dagger f(z)\hat{p}_l + \hat{p}_l^\dagger f(z)\hat{p}_j \right], \quad (2.19)$$

onde p_j é a componente j do operador momento definido acima na equação (2.18).

Para $j \neq z$ e $l \neq z$ a substituição a ser feita é simples pois $\partial/\partial j$ e $\partial/\partial l$ comutam com $f(z)$. Logo,

$$f(z) \Rightarrow f(z). \quad (2.20)$$

Para $j \neq z$ e $l = z$, a parte não trivial da substituição é dada por,

$$f(z)\hat{p}_z \Rightarrow \frac{1}{2} [f(z)\hat{p}_z + \hat{p}_z^\dagger f(z)]. \quad (2.21)$$

Para $j = 3$ e $l = 3$ temos que,

$$f(z)\hat{p}_z\hat{p}_z \Rightarrow \hat{p}_z^\dagger f(z)\hat{p}_z. \quad (2.22)$$

Assim vamos determinar os elementos da matriz (2.12) dados pelas equações (2.13)-(2.16), porém antes faremos uma simplificação de notação. Vamos considerar

$$\langle jm_j \vec{k} K | H_0 | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \langle K | H_0 | K' \rangle, \quad (2.23)$$

onde $K \equiv K + k_z$ e $K' \equiv K' + k_z$. Desta forma temos para os operadores simetrizados as seguintes relações,

$$\langle K | f(z) | K' \rangle = \frac{1}{d} \left[\int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{iK'z} dz \right], \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \langle K | \frac{1}{2} [p_z^\dagger f(z) + f(z)p_z] | K' \rangle &= \frac{1}{d} \left\{ \int_0^d e^{-iKz} \frac{1}{2} [p_z^\dagger f(z) + f(z)p_z] e^{iK'z} dz \right\} \\ &= \frac{\hbar(K' + K)}{2d} \int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{iK'z} dz \end{aligned} \quad (2.25)$$

e

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K' \rangle = \frac{1}{d} \int_0^d e^{-iKz} p_z^\dagger f(z) p_z e^{iK'z} dz = \frac{\hbar^2}{d} K K' \int_0^d e^{-iKz} f(z) e^{iK'z} dz, \quad (2.26)$$

pois $|K\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{iKz}$.

Examinando estas integrais, observamos dois casos distintos: quando os elementos da matriz têm o mesmo K e quando eles têm diferentes K 's. As expressões (2.24)-(2.26) dependem do valor da integral $\int_0^d f(z) e^{i(K-K')z} dz$, que deve ser determinado para os dois casos acima. Para $K' = K$, temos uma soma simples dada por

$$\int_0^d f(z) e^{i(K-K)z} dz = \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}). \quad (2.27)$$

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

$$\int_0^d f(z) e^{i(K'-K)z} dz = -i \frac{1}{(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right]. \quad (2.28)$$

Aplicando as expressões (2.27) e (2.28) para as equações (2.24), (2.25) e (2.26), temos para $K' = K$

$$\langle K | f(z) | K \rangle = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}) \quad (2.29)$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [p_z f(z) + f(z) p_z] | K \rangle = \frac{\hbar K}{d} \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}) \quad (2.30)$$

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K \rangle = \frac{\hbar^2 K^2}{d} \sum_{i=1}^n f_i (z_i - z_{i-1}), \quad (2.31)$$

e para $K' \neq K$

$$\langle K | f(z) | K' \rangle = -i \frac{1}{d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (2.32)$$

$$\langle K | \frac{1}{2} [p_z^\dagger f(z) + f(z) p_z] | K' \rangle = -i \frac{\hbar (K + K')}{2d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (2.33)$$

$$\langle K | p_z^\dagger f(z) p_z | K' \rangle = -i \frac{\hbar^2}{d(K' - K)} \left[(f_n - f_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (f_i - f_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right]. \quad (2.34)$$

Substituindo os operadores na matriz de energia cinética (H_0) na expressão (2.12), obtemos

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

$$\begin{pmatrix} \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{2}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} \\ \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} \\ \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S} & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) \\ 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2}\hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} & i\sqrt{2}\hat{R} & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \hat{\Delta} & 0 \\ i\sqrt{2}\hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \hat{\Delta} \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

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

$$\hat{Q} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n (\gamma_1^i + \gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 + k_y^2) + K^2 \sum_{i=1}^n (\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right] \quad (2.36)$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n (\gamma_1^i - \gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 + k_y^2) + K^2 \sum_{i=1}^n (\gamma_1^i + 2\gamma_2^i) (z_i - z_{i-1}) \right] \quad (2.37)$$

$$\hat{S} = i \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\sqrt{3}}{d} (k_x - ik_y) K \sum_{i=1}^n \gamma_3^i (z_i - z_{i-1}) \quad (2.38)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\sqrt{3}}{d} \left[\left(\sum_{i=1}^n \gamma_2^i (z_i - z_{i-1}) \right) (k_x^2 - k_y^2) - 2i \left(\sum_{i=1}^n \gamma_3^i (z_i - z_{i-1}) \right) k_x k_y \right] \quad (2.39)$$

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n \Delta_i (z_i - z_{i-1}) \quad (2.40)$$

para $K' = K$, e

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{1}{d} \times \\ &\left\{ \left[(\gamma_1^n + \gamma_2^n) - (\gamma_1^1 + \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} + \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ &\left. + \left[(\gamma_1^n - 2\gamma_2^n) - (\gamma_1^1 - 2\gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] K K' \right\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{1}{d} \times \\ &\left\{ \left[(\gamma_1^n - \gamma_2^n) - (\gamma_1^1 - \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i - \gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} - \gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ &\left. + \left[(\gamma_1^n + 2\gamma_2^n) - (\gamma_1^1 + 2\gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} [(\gamma_1^i + 2\gamma_2^i) - (\gamma_1^{i+1} + 2\gamma_2^{i+1})] e^{i(K'-K)z_i} \right] K K' \right\} \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\sqrt{3}}{d} (k_x - ik_y) \frac{(K' + K)}{(K' - K)} \left[(\gamma_3^n - \gamma_3^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \frac{i\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{(K' - K)} \frac{\sqrt{3}}{d} \times \left\{ \left[(\gamma_2^n - \gamma_2^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_2^i - \gamma_2^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] (k_x^2 - k_y^2) - \right. \\ &\left. - 2i \left[(\gamma_3^n - \gamma_3^1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\gamma_3^i - \gamma_3^{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] k_x k_y \right\} \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\hat{\Delta} = -i \frac{1}{d} \frac{1}{(K' - K)} \left[(\Delta_n - \Delta_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (\Delta_i - \Delta_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (2.45)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0 d} \left\{ [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) + (\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] (k_x^2 + k_y^2) + \right. \\ &\left. + K^2 [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) - 2(\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] \right\} \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} = & -\frac{\hbar^2}{2m_0d} \{[(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) - (\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)] (k_x^2 + k_y^2) + \\ & + K^2 [(\gamma_1^1 d_1 + \gamma_1^2 d_2) + 2(\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2)]\} \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\hat{S} = -i\frac{\hbar^2}{2m_0d} 2\sqrt{3}K (\gamma_3^1 d_1 + \gamma_3^2 d_2) (k_x - ik_y) \quad (2.48)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2}{2m_0d} \sqrt{3} [(\gamma_2^1 d_1 + \gamma_2^2 d_2) (k_x^2 - k_y^2) - 2i (\gamma_3^1 d_1 + \gamma_3^2 d_2) k_x k_y] \quad (2.49)$$

$$\Delta(z) = \frac{1}{d} (\Delta_1 d_1 + \Delta_2 d_2) \quad (2.50)$$

onde d_1 e d_2 são as larguras da barreira e do poço, respectivamente (ver Figura 2.1). Para $K' = K$ e,

$$\begin{aligned} \hat{Q} = & \frac{-i\hbar^2}{2m_0(K - K')d} [1 - e^{i(K-K')d_1}] [(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) + (\gamma_2^2 - \gamma_2^1)] (k_x^2 + k_y^2) + \\ & + KK' [(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) - 2(\gamma_2^2 - \gamma_2^1)] \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \hat{T} = & \frac{-i\hbar^2}{2m_0(K - K')d} [1 - e^{i(K-K')d_1}] [(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) - (\gamma_2^2 - \gamma_2^1)] (k_x^2 + k_y^2) + \\ & + KK' [(\gamma_1^2 - \gamma_1^1) + 2(\gamma_2^2 - \gamma_2^1)] \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$\hat{S} = -\frac{\hbar^2\sqrt{3}}{2m_0(K - K')d} [1 - e^{i(K-K')d_1}] (\gamma_3^2 - \gamma_3^1) (k_x - ik_y) (K + K') \quad (2.53)$$

$$\hat{R} = -\frac{\hbar^2 i}{2m_0(K - K')d} \sqrt{3} [1 - e^{i(K-K')d_1}] [(\gamma_2^2 - \gamma_2^1) (k_x^2 - k_y^2) - 2i (\gamma_3^2 - \gamma_3^1) k_x k_y] \quad (2.54)$$

$$\Delta(z) = -\frac{i}{(K - K')d} (\Delta_2 - \Delta_1) [1 - e^{i(K-K')d_1}] \quad (2.55)$$

para $K' \neq K$.

Determinada a Hamiltoniana cinética H_0 , o próximo passo é determinar os outros termos da matriz (2.7).

2.5 Potencial da Heteroestrutura

Para as heteroestruturas devemos levar em conta o potencial quadrado gerado pela diferença entre as energias dos *gaps* dos materiais. Desta forma podemos representar a descontinuidade da banda de valência como:

$$\langle jm_j \vec{k} K | V_{HET} | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \langle K | V_{HET} | K' \rangle \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j} \quad (2.56)$$

onde, dentro da teoria da massa efetiva, os elementos fora da diagonal com relação a $jm_j, j'm'_j$ são desprezados [184]. O termo $\langle K | V_{HET} | K' \rangle$ são os coeficientes de Fourier de V_{HET} ao longo da direção de crescimento z .

2.6 Potencial de Coulomb no Espaço Recíproco

Em nosso método, nós representamos os elementos da matriz de Coulomb no espaço recíproco como

$$\langle jm_j \vec{k} K | V_C | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \langle K | V_C | K' \rangle \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j}. \quad (2.57)$$

Lembrando que $V_C(z) = V_A(z) + V_H(z)$, então nesta representação a equação de Poisson é dada por

$$\langle jm_j K | V_C | j' m'_j K' \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} \frac{1}{|K - K'|^2} \langle K | p(z) - N_A(z) | K' \rangle, \quad (2.58)$$

onde $\langle K | N_A | K' \rangle$ são os coeficientes de Fourier da distribuição de aceitadores ionizados, $N_A(z)$. Para simplificar assumimos que o potencial de Coulomb tem elementos fora da diagonal da matriz KK' , mas se anula para estados de Bloch com jm_j diferentes. A justificativa desta aproximação vem do fato de supormos que o potencial de Coulomb é suave na escala atômica. Para obter agora os coeficientes de Fourier da distribuição de buracos, $\langle K | p(z) | K' \rangle$, inicialmente escreveremos a distribuição de buracos em termos das componentes $\langle rs | \nu \vec{k} \rangle$, como segue

$$p(\vec{r}) = \sum_s \sum_{\substack{\text{Estados} \\ \text{vazios}} | \nu \vec{k} \rangle} \left| \langle \vec{r} s | \nu \vec{k} \rangle \right|^2. \quad (2.59)$$

A segunda soma acima é feita sobre os estados vazios, ou seja, estados que perderam carga para átomos aceitadores. Vamos reescrever a densidade de probabilidade dos portadores, $|\langle \vec{r}s | \nu\vec{k} \rangle|^2$, na base das funções dada na equação (2.6):

$$\begin{aligned} |\langle \vec{r}s | \nu\vec{k} \rangle|^2 &= \sqrt{\Omega} \sum_{j'm'_j} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j\vec{k}K'' | \nu\vec{k} \rangle \langle \nu\vec{k} | j'm'_j\vec{k}K''' \rangle \\ &\times \langle z | K'' - K''' \rangle \langle jm_j\vec{k} | \vec{r}s \rangle \langle \vec{r}s | j'm'_j\vec{k} \rangle . \end{aligned} \quad (2.60)$$

Se tomarmos a média dessa expressão na célula unitária do material volumétrico e somarmos sobre as diferentes coordenadas de *spin*, removeremos as flutuações espaciais na escala atômica de comprimentos. A média é diagonal em m_j, m'_j, j, j' , sendo os elementos diagonais dados por:

$$\sum_s |\langle \vec{r}s | \nu\vec{k} \rangle|^2 = \sqrt{\Omega} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j\vec{k}K'' | \nu\vec{k} \rangle \langle \nu\vec{k} | jm_j\vec{k}K''' \rangle \langle z | K'' - K''' \rangle . \quad (2.61)$$

Logo a distribuição de cargas dada na equação (2.59) ao longo da direção z pode ser escrita como:

$$p(z) = \sqrt{\Omega} \sum_{\substack{|\nu\vec{k}\rangle \\ \text{vazios}}} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j\vec{k}K'' | \nu\vec{k} \rangle \langle \nu\vec{k} | jm_j\vec{k}K''' \rangle \langle z | K'' - K''' \rangle . \quad (2.62)$$

Na representação de ondas planas escrevemos:

$$\langle K | p | K' \rangle = \frac{1}{\Omega} P(K - K') \quad (2.63)$$

onde,

$$P(K) = \sum_{\substack{\nu\vec{k} \\ \text{vazios}}} \sum_{jm_j} \sum_{K''} \langle jm_j\vec{k}K'' | \nu\vec{k} \rangle \langle \nu\vec{k} | jm_j\vec{k}K'' - K \rangle . \quad (2.64)$$

Devido à neutralidade da carga, a carga total dentro da célula unitária deve se anular. Portanto devemos ter

$$\langle K | N_A | K \rangle - \langle K | p | K \rangle = 0. \quad (2.65)$$

Assumiremos na equação de Poisson um único valor para a constante dielétrica ϵ ao longo de toda a heteroestrutura (super-rede). A justificativa para isto vem do fato de que nos sistemas que estudamos neste trabalho, especialmente os nitretos, não é esperado que uma mudança na constante dielétrica afete de maneira significativa os estados de energia e os perfis de potencial. Já que as massas efetivas de buracos nos nitretos são grandes, apenas uma pequena quantidade de carga é encontrada penetrando as regiões de barreiras de potencial. Para as heteroestruturas derivadas dos arsenetos, por outro lado, as constantes dielétricas das regiões de poço e barreira diferem muito pouco, menos do que 10% e portanto a mesma aproximação também pode ser usada [187].

2.7 Potencial de Troca-Correlação

Descreveremos aqui o potencial de troca-correlação envolvendo os três tipos de buracos, leves, pesados e de *split-off*, no qual todas as bandas associadas a estes portadores estão acopladas. O modelo apresentado aqui foi desenvolvido no grupo e aplicado com sucesso ao gás de buracos presente em heteroestruturas delta-dopadas tipo-p em Silício [8, 9, 11, 182] e GaAs [5, 7, 172]. A expressão do potencial de troca-correlação para um gás de buracos livres foi escrita generalizando a expressão para um gás de elétrons livres e dependerá das ocupações para os gases de buracos pesados, p_{hh} , leves, p_{lh} , e de *split-off*, p_{so} . A densidade de estados para cada portador é dada por:

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}(E)_{hh} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{\tilde{m}_{hh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \\ \mathfrak{D}(E)_{lh} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{\tilde{m}_{lh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \\ \mathfrak{D}(E)_{so} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{\tilde{m}_{so}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - \Delta} \end{aligned} \quad (2.66)$$

onde \tilde{m}_{hh} , \tilde{m}_{lh} e \tilde{m}_{so} são as massas isotrópicas do buraco pesado, leve e de *split-off*, respectivamente. Assumiremos aqui que a não parabolicidade das bandas, isto é, o efeito de “entortamento” (*warping*) das bandas não afetará a interação de troca-correlação consideravelmente, logo isto justifica tomarmos as massas isotrópicas ao invés das massas na direção $\langle 001 \rangle$ nas expressões acima. A seguir integraremos estas densidades de estados até o limite do potencial químico local $\mu(z)$ e obtemos:

$$\begin{aligned}
 p_{hh} &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{hh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \mu(z)^{\frac{3}{2}} \\
 p_{lh} &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{lh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \mu(z)^{\frac{3}{2}} \\
 p_{so} &= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{so}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (\mu(z) - \Delta)^{\frac{3}{2}} \theta(\mu(z) - \Delta)
 \end{aligned} \tag{2.67}$$

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

$$p(z) = p_{hh}(z) + p_{lh}(z) + p_{so}(z). \tag{2.68}$$

Se $\mu(z)$ for menor do que Δ , não haverá ocupação de buracos de *split-off* e $p(z)$ se reduz a:

$$p(z) = p_{hh}(z) + p_{lh}(z), \tag{2.69}$$

ou seja,

$$p(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right) \mu(z)^{\frac{3}{2}}. \tag{2.70}$$

Caso contrário, temos:

$$p(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right) \mu(z)^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{so}^{\frac{3}{2}} (\mu(z) - \Delta)^{\frac{3}{2}} \right]. \tag{2.71}$$

Ainda para o caso em que $\mu(z) < \Delta$ temos as seguintes relações:

$$\begin{aligned}
 p_{hh} &= \frac{\bar{m}_{hh}}{\bar{m}_{hh}^{3/2} + \bar{m}_{lh}^{3/2}} p(z)^{3/2} \quad , \\
 p_{lh} &= \frac{\bar{m}_{lh}}{\bar{m}_{hh}^{3/2} + \bar{m}_{lh}^{3/2}} p(z)^{3/2} \quad .
 \end{aligned} \tag{2.72}$$

Para o caso em que $\mu(z) > \Delta$ não há solução analítica para $\mu(z)$ e para as ocupações de buracos. Se assumirmos que $p_{so}(z)$ é muito menor do que a soma de $p_{hh}(z)$ e $p_{lh}(z)$, a expressão (2.71) pode ser resolvida aproximadamente como:

$$\mu(z) = \frac{(3\pi)^{\frac{2}{3}}}{2} \hbar^2 \left[\left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}} (p(z) - p_{so}^0)^{\frac{2}{3}} \right], \quad (2.73)$$

onde

$$p_{so}^0(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2\bar{m}_{so}}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{2} \hbar^2 \left(\bar{m}_{hh}^{\frac{3}{2}} + \bar{m}_{lh}^{\frac{3}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}} p(z)^{\frac{2}{3}} - \Delta \right] \quad (2.74)$$

é a população de buracos de *split-off*. Adiantamos, neste ponto, que embora a banda de buracos leves esteja acoplada à banda de buracos de *split-off* no caso dos nitretos do grupo-III, a aproximação assumida acima para a expressão (2.73) é válida, uma vez que não há ocupação de bandas de buracos leves e de *split-off*.

O próximo passo é determinar o potencial de troca-correlação para buracos. Para um gás homogêneo de elétrons de massa efetiva m^* (em função de m_0 , massa do elétron), com densidade n , num material de constante dielétrica ε , o potencial de troca-correlação, proposto por Hedin e Lundqvist [188], é descrito da seguinte forma:

$$V_{XC} = -\frac{e^2}{2\varepsilon a_B^*} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s} \right) - \frac{e^2}{2\varepsilon a_B^*} \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s} \right) 0,0368 \ln \left(1 + \frac{21}{r_s} \right), \quad (2.75)$$

onde a_B^* , representa o raio de Bohr efetivo:

$$a_B^* = \varepsilon(m_0/m^*)a_B, \quad (2.76)$$

com a_B , o raio de Bohr,

$$\alpha = (4/9\pi)^{\frac{1}{3}} \quad (2.77)$$

e r_s o raio de blindagem, dado por:

$$r_s^{-1} = a_B^* \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) n \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (2.78)$$

O primeiro termo da equação (2.75) está relacionado com a troca e o segundo (que envolve uma função logarítmica) com a correlação Coulombiana.

Vemos no entanto que esta expressão para o potencial de troca-correlação só será válida para sistemas que possuam somente um tipo de portador, logo não se aplica a um

sistema como um gás de buracos, já que este envolve três tipos de portadores: buracos leves, pesados e *split-off*. Analisando cada termo em (2.75), notamos que o primeiro termo, o termo de troca, ocorre somente para portadores de mesmo tipo que interagem entre si. O segundo termo, a correlação, não distingue o tipo de portador. A conclusão disto é que podemos escrever o potencial de troca-correlação para buracos leves, pesados e de *split-off* separadamente. Dessa forma, teremos o raio de Bohr efetivo distinto para cada portador, e teremos raios de blindagem diferentes para o termo de troca e para o termo de correlação, os quais são também distintos para cada tipo de portador. Assim a equação (2.75) pode ser reescrita como:

$$V_{XC}^{hh} = -\frac{e^2}{2\epsilon a_B^{*hh}} \left(\frac{2}{\pi \alpha r_s^{hh}} \right) - \frac{e^2}{2\epsilon a_B^{*hh}} \left(\frac{2}{\pi \alpha} \right) 0.0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{hh}} \right) \quad (2.79)$$

$$V_{XC}^{lh} = -\frac{e^2}{2\epsilon a_B^{*lh}} \left(\frac{2}{\pi \alpha r_s^{lh}} \right) - \frac{e^2}{2\epsilon a_B^{*lh}} \left(\frac{2}{\pi \alpha} \right) 0.0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{lh}} \right) \quad (2.80)$$

$$V_{XC}^{so} = -\frac{e^2}{2\epsilon a_B^{*so}} \left(\frac{2}{\pi \alpha r_s^{so}} \right) - \frac{e^2}{2\epsilon a_B^{*so}} \left(\frac{2}{\pi \alpha} \right) 0.0368 \ln \left(1 + \frac{21}{R_s^{so}} \right) \quad (2.81)$$

onde:

$$a_B^{*q} = \epsilon \left(\frac{m_0}{m_q^*} \right) a_B^q \quad , \quad (2.82)$$

$$r_s^q = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^{*q})^3 p_q \right]^{-\frac{1}{3}} \quad , \quad (2.83)$$

$$R_s^q = \left[\left(\frac{4\pi}{3} \right) (a_B^{*q})^3 p(z) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad , \quad (2.84)$$

com $q = hh, lh, so$ e p_q e p dados pelas expressões (2.70)-(2.72) e (2.74). Desta maneira, podemos escrever a matriz para V_{XC} em relação a base $|jm_j\vec{k}\rangle$ como (ver detalhes da determinação desta matriz nas Refs. [5, 7]):

$$\langle jm_j\vec{k} | V_{XC} | j'm'_j\vec{k}' \rangle = \begin{pmatrix} Q_{XC} & S_{XC} & R_{XC} & 0 & 0 & 0 \\ S_{XC}^* & T_{XC} & 0 & R_{XC} & 0 & 0 \\ R_{XC}^* & 0 & T_{XC} & -S_{XC} & 0 & 0 \\ 0 & R_{XC}^* & -S_{XC}^* & Q_{XC} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{XC}^{so} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{XC}^{so} \end{pmatrix} \quad , \quad (2.85)$$

onde

$$Q_{XC} = \frac{1}{4} [V_{XC}^{hh} + 3V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + V_{XC}^{hh} \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \quad (2.86)$$

$$T_{XC} = \frac{1}{4} [3V_{XC}^{lh} + V_{XC}^{hh}] \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + V_{XC}^{lh} \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \quad (2.87)$$

$$R_{XC} = -\frac{\sqrt{3}}{4} [V_{XC}^{hh} - V_{XC}^{lh}] \left(\frac{k_x - ik_y}{k} \right)^2, \quad (2.88)$$

$$S_{XC} = i\frac{\sqrt{3}}{4} [V_{XC}^{hh} - V_{XC}^{lh}] \left(\frac{(k_x - ik_y) k_z}{k^2} \right), \quad (2.89)$$

$$Q_{XC}^{so} = V_{XC}^{so}. \quad (2.90)$$

A matriz (2.85) é diagonal se assumimos valores iguais para V_{XC}^{hh} e V_{XC}^{lh} . Porém estes potenciais diferem bastante devido ao fato de que as densidades de buracos leves e pesados são diferentes. Ainda observamos que esta matriz é aplicada a um gás de buracos homogêneo da banda de valência Γ_8 . O caráter não homogêneo do gás de buracos é introduzido considerando-se uma dependência em z nos termos da matriz (2.85), que passa a ser representada por $\langle jm_j \vec{k} K | V_{XC} | j' m'_j \vec{k} K' \rangle$ no espaço recíproco, bem como seus termos: $\langle K | Q_{XC} | K' \rangle$, $\langle K | S_{XC} | K' \rangle$, $\langle K | R_{XC} | K' \rangle$ e $\langle K | T_{XC} | K' \rangle$. Além disso, a matriz é tomada como sendo diagonal para buracos de *split-off*, pois os elementos fora da diagonal são pequenos e podem ser desprezados. Dessa forma:

$$\langle jm_j \vec{k} K | V_{XC} | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \begin{pmatrix} \langle K | Q_{XC} | K' \rangle & \langle K | S_{XC} | K' \rangle & \langle K | R_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 & 0 \\ \langle K | S_{XC} | K' \rangle^* & \langle K | T_{XC} | K' \rangle & 0 & \langle K | Q_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 \\ \langle K | R_{XC} | K' \rangle^* & 0 & \langle K | T_{XC} | K' \rangle & -\langle K | S_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle K | R_{XC} | K' \rangle^* & -\langle K | S_{XC} | K' \rangle^* & \langle K | Q_{XC} | K' \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle K | Q_{XC}^{so} | K' \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \langle K | Q_{XC}^{so} | K' \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle K | Q_{XC} | K' \rangle &= \frac{1}{4} [\langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle + 3 \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle] \times \\ &\times \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + \langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \end{aligned} \quad (2.92)$$

$$\begin{aligned} \langle K | T_{XC} | K' \rangle &= \frac{1}{4} [3 \langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle + \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle] \times \\ &\times \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{k^2} \right) + \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle \left(\frac{k_z}{k} \right)^2, \end{aligned} \quad (2.93)$$

$$\langle K | R_{XC} | K' \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{4} [\langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle - \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle] \left(\frac{k_x - ik_y}{k} \right)^2, \quad (2.94)$$

$$\langle K | S_{XC} | K' \rangle = i\frac{\sqrt{3}}{4} [\langle K | V_{XC}^{hh} | K' \rangle - \langle K | V_{XC}^{lh} | K' \rangle] \left(\frac{(k_x - ik_y)k_z}{k^2} \right), \quad (2.95)$$

$$\langle K | Q_{XC}^{so} | K' \rangle = \langle K | V_{XC}^{so} | K' \rangle, \quad (2.96)$$

com V_{XC}^q dados pelas expressões (2.79)-(2.81).

Com a determinação da matriz de troca-correlação para um gás de buracos não homogêneo e que inclui os três tipos de portadores, falta apenas determinar o termo referente ao *strain*, que será apresentado a seguir. Cabe ressaltar aqui que os efeitos de tensão são interessantes, principalmente em estruturas onde existe mais de uma fase, os nitretos. Para tal, mostraremos em detalhes o papel da tensão nas estruturas de bandas e determinaremos a matriz de *strain*.

2.8 Estudo da Tensão

Por várias décadas, foram realizados estudos do papel da tensão nas propriedades eletrônicas e ópticas dos semicondutores [189–192]. Estes estudos são extremamente importantes no desenvolvimento de uma compreensão melhor da estrutura de bandas de semicondutores.

Quando crescemos uma heteroestrutura semicondutora ocorre o descasamento (*lattice mismatch*) dos parâmetros de rede. Os parâmetros de rede dos materiais tentam se igualar como é mostrado esquematicamente na Figura 2.2. Isto originará uma força de

tensionamento mecânica, causando uma deformação ou *strain* (veja Figura 2.3). O efeito da tensão será mais ou menos forte conforme o descasamento dos parâmetros de rede $\frac{\delta a}{a}$, que pode ser definido como:

$$\frac{\delta a}{a} = \frac{a_2 - a_1}{a_1} \quad (2.97)$$

onde a_1 e a_2 são os parâmetros de rede do material 1 e 2, respectivamente. Se δa for menor que 0,1% não há tensão. Se δa estiver entre 0,1 a 2% a tensão começa a afetar a estrutura de bandas. E se δa for maior do que 2% a estrutura de bandas é fortemente modificada. Neste ponto percebemos que como o descasamento de parâmetros de rede é grande para os materiais nitretos, por exemplo para a interface GaN/AlN $\delta a \approx 3\%$, a tensão irá desempenhar um papel fundamental na estrutura de bandas.

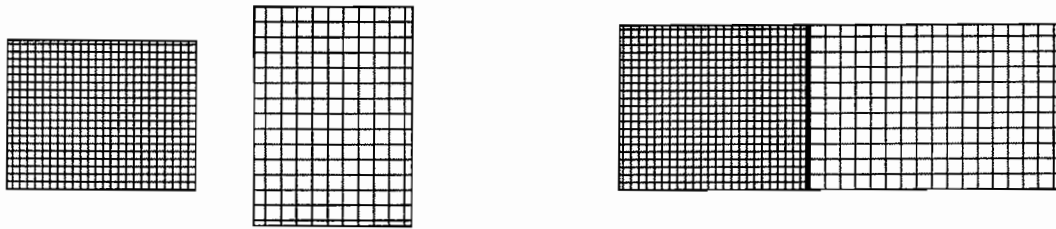


Figura 2.2: Esquema de descasamento e casamento de dois materiais com parâmetros de rede diferentes.

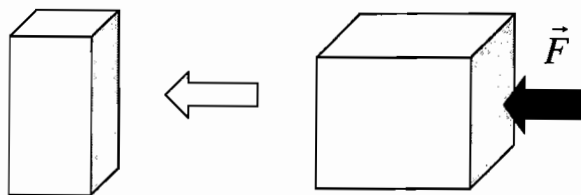


Figura 2.3: Representação esquemática da força mecânica \vec{F} atuando na camada (compressão) e causando sua deformação.

De forma geral durante o casamento dos parâmetros de rede, ou tensionamento, ocorrem dois tipos de processos na camada, devido à atuação da força de tensionamento mecânica sobre a mesma: a compressão, que ocorre quando o parâmetro de rede da camada epitaxial é maior do que o parâmetro de rede do substrato, ou a distensão, que

ocorre no caso oposto. Estes tipos de tensionamentos podem ser descritos como a combinação das chamadas tensões uniaxial, biaxial e da pressão hidrostática. A tensão uniaxial ocorre quando uma força atua numa única direção, a pressão hidrostática ocorre quando existe variação de volume (aumentando ou diminuindo) na camada e a tensão biaxial é a soma das componentes hidrostática e uniaxial da tensão (com sinal oposto a uma das componentes hidrostática). No caso que estudaremos aqui, materiais cúbicos, teremos o caso em que o tensionamento é biaxial, compressivo ou distensor, como é mostrado esquematicamente na Figura 2.4. Cabe ressaltar que este é o caso para estruturas na fase cúbica. Para as estruturas na fase wurtzita, a tensão pode ser só uniaxial, biaxial, compressiva ou distensora.

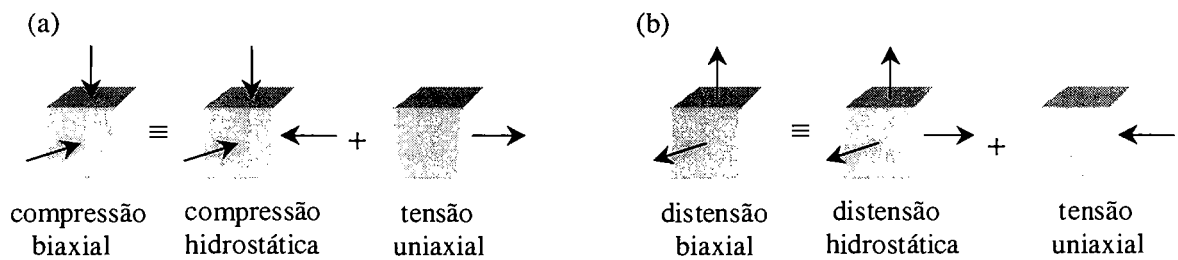


Figura 2.4: Representação esquemática, em materiais cúbicos, de uma camada biaxialmente tensionada nos casos de: (a) compressão e (b) distensão.

Como observamos, a camada pode estar tensionada biaxialmente de duas maneiras e esta tensão pode ser decomposta em outros tipos de tensões. Analisemos agora o que isto provoca na estrutura eletrônica, para isto descrevemos quantitativamente os efeitos das tensões elásticas.

Para definirmos o *strain* (deformação) num sistema nós imaginaremos um grupo ortogonal de vetores \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} num sistema sem *strain*. Sob a influência de uma deformação uniforme estes eixos são distorcidos para \vec{x}' , \vec{y}' e \vec{z}' . Os novos eixos podem ser relacionados com os antigos pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned}\vec{x}' &= (1 + \epsilon_{xx})\hat{x} + \epsilon_{xy}\hat{y} + \epsilon_{xz}\hat{z} \\ \vec{y}' &= \epsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \epsilon_{yy})\hat{y} + \epsilon_{yz}\hat{z} \\ \vec{z}' &= \epsilon_{zx}\hat{x} + \epsilon_{zy}\hat{y} + (\epsilon_{zz} + 1)\hat{z} \quad .\end{aligned}\tag{2.98}$$

Os coeficientes ϵ_{ij} definem a deformação do sistema. Os novos eixos em geral não são ortogonais. Vamos considerar o efeito da deformação num ponto \vec{r} o qual, sem *strain*, é dado por:

$$\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad . \quad (2.99)$$

Depois da distorção, o novo vetor é dado por:

$$\vec{r}' = x\vec{x}' + y\vec{y}' + z\vec{z}' \quad . \quad (2.100)$$

O vetor da deformação, \vec{R} , é então:

$$\begin{aligned} \vec{R} = \vec{r}' - \vec{r} = & x(\vec{x}' - \hat{x}) + y(\vec{y}' - \hat{y}) + z(\vec{z}' - \hat{z}) = (x\epsilon_{xx} + \\ & + y\epsilon_{yx} + z\epsilon_{zx})\hat{x} + (x\epsilon_{xy} + y\epsilon_{yy} + z\epsilon_{zy})\hat{y} + (x\epsilon_{xz} + y\epsilon_{yz} + z\epsilon_{zz})\hat{z}, \end{aligned} \quad (2.101)$$

que podemos escrever em termos de u, v e w da forma:

$$\vec{R}(\vec{r}) = u(\vec{r})\hat{x} + v(\vec{r})\hat{y} + w(\vec{r})\hat{z} \quad . \quad (2.102)$$

Assim podemos definir as componentes do *strain* como:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x}; \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}; \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}; \\ \epsilon_{xy} &= \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}; \epsilon_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}; \epsilon_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \quad . \end{aligned} \quad (2.103)$$

O próximo passo é definir o *stress* (tensão), a força por unidade de área, em função do *strain*. Neste caso temos nove componentes de *stress* que se reduzem a seis se considerarmos um sistema cúbico em equilíbrio estático. Na Figura 2.5 é mostrada a componente de *stress* σ_{xx} , que representa uma força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{x} . Também é mostrada a componente de *stress* σ_{xy} , que representa uma força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{y} . Desta forma, através da Lei de Hooke, podemos escrever as componentes de tensão como combinações lineares das componentes de *strain*, ou seja o tensor de *strain*, da seguinte maneira:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix}, \quad (2.104)$$

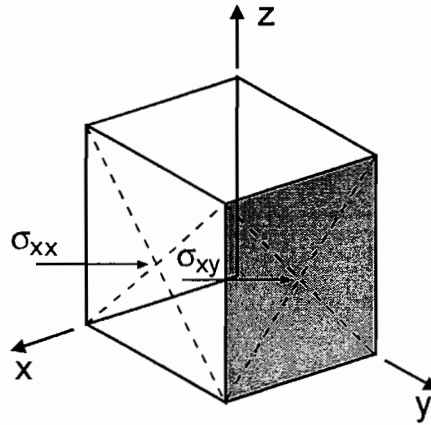


Figura 2.5: Componente de *stress* (tensão) σ_{xx} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{x} e componente de *stress* σ_{xy} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{y} .

onde C_{kl} são as constantes elásticas de *stiffness* ou módulos de elasticidade e têm dimensão de força por unidade de área ou energia por unidade de volume. As quantidades ϵ_{ij} são as componentes da deformação, com os índices i e j definidos acima.

Para os cristais com simetria cúbica as constantes elásticas podem ser reduzidas de 36 para 3 devido à simetria do cristal. Logo a expressão (2.104) se reduz a:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix}. \quad (2.105)$$

Para sistemas de nosso interesse aqui, a camada epitaxial é biaxialmente tensionada no plano do substrato, por uma quantidade ϵ_{\perp} . O *strain* paralelo, ϵ_{\parallel} , é determinado em função do parâmetro de rede do material 1, a_1 , substrato, e do parâmetro de rede do material 2, a_2 , camada epitaxial, ou seja

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{a_2 - a_1}{a_1}, \quad (2.106)$$

que é exatamente $\frac{\delta a}{a}$, definido anteriormente (expressão (2.97)).

Se o crescimento epitaxial se dá na direção $\langle 001 \rangle$, os termos mistos da expressão (2.105) por simetria são zero, portanto a expressão pode ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.107)$$

Considerando $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel}$; $\epsilon_{\perp} = \epsilon_{zz}$; $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{\parallel}$ e $\sigma_{zz} = \sigma_{\perp} = 0$, pois não existe tensão sendo aplicada perpendicularmente (tensão biaxial) e resolvendo (2.107), obtemos a seguinte relação:

$$\epsilon_{zz} = \epsilon_{\perp} = \frac{-2C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{\parallel}. \quad (2.108)$$

Uma vez que o tensor de *strain* é conhecido, nós podemos aplicar a teoria do potencial de deformação para calcular os efeitos da tensão. A Hamiltoniana de *strain* é calculada a partir da teoria de perturbação de primeira ordem, em geral nós temos [191]:

$$H_{\epsilon}^{\alpha\beta} = \sum_{ij} D_{ij}^{\alpha\beta} \epsilon_{ij}, \quad (2.109)$$

onde D_{ij} é o operador potencial de deformação que transforma-se sob operações de simetria. $D_{ij}^{\alpha\beta}$ são os elementos de matriz de D_{ij} . Os índices α e β representam uma base de funções no cristal na ausência da perturbação causada pela tensão elástica. O número de elementos desta matriz pode ser reduzido de modo semelhante ao caso das constantes elásticas. Entretanto, para os potenciais de deformação essa redução é dependente da simetria das funções de onda dos estados das bandas de condução e valência.

Neste ponto, vamos fazer uma pausa antes de continuar, e discutir as simetrias nos sistemas que estamos estudando. O ponto de mais alta simetria é o ponto $\Gamma(\vec{k} = 0)$, que corresponde ao centro da zona de Brillouin do sistema [7, 184]. No entanto, se não considerarmos os efeitos de *spin-órbita*, o fundo da banda de condução será bidegenerado (*spin up* e *spin down*), com simetria Γ_1 , e o topo da banda de valência é hexadegenerado com simetria Γ_{15} , isto é mostrado na Figura 2.6(a), como extraído da Ref. [42]. Se agora levarmos em conta os efeitos de *spin-órbita*, o que ocorrerá será uma quebra de simetria da banda de valência no ponto Γ , que passará a ter uma banda quadridegenerada, com simetria Γ_8 , e outra banda abaixo desta bidegenerada (*split-off*), com simetria Γ_7 , conforme Figura 2.6(b) [42]. A banda de condução permanece bidegenerada e tem simetria Γ_6 . Todavia cabe ressaltar aqui que esta discussão é válida somente para estruturas cúbicas. Na Figura 2.6 são indicadas as bandas de buracos pesados HH, buracos leves LH e de buracos de *split-off* SH(SO).

Para estruturas hexagonais existe ainda o desdobramento do campo cristalino, Δ_{cr} , que provém do fato de que a simetria hexagonal (C_{6v}) é mais baixa do que a cúbica (T_d) [25, 29, 73, 159]. Na Figura 2.7 é mostrada a estrutura de bandas esquemática para o GaN e AlN hexagonais [42]. Para estas mesmas estruturas, se não considerarmos o efeito de *spin-órbita*, a banda de valência no ponto Γ se divide em uma banda quadri-degenerada Γ_6 e uma bidegenerada Γ_1 conforme é mostrado na Figura 2.7(a). Se agora levarmos em conta os efeitos de *spin-órbita*, o que ocorrerá será uma quebra de simetria da banda quadri-degenerada no ponto Γ , que passará a ter duas sub-bandas diferentes bidegeneradas Γ_9 e Γ_7 (buracos pesados e leves, respectivamente), e outra banda abaixo desta bidegenerada (*split-off*), com simetria Γ_7 , conforme Figura 2.7(b) para o GaN. A banda de condução permanece bidegenerada e tem simetria Γ_7 . A ordem em que Γ_1 e Γ_6 aparece na banda de valência, Figura 2.7(a), depende do tipo de material, da razão das constantes de rede c/a e do parâmetro interno u . Por exemplo no caso do GaN (AlN), o estado Γ_6 é mais alto (mais baixo) do que o estado Γ_1 , e Δ_{cr} é positivo (negativo), como podemos ver nas Figuras 2.7(a) e 2.7(c).

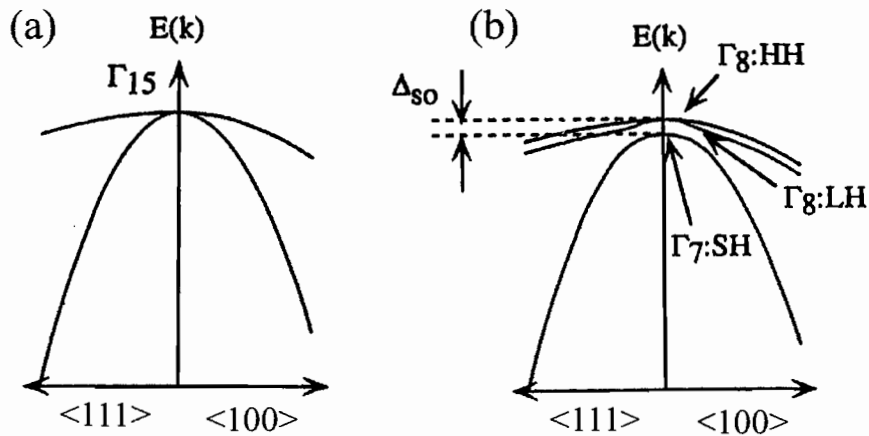


Figura 2.6: Representação esquemática da estrutura de bandas de valência para materiais cúbicos ao longo das direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$, (a) sem acoplamento *spin-órbita*; (b) com acoplamento *spin-órbita*. HH, LH e SH(SO) são as bandas de buraco pesado, buraco leve e *split-off*, respectivamente. A separação de energia Δ_{SO} devida à interação *spin-órbita* é indicada. Esta figura foi extraída da Ref. [42].

Feita a análise das simetrias e estruturas de bandas sem a tensão, retomaremos o cálculo da Hamiltoniana de *strain*. Para obter as correções da energia devido à perturbação produzida pela tensão elástica, determina-se o número de potenciais de deformação que existem nas bandas de condução e valência. O procedimento é utilizar argumentos de simetria sobre o cubo da Figura 2.5 na banda de condução e na banda de valência,

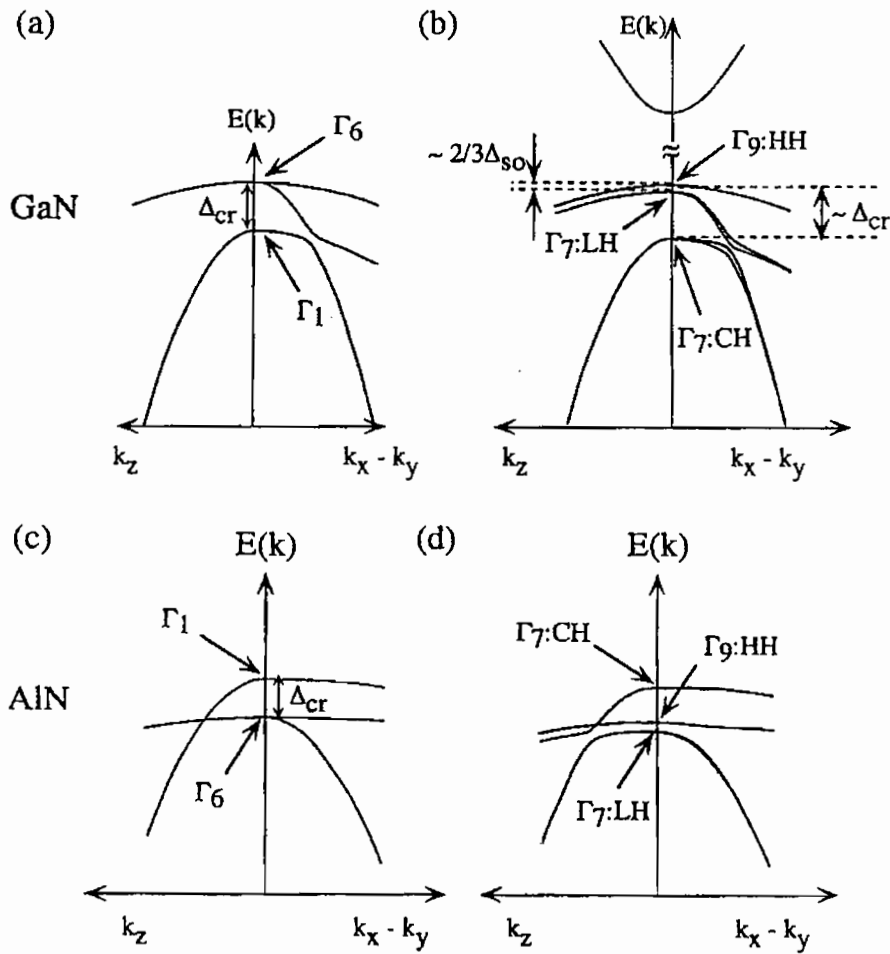


Figura 2.7: Representação esquemática da estrutura de bandas para a wurtzita, (a) sem acoplamento *spin-órbita* para GaN; (b) com acoplamento *spin-órbita* para GaN; (c) sem acoplamento *spin-órbita* para AlN e (d) com acoplamento *spin-órbita* para AlN. HH, LH e SO(CH) são as bandas de buracos pesados, buracos leves e *split-off*, respectivamente. Δ_{SO} corresponde ao desdobramento devido à interação *spin-órbita*. Também é indicada a separação de energia Δ_{cr} devida ao campo cristalino. Esta figura foi extraída da Ref. [42].

obtendo dois tipos de tensionamento: hidrostática e uniaxial. Todos os cálculos para cada elemento de matriz são descritos em detalhes no Apêndice A. Mencionamos que, a partir daqui não vamos considerar a parte hidrostática, pois esta apenas provoca um “deslocamento rígido” das bandas de energia, isto é, muda a energia do *gap*, E_g , do sistema e estamos interessados somente na parte uniaxial da tensão que modificará a banda de valência. Logo temos a seguinte matriz de *strain*:

$$\begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\epsilon & 0 & 0 & -i\sqrt{2}\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon & 0 & 0 & -i\sqrt{2}\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2}\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2}\epsilon & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.110)$$

onde para simplificar a notação, denotamos:

$$\epsilon \equiv b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right), \quad (2.111)$$

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. Existem outras notações para os potenciais de deformação. As mais comuns usadas na literatura são as nomenclaturas de Bir-Pikus, que adotaremos neste trabalho, e de Klener-Roth [189]:

Bir-Pikus	Klener-Roth
a_v	D_d^v
b	$(-\frac{2}{3})D_u$
d	$(-\frac{2}{3})D_{u'}$

onde a_v é o potencial de deformação hidrostático da banda de valência e d é o potencial de deformação de cisalhamento da banda de valência para simetria de *strain* romboédrica. Maiores informações podem ser encontradas no Apêndice A.

Analisando as expressões obtidas para descrever a Hamiltoniana de *strain* (Apêndice A) podemos afirmar que a tensão afeta o potencial de portadores na banda de valência e a energia do *gap* E_g como ilustram as Figuras 2.8 e 2.9.

Na Figura 2.8 é mostrada esquematicamente a estrutura de bandas sem tensão e com tensão compressiva e distensora. Podemos notar que a energia do *gap* aumenta para o caso compressivo e diminui para o caso distensor, isto ocorre basicamente por causa do sinal do *strain* na componente hidrostática da tensão. Outro ponto importante é que, mesmo que não consideremos o efeito de desdobramento de *spin-órbita*, a tensão remove a degenerescência da banda de buracos pesados e buracos leves, pois as deformações alteram a estrutura cristalina das camadas e da estrutura de bandas. Na Figura 2.9 é mostrada esquematicamente a mudança no potencial de portadores na banda de valência, de acordo com o sinal do *strain*. Para o caso compressivo temos que $V_{HH} = V + \epsilon$, $V_{LH} = V - 2\epsilon$ e $V_{SO} = V + \epsilon$, onde V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos

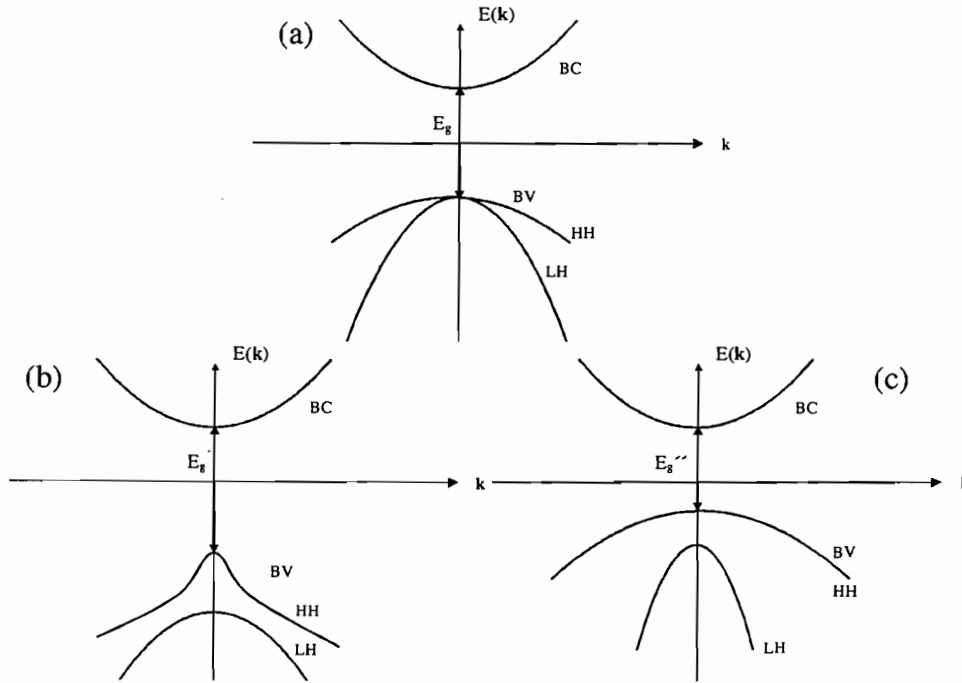


Figura 2.8: Representação esquemática da banda de valência (BV) e banda de condução (BC) (a) sem tensão; (b) com tensão compressiva e (c) com tensão distensora. HH e LH representam bandas de buracos pesados e leves, respectivamente. E_g é a energia do *gap*, E'_g é a energia do *gap* no caso compressivo e E''_g no caso distensor.

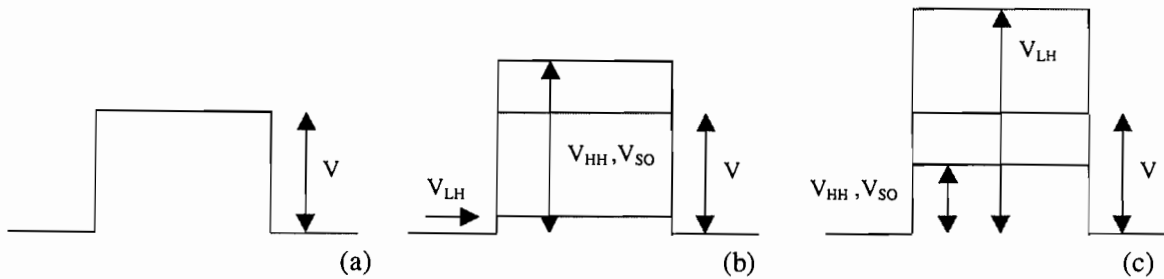


Figura 2.9: Representação esquemática do potencial de portadores da banda de valência (BV) (a) sem tensão; (b) com tensão compressiva e (c) com tensão distensora. V é o potencial periódico, V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos leves e V_{SO} é o potencial de buracos de *split-off*.

leves, V_{SO} é o potencial de buracos de *split-off* e ϵ é a energia de *strain*. Para o caso distensor temos que $V_{HH} = V - \epsilon$, $V_{LH} = V + 2\epsilon$ e $V_{SO} = V - \epsilon$. Podemos notar que, dependendo do caso que iremos analisar teremos mais ou menos estados confinados e as vezes nem mesmo confinamento para um determinado tipo de portador, dependendo do

tipo de tensão.

Finalmente, a partir da matriz definida em (2.110), podemos reescrever a matriz de *strain* em termos da base que estamos utilizando, ou seja

$$\langle jm_j \vec{k} K | H_S | j' m'_j \vec{k} K' \rangle = \langle K | \epsilon(z) | K' \rangle M_{jm_j}^{j' m'_j} , \quad (2.112)$$

onde $\epsilon(z)$ é a energia de *strain* ao longo de z e $M_{jm_j}^{j' m'_j}$ é definida como:

$$M_{jm_j}^{j' m'_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.113)$$

Nos casos que estudaremos, consideraremos que a energia de *strain* é zero na região da barreira e dentro do poço é calculada conforme a expressão (2.111), ou simplesmente não a levaremos em conta. A razão será dada a seguir.

Quando temos a tensão atuando num determinado sistema como uma heteroestrutura formada por poço e barreira, podemos ter as seguintes situações: na primeira a espessura da barreira é larga o suficiente para não sofrer tensão do poço, mas exercer tensão no poço. Este é o caso de poços isolados ou múltiplos poços quânticos. Na segunda situação, a barreira e o poço são estreitos, como nas super-redes, de forma que há tensão no poço e na barreira. A tensão neste caso será menor do que na primeira situação porque a tensão na barreira compensará a tensão no poço. Na terceira situação não há tensionamento, seja porque o descasamento dos parâmetros de rede é muito pequeno ou, no caso de super-redes, porque a tensão no poço compensará totalmente a tensão na barreira. Para sabermos em qual caso o sistema que estamos considerando se enquadra, usamos como indicativo a espessura crítica, d_c , definida a partir do modelo de Matthews-Blakeslee como [189]:

$$d_c \equiv \left[b_1 \left(\frac{\delta a}{a} \right)^{-1} \frac{1 - \eta/4}{4\pi(1 + \eta)} \right] \cdot \left(\ln \left(\frac{d_c}{b_1} \right) + 1 \right) , \quad (2.114)$$

onde b_1 é o vetor de Burger paralelo às direções $\langle 101 \rangle$ ou $\langle 011 \rangle$ e $|b_1| = a_1/\sqrt{2}$, onde a_1 é o parâmetro de rede do substrato, η é a razão de Poisson, $\eta = -S_{12}/S_{11}$ (S_{ij} são as constantes elásticas) e $\frac{\delta a}{a}$ é o descasamento relativo dos parâmetros de rede.

Na Figura 2.10 é mostrada esquematicamente a espessura crítica em função do descasamento relativo dos parâmetros de rede. Temos duas curvas, uma para poços isolados e outra para super-redes. Isto por causa da forma como tratamos a tensão em uma e noutra estrutura. As camadas mais finas que a espessura crítica têm seu descasamento dos parâmetros de rede acomodado pelo tensionamento elástico, ou seja não há tensão. Para camadas mais largas, o descasamento dos parâmetros de rede se acomoda pelas combinações de *strain* e deslocções [189, 190, 193, 194].

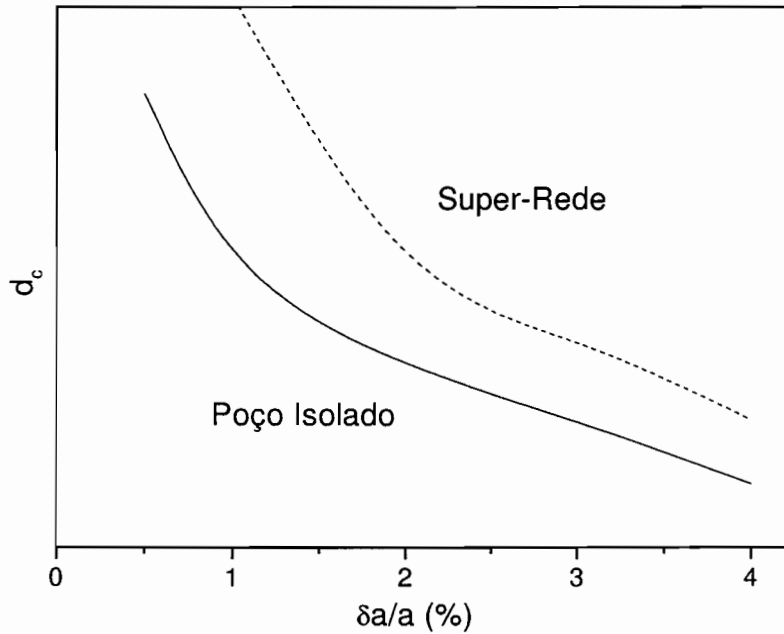


Figura 2.10: Representação esquemática da espessura crítica em função do descasamento dos parâmetros de rede, extraída da Ref. [189]. A linha sólida se aplica à sistemas isolados e a linha tracejada se aplica à super-redes.

Parker *et al.* [195], calcularam os valores de espessura crítica para a liga de InGa_N, na fase wurtzita, através da mudança na emissão de fotoluminescência, porém o erro experimental neste trabalho é grande. Recentemente, este mesmo grupo realizou medidas experimentais de fotoluminescência, condutividade e mobilidade para determinar a espessura crítica para um sistema de poços duplos de GaN/In_xGa_{1-x}N (wurtzita), com concentrações de $x \leq 0,15$ [193]. Estes resultados podem servir como base para avaliar d_c nas estruturas cúbicas.

Outra forma de estimar a espessura crítica é através das soluções da equação transcendental (2.114). A espessura crítica obtida na Ref. [196] para o c-AlN é da ordem de 14,1 nm. Outro cálculo, realizado pelo grupo da Universidade de Paderborn, em Paderborn, na Alemanha, e pelo grupo do LNMS, determinou a curva da espessura crítica

para ligas de $c\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [197], mostrada na Figura 2.11. Também foi considerado um sistema tipo poço isolado. Todos estes resultados, no entanto, ainda não são totalmente conclusivos sobre o melhor valor a adotar pois muitas aproximações são feitas. No caso da determinação teórica, o modelo de Mattews-Blakeslee é baseado no equilíbrio mecânico, porém o efeito térmico também interfere e não é considerado. Desta forma os valores experimentais tendem a ser mais altos do que os valores teóricos. Estas discrepâncias são discutidas para outros sistemas como $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ na Ref. [174]. No entanto nos basearemos nestes dados para podermos realizar nossos cálculos.

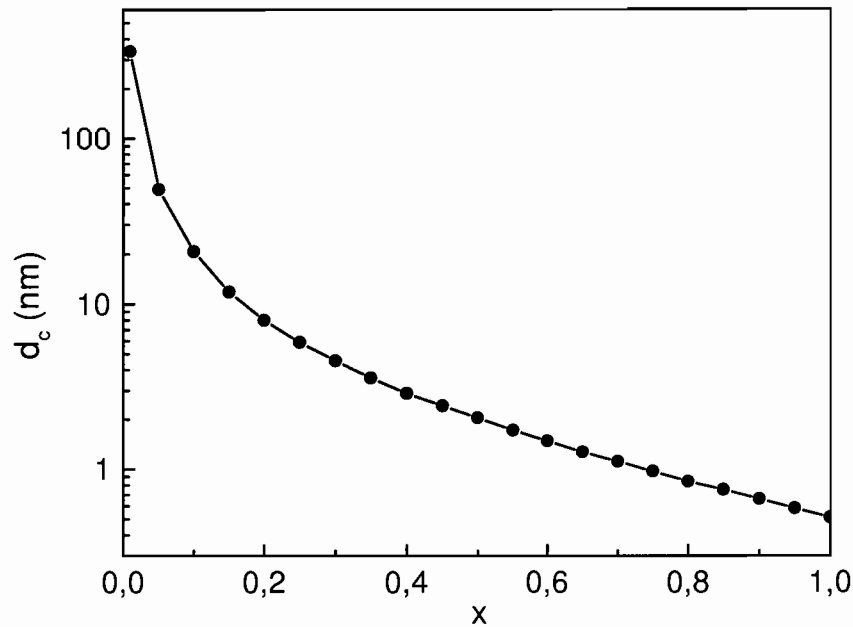


Figura 2.11: Espessura crítica d_c em função da composição x , como obtida através da expressão (2.114), para o sistema $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ crescido sobre GaN, extraída da Ref. [197].

Com a determinação das matrizes de energia cinética H_0 , de *strain* H_S , do potencial da heteroestrutura V_{HET} , do potencial de Coulomb V_C e do potencial de troca-correlação V_{XC} podemos determinar os autovalores e autofunções de forma autoconsistente, resolvendo simultaneamente as equações (2.7) e (2.58).

2.9 Etapas do Cálculo

Apresentaremos aqui um breve histórico e descrição do programa a ser utilizado nos cálculos. O programa foi desenvolvido no próprio grupo do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) do IFUSP, em sistemas δ -dopados tipo-p em GaAs [5-7]. A seguir foi inserido no programa o termo de troca-correlação para buracos de *split-off*,

tornando mais realístico o cálculo das estruturas de bandas de valência quando existem cargas no sistema e os efeitos de *split-off* não podem ser desprezados [8, 9, 11, 182]. Também foram introduzidos e considerados os efeitos do campo magnético ao longo da direção de crescimento [183]. No entanto, todos os sistemas estudados estavam restritos a homoestruturas semicondutoras. Era necessário porém, reestruturar o programa para calcular heteroestruturas semicondutoras, principalmente para interpretar de forma mais correta os resultados experimentais para poços quânticos e super-redes. Desta forma, generalizamos o método para calcular a estrutura de bandas de valência de heteroestruturas não dopadas e dopadas tipo-p para qualquer configuração de potencial (poço quadrado, poço com delta, barreira com delta, poço assimétrico, etc.) e que considere todos os efeitos existentes no sistema (tensão, troca-correlação, etc.). A diferença dos materiais na barreira e no poço é levada em conta através dos parâmetros de Luttinger γ 's como descrito anteriormente.

O programa consiste na resolução autoconsistente das Equações de Massa Efetiva e de Poisson, onde a convergência do cálculo ocorre quando a diferença entre o potencial (e a energia de Fermi) da penúltima e da última iterações é menor que 0,1 meV. O cálculo converge geralmente após 40 iterações. Inicialmente é determinado o potencial devido às cargas fixas. O potencial de aceitadores ionizados depende apenas do número de ondas planas, que trunca a base e de sua descrição no espaço real. Dentre os parâmetros que o definem estão o período da super-rede d ; a concentração de aceitadores N_A ; a região onde se encontram estes aceitadores, região de espessura ou largura d_p , e a constante dielétrica do material ϵ .

Após a construção do potencial de entrada (inicial), os outros parâmetros necessários à resolução da EME são lidos: o número de ondas planas (41 ondas planas na maioria dos cálculos); o número de pontos G_{\parallel} ($\Gamma - Z$) e G_{\perp} ($\Gamma - \Delta$) na zona de Brillouin em cada direção onde será calculada a estrutura de bandas (10 pontos em cada direção); o tipo de matriz (4×4 e 6×6); a existência ou não de tensão no sistema; o potencial de deformação b ; as constantes elásticas do poço C_{11} e C_{12} e o número de materiais envolvidos. O número de ondas planas e o número de pontos G_{\parallel} e G_{\perp} foram testados, verificando não ser necessário o aumento dos mesmos para descrever as estruturas de bandas discutidas neste trabalho.

Para cada material são declarados: a região onde este se encontra (larguras da barreira d_1 e do poço d_2); os parâmetros de Luttinger $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$; a energia do desdobramento de *spin-órbita* Δ ; a energia do *gap* e o parâmetro de rede a . Cada matriz, H_0, H_S, V_{HET}, V_C e V_{XC} , é montada conforme descrito nas seções anteriores. A Hamiltoniana total é então diagonalizada e calcula-se a energia de Fermi através do preenchimento (ocupação) dos estados.

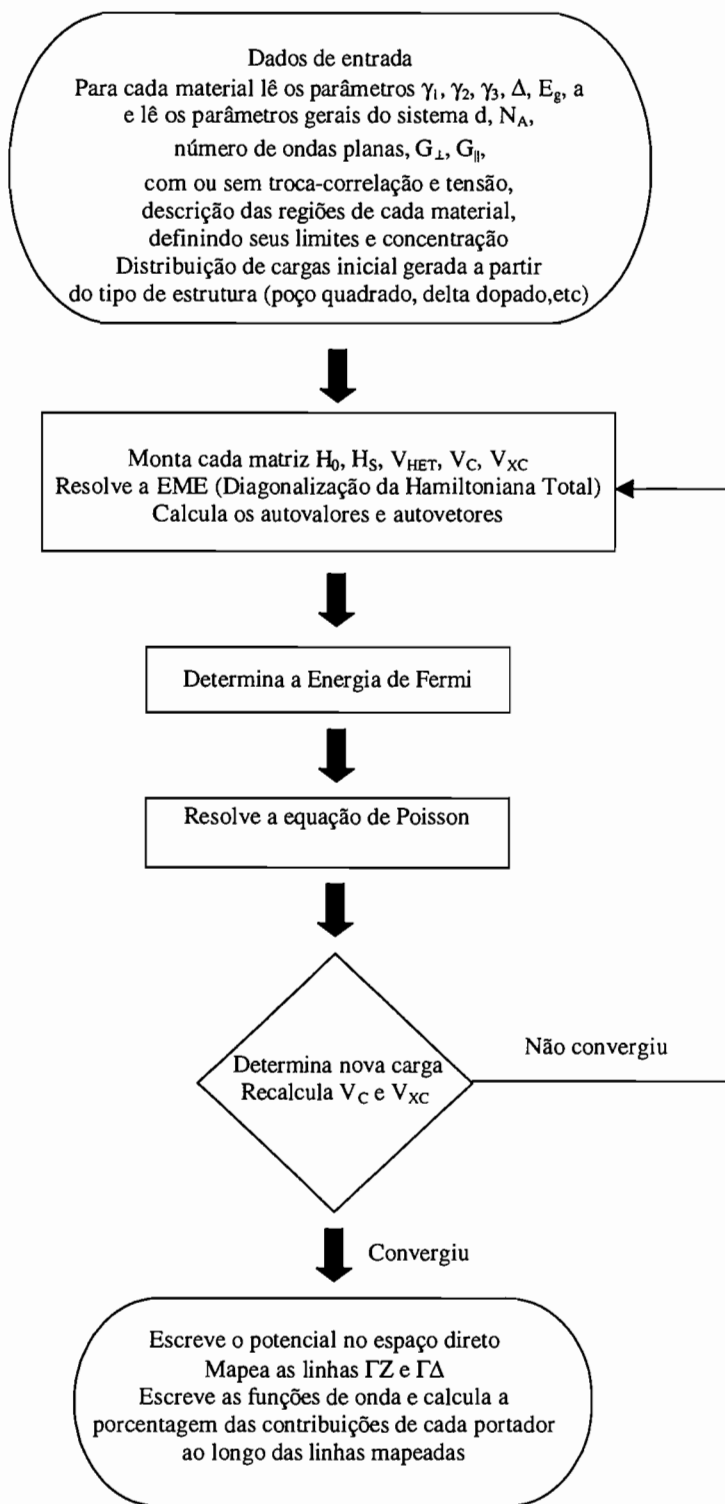


Figura 2.12: Diagrama esquemático do cálculo autoconsistente para determinação da estrutura de bandas de valência.

A partir das ocupações dos estados calcula-se a distribuição de cargas no sistema e através desta o potencial de Hartree via resolução da equação de Poisson. O potencial de troca-correlação também é calculado. Com estes potenciais é reiniciado o ciclo autoconsistente.

Após a autoconsistência é feito o mapeamento nas linhas $\Gamma - Z$ e $\Gamma - \Delta$ em função da energia (Figura 2.1). Além disso, também são calculadas as porcentagens das contribuições de cada portador ao longo das linhas mapeadas para cada nível eletrônico, o que é importante para determinar o quanto uma banda está ou não acoplada com outra, por exemplo, no ponto Γ . As funções de onda, bem como a distribuição de cargas também são fornecidas. Um ponto importante ainda a ser mencionado é que o programa em sua versão atual também pode ser utilizado para materiais crescidos em outras direções, como a $\langle 111 \rangle$ e $\langle 311 \rangle$. Esta parte foi desenvolvida paralelamente em colaboração com o Prof. Dr. Guilherme M. Sipahi do Instituto de Física de São Carlos, USP, durante seu período de pós-doutoramento no grupo do LNMS do IFUSP. A Figura 2.12 apresenta o diagrama de blocos do cálculo, descrevendo todas estas etapas.

No capítulo seguinte apresentaremos aplicações do método feitas para sistemas envolvendo heteroestruturas derivadas dos nitretos do grupo-III. Mostraremos as influências da diferença dos parâmetros de Luttinger, da inclusão da banda de *spin-órbita* e dos efeitos de tensão nos sistemas envolvendo nitretos não dopados e dopados.

Capítulo 3

Aplicações em heteroestruturas derivadas de nitretos do grupo-III

3.1 Introdução

Os nitretos cúbicos(c) do grupo-III, crescidos em substratos de GaAs ou 3C-SiC [81, 125, 132, 198–200], estão atraindo interesse na fabricação de LEDs e LDs operando na região visível e ultravioleta. Estes dispositivos são fundamentais para impressoras *lasers*, memórias óticas de alta densidade, *digital video disk* (DVD), visores, etc [25, 39–44]. Até o momento, todo comércio disponível em LEDs baseados no GaN é em estruturas wurtzita. Todavia o crescimento epitaxial do c-GaN em GaAs permitirá processar dispositivos mais facilmente, de forma a serem compatíveis com a tecnologia dos LEDs baseados no GaAs, atualmente usados nas indústrias.

Para fornecer uma base para compreender os conceitos e aplicações de dispositivos que envolvem heteroestruturas semicondutoras baseadas nos nitretos cúbicos, é necessário estudar as propriedades eletrônicas e óticas destes materiais. Para isso devemos estudar a estrutura de bandas de valência nos nitretos. Assim, iremos aplicar o modelo 6×6 de Luttinger-Kohn, dentro da aproximação da massa efetiva, descrito em detalhes no Capítulo 2, para determinar estas estruturas de bandas de valência em poços quânticos e super-redes de AlGaN/GaN e GaN/InGaN. Levaremos em conta a diferença dos parâmetros de Luttinger entre a barreira e o poço, efeitos de *spin-órbita* e de tensão.

Inicialmente iremos apresentar a estrutura de bandas de valência para o *bulk* de GaN próximo ao ponto Γ na direção $\langle 001 \rangle$. Este será o primeiro passo para testar o modelo. O segundo passo é reproduzir resultados da literatura para sistemas que envolvam ou não tensão. A seguir iremos apresentar poços quânticos e super-redes não dopados de AlGaN/GaN e GaN/InGaN, onde consideraremos os efeitos descritos acima e iremos

variar o período da super-rede, composição da liga x e a descontinuidade da banda de valência. Finalmente, mostraremos os sistemas dopados para estas mesmas estruturas, onde através da solução simultânea da EME e da equação de Poisson podemos descrever as estruturas de bandas de valência. Desta forma apresentaremos as condições necessárias para a formação de um gás de buracos bidimensional de alta densidade nestes sistemas. Efeitos de troca-correlação dentro da aproximação da densidade local (LDA) também serão considerados nos cálculos.

3.2 Estrutura de Bandas para o *bulk* de GaN

Para determinarmos se o modelo é confiável, primeiramente determinamos se os parâmetros utilizados estavam adequados [185]. Com estes parâmetros, calculamos a estrutura de bandas do *bulk* de GaN, assumindo que o sistema não possui cargas. Além disso assumiremos que o potencial periódico é nulo. Desta forma, a equação (2.7) se resume ao termo de energia cinética que inclui os efeitos de *spin-órbita*.

Os parâmetros que utilizamos para o GaN (ver Tabela 3.1) foram determinados por meio de cálculos *ab initio* utilizando-se o método *Full-Potential Linear Augmented Plane-Wave* (FLAPW), obtidos em nosso grupo [157]. A discussão sobre a concordância destes valores com dados da literatura será apresentada nas próximas seções. Nosso objetivo aqui é determinar as massas efetivas na direção $\langle 001 \rangle$, para cada banda, e comparar com os resultados obtidos através do FLAPW [157].

Tabela 3.1: Parâmetros do *bulk* obtidos em nosso grupo através de cálculos *ab initio*, FLAPW [157].

	γ_1	γ_2	γ_3	$\Delta(\text{meV})$	$a(\text{\AA})$
GaN	2,83	0,85	1,14	14	4,55

Na Fig 3.1 mostramos a estrutura de bandas do *bulk* de GaN próxima ao ponto Γ na direção $\langle 001 \rangle$. Podemos observar que as bandas de buracos pesados (HH) e leves (LH) estão degeneradas no ponto Γ e a banda de *split-off* (SO) está situada, logo abaixo, a 14 meV, que é a energia de desdobramento de *spin-órbita*, Δ . Este comportamento é esperado para estruturas tipo *zincblende*, conforme descrito na seção (2.8).

Utilizando um ajuste parabólico para pontos ainda mais próximos do ponto Γ , pois esta aproximação só é válida nesta região [184], podemos determinar as massas efetivas para cada portador, através da seguinte relação

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (3.1)$$

Tabela 3.2: Massas efetivas dos buracos pesados(HH), leves(LH) e *split-off*(SO), na direção $\langle 001 \rangle$, para o GaN, AlN, InN, GaAs e Si em função da massa do elétron livre, m_0 .

	GaN (nosso)	GaN [157]	AlN [157]	InN [147]	GaAs [5]	Si [8]
m_{hh}^*	0,84	0,85	1,29	0,84	0,34	0,29
m_{lh}^*	0,22	0,22	0,41	0,16	0,09	0,20
m_{so}^*	0,33	0,34	0,60	0,24	0,18	0,24

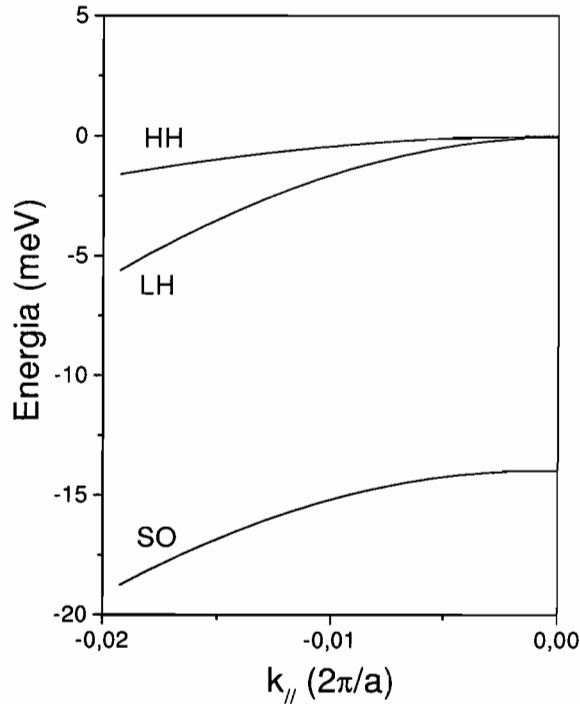


Figura 3.1: Estrutura de bandas de valência do *bulk* de GaN, próxima ao ponto Γ , na direção $\langle 001 \rangle$. Os símbolos HH, LH e SO se referem às bandas de buracos pesados, leves e *split-off*, respectivamente.

Os resultados são mostrados na Tabela 3.2. Na tabela apresentamos também, para efeito de comparação, os valores das massas efetivas de buracos para o GaAs [5], para o Si [8] e para o AlN [157] e o InN [147]. Analisando os valores obtidos para o GaN por nós e os valores obtidos através do FLAPW, vemos que estão em excelente concordância. O que indica que nosso modelo funciona corretamente para este sistema. Podemos perceber também que o GaN possui valores de massas efetivas maiores, quando comparados com

outros materiais, como o GaAs e o Si. Isto terá implicações na estrutura eletrônica como iremos apresentar adiante. Feita a análise para o *bulk* de GaN, iremos reproduzir cálculos da literatura para poços quânticos não dopados de AlGaN/GaN. Ainda devemos mencionar que não calculamos as estruturas de bandas para o *bulk* de AlN e de InN, pois estas estruturas são muito parecidas com a do *bulk* de GaN. Logo a teoria da massa efetiva e o modelo adotado também funcionarão para o AlN e o InN.

3.3 Poços Quânticos de AlGaN/GaN Reportados na Literatura

Os resultados a seguir foram obtidos para poços quânticos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ na forma cúbica. Nossos resultados serão comparados com dados da literatura [27, 28], onde o método empregado pelos autores é o modelo 6×6 de Luttinger-Kohn no espaço direto. Na Tabela 3.3 apresentamos os parâmetros utilizados para determinar a estrutura de bandas, obtidos a partir das referências [27, 28]. O sistema consiste num poço quadrado de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($x=0,15$), sem portadores, com largura da barreira $d_1=200 \text{ \AA}$, largura do poço $d_2=100 \text{ \AA}$ e $d = d_1 + d_2 = 300 \text{ \AA}$. Assumiremos também para os parâmetros de massa efetiva, Luttinger, etc, os valores do GaN. Com o intuito de determinarmos o descasamento dos parâmetros de rede, adotaremos, para o caso de poços tensionados, o valor de $4,48 \text{ \AA}$ para o parâmetro de rede da liga, obtido por interpolação linear entre o GaN ($4,50 \text{ \AA}$) e o AlN ($4,35 \text{ \AA}$) [27]. Desta forma asseguraremos as mesmas condições dos autores. Utilizando estes dados determinamos as estruturas de bandas, para os casos não tensionado e tensionado, as quais são apresentadas nas Figuras 3.2 e 3.3, respectivamente. Para comparação, apresentamos os resultados obtidos nas referências [27, 28], não tensionado e tensionado, nas Figuras 3.4 e 3.5, respectivamente. A classificação das bandas em nossos resultados é feita no ponto Γ a partir da determinação numérica da densidade de probabilidade das componentes dos autovetores. Na Tabela 3.4 são apresentadas as porcentagens das componentes dos portadores de cada banda para ambos os casos. A notação SOn-LHn(LHn-SOn) indica que o caráter da banda n é predominantemente SO(LH).

Tabela 3.3: Parâmetros utilizados para o GaN nos cálculos dos poços quânticos de AlGaN/GaN [27, 28].

	γ_1	γ_2	γ_3	$\Delta(\text{meV})$	$a(\text{\AA})$	$C_{11}(\text{GPa})$	$C_{12}(\text{GPa})$	$b(\text{eV})$	Barreira(meV)
GaN	3,07	0,80	1,26	17	4,50	296	154	-1,6	123,3

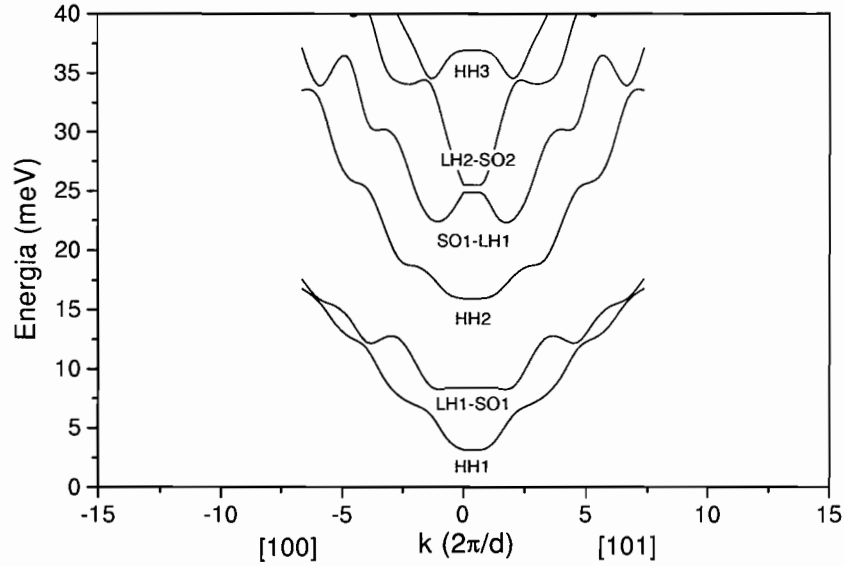


Figura 3.2: Estrutura de bandas para um poço quântico não tensionado de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$. Os níveis de energia são indicados HHn para buracos pesados, LHn para buracos leves e SO n para buracos de *split-off*. O zero de energia se encontra no fundo do poço.

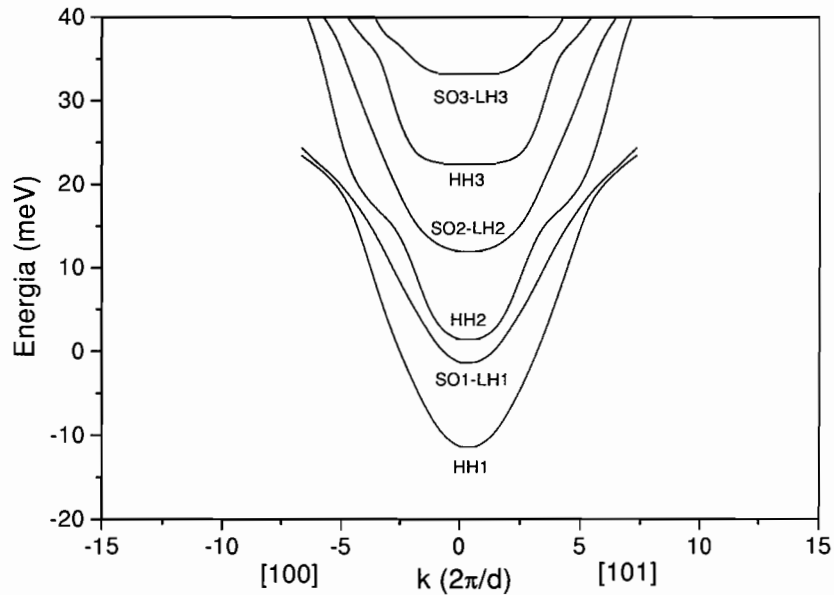


Figura 3.3: Estrutura de bandas para um poço quântico tensionado de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$. Os níveis de energia são indicados HHn para buracos pesados, LHn para buracos leves e SO n para buracos de *split-off*. O zero de energia se encontra no fundo do poço sem tensão. A energia de *strain* é $14,5 \text{ meV}$.

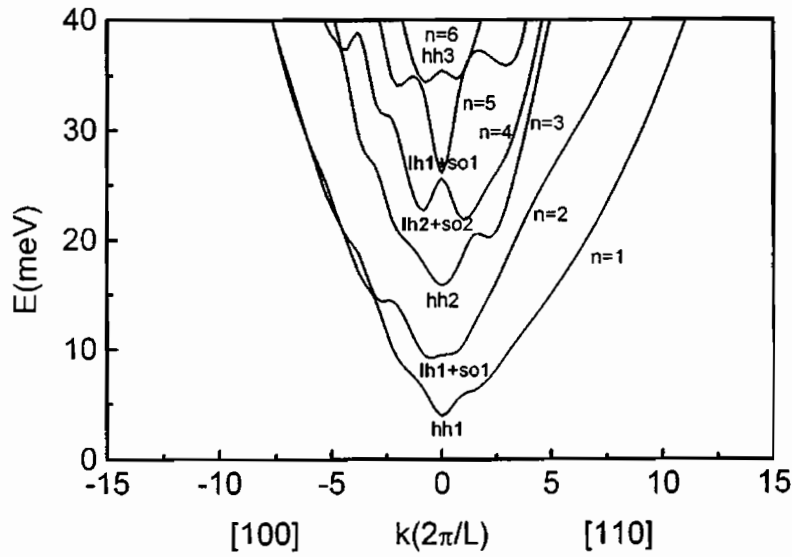


Figura 3.4: Estrutura de bandas para um poço quântico não tensionado de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$, como obtido da Ref [27]. Os níveis de energia são indicados hhn para buracos pesados, lhn para buracos leves e son para buracos de *split-off*. O zero de energia se encontra no fundo do poço. L corresponde ao período da super-rede d , adotado neste trabalho.

Tabela 3.4: Classificação das bandas a partir das densidades de probabilidade no ponto Γ . Os valores mostrados (em porcentagem de caráter relativo à cada tipo de portador) correspondem às estruturas de bandas calculadas das Figuras 3.2 (sem tensão) e 3.3 (com tensão).

Banda	Sem Tensão			Com Tensão		
	HH(%)	LH(%)	SO(%)	HH(%)	LH(%)	SO(%)
1	100	0	0	100	0	0
2	0	90,8	9,2	0	49	51
3	100	0	0	100	0	0
4	0	9,6	90,4	0	43	57
5	0	54,7	45,3	100	0	0
6	100	0	0	0	39,5	60,5

Podemos observar através da Figura 3.2 a forte interação das bandas de *split-off* com as bandas de buracos pesados e de buracos leves, basta verificarmos os quatro primeiros níveis, onde a banda de *split-off* aparece entre a banda de buracos leves e pesados. Isto ocorre porque a separação de energia Δ devido à interação *spin-órbita* é pequena o bastante para afetar as bandas de buracos pesados e leves. Este tipo de comportamento

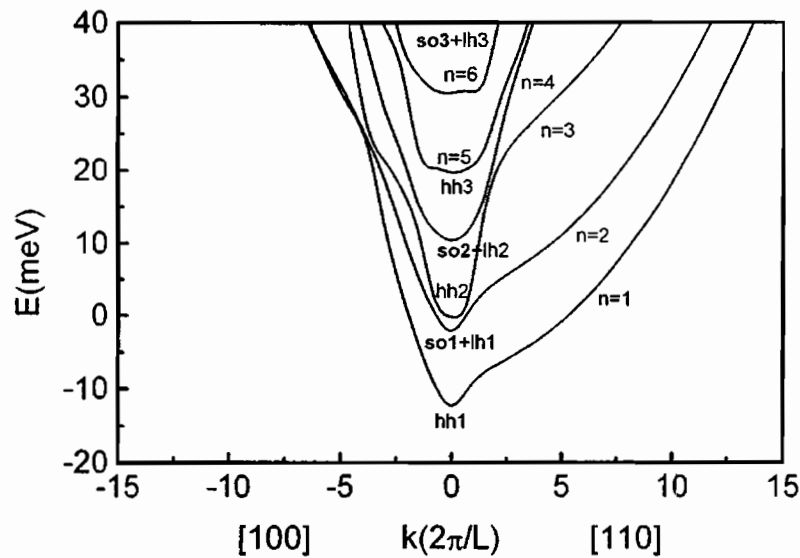


Figura 3.5: Estrutura de bandas para um poço quântico tensionado de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$, extraída da Ref [27]. Os níveis de energia são indicados hhn para buracos pesados, lhn para buracos leves e son para buracos de *split-off*. O zero de energia se encontra no fundo do poço. L corresponde ao período da super-rede d , adotado neste trabalho.

ocorre para materiais, cujo valor de Δ seja pequeno, tais como o Si [8] e nitretos em geral. Ainda com relação à Figura 3.2 podemos observar uma forte não parabolicidade das bandas ao longo das direções paralelas. Além do fato de que os estados de buracos de *split-off* estão fortemente acoplados com os estados de buracos leves já no ponto Γ . Isto ocorre também por causa da forte interação de *spin-órbita*. Este comportamento também é reportado na Ref. [27] e como podemos verificá-lo na Figura 3.4 (extraída da mesma). Todavia, cabe ressaltar aqui que na identificação de bandas, os autores consideram as bandas $n=2$ e $n=5$ como sendo iguais, isto não pode ocorrer uma vez que não podem haver dois autovetores gerando os mesmos autovalores. Logo o mais provável é que para $n=5$ tenhamos $so1-lh1$. Ainda outro ponto referente a Figura 3.4 é que a estrutura de bandas é calculada em direções diferentes ao nosso cálculo. A única região para comparação da Figura 3.4 é a direção $\langle 100 \rangle$ (Γ -X). Fazendo isto podemos verificar que as estruturas de bandas são bastante semelhantes. Também ocorre uma inversão dos níveis $SO1-LH1$ e $LH2-SO2$ quando comparamos ambas Figuras 3.2 e 3.4. Isto acontece porque estes níveis estão muito próximos, apenas alguns meV de diferença no ponto Γ , logo a identificação se torna difícil, qualquer aproximação no cálculo, pode afetar o resultado. Os autores utilizam a função de onda no ponto Γ para identificar as bandas e resolvem a EME no espaço direto; porém, eles não graficam estas funções de

onda, apenas para o caso que envolve tensão. Logo não há como fazer uma análise mais profunda.

Observando a Figura 3.3 percebemos que aparecem apenas níveis de buracos pesados e buracos de *split-off* misturados com buracos leves, com predominância de caráter da banda de buracos de *split-off*, conforme Tabela 3.4. Além disso, notamos que na presença da tensão o acoplamento é ainda maior entre as bandas de buracos leves e *split-off*. Este comportamento ocorre por causa da tensão compressiva (caso que estamos considerando) que aumenta o potencial de buracos pesados e de *split-off* (ver Figura 2.9) e diminui o potencial de buracos leves. Logo, como o poço é mais profundo para buracos pesados e de *split-off* os estados dentro destes poços estarão mais confinados, ao passo que o poço para buracos leves se torna mais raso e portanto os estados estarão menos confinados. Este efeito também pode ser explicitado em comparação com a Figura 3.2, onde não é levada em conta a tensão. Neste caso, vemos que o segundo nível é uma banda de buracos leves misturada com *split-off* que só irá aparecer no sétimo nível do sistema da Figura 3.3, não graficado.

Comparando agora o resultado obtido por nós, apresentado na Figura 3.3 com o resultado obtido pelos autores na Ref. [27], apresentado na Figura 3.5, notamos novamente que os resultados são muito semelhantes, inclusive a identificação das bandas.

A partir destes resultados podemos dizer que as pequenas diferenças que ocorrem entre nossos cálculos e os das Refs. [27,28], possivelmente, vêm do fato de usarmos um método computacional diferente ou ainda de algum outro parâmetro utilizado. Contudo, estes detalhes não comprometem nosso cálculo, já que obtivemos um comportamento muito semelhante para as estruturas de bandas, sejam elas tensionadas ou não tensionadas. Logo aplicaremos nosso método para determinarmos a influência da diferença dos parâmetros de Luttinger da barreira e do poço, bem como os efeitos da banda de *split-off* e tensão. Isto será mostrado a seguir para sistemas não dopados de poços quânticos e super-redes de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ e $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

3.4 Poços Quânticos e Super-Redes Não Dopados de AlGaN/GaN e GaN/InGaN

3.4.1 Efeitos da Utilização de Diferentes Parâmetros de Luttinger

Apresentaremos nesta seção resultados para poços quânticos de AlGaN/GaN e GaN/InGaN considerando a diferença dos parâmetros de Luttinger na barreira e no poço e

seus efeitos. Como mencionado anteriormente utilizaremos os parâmetros obtidos em nosso grupo, através do método *ab initio* FLAPW [157,201]. Estes parâmetros estão em boa concordância com resultados da literatura, como podemos observar na Tabela 3.5. Além disso, para algumas outras grandezas utilizamos os valores, também indicados na Tabela 3.5.

 Tabela 3.5: Parâmetros do *bulk* para o GaN, AlN e InN.

	GaN	AlN	InN		GaN	AlN	InN
γ_1				a(Å)			
nosso grupo [†]	2,83	1,57	3,77	nosso grupo [†]	4,55	4,40	5,03
Ref. [161]	2,7	1,5		Ref. [41]	4,52	4,38	4,98
Ref. [27]	3,07			Ref. [144]	4,56	4,36	5,05
Ref. [128]	3,75			Ref. [149]	4,54	4,38	
γ_2				Ref. [154,155]	4,46	4,32	4,92
nosso grupo [†]	0,85	0,36	1,33	Ref. [156]	4,46	4,37	4,95
Ref. [161]	0,76			Ref. [27]	4,50	4,35	
Ref. [27]	0,80			E_g (eV)			
Ref. [128]	0,69			Ref. [27]	3,2	5,94	
γ_3				Ref. [135]			1,9
nosso grupo [†]	1,14	0,60	1,60	C₁₁ (GPa)			
Ref. [161]	1,07	0,62		Ref. [150]	293	304	187
Ref. [27]	1,26			C₁₂ (GPa)			
Ref. [128]	1,44			Ref. [150]	159	160	125
Δ(meV)				b (eV)			
nosso grupo [†]	14	19	3	Ref. [27,128]	-1,6		
Ref. [148]	11			Ref. [203]		-1,5	
Ref. [153]	19	19		Ref. [143,203]			-1,2
Ref. [161]	20	20					
Ref. [202]	15	19	1				

[†] Refs. [157,201]

Para as ligas $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ os parâmetros utilizados foram interpolados linearmente. A descontinuidade (*band offset*) das bandas de condução e valência ainda não está bem estabelecida na literatura [25, 27, 202, 204], ficando entre 30% e 40% para a banda de valência. Desta forma utilizaremos em nossos cálculos estes dois valores extremos. Outro parâmetro a ser discutido aqui é a energia do *gap* E_g . Para a liga de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ utilizaremos a interpolação linear para determinar o *gap*. Para a liga de

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ adotaremos a curva parabólica, dada pela relação $E_g(x) = 3,2 - 2,3x + 1,05x^2$, obtida na Ref. [135], através de medidas experimentais de absorção óptica (ver Figura 3.6). Ainda com relação a liga de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, tomaremos valores de $x \leq 0,52$, pois o *gap* passa a ser indireto nas estruturas cúbicas [146, 148, 157, 205].

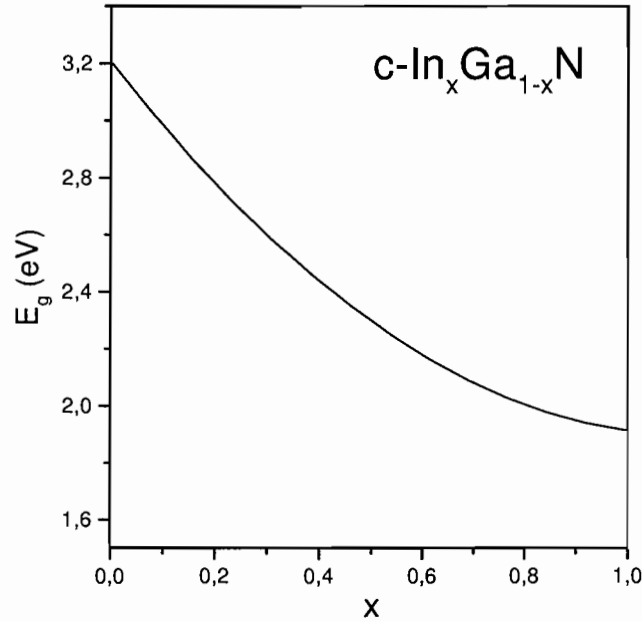


Figura 3.6: Dependência da energia do *gap*, E_g , em função da composição x da liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, obtida da Ref. [135].

A dependência das estruturas de bandas de valência quando usamos parâmetros de Luttinger diferentes para barreiras e poços é mostrada na Figura 3.7 para $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}/\text{GaN}$ sem tensão [166, 170]. A linha Γ - Δ corresponde à direção perpendicular ao eixo da super-rede Γ -Z. Na Figura 3.7(a), a largura da barreira é $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e a largura do poço é $d_2 = 30 \text{ \AA}$; e na Figura 3.7(b) temos $d_1 = d_2 = 30 \text{ \AA}$, as linhas tracejadas indicam materiais iguais (parâmetros de Luttinger iguais). A notação para os níveis de energia é a mesma citada na seção (3.3). Adotamos aqui 30% para a descontinuidade da banda de valência em ambos os casos. Podemos observar nesta figura o mesmo comportamento já descrito anteriormente, o acoplamento das bandas de *split-off* e buracos leves devido ao valor pequeno de Δ . Notamos também que os níveis de buracos mudam quando consideramos parâmetros diferentes.

Estas mudanças são maiores quando aumentamos a concentração de Al na liga, isto é mostrado na Figura 3.8, para o caso em que $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$, onde é apresentado o caso extremo AlN/GaN ($x=1$) sem tensão. Uma observação a ser feita é que este sistema foi calculado apenas como ilustração, uma vez que o *gap* é indireto para este valor de x .

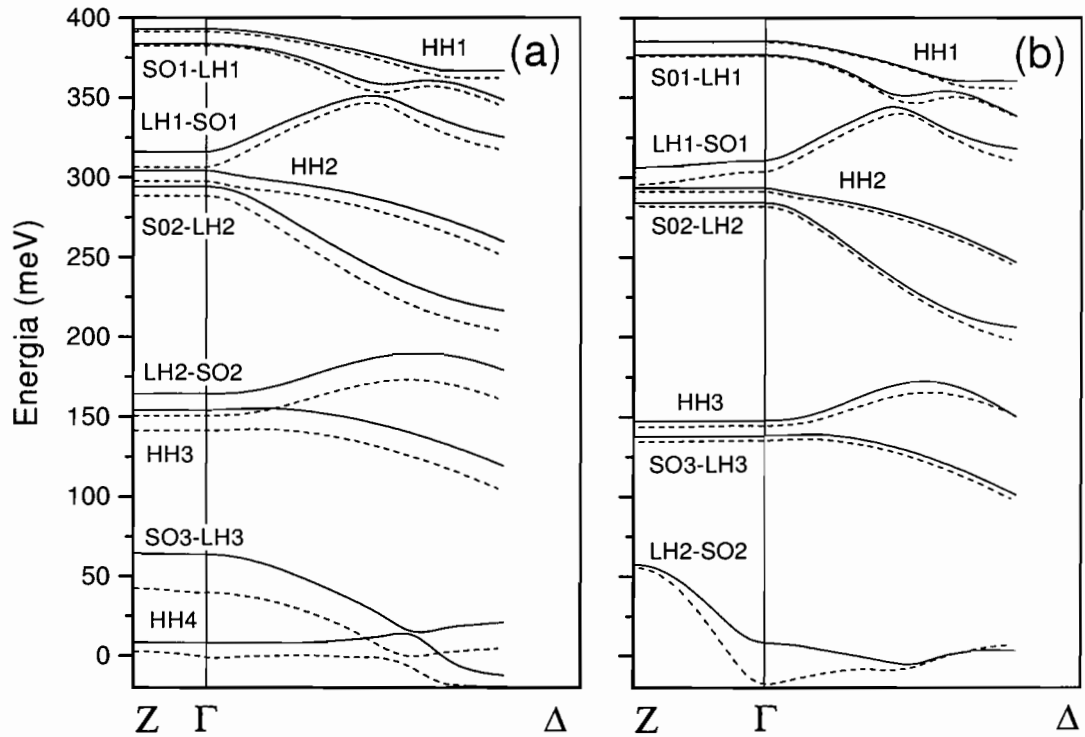


Figura 3.7: Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ para uma super-rede de $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}/\text{GaN}$ sem tensão. (a) $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$ e (b) $d_1 = d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é de 420 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

Consideramos aqui também 30% para a descontinuidade da banda de valência.

A diferença que existe entre as curvas sólida (materiais diferentes) e tracejada (materiais iguais) se deve exclusivamente aos parâmetros de Luttinger considerados na barreira e no poço (ver Tabela 3.5). Para super-redes com barreiras da ordem de 100 \AA , os poços se encontram isolados, na Figura 3.7(a) notamos que praticamente não há dispersão das minibandas. Conforme o período da super-rede diminui, começa a ocorrer dispersão nas minibandas ao longo de Γ -Z, caracterizando a interação entre os poços (Figura 3.7(b)). Como a massa efetiva do buraco pesado e buraco de *split-off* são maiores do que a massa efetiva do buraco leve (ver Tabela 3.2), há dispersão significativa somente nos níveis confinados de buraco leve ($\approx 50 \text{ meV}$). Esta dispersão é ainda maior no topo da barreira, isto se deve a interação entre os poços, que afeta os níveis mais altos.

Outro comentário a ser colocado referente às Figuras 3.7(a) e 3.8 é o fato dos níveis de energia tenderem a se aproximar cada vez mais conforme aumenta x . Este comportamento ocorre em virtude do aumento da profundidade do poço com o aumento de x . Neste caso,

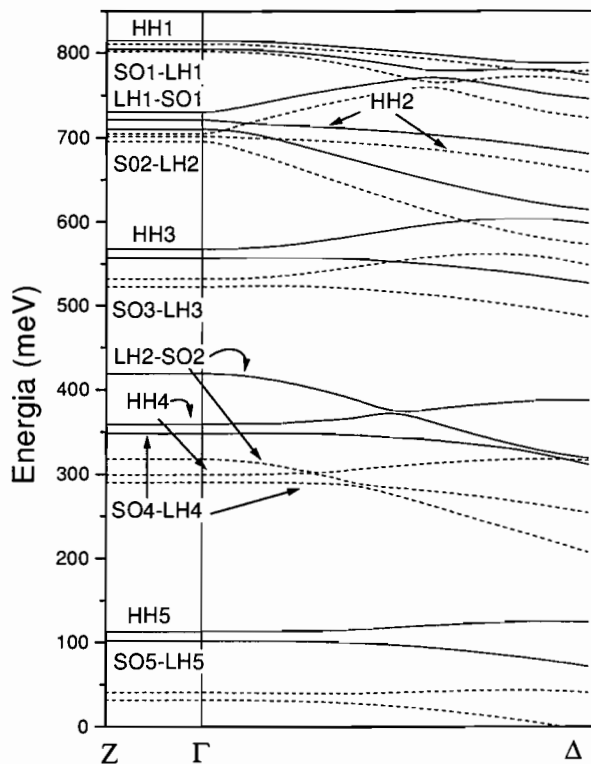


Figura 3.8: Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ para uma superrede de AlN/GaN sem tensão com $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é de 840 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

os níveis de energia com massa efetiva maior tendem a estarem mais localizados. Isso explica a inversão dos níveis SO3-LH3 e LH2-SO2 entre um sistema ($\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}/\text{GaN}$) e o outro (AlN/GaN).

Na Figura 3.9 mostramos a estrutura de bandas para o sistema de GaN/InN sem tensão, com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. Consideramos aqui 40% para a descontinuidade da banda de valência. Podemos perceber que a diferença entre os níveis devido à mudança dos parâmetros de Luttinger é menor quando comparada com sistemas que envolvem AlGaIn. Isto ocorre por que a diferença das massas efetivas dos buracos são maiores entre o AlN e o GaN do que entre o InN e o GaN (ver Tabela 3.2). Porém mesmo assim podemos observar que os níveis de energia mudam quando consideramos materiais iguais ou diferentes para o poço e barreira, principalmente para os níveis mais altos. A explicação é a mesma dos sistemas de AlGaIn.

Logo podemos concluir a partir destes resultados que devemos levar em conta a diferença dos parâmetros de Luttinger, pois isto afeta a banda de valência, alterando seus

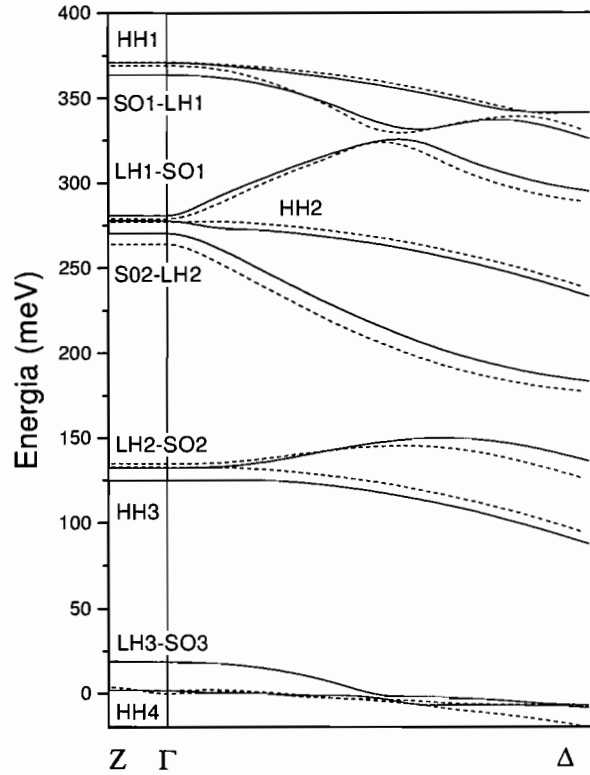


Figura 3.9: Estrutura da banda de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ para uma super-rede de GaN/InN sem tensão com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é de 400 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

níveis de energia. Na próxima seção analisaremos os efeitos de tensão e da banda de *split-off* na estrutura de bandas.

3.4.2 Efeitos da Inclusão da Tensão e da Banda de *Split-Off*

Conforme descrito no Capítulo 2 os efeitos de tensão podem mudar drasticamente a estrutura de bandas de valência, bem como a inclusão da banda de *split-off* [166,169–171]. Na Figura 3.10 apresentamos as estruturas de bandas de valência para a super-rede de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. Iremos tomar 30% para a descontinuidade da banda de valência. As linhas tracejadas correspondem à estrutura de bandas obtida fazendo $\Delta = \infty$. A profundidade do poço é 126 meV. A Figura 3.10(a) não leva em conta os efeitos de tensão e a Figura 3.10(b) considera os efeitos de tensão.

Como observado na Figura 3.10(a) a inclusão da banda de *split-off* muda completamente a forma das bandas, bem como seu ordenamento. Além disso, percebemos que as

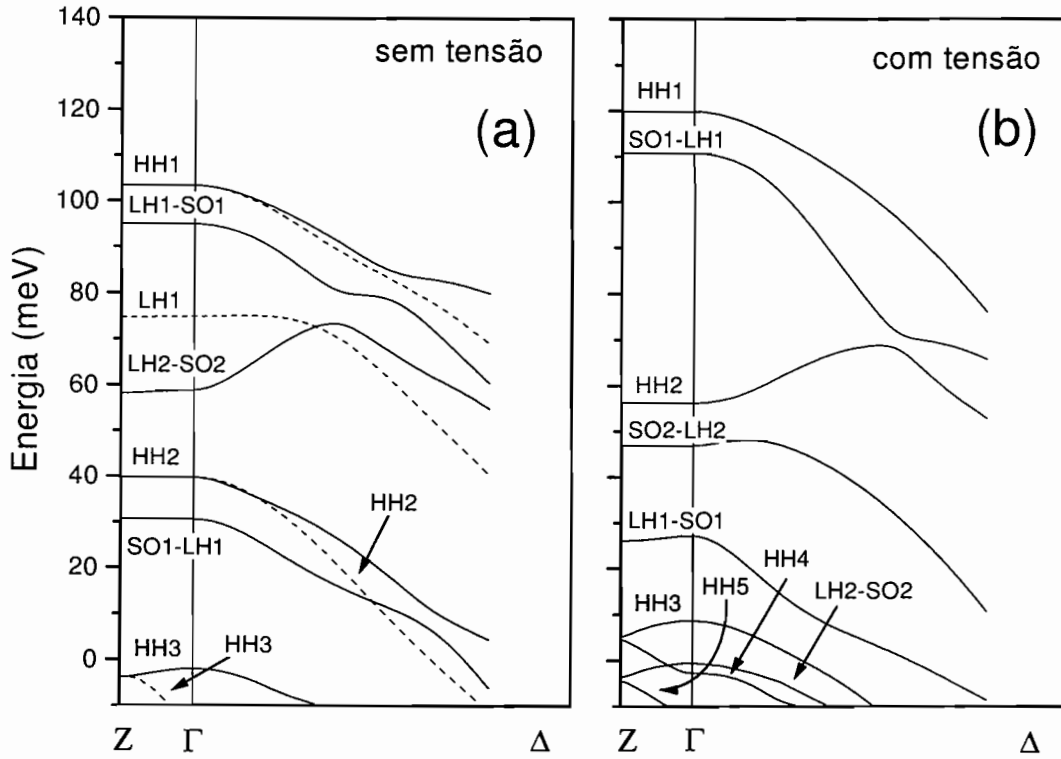


Figura 3.10: Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ para uma super-rede de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$ sem tensão com $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. Também é mostrado em (a) cálculos incluindo (linha sólida) e desprezando (linha tracejada) a interação *spin-órbita*. A profundidade do poço é de 126 meV considerando a super-rede sem tensão. O zero de energia se encontra no topo da barreira. A energia de *strain* é de 16,5 meV.

bandas de buracos leves e *split-off* estão sempre acopladas no ponto Γ , e este acoplamento é responsável por dois principais efeitos: (i) o estado de buraco misturado LH1-SO1 é empurrado para mais próximo ao estado HH1, diminuindo o espaçamento entre os dois níveis mais baixos quando comparado com o caso em que não há a inclusão do *spin-órbita*; (ii) forte não parabolicidade ao longo da linha Γ - Δ , evidenciando o comportamento de *anticrossing* [184]. Este comportamento ocorre devido aos pequenos valores de Δ , logo a inclusão da banda de *split-off* nos cálculos é fundamental para uma descrição realística do sistema.

O efeito de tensão é enfatizado comparando as linhas sólidas das Figuras 3.10(a) e 3.10(b). Como os potenciais de buracos pesados e de *split-off* tornam-se mais profundos e o potencial de buracos leves se torna mais raso (tensão compressiva), os níveis de buracos pesados e de *split-off* são empurrados para o fundo do poço, enquanto os níveis de buracos leves são empurrados no sentido oposto. O valor da energia de *strain* é da ordem de 16,5 meV. Desta maneira, os níveis e seu ordenamento mudam completamente.

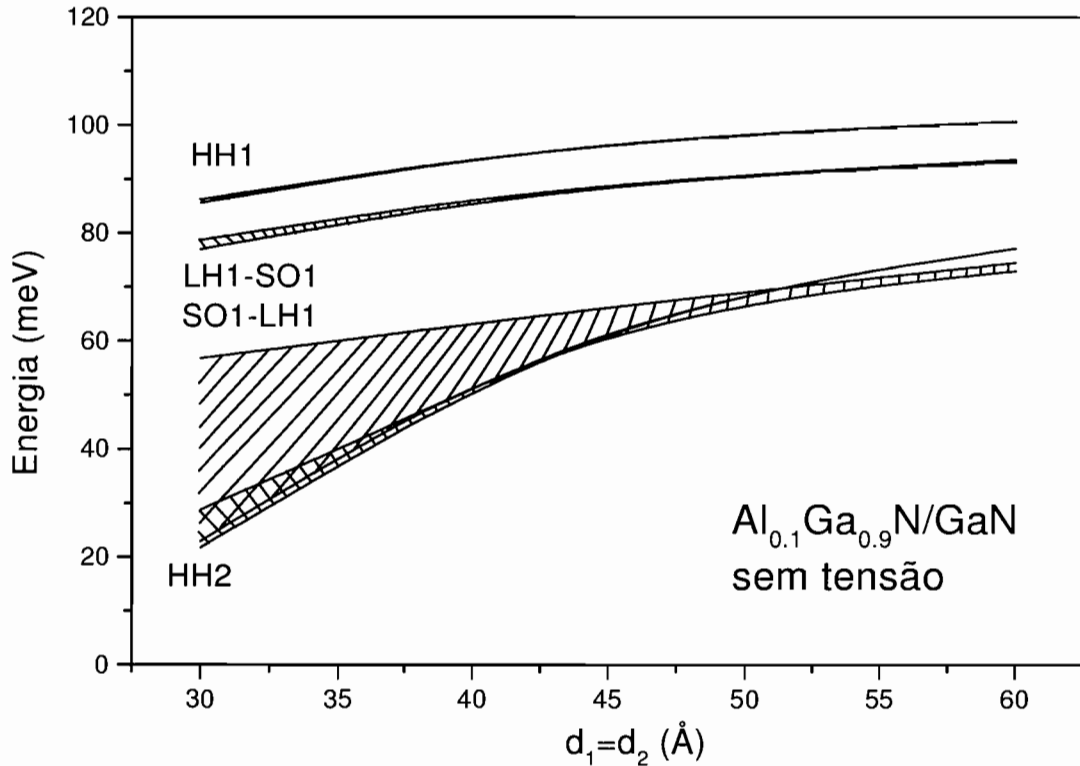


Figura 3.11: Níveis de energia para buracos, confinados dentro do poço, em função da largura do poço (largura da barreira $d_1 = d_2$) para super-redes de $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ não dopadas e não tensionadas. A profundidade do poço é 109,6 meV. As áreas hachuradas correspondem à dispersão das minibandas ao longo da direção Γ -Z. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

Este aspecto também foi abordado na seção (3.3).

Na Figura 3.11 apresentamos os níveis de energia, confinados no poço, ao longo da direção Γ -Z para o sistema de poços quânticos de $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ não tensionado, onde variamos o período da super-rede de $d_1 = d_2$ de 30 a 60 Å. Além disso assumiremos que a tensão na barreira e no poço se compensam devido a espessura crítica, discutida na seção (2.8). Adotamos 40% de descontinuidade para a banda de valência. A profundidade do poço é 109,6 meV. Analisando os resultados, vemos que conforme o período da super-rede aumenta, a interação entre os poços diminui, tornando a dispersão menor e os níveis mais profundos. Somente para períodos muito pequenos, da ordem de 45 Å, começa haver uma dispersão significativa, principalmente para a banda SO1-LH1. No caso em que $d_1 = d_2 = 30$ Å, esta dispersão chega a ≈ 35 meV. Isto ocorre devido aos altos valores de massas efetivas nos nitretos (ver Tabela 3.2).

Resultados similares são obtidos para poços quânticos $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ tensionados, os quais apresentamos na Figura 3.12. Neste caso assumiremos que existe tensão no

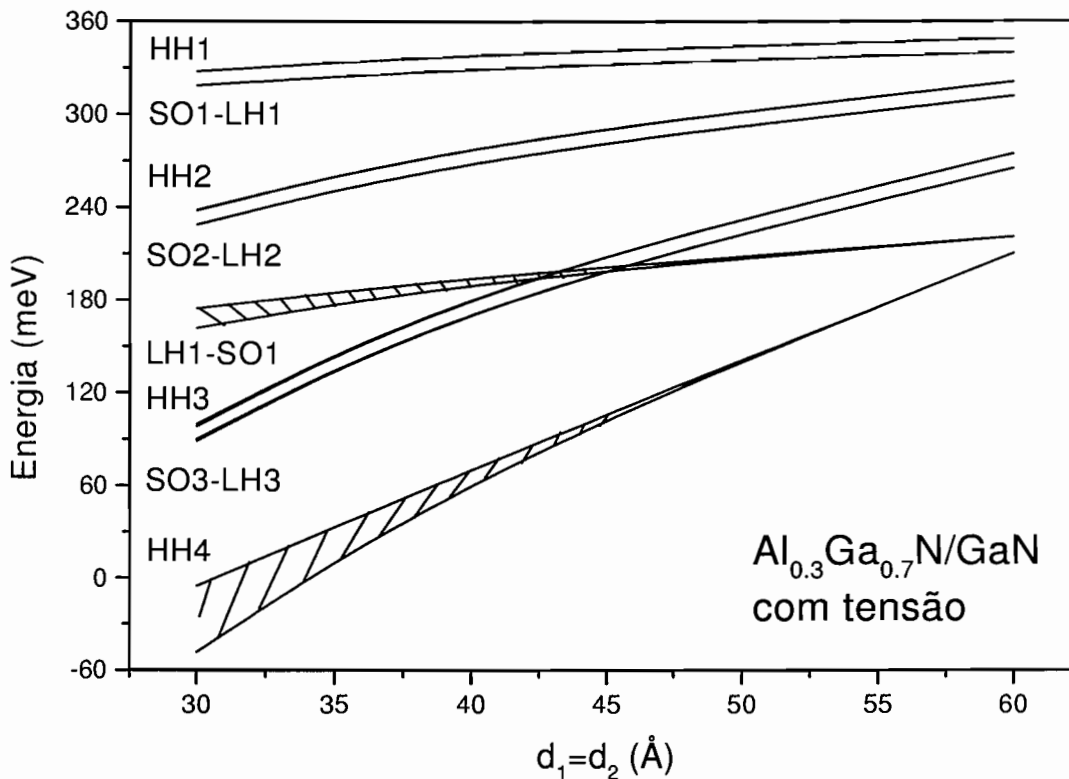


Figura 3.12: Níveis de energia para buracos, confinados dentro do poço, em função da largura do poço (largura da barreira $d_1 = d_2$) para super-redes de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ não dopadas e tensionadas. A profundidade do poço é 328,8 meV e a energia de *strain* é 33 meV. As áreas hachuradas correspondem à dispersão das minibandas ao longo da direção Γ -Z. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

poço. No entanto, cabe ressaltar aqui que, em se tratando de super-redes, consideraremos que a tensão na barreira e no poço se compensam para valores de $d \leq 90 \text{ \AA}$, apesar das controvérsias na literatura sobre a espessura crítica. Alguns dos resultados aqui apresentados foram obtidos para períodos que estão acima desta espessura crítica e foram calculados a título da investigação dos efeitos de tensão sobre super-redes.

Na Figura 3.12 temos mais estados confinados dentro do poço e dispersões de minibandas de uma maneira geral menores, quando comparado com a Figura 3.11, isto porque a barreira se tornou maior (o poço se tornou mais profundo). As minibandas com uma dispersão mais significativa aparecem somente para níveis mais altos e para $d_1 = d_2 \leq 45 \text{ \AA}$. Os níveis mais baixos, como podemos notar, são de buracos pesados e *split-off*. Novamente, por causa do tensionamento compressivo e das massas efetivas. Logo podemos afirmar que a inclusão da tensão afeta bastante a estrutura de bandas

nestes poços de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ e portanto deve ser levada em conta nos cálculos. Este efeito é ainda mais importante para as ligas de $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, pois Δ é menor e o descasamento dos parâmetros de rede é maior.

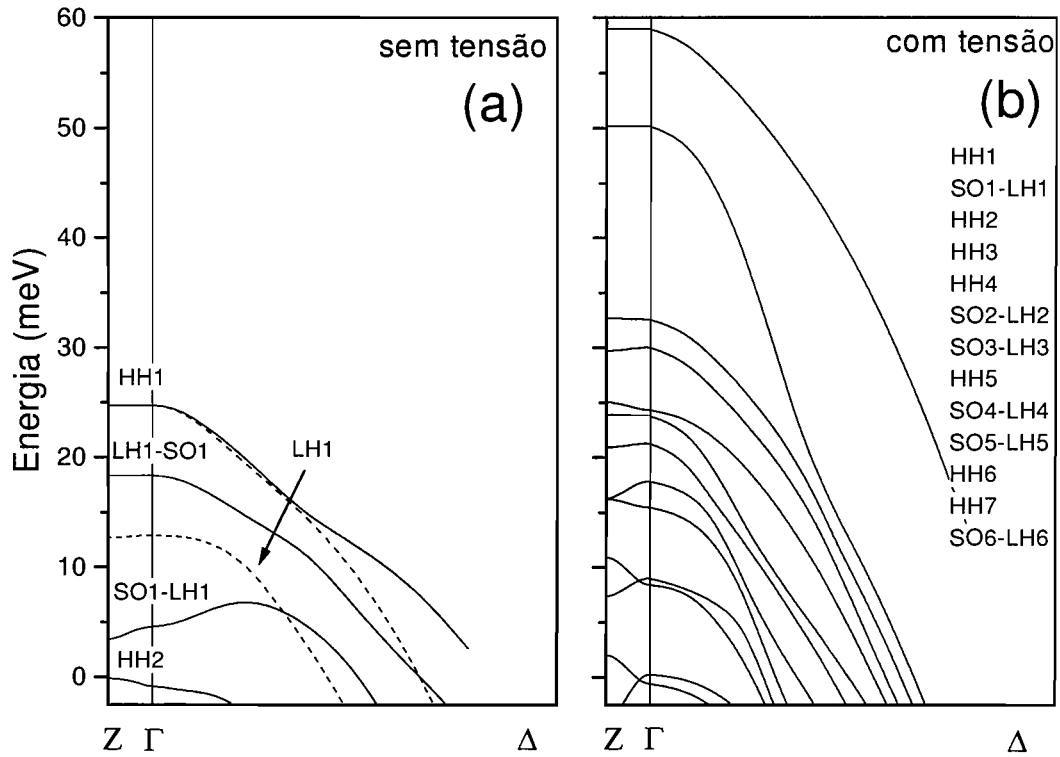


Figura 3.13: Estrutura de bandas de valência para a super-rede de $\text{GaN}/\text{In}_{0,10}\text{Ga}_{0,90}\text{N}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) sem tensão e (b) com tensão. Também são mostrados em (a) cálculos incluindo (linha sólida) e desprezando (linha tracejada) a interação *spin-órbita*. A profundidade do poço é 40 meV considerando-se a super-rede sem tensão. A energia de *strain* é $34,23 \text{ meV}$. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

Nas Figuras 3.13 e 3.14 apresentamos as estruturas da banda de valência para a super-rede de $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ para $x = 0,10$ e $0,30$, respectivamente, com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. Os parâmetros usados estão na Tabela 3.5, onde interpolamos estes para os diferentes valores de x . Também tomamos 40% para a descontinuidade da banda de valência. Para $x = 0,1$, utilizamos uma aproximação linear para o *gap*. A notação é a mesma adotada na Figura 3.10. As Figuras 3.13(a) e 3.14(a) não levam em conta os efeitos de tensão e as Figuras 3.13(b) e 3.14(b) consideram os efeitos de tensão. A identificação das bandas é colocada ao lado para não sobrecarregar as figuras, a ordem começa pela banda mais próxima do fundo do poço.

Analisando as Figuras 3.13(a) e 3.14(a) vemos que existe forte acoplamento entre buracos leves e buracos de *split-off*, como esperado. Também notamos o mesmo efeito

descrito anteriormente para o AlGa_xN/GaN, onde o estado de buraco misturado LH1-SO1 é empurrado mais próximo do estado HH1, quando comparamos ambos os casos com e sem o efeito de *spin-órbita*.

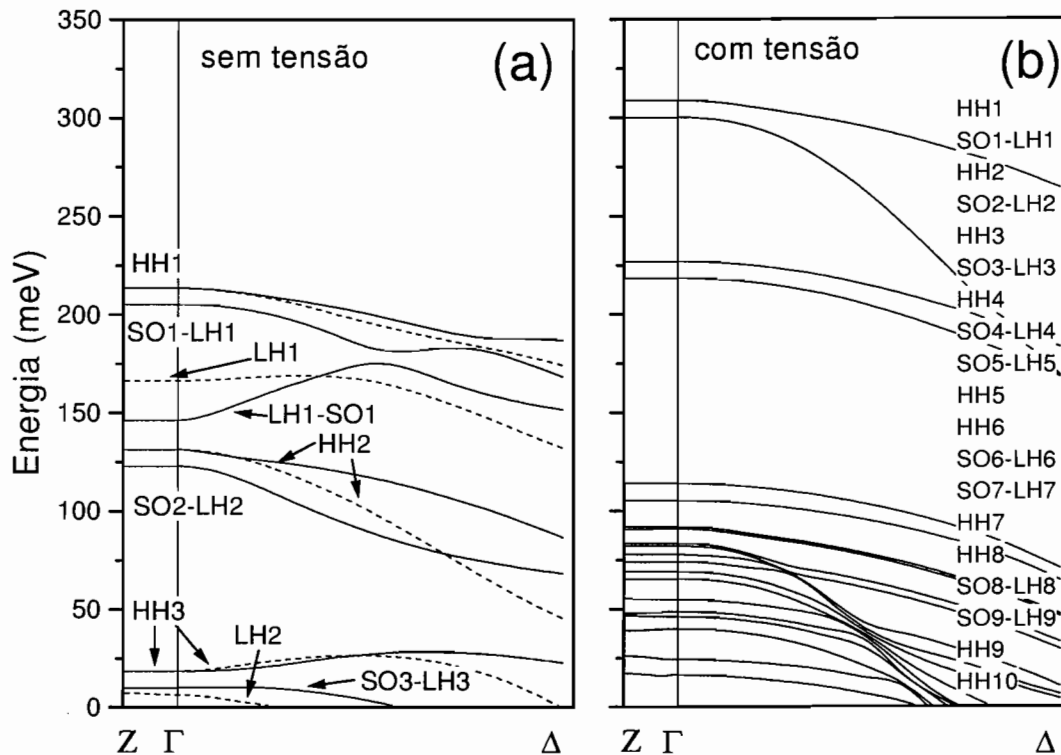


Figura 3.14: Estrutura de bandas de valência para a super-rede de GaN/ In_{0,30}Ga_{0,70}N com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) sem tensão e (b) com tensão. Também são mostrados em (a) cálculos incluindo (linha sólida) e desprezando (linha tracejada) a interação *spin-órbita*. A profundidade do poço é 240 meV considerando-se a super-rede sem tensão. A energia de *strain* é 97,11 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

Quanto às Figuras 3.13(b) e 3.14(b), podemos ver que o efeito da tensão é muito forte nas bandas, tornando as barreiras efetivas muito mais profundas. Este comportamento ocorre por causa do grande descasamento dos parâmetros de rede entre o GaN e o In_xGa_{1-x}N, cuja consequência é o aumento na energia de *strain*, cerca de duas a três vezes maior, quando comparada com o Al_xGa_{1-x}N/GaN. Também ocorre o confinamento de muito mais estados. Como ocorreu no caso do Al_xGa_{1-x}N/GaN temos apenas confinamento de estados de buracos pesados e de buracos de *split-off*, isto porque estamos considerando o tensionamento compressivo e neste caso, como já dito antes, a barreira para o buraco leve é menor ou inexistente, logo não temos estados confinados de buracos leves. A ordem dos níveis de energia é alterada pelos mesmos fatores descritos acima: maior confinamento de estados e Δ de *split-off* menor com o aumento de x . Outra questão

é que com a tensão a barreira de potencial para os buracos de *split-off* se torna ainda maior do que para buracos pesados e portando o efeito da banda de *split-off* afetará ainda mais a banda de valência.

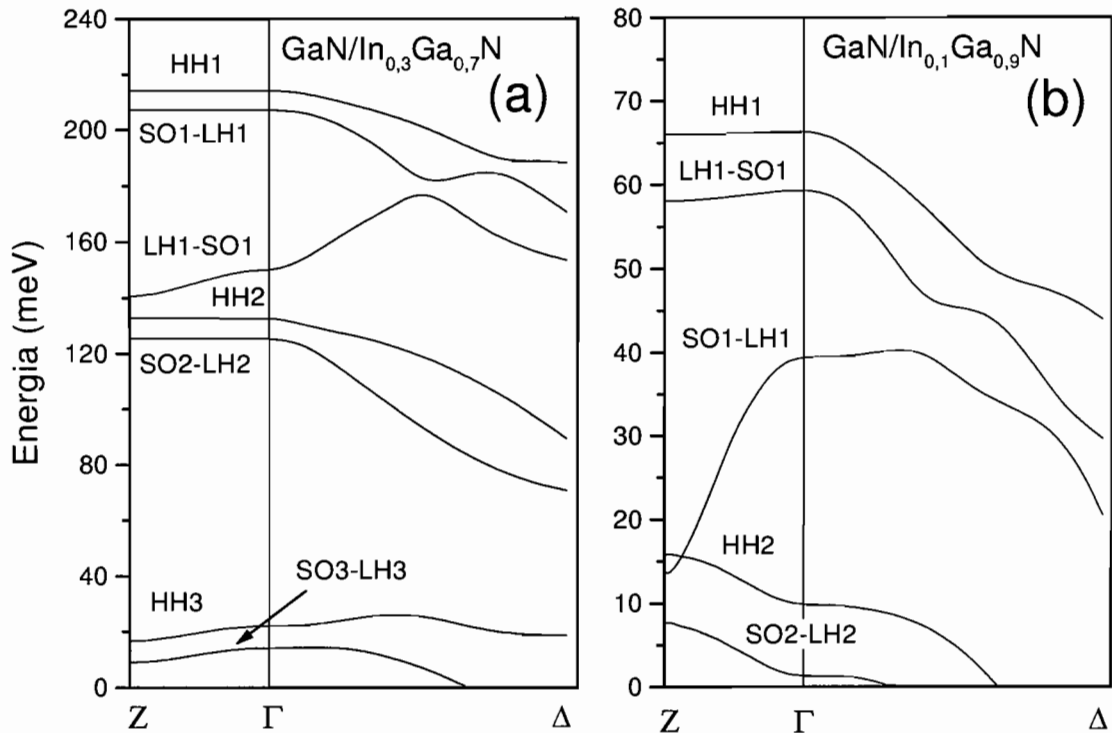


Figura 3.15: Estrutura de bandas de valência para a super-rede de GaN/In_xGa_{1-x}N com $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$ sem tensão. (a) $x = 0,3$ e (b) $x = 0,1$. A profundidade do poço é 240 meV e 80 meV, respectivamente. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

Na Figura 3.15 apresentamos as estruturas de bandas de valência para a super-rede de GaN/In_xGa_{1-x}N para $x = 0,10$ e $0,30$, respectivamente, com $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$, sem tensão. Os parâmetros usados estão na Tabela 3.5, e foram interpolados para obter os diferentes valores de x . Também tomamos 40% de descontinuidade para a banda de valência. A notação é a mesma adotada na Figura 3.10. Cabe aqui ressaltar, no entanto, que estamos trabalhando com sistemas não tensionados, uma vez que para os valores das larguras d_1 e d_2 , as tensões na barreira e no poço estarão compensadas. Analisando a Figura 3.15 podemos observar exatamente as mesmas características descritas nas Figuras 3.13 e 3.14. As únicas diferenças se referem ao número menor de estados confinados, por causa da maior interação entre os poços. Esta interação gera dispersões nas minibandas muito maiores do que vimos quando o período é maior, com a largura da barreira maior.

As conclusões que chegamos a partir dos resultados apresentados são que os efeitos de tensão, os efeitos de *spin-órbita* e o uso de diferentes parâmetros de Luttinger são fundamentais na determinação da estrutura de bandas de poços quânticos e super-redes de AlGa_xN/GaN e GaN/InGa_xN cúbicos, pois influenciam as estruturas de minibandas e sub-bandas de valência. Isto tem implicações importantes pois resulta em modificações das propriedades óticas destes sistemas [26, 128, 133, 160–162].

O próximo passo é estender nossos cálculos para sistemas dopados, onde determinaremos as condições para a existência do gás bidimensional de buracos (2DHG). Levaremos em conta todos os efeitos descritos acima e também efeitos de troca-correlação, que serão essenciais para determinar a forma do potencial e os níveis de energia quando incluirmos cargas no sistema. Isto será apresentado em detalhes a seguir.

3.5 Poços Quânticos e Super-Redes Dopados de Al-GaN/GaN e GaN/InGa_xN

Nesta seção iremos discutir os resultados obtidos para sistemas dopados em poços quânticos e super-redes de Al_xGa_{1-x}N/GaN e GaN/In_xGa_{1-x}N [168–171]. Contudo, devemos mencionar que foram realizados testes iniciais em estruturas dopadas tipo-p em poços quânticos baseados nos arsenetos, reproduzindo cálculos da literatura. Estes testes serão apresentados em detalhes no Capítulo 5, juntamente com resultados pioneiros para poços de GaAs/InGaAs. Na Figura 3.16 apresentamos esquematicamente os perfis de potencial e dopagem numa super-rede (ou múltiplos poços quânticos). A fim de permitir uma análise mais rigorosa de nossos resultados, nós iremos considerar a concentração de aceitadores ionizados 3D, N_A , como constante, e aumentaremos a concentração de aceitadores 2D em nosso sistema através do aumento da espessura da camada dopada, d_p , que estará situada no centro da barreira. Este perfil de dopagem é mostrado de forma esquemática na Figura 3.16(a). Como o nível aceitador para os nitretos está entre 0,1 e 0,2 eV, iremos realizar cálculos para valores da composição da liga x , maiores que 0,3. Desta forma asseguraremos que teremos alturas da barreira maiores que 200 meV e que todos os aceitadores estão ionizados, ou seja, a densidade de buracos total será igual à densidade de aceitadores total.

A inclusão dos efeitos de troca-correlação em nossos cálculos criará três diferentes potenciais de troca-correlação, V_{XC} , para cada portador. Todavia, todas as partículas estão sujeitas ao mesmo potencial de Coulomb, V_C . Logo, a referência mais apropriada para o potencial das heteroestruturas dopadas é o potencial de Coulomb no topo da barreira. Na Figura 3.16(b) mostramos esquematicamente o potencial total, que é dado pelas

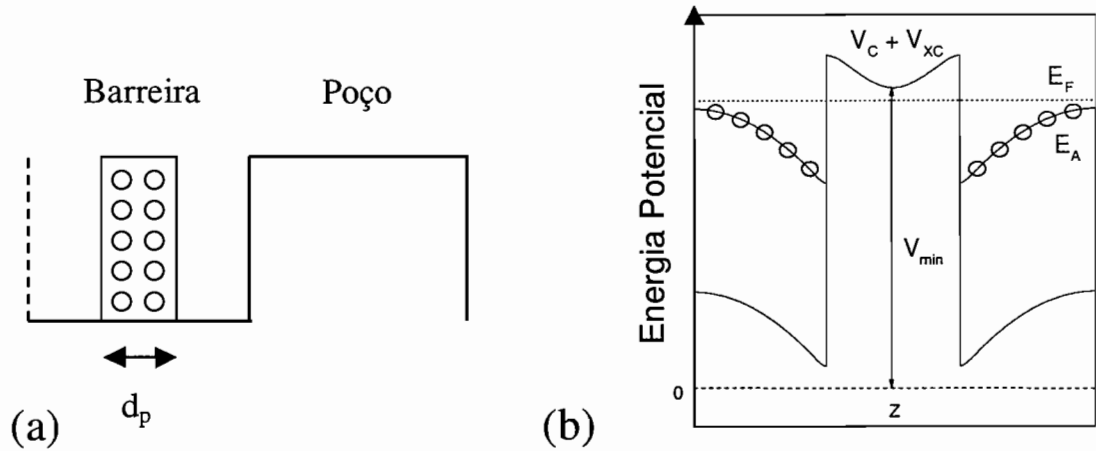


Figura 3.16: Representação esquemática do topo da banda de valência de múltiplos poços quânticos dopados tipo-p: (a) perfil de dopagem na barreira e (b) o perfil de potencial correspondente. O nível de Fermi, E_F , a profundidade mínima, V_{min} , e o nível de aceitadores, E_A são indicados. O zero de energia se situa no potencial de Coulomb no topo da barreira.

contribuições de V_{XC} e V_C . A diferença entre o topo da barreira e o zero é devida a energia de troca-correlação, que é diferente para cada portador. Também são apresentados o nível aceitador E_A , o nível de Fermi E_F e profundidade mínima do poço devido ao “encurvamento” (*bending*) do potencial, V_{min} .

Utilizaremos os valores da Tabela 3.5 em nossos cálculos. Além disso, para a determinação do termo de troca-correlação, precisaremos das massas isotrópicas do GaN, do AlN e do InN. Como a maioria das cargas se concentram dentro do poço, e a troca-correlação é um efeito local, então podemos considerar um único valor de massa isotrópica para o poço e para a barreira, tomando como base valores do poço. Para as ligas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, que formam os poços nas heteroestruturas GaN/InGaN, interpolamos linearmente estas massas isotrópicas. No caso das heteroestruturas de AlGaIn/GaN utilizaremos então os valores para o GaN. Na Tabela 3.6 apresentamos os valores de massas efetivas novamente na direção $\langle 001 \rangle$ e nas direções $\langle 111 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$, também calculadas através de cálculos *ab initio* FLAPW em nosso grupo [157,201]. A partir da média sobre os valores das massas nestas direções no espaço recíproco, calculamos as massas isotrópicas, exceto para a massa de buracos de *split-off* que é isotrópica. Iremos colocar novamente os valores da Tabela 3.2, como complementação. O valor para a constante dielétrica adotado foi o do GaN, $\epsilon = 9,5$ [42]. Mencionamos que a constante dielétrica nos nitretos do grupo-III ainda não é bem estabelecida na literatura [42, 151, 164, 206]. Adotamos também 40% para a descontinuidade da banda de valência. A nomenclatura para identificar as bandas

é a mesma adotada para os sistemas não dopados já apresentados anteriormente.

Tabela 3.6: Massas efetivas dos buracos pesados(HH), leves(LH) e de *split-off* (SO), nas direções $\langle 001 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$, para o GaN e AlN obtidas a partir de cálculos *ab initio* FLAPW em nosso grupo [157, 201] e em função da massa do elétron livre, m_0 , e para o InN, como extraídas da Ref. [147]. Também são indicados os valores das massas isotrópicas para cada portador, \bar{m} .

	GaN	InN [†]	AlN
$m_{hh}^{\langle 001 \rangle}$	0,85	0,84	1,29
$m_{lh}^{\langle 001 \rangle}$	0,22	0,16	0,41
$m_{so}^{\langle 001 \rangle}$	0,34	0,24	0,60
$m_{hh}^{\langle 110 \rangle}$	1,57		2,23
$m_{lh}^{\langle 110 \rangle}$	0,22		0,36
$m_{hh}^{\langle 111 \rangle}$	1,88	2,19	3,93
$m_{lh}^{\langle 111 \rangle}$	0,20		0,35
\bar{m}_{hh}	1,46	1,61	2,67
\bar{m}_{lh}	0,21	0,16	0,37
\bar{m}_{so}	0,34	0,24	0,60

[†] extraída da Ref. [147]

3.5.1 Múltiplos Poços Quânticos de AlGa_xN/GaN e GaN/InGa_xN Dopados

Dentro destas considerações iremos mostrar as estruturas de bandas e perfis de potencial com tensão compressiva para sistemas de múltiplos poços quânticos de Al_xGa_{1-x}N/GaN e GaN/In_xGa_{1-x}N com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. Mostraremos apenas os seis primeiros níveis. Na Figura 3.17 apresentamos resultados para múltiplos poços quânticos de Al_{0,3}Ga_{0,7}N/GaN com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $d_p = 200 \text{ \AA}$. Na Figura 3.18, apresentamos um sistema semelhante com $d_p = 60 \text{ \AA}$. Os níveis da banda de valência para uma estrutura não dopada equivalente também são mostrados (linhas tracejadas-pontilhadas-pontilhadas) para comparação.

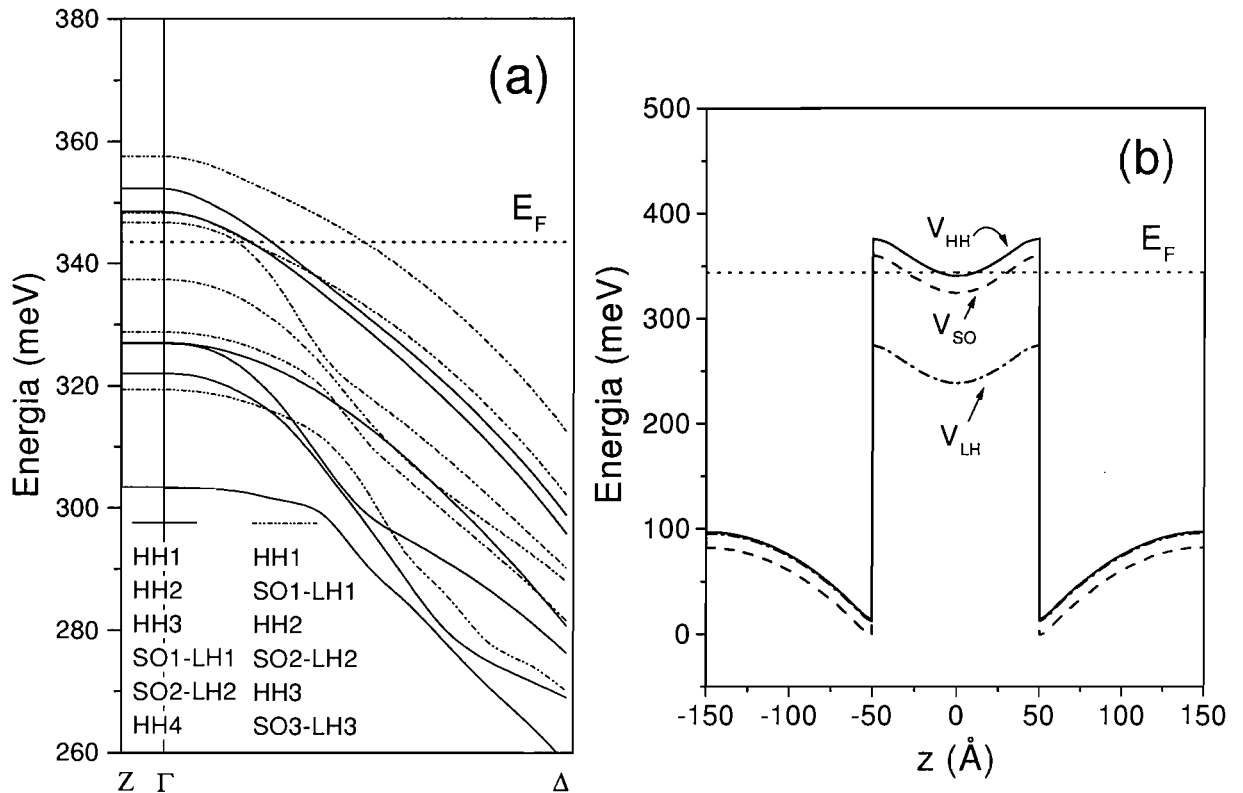


Figura 3.17: Múltiplos poços quânticos tensionados compressivamente de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. A concentração é $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $d_p = 200 \text{ \AA}$). (a) Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ . Os níveis de buracos para o mesmo sistema, porém não dopado, também são mostrados para comparação (linhas tracejadas-pontilhadas-pontilhadas). (b) Perfis de potencial, a linha cheia indica buraco pesado V_{HH} , a linha tracejada-pontilhada indica buraco leve V_{LH} , a linha tracejada indica buraco de *split-off* V_{SO} e a linha pontilhada indica o nível de Fermi E_F . O zero de energia se encontra no topo do potencial de Coulomb na barreira. A profundidade do poço é 328,8 meV e a energia de *strain* é 33 meV.

Podemos perceber em ambas as figuras, Figuras 3.17 e 3.18, que os níveis de energia não apresentam dispersão ao longo da direção Γ -Z, característica de poços isolados. Em relação ao *bending*, ou seja o “encurvamento” do potencial dentro da região de poço, este será maior ou menor dependendo do perfil de dopagem, ou seja, dependerá da concentração bidimensional N_{2D} determinada a partir da largura da região dopada e da concentração N_A .

Caso a concentração N_{2D} seja grande, a quantidade de cargas que migram para o poço será maior e portanto o *bending* também será maior. Quanto aos estados ocupados, podemos observar que dependendo de novo da concentração bidimensional N_{2D} teremos

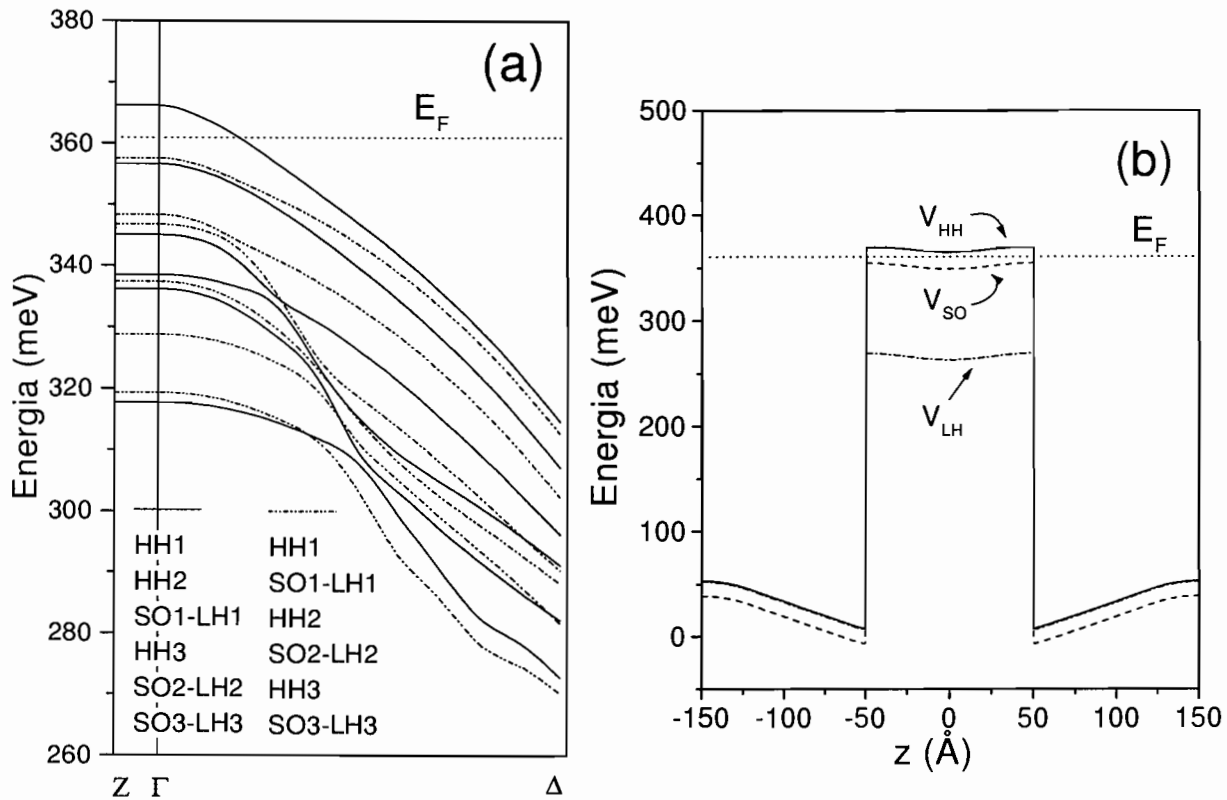


Figura 3.18: Mesmo que a Figura 3.17 para um sistema com $d_p=60 \text{ \AA}$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D}=6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$).

mais ou menos estados ocupados. Os estados ocupados, como também observamos são os de buracos pesados. Isto acontece porque a massa efetiva do buraco pesado é bem maior do que as de buraco leve e de *split-off*, conforme mostrado na Tabela 3.6. No caso da Figura 3.17, os estados ocupados (HH1 e HH2) se comportam como uma única “minibanda”, devido a interação dos dois diferentes poços criados pelo *bending*. A estes poços interagentes chamaremos de duplo poço quântico. Este comportamento surge por causa da localização espacial das autofunções e da posição dos níveis de energia. Comparando, nas Figuras 3.17 e 3.18, os sistemas dopados com os não-dopados, podemos perceber mudanças quanto à ordem dos níveis de energia. No primeiro caso o *bending* do potencial, que é causado majoritariamente por buracos pesados que têm massa efetiva maior e portanto é mais profundo, repele os estados de buracos leves e buracos de *split-off*. Por este motivo os níveis de buracos pesados são mais profundos. No segundo caso como o *bending* é muito pequeno, praticamente plano (*flat*), esta repulsão não ocorre. Além disso, neste último caso, os estados tendem a serem mais profundos. Isto explica a diferença, para ambos os casos, do posicionamento de seus níveis quando comparados com sistemas não dopados.

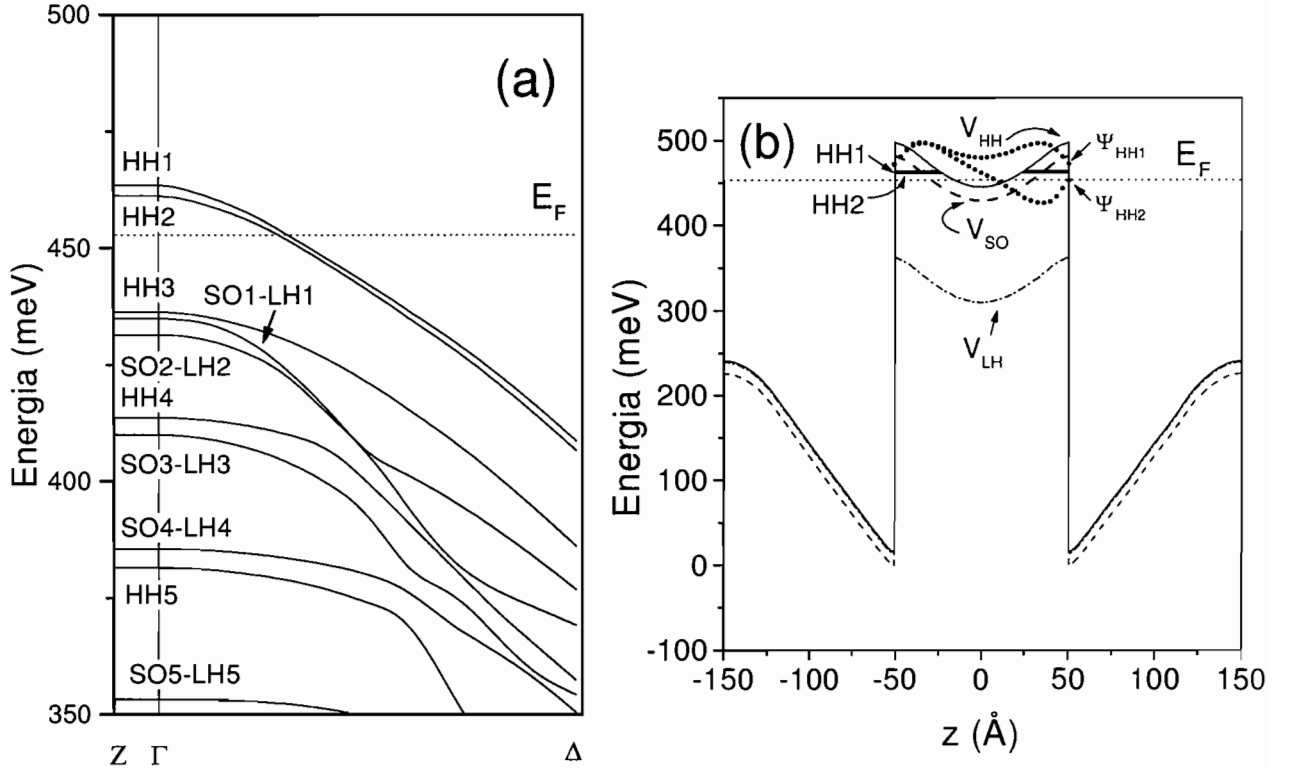


Figura 3.19: Mesmo que a Figura 3.17 para um sistema de múltiplos poços quânticos tensionados de $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_p=60 \text{ \AA}$ e $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D}=2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). A energia de *strain* é 44 meV. Os níveis HH1 e HH2 e suas respectivas autofunções, Ψ_1 e Ψ_2 , dentro do poço, são mostrados em (b).

Na Figura 3.19 mostramos os resultados para estrutura de bandas e perfis de potencial para $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}/\text{GaN}$, $d_p = 60 \text{ \AA}$ e $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). São indicados os níveis HH1 e HH2, e suas funções de ondas correspondentes, dentro do poço, Ψ_1 e Ψ_2 , respectivamente. Notamos o mesmo comportamento descrito na Figura 3.17, pois a N_{2D} é a mesma. A diferença está apenas no fato do poço ser mais profundo em energia no caso da Figura 3.19, pois $x = 0,4$.

Comportamento bastante semelhante ao observado acima para AlGaIn/GaN é verificado para o sistema GaN/InGaIn . Na Figura 3.20 apresentamos a estrutura de bandas de valência, perfis de potencial e nível de Fermi para múltiplos poços quânticos de $\text{GaN}/\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$, $d_p = 200 \text{ \AA}$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). A única diferença neste caso é o fato do efeito da tensão ser mais forte, como esperado, uma vez que o descasamento dos parâmetros de rede é maior. A energia de *strain* é 97,1 meV e a altura da barreira é 240,4 meV.

Depois de discutirmos as características gerais da estrutura de bandas e potenciais,

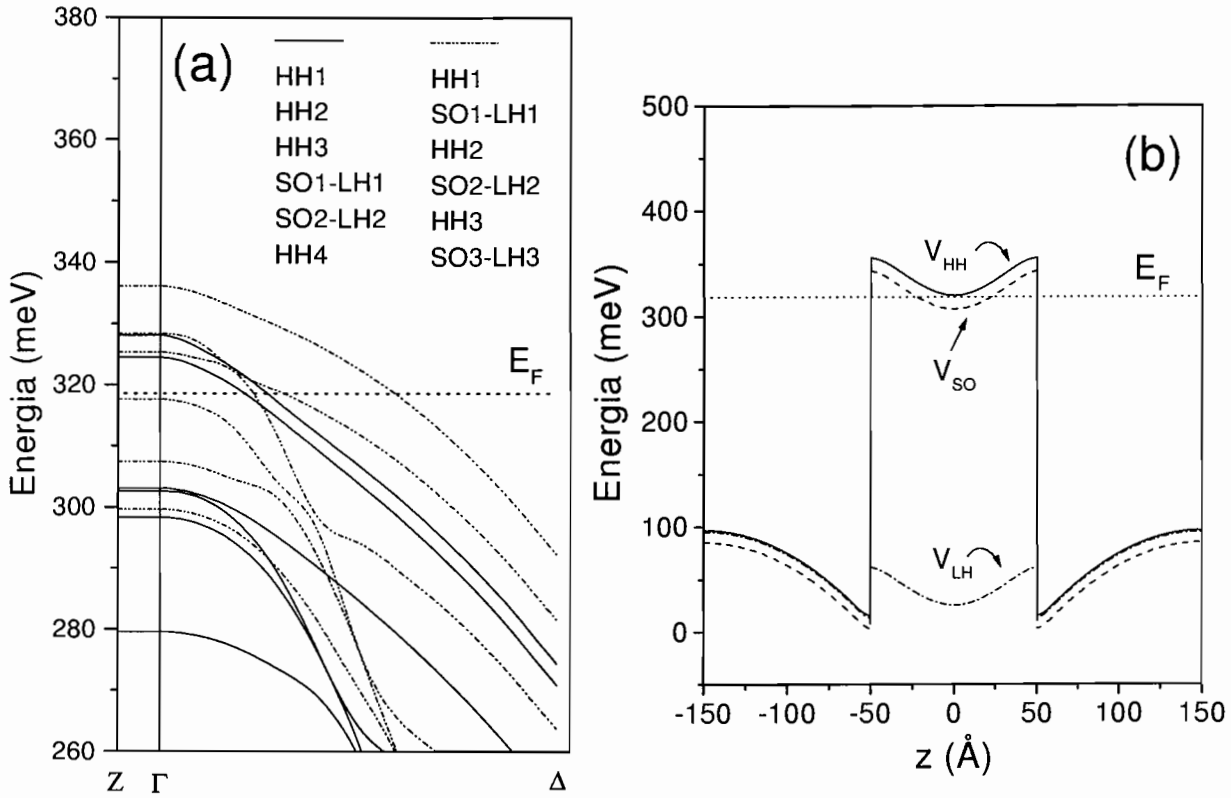


Figura 3.20: Mesmo que a Figura 3.17 para um sistema com múltiplos poços quânticos tensionados de GaN/In_{0,3}Ga_{0,7}N com $d_p=200 \text{ \AA}$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D}=2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). A energia de *strain* é 97,11 meV.

iremos analisar a dependência das sub-bandas com a concentração de dopantes. Utilizaremos para esta análise o sistema de múltiplos poços quânticos GaN/In_xGa_{1-x}N, com $x=0,3$. A Figura 3.21 apresenta os níveis de energia no ponto Γ para múltiplos poços quânticos com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$. Os valores da barreira e da energia de *strain* são os mesmos do caso anterior. A concentração de aceitadores 3D é fixa em $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, e a espessura da camada dopada d_p varia de 60 \AA a 200 \AA . De acordo com os valores de d_p , a concentração de aceitadores 2D varia num intervalo de $6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} < N_{2D} < 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Também são indicados o nível de Fermi, E_F , e a profundidade mínima do poço devido ao *bending*, V_{min} . Analisando o gráfico vemos que para valores de $d_p \leq 100 \text{ \AA}$, temos apenas um nível ocupado, HH1. Para $d_p > 100 \text{ \AA}$ temos dois estados ocupados HH1 e HH2. A transição de um simples poço quântico para um duplo poço quântico acontece em $d_p \approx 170 \text{ \AA}$, pois HH2 passa a ter energia maior que V_{min} (ou seja, HH2 fica abaixo de V_{min}), indicando que há dois poços interagentes, como já mencionado. Este fato pode ter implicações importantes do ponto vista experimental, como medidas óticas, por exemplo, de fotoluminescência em heteroestruturas baseadas nos nitretos.

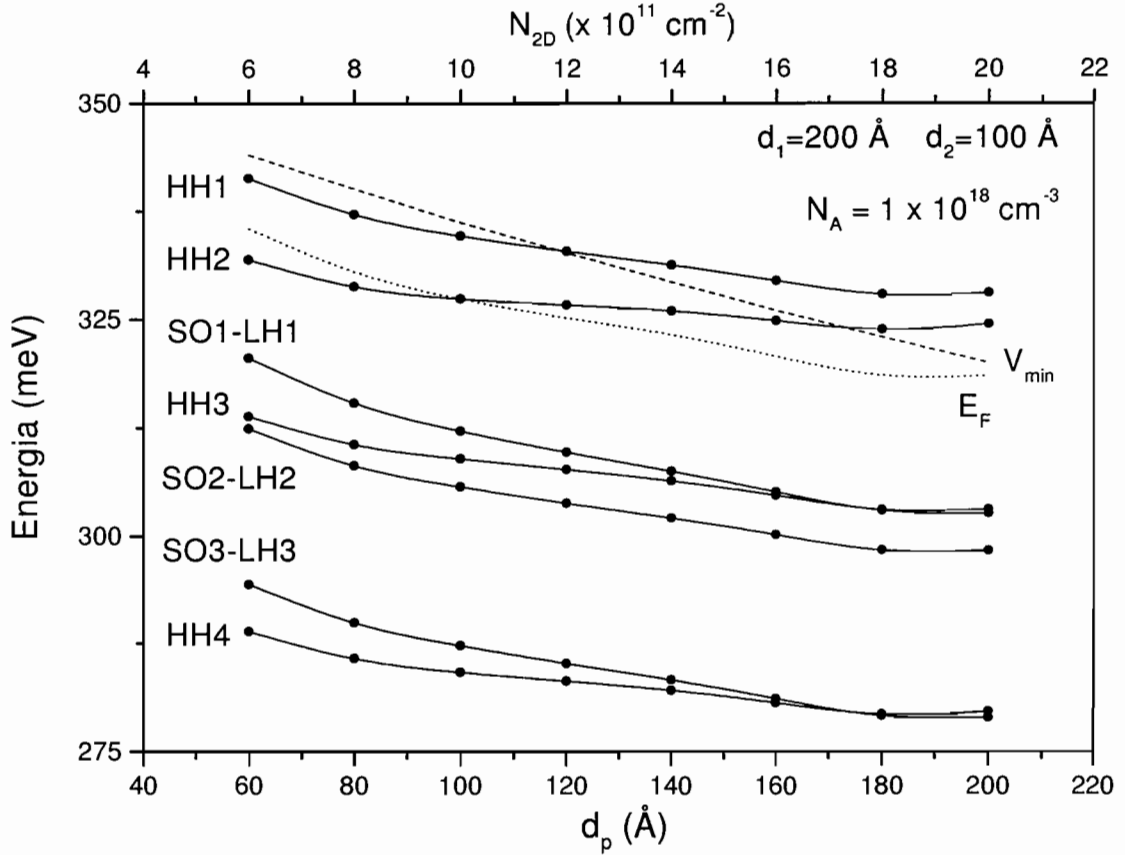


Figura 3.21: Múltiplos poços quânticos tensionados de GaN/In_{0,3}Ga_{0,7}N com $d_1 = 200 \text{ Å}$ e $d_2 = 100 \text{ Å}$, $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. São graficados os sete primeiros níveis de energia, a profundidade do potencial, V_{min} e o nível de Fermi, E_F em função da espessura de dopagem d_p (escala indicada embaixo) e em função da concentração N_{2D} (escala indicada no topo).

Ainda referente à Figura 3.21 podemos notar que V_{min} diminui praticamente de forma linear com o aumento de N_{2D} . Este comportamento é esperado uma vez que o *bending* aumenta com o aumento de N_{2D} . Em relação aos níveis de energia vemos que estes se alternam (SO1-LH1 com HH3 e SO3-LH3 com HH4). Isto ocorre por causa do *bending*, como explicado anteriormente para as Figuras 3.17 e 3.18.

Para entender melhor estas características, iremos estudar a distribuição de cargas para estes mesmos sistemas da Figura 3.21. Apresentamos na Figura 3.22, a densidade de carga de buracos livres 3D, $p(z)$, como função de z . Como na Figura 3.21, d_p varia de 60 Å a 200 Å. Podemos ver na figura que para concentrações 2D pequenas, $p(z)$ tem um máximo no centro do poço, com uma larga distribuição. Conforme a distribuição N_{2D} aumenta, o sistema passa a ter dois máximos. Então, para $N_{2D} \gtrsim 1,2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, podemos assumir que existem dois canais de portadores diferentes, presentes nestes sistemas. Um comportamento similar descrito aqui pôde ser visto para sistemas de AlGaIn/GaN.

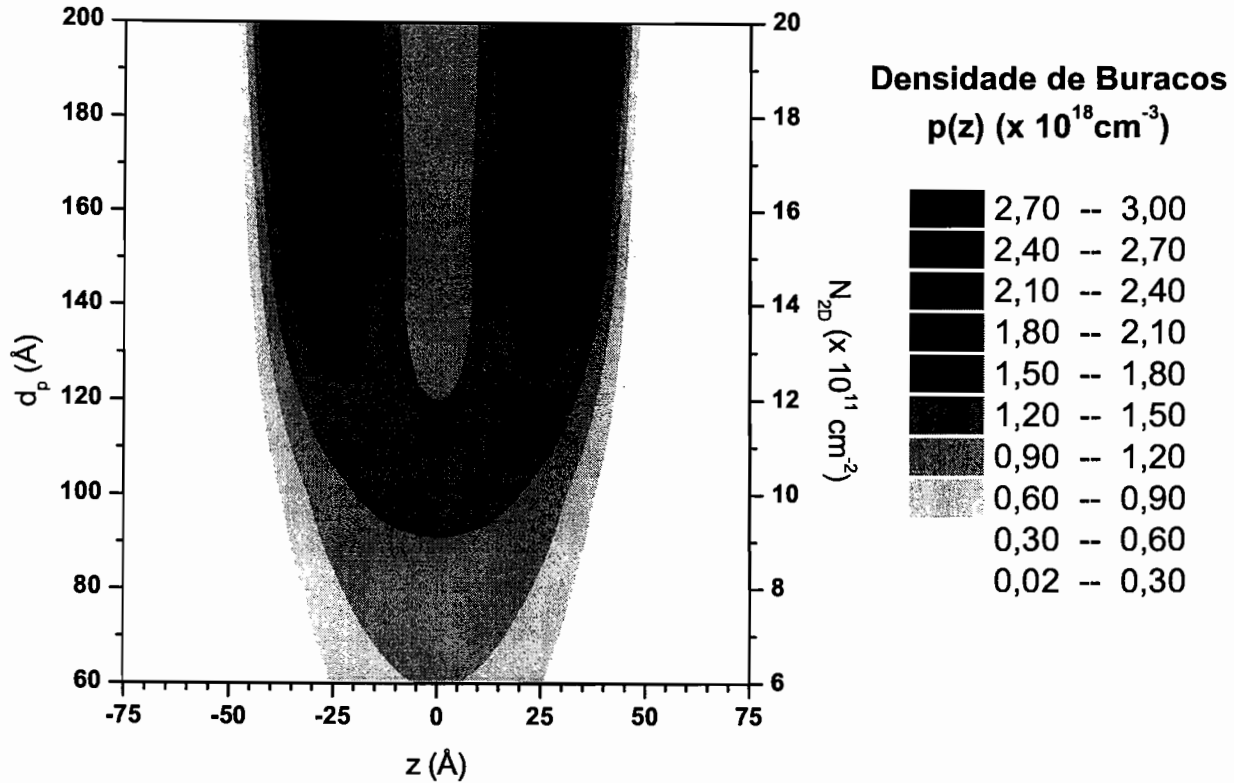


Figura 3.22: Densidade de carga de buracos livres 3D, $p(z)$, como função de z para múltiplos poços quânticos tensionados de GaN/In_{0,3}Ga_{0,7}N com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. A espessura de dopagem d_p é variada de 60 \AA a 200 \AA (escala indicada a esquerda), e a concentração N_{2D} é variada de 6 a $20 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (escala indicada a direita).

Feita a análise para múltiplos poços quânticos de AlGa_{0,3}N/GaN e GaN/InGa_{0,7}N, nosso próximo passo é estudar as super-redes a fim de determinarmos as influências das cargas nestas estruturas.

3.5.2 Super-redes de AlGa_{0,3}N/GaN e GaN/InGa_{0,7}N Dopadas

Apresentaremos nesta seção super-redes dopadas, com períodos $d \leq 90 \text{ \AA}$, para AlGa_{0,3}N/GaN e GaN/InGa_{0,7}N. Consideraremos que as super-redes não estão tensionadas e tomaremos valores da composição da liga para $x \geq 0,3$, como justificado anteriormente. A dopagem será sempre feita em toda a barreira, ou seja $d_p = d_1$. A nomenclatura e o zero de energia são os mesmos adotados para múltiplos poços quânticos dopados (períodos grandes).

Na Figura 3.23 mostramos a estrutura de bandas e os perfis de potencial para uma super-rede de Al_{0,3}Ga_{0,7}N/GaN, com $d_1 = 60 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. A concentração de aceitadores

é $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). Também é apresentado o poço não dopado (linhas tracejadas- pontilhadas-pontilhadas) para comparação.

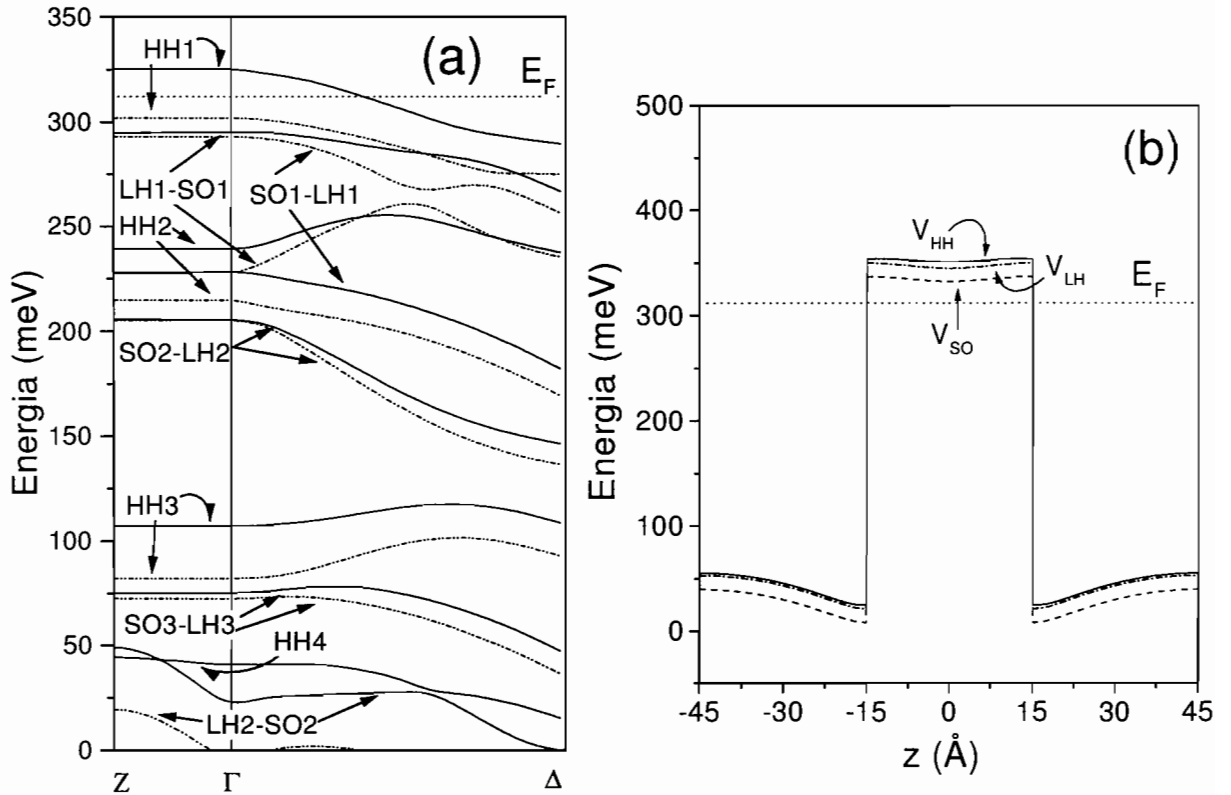


Figura 3.23: Estrutura de bandas (a) e perfis de potencial (b) para uma super-rede de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_1 = 60 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$, $d_p = 60 \text{ \AA}$, $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). A notação e o zero de energia são os mesmos da Figura 3.17.

Na Figura 3.24 mostramos resultados semelhantes para $\text{GaN}/\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$, onde a concentração de aceitadores ionizados é menor, $N_{2D} = 1,8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Para este caso em particular, não pudemos considerar que todos os aceitadores são ionizados, caso contrário estaríamos fora do limite do nível aceitador imposto no início, 200 meV. Podemos notar que para super-redes praticamente não há entortamento (*bending*) do potencial na região do poço. As razões para este comportamento são as mesmas discutidas anteriormente para o caso mostrado na Figura 3.18: contribuição do potencial de Coulomb e troca-correlação no potencial total. A consequência é que os níveis de energia ficam mais próximos do fundo do poço por causa destes efeitos, como podemos perceber quando comparamos com o caso não dopado. Estas contribuições ao potencial total são tão importantes que podem modificar a forma do *bending*, tornando sua forma oposta ao caso dos poços isolados, como apresentado na Figura 3.25. Nesta figura apresentamos

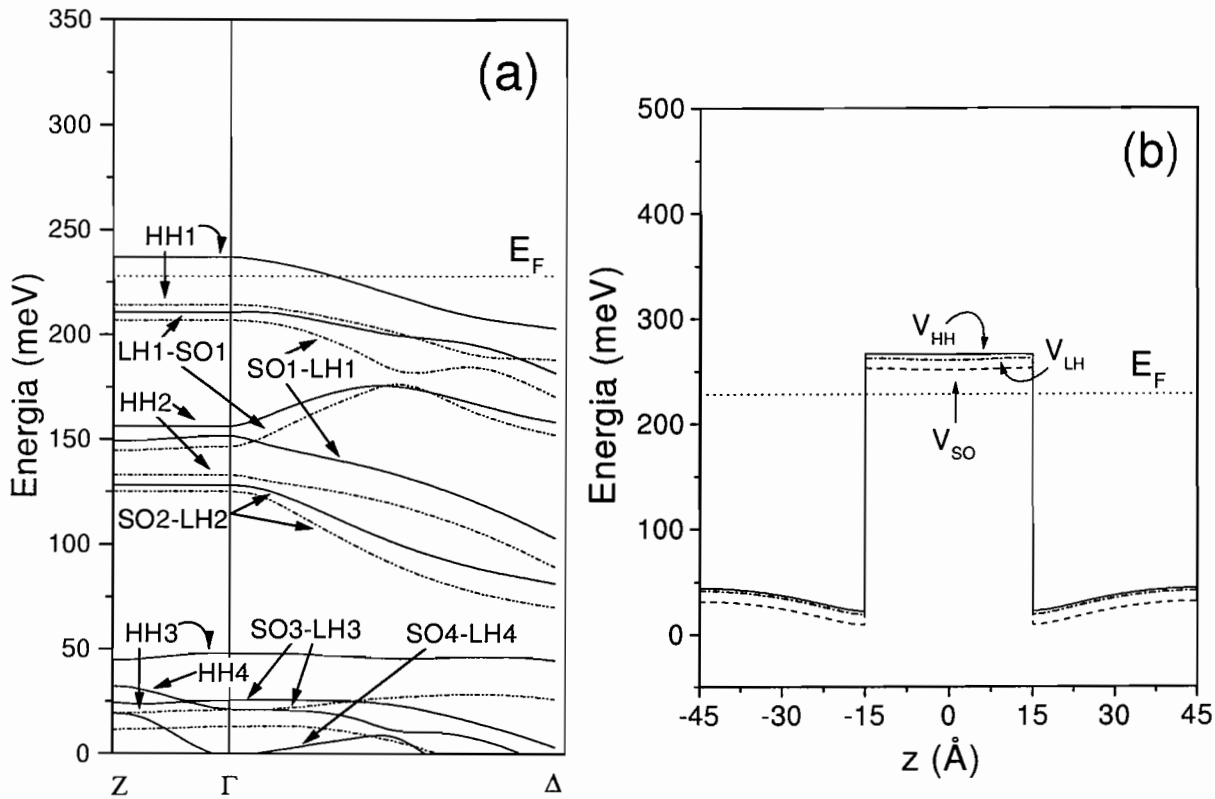


Figura 3.24: Estrutura de bandas (a) e perfis de potencial (b) para uma super-rede de GaN/ $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ com $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 1,8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$) e $d_1 = 60 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$. A notação e o zero de energia são os mesmos da Figura 3.17.

uma super-rede não tensionada de GaN/ $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ com $N_A = 3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 1,2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). Também são indicados os perfis de potencial para dois poços quânticos, evidenciando a mudança da forma do *bending*. Discutiremos na sub-seção seguinte as razões físicas para este comportamento.

Outro ponto a ser mencionado sobre estes três casos (Figuras 3.23, 3.24 e 3.25) é que o comportamento característico de super-rede só irá aparecer para um período $d \leq 70 \text{ \AA}$ ou para níveis bem mais altos, já próximos ao topo da barreira, devido aos altos valores de massas efetivas dos nitretos. A mudança dos níveis de energia, quando comparamos os casos dopado e não dopado é mais drástica para as super-redes de GaN/ InGaN . Isto ocorre devido ao fato de que a barreira é mais rasa no caso do GaN/ InGaN .

Outra característica importante que deve ser mencionada é que a concentração de aceitadores pode alcançar valores altos, $N_A = 1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$, nas super-redes de AlGaIn/GaN e InGaIn/GaN com períodos $d \leq 70 \text{ \AA}$. Esta conclusão pôde ser feita a partir de uma análise sistemática de variação da concentração de aceitadores em super-redes de ambos

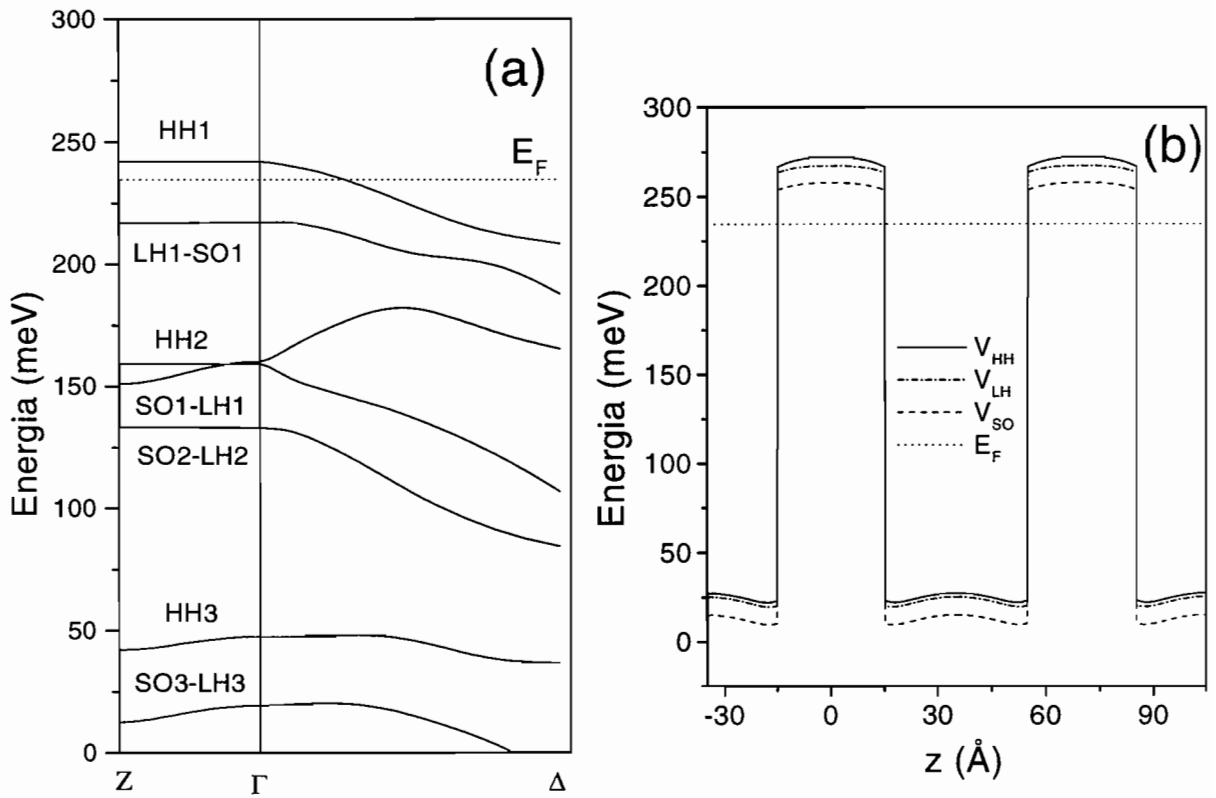


Figura 3.25: Estrutura de bandas (a) e perfis de potencial (b) para uma super rede semelhante à da Figura 3.24, com $d_1 = 40 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$, $d_p = 40 \text{ \AA}$, $N_A = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 1,2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). São apresentados os perfis de potencial para dois poços quânticos adjacentes. A notação e o zero de energia são os mesmos da Figura 3.17.

os sistemas. Isto é consistente com resultados experimentais que mostram densidades de buracos altas para super-redes com períodos curtos em estruturas wurtzita [121, 124, 207].

No próximo item descreveremos os efeitos do potencial de troca-correlação e do potencial de Coulomb em poços isolados e super-redes de AlGaIn/GaN e GaN/InGaIn, e como estes efeitos afetam a forma do *bending*.

3.5.3 Efeitos do Potencial de Troca-Correlação e do Potencial de Coulomb

As contribuições do potencial de troca-correlação e do potencial de Coulomb ao potencial total serão analisadas para super-redes e poços isolados. Na Figura 3.26 mostramos o potencial de troca-correlação, V_{XC} (linha tracejada), o potencial de Coulomb, V_C (linha pontilhada) e o potencial total ($V_{XC} + V_C$) (linha sólida) que os buracos pesados sentem

numa heteroestrutura dopada de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ para dois diferentes períodos: uma super-rede de período $d = 90 \text{ \AA}$ e múltiplos poços quânticos de $d = 300 \text{ \AA}$. O zero de energia se encontra no topo do potencial de Coulomb na barreira.

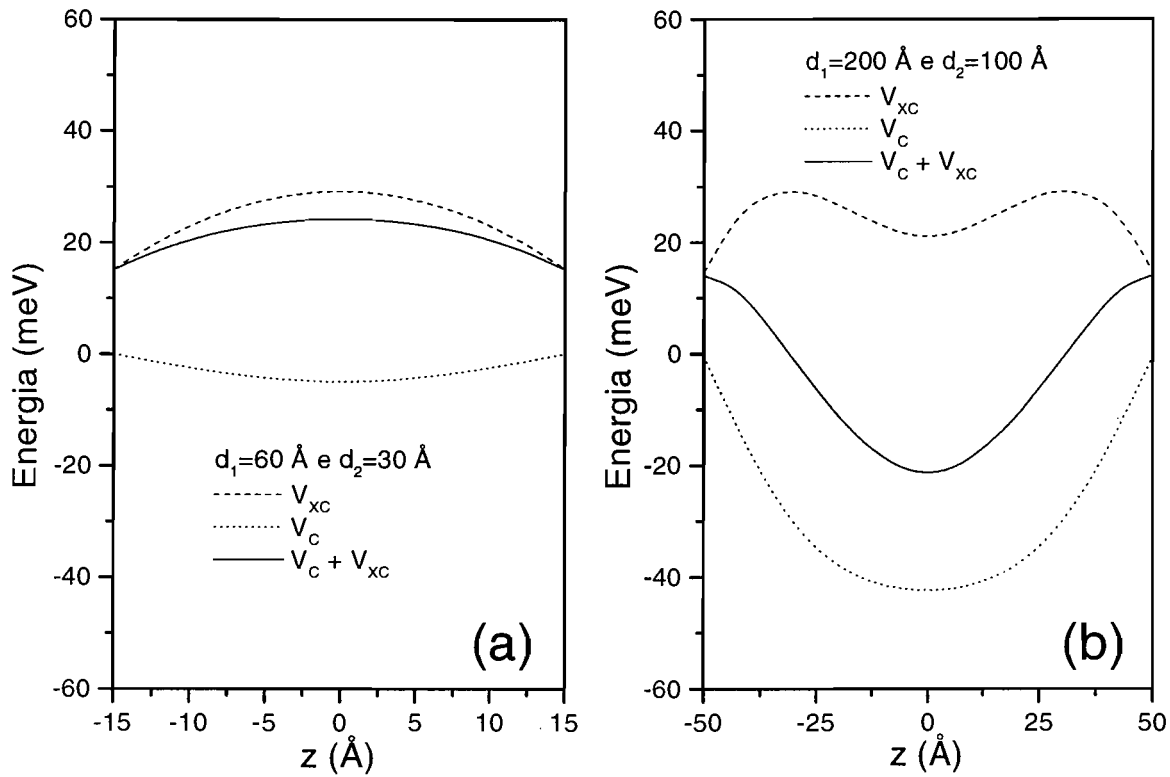


Figura 3.26: Potenciais de troca-correlação (V_{XC}), Coulomb (V_C) e total ($V_{XC} + V_C$) que os buracos pesados sentem numa heteroestrutura de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ dopada completamente na barreira com: (a) $d_1 = 60 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. A concentração de aceitadores é $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ em ambos os casos. O zero de energia é o mesmo da Figura 3.17, e mostramos os perfis de potencial somente na região interna ao poço.

Ambos os sistemas estão dopados completamente na barreira com $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Na Figura 3.26(a) temos uma super-rede com $d_1 = 60 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$, sendo que $N_{2D} = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e na Figura 3.26(b) temos múltiplos poços quânticos com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$, sendo que $N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Apesar dos perfis de potencial totais serem diferentes, o valor máximo de V_{XC} é praticamente o mesmo para ambos os casos (aproximadamente 29 meV). Para entender a diferença entre estes dois sistemas, temos que analisar o potencial de Coulomb, V_C . No caso da super-rede V_C é bem raso, da ordem de 5 meV, enquanto que para múltiplos poços quânticos V_C é profundo, da ordem de 42 meV. Isto acontece por causa da localização das cargas e dos valores altos de massa efetiva. Desta forma para a super-rede a contribuição mais importante para o potencial total é

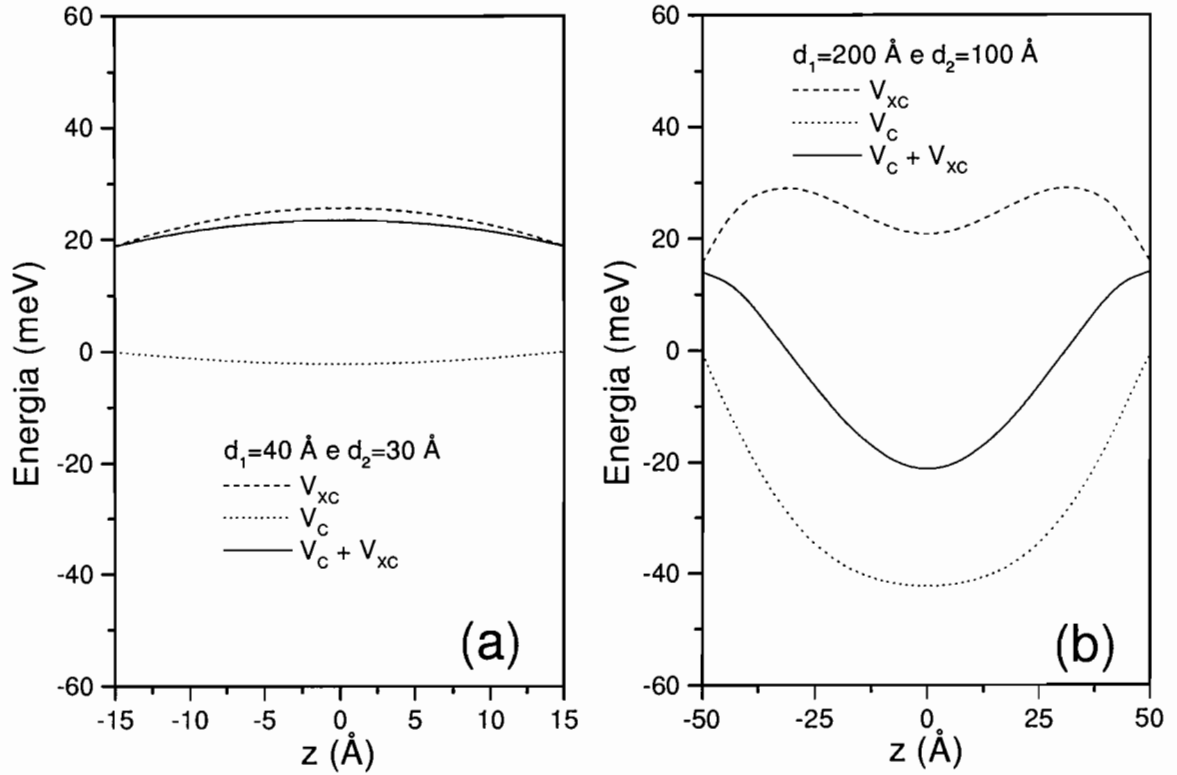


Figura 3.27: Mesmo que Figura 3.26, para sistemas de GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N com: (a) $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$.

o potencial de troca-correlação, enquanto que para o poço isolado a contribuição mais importante é o potencial de Coulomb. Na Figura 3.27 apresentamos resultados análogos, porém para GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N, onde o único parâmetro diferente é em (a), a largura da barreira, que é $d_1 = 40 \text{ \AA}$. Todos os outros dados e notações são os mesmos da Figura 3.17. Obtemos exatamente o mesmo comportamento já descrito para o AlGaIn/GaN. Mudam apenas os pontos de máximo de V_{xc} e o potencial de Coulomb, para a super-rede, de aproximadamente 25 meV e 2 meV, respectivamente.

Para as super-redes, ou seja, períodos estreitos, podemos ver que o potencial de troca-correlação tem uma contribuição muito importante. Para analisar estes aspectos vamos voltar ao sistema apresentado na Figura 3.26(a), que é a super-rede de Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN, com $d_1 = 60 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$. Na Figura 3.28(a) mostramos as sub-bandas e minibandas de valência (linha sólida) e o nível de Fermi E_F considerando os efeitos de troca-correlação e para comparação mostramos também estas mesmas sub-bandas e minibandas (linha tracejada-pontilhada-pontilhada) e o correspondente nível de Fermi E_F^{NOXC} sem considerar estes efeitos. Na Figura 3.28(b) apresentamos os perfis de potencial, V_{HH} , V_{LH} e V_{SO} , incluindo o termo de troca-correlação e apresentamos o potencial de Coulomb,

V_{NOXC} , que não inclui este termo. Cabe ressaltar aqui que este potencial, V_{NOXC} , é o mesmo “sentido” pelos buracos pesados e leves, e para os buracos de *split-off* ele estará deslocado de Δ . Somente haverá diferenciação entre os potenciais quando incluirmos o potencial de troca-correlação, pois para cada portador este será diferente (veja seção (2.7)).

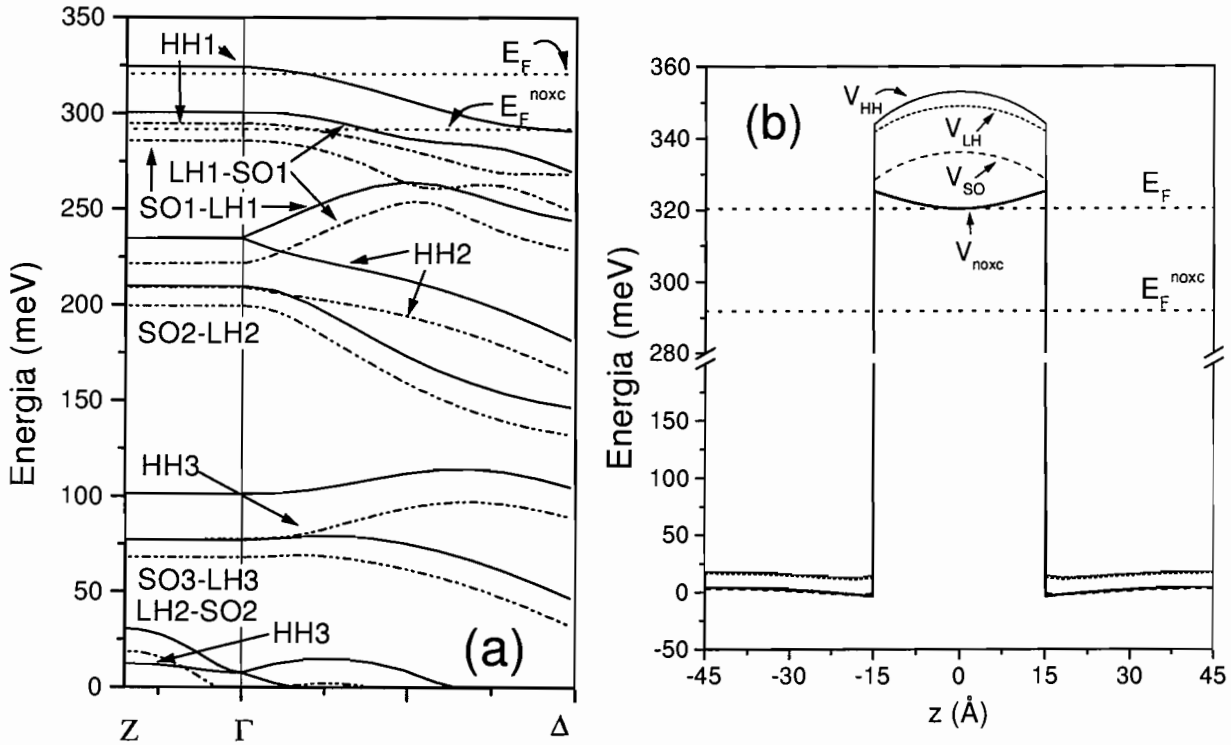


Figura 3.28: Mesmo sistema da Figura 3.26(a). A notação e o zero de energia são os mesmos utilizados na Figura 3.17. Em (a) é apresentada a estrutura de bandas (linha sólida). Para comparação é mostrada também a estrutura de bandas sem a inclusão dos efeitos de troca-correlação (linha tracejada-pontilhada-pontilhada). Em (b) apresentamos os perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida), buracos leves, V_{LH} (linha tracejada-pontilhada) e buracos de *split-off*, V_{SO} (linha tracejada). O nível de Fermi E_F (linha pontilhada) também é indicado. V_{NOXC} e E_F^{NOXC} são o potencial de buracos pesados e o nível de Fermi, respectivamente, sem os efeitos de troca-correlação.

Podemos ver que os efeitos de troca-correlação além de modificarem a forma do potencial, como já discutido anteriormente, também modificam drasticamente o comportamento da banda de valência da estrutura. Isto pode ser visto quando comparamos as diferenças entre os níveis de energia para os primeiros estados. Quando os efeitos

de troca-correlação são considerados, a diferença entre HH1 e LH1-SO1 é da ordem de 25 meV, enquanto que no caso em que desprezamos estes efeitos temos esta diferença em aproximadamente 10 meV. Comparando os níveis de Fermi, E_F e E_F^{NOXC} , a diferença é de 30 meV. Apesar da forma do *bending* ser diferente para o caso com e sem troca-correlação podemos perceber que somente um nível de buraco pesado é ocupado. Podemos notar também que em $z = 0$ a diferença de energia entre V_{HH} e V_{NOXC} pode chegar a 50 meV. Desta forma devemos levar em conta os efeitos de troca-correlação para obter uma descrição realística dos sistemas que estamos analisando.

Em resumo, em nossas investigações mostramos que os efeitos de tensão, o uso de diferentes parâmetros de massa efetiva para a barreira e para o poço e a interação de spin-órbita desempenham um papel fundamental na descrição da estrutura de bandas de valência de múltiplos poços quânticos e super-redes de AlGaN/GaN e GaN/InGaN dopados e não dopados. Com relação aos sistemas dopados, a inclusão do potencial autoconsistente, bem como da densidade de cargas são essenciais à correta descrição do sistema. Além disso os efeitos de troca-correlação podem alterar significativamente a forma do *bending* do potencial total, e portanto também devem ser levados em conta. Todas estas características serão extremamente importantes para a obtenção de um modelo realista das propriedades óticas e de transporte nestes sistemas. Cabe ressaltar aqui também que, apesar de obtermos apenas estados de buracos pesados ocupados nos sistemas dopados, não podemos desprezar a influência das outras bandas, bem como a autoconsistência e os efeitos de muitos corpos. Este fato foi mostrado através do estudo das propriedades óticas, em estruturas wurtzita, para sistemas onde a densidade de cargas é gerada por fotoexcitação ou injeção de corrente [95, 98, 127].

No próximo capítulo iremos aplicar nosso método a sistemas dopados e não dopados de poços quânticos e super-redes baseados nos arsenetos, onde determinaremos as estruturas de bandas de valência e perfis de potencial dos portadores. Mostraremos que os efeitos de tensão e da inclusão da banda de *split-off*, bem como a diferença dos parâmetros de Luttinger são fundamentais para uma descrição correta destes sistemas. Além disso também apresentaremos resultados para um poço quântico de AlGaAs/GaAs com dopagem planar tipo-p no centro do poço, comprovando que podemos calcular qualquer configuração de potencial.

Capítulo 4

Aplicações em Heteroestruturas Derivadas dos Arsenetos

4.1 Introdução

Aplicamos nosso modelo até o momento para os nitretos. Neste capítulo iremos estender as aplicações do método desenvolvido para outros materiais, como poços quânticos e super-redes envolvendo arsenetos. Analisaremos os efeitos de tensão e da inclusão da banda de *split-off*, quando houver, e da diferença dos parâmetros de Luttinger na barreira e no poço. Além disso, também estudaremos os efeitos da dopagem nestes sistemas e os compararemos com os nitretos [170].

Os poços quânticos e super-redes derivados de arsenetos (GaAs, AlAs, InAs, AlGaAs, InGaAs, etc) vêm sendo amplamente aplicados em diversos dispositivos optoeletrônicos e de transporte nas últimas décadas [1]. Dentre estes, iremos aqui tratar de sistemas envolvendo InGaAs por apresentarem características interessantes [174]. Por causa do pequeno valor da energia do *gap* para o InAs (0,42 eV), comparado ao GaAs (1,52 eV) e ao AlAs (2,15 eV), as descontinuidades das bandas de valência e de condução nas heteroestruturas de InGaAs/GaAs são bem grandes, tornando estas heteroestruturas adequadas para a dopagem modulada, e para a fabricação de *lasers* e MODFETs [175, 176]. Os *lasers* de GaAs/InGaAs/GaAs tensionados são mais estáveis do que os *lasers* de AlAs/GaAs/AlAs. Em relação aos MODFETs, é possível obter alta velocidade com apenas 40% de In na liga, ao passo que em sistemas como Si/SiGe é necessário ter 75% de Ge na liga, para o mesmo resultado.

Apresentadas as características de sistemas de InGaAs/GaAs iremos determinar as estruturas de bandas de valência. Porém, antes iremos mostrar alguns sistemas da literatura reproduzidos para poços quânticos de AlGaAs/GaAs. Estes foram os primeiros

testes realizados em sistemas dopados, para verificar se nosso método estava adequado quando consideramos cargas.

4.2 Poços Quânticos de AlGaAs/GaAs Reportados na Literatura

Nesta seção iremos mostrar alguns testes iniciais que reproduzem dados da literatura. O que demonstra que o programa funciona para sistemas dopados, para qualquer tipo de perfil de dopagem e também reproduz resultados em outras direções sem ser a $\langle 001 \rangle$. Paralelamente ao projeto de doutoramento foram desenvolvidos em colaboração com o Prof. Dr. Guilherme M. Sipahi da USP, São Carlos, estudos de sistemas com direções de crescimento $\langle 311 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$. Desta maneira estas direções também foram incorporadas neste programa [208] como mostraremos a seguir, em particular para a direção $\langle 111 \rangle$.

O primeiro teste foi para um sistema, da literatura [209], de múltiplos poços quânticos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crescidos na direção $\langle 111 \rangle$ com $x=0,27$, largura da barreira $d_1 = 235 \text{ \AA}$ e largura do poço $d_2 = 55 \text{ \AA}$. Ainda consideramos um sistema sem cargas. Os autores fornecem resultados experimentais, obtidos através de espectros de fotorefletância. Na Tabela 4.1 mostramos os parâmetros utilizados para os cálculos, sendo que as massas efetivas estão em função de m_0 , m_e^* é a massa efetiva do elétron e ϵ é a constante dielétrica do GaAs [5].

A matriz 6×6 de Luttinger-Kohn a ser resolvida se reduz a uma matriz 4×4 , ou seja, a banda de *split-off* é desprezada pois Δ é grande para estes sistemas. Estas considerações também serão feitas nos outros sistemas que envolvem GaAs e que mostraremos adiante.

Também assumiremos os mesmos parâmetros de Luttinger (do GaAs) tanto na barreira como no poço. Os outros parâmetros são dados na direção $\langle 001 \rangle$ e o programa irá através de uma matriz de rotação, determinar os autoestados e autofunções na direção $\langle 111 \rangle$. Os estados na banda de condução foram determinados a partir de outro programa desenvolvido no grupo, que resolve numericamente a equação de Schrödinger de uma banda para um poço isolado. Na Tabela 4.2 são mostradas as transições eletrônicas interbandas como obtidas na Ref. [209] e aquelas obtidas a partir dos nossos cálculos. A nomenclatura E1 e E2 indica o primeiro e segundo nível eletrônico, respectivamente. A nomenclatura é a mesma adotada no Capítulo 3, com a classificação de bandas feita no ponto Γ .

Como podemos observar as diferenças relativas entre as transições eletrônicas obtidas por nós e experimentalmente estão em bom acordo.

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados para múltiplos poços quânticos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ($x=0,27$) na direção $\langle 001 \rangle$. As massas efetivas são dadas em função da massa do elétron m_0 [5]. A altura da barreira, também é indicada.

	GaAs
γ_1	6,85
γ_2	2,10
γ_3	2,90
Barreira na banda de valência (meV)	234
Barreira na banda de condução (meV)	115
ε	12,3
$m_{hh}^*(m_0)$	0,34
$m_{lh}^*(m_0)$	0,087
$m_e^*(m_0)$	0,067
Δ (meV)	340
E_g (eV)	1,51

Tabela 4.2: Transições eletrônicas para múltiplos poços quânticos de $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$.

	experimental [209]	nosso cálculo
E1-HH1 (meV)	1586	1590
E1-LH1 (meV)	1622	1616
E1-HH3 (meV)	1653	1656
E2-HH2 (meV)	1771	1789

A seguir realizamos outro cálculo para um poço quântico isolado dopado tipo-p de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ com $x=0,3$ crescido na direção $\langle 001 \rangle$ e comparamos com o resultado da literatura apresentado na Ref. [17], que resolve este sistema através do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, utilizando a matriz de Luttinger-Kohn 4×4 e resolvendo a equação de Poisson. Efeitos de troca também são levados em conta dentro da aproximação da densidade local. Dentro de um processo autoconsistente são determinados os estados de buracos para esta estrutura [17]. Os parâmetros γ 's, Δ e ε são os mesmos dados na Tabela 4.1, cujos valores coincidem com os da Ref. [17]. A altura da barreira é de 150 meV para a banda de valência, $d_2 = 50 \text{ \AA}$ e $d_1 = 500 \text{ \AA}$ (valor adotado para assegurar que o poço esteja isolado). Também é assumido que a camada do poço está uniformemente dopada com $N_{2D} = 1,43 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e que todas as cargas estão ionizadas. Além disso consideramos também o mesmo tipo de material na barreira e no poço (GaAs), como os autores. Na Figura 4.1 é mostrado o resultado de nosso cálculo e na Figura 4.2 é mostrado o resultado da

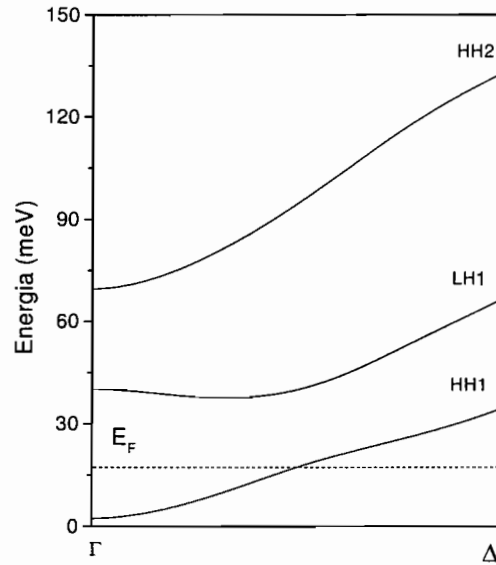


Figura 4.1: Estrutura de bandas para um poço isolado de AlGaAs/GaAs com $d_1 = 500 \text{ \AA}$, $d_2 = 50 \text{ \AA}$ e $N_{2D} = 1,43 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (são mostrados apenas os três primeiros níveis). Os níveis de energia são indicados HHn para buracos pesados e LHn para buracos leves. O zero de energia se encontra no fundo do poço. A energia de Fermi E_F é indicada por uma linha tracejada.

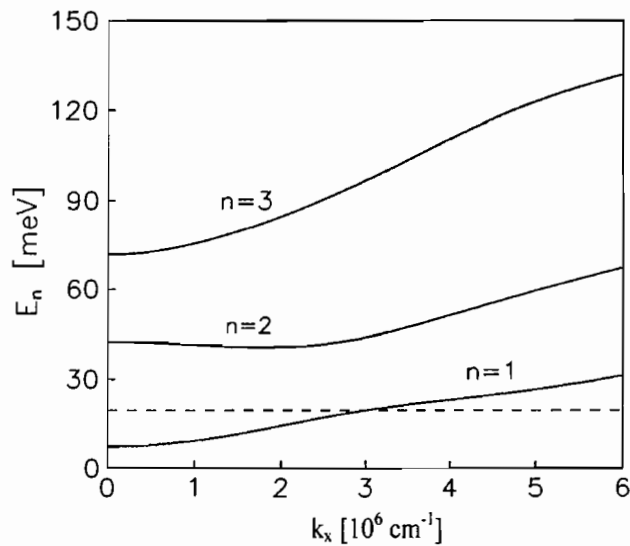


Figura 4.2: Estrutura de bandas obtida para o mesmo sistema da Figura 4.1, como extraída da Ref. [17]. O zero de energia se encontra também no fundo do poço. A direção Γ - Δ da Figura 4.1 corresponde a direção k_x . Os níveis HH1, LH1 e HH2, correspondem a $n=1$, 2 e 3, respectivamente.

Ref. [17]. Também é indicada a linha Γ - Δ que corresponde ao vetor k_x perpendicular ao eixo da super-rede. Neste caso a escala do eixo x de ambos gráficos das Figuras 4.2 e 4.1

coincidem.

Comparando ambas Figuras 4.1 e 4.2, percebemos que os resultados obtidos por nós estão de acordo com os resultados da literatura.

O último sistema estudado, dentre os sistemas teste, é uma super-rede de AlGaAs/GaAs. O valor de x não é especificado nas referências [15, 16], porém são fornecidas outras informações que são mostradas na Tabela 4.3. A largura do poço é de $d_2 = 60 \text{ \AA}$ e a largura da barreira $d_1 = 140 \text{ \AA}$. O perfil de dopagem foi feito de duas formas: dopado uniformemente no poço com uma concentração $N_A = 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e dopado numa região de 60 \AA no centro da barreira ($d_p = 60 \text{ \AA}$) com uma concentração $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Também é considerada uma energia de ionização de 35 meV a uma temperatura $T = 300 \text{ K}$. Isto mostra que os átomos não estão completamente ionizados, a carga real (concentração de buracos) do sistema deverá ser calculada a partir da expressão que determina a concentração de buracos em função da temperatura e da energia de ionização [210]:

$$p_v(T) = 2,5 \cdot \left(\frac{m_v^*}{m_0}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \cdot 10^{19} \cdot e^{-(E_F - E_A)/kT} \quad , \quad (4.1)$$

onde p_v é a concentração de buracos em cm^{-3} , m_v^* é a massa efetiva do buraco, no caso vamos considerar a de buraco pesado. Os autores utilizam um mesmo valor de massa efetiva para buracos pesados e leves; m_0 é a massa do elétron, T é a temperatura em Kelvin, E_A é a energia de ionização do aceitador, k é a constante de Boltzmann e E_F é a energia de Fermi.

Tabela 4.3: Parâmetros utilizados para super-redes de poços quânticos de AlGaAs/GaAs, extraídos das Refs. [15, 16]. A altura da barreira também é indicada.

	GaAs
γ_1	7,65
γ_2	2,41
γ_3	3,28
Barreira na banda de valência (meV)	130
ϵ	12,82
$m_{hh}^* (m_0)$	0,52
Δ (meV)	340

Um ponto importante a ser mencionado é que não foi fornecido pelos autores nas Refs. [15, 16] informações sobre a posição do nível de Fermi, nos sistemas, o qual entra na expressão (4.1). Dessa forma, ajustamos um melhor valor tal que os perfis de potencial

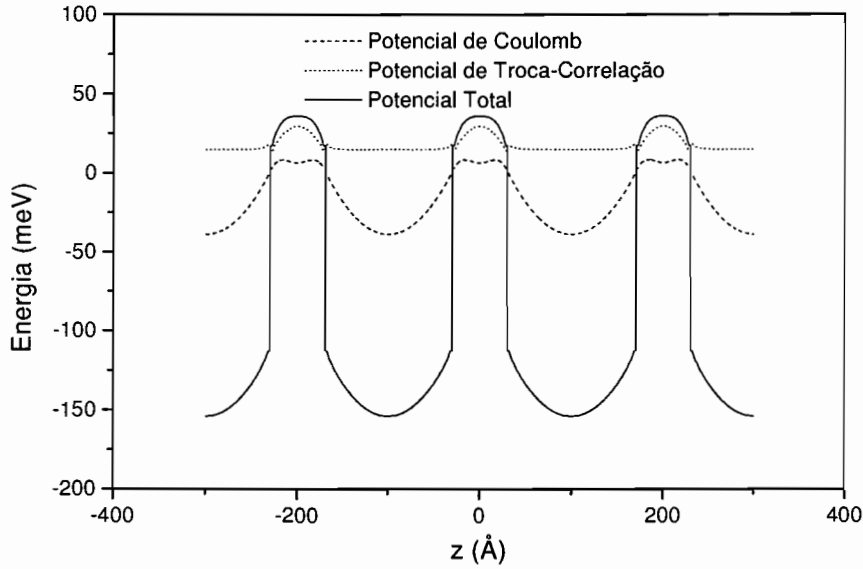


Figura 4.3: Perfis de potencial para uma super-rede de AlGaAs/GaAs dopada uniformemente no poço com $N_A = 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$. A linha sólida é o potencial total obtido autoconsistentemente, a linha tracejada é o potencial de Coulomb e a linha pontilhada é o potencial de troca-correlação. O zero de energia se encontra no nível de Fermi.

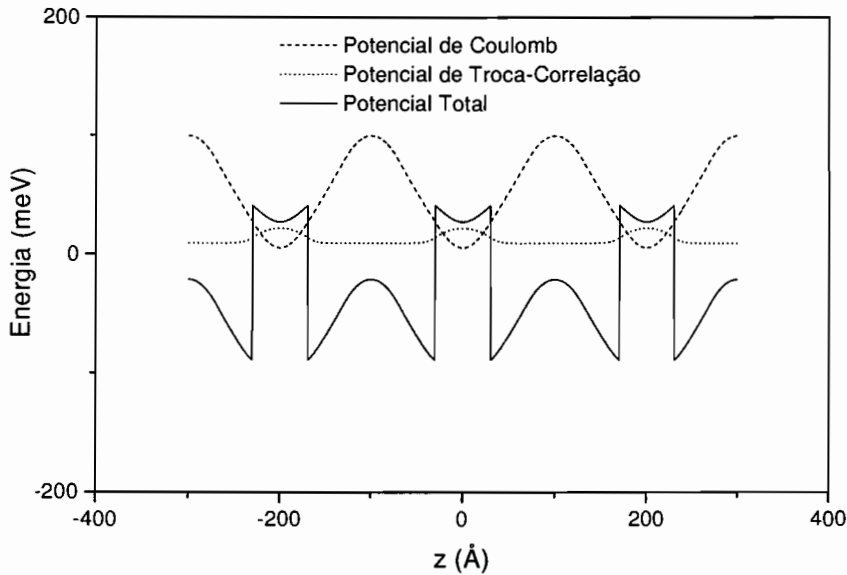


Figura 4.4: Perfis de potencial para uma super-rede de AlGaAs/GaAs dopada em uma região de 60Å no centro da barreira com $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. A linha sólida é o potencial total obtido autoconsistentemente, a linha tracejada é o potencial de Coulomb e a linha pontilhada é o potencial de troca-correlação. O zero de energia se encontra no nível de Fermi.

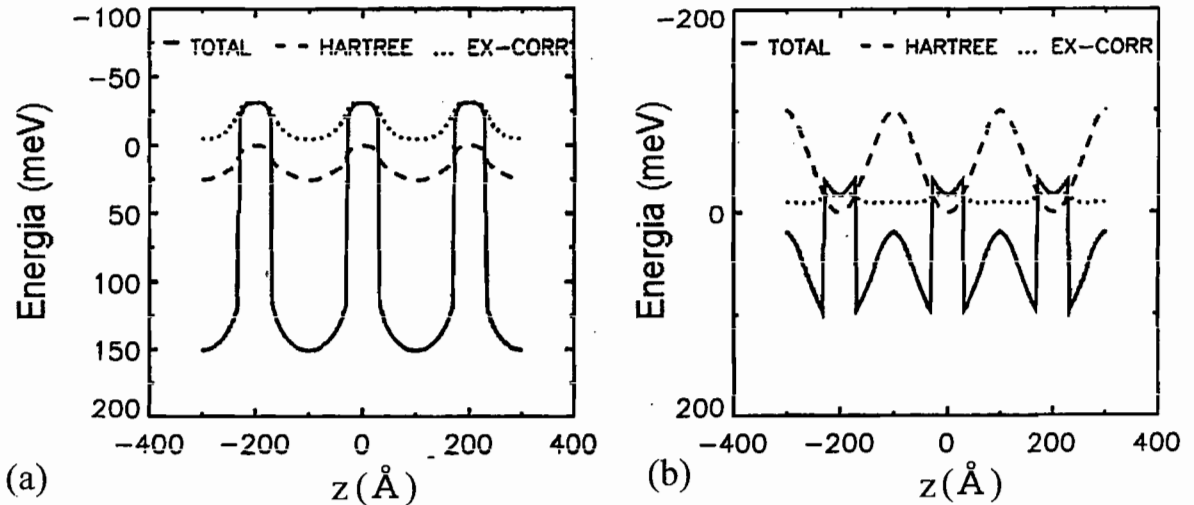


Figura 4.5: Perfis de potencial para uma super-rede de AlGaAs/GaAs, extraídos da Ref. [15], com (a) $N_A = 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$, dopada uniformemente no poço e (b) $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, dopada em uma região de 60 Å no centro da barreira. A linha sólida é o potencial total obtido autoconsistentemente, a linha pontilhada é o potencial de Hartree (que se compara ao nosso potencial de Coulomb) e a linha pontilhada é o potencial de troca-correlação. O zero de energia se encontra no nível de Fermi [15].

fossem reproduzidos. Nas Refs. [15, 16], estes sistemas são resolvidos através do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, utilizando a matriz de Luttinger-Kohn 4×4 . Também são levados em conta efeitos de troca-correlação dentro da aproximação da densidade local, considerando um único tipo de portador (buraco pesado). Nossos resultados são mostrados nas Figuras 4.3 e 4.4, e os resultados obtidos da Ref. [15] são mostrados na Figura 4.5.

Comparando as Figuras 4.3 e 4.4, obtidas através de nossos cálculos com a Figura 4.5, obtida pelos autores da Ref. [15] podemos notar que os resultados são bastante semelhantes, as diferenças que ocorrem, especialmente para o caso onde a dopagem é feita no poço, devem-se à falta de informações mais detalhadas a respeito da energia de Fermi. De qualquer maneira podemos observar que o comportamento e magnitude dos potenciais são muito parecidos. Destes resultados também podemos perceber que a contribuição do potencial de Coulomb é maior no caso onde a dopagem é feita na barreira do que aquela em que é feita dentro do poço. Isto ocorre porque a blindagem é mais efetiva no caso de dopagem no poço. Portanto, essas diferentes contribuições causarão uma mudança no potencial total, principalmente no caso da dopagem feita na barreira, onde o potencial de Coulomb supera o potencial de troca-correlação. Este comportamento também ocorreu com os poços quânticos e super-redes de nitretos, conforme descrito na seção (3.5.3).

Assim, através dos cálculos efetuados pudemos comprovar a adequação do modelo

para sistemas dopados tipo-p para qualquer perfil de dopagem e direção, no caso as direções $\langle 111 \rangle$ e $\langle 001 \rangle$. A seguir iremos apresentar sistemas dopados e não dopados de poços quânticos e super-redes de InGaAs/GaAs, analisando diversos efeitos, tais como diferença dos parâmetros de Luttinger, inclusão da banda de *split-off*, efeitos de tensão e efeitos de troca-correlação.

4.3 Poços Quânticos e Super-Redes de GaAs/InGaAs Dopados e Não Dopados

4.3.1 Poço Quântico de GaAs/InGaAs Não Dopado

Nesta seção estudaremos os efeitos da diferença dos parâmetros de Luttinger para múltiplos poços quânticos de GaAs/In_{0,5}Ga_{0,5}As, com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$ [170]. Neste caso não iremos considerar os efeitos de tensão, pois queremos enfatizar apenas os efeitos da diferença dos materiais na barreira e no poço. A notação é a mesma adotada no Capítulo 3. Os valores utilizados no cálculo foram extraídos da literatura e são apresentados na Tabela 4.4. Para a liga interpolamos linearmente os valores dos parâmetros do *bulk* de GaAs e InAs. Utilizamos 40 % de descontinuidade da banda de valência. Todavia, existem discussões na literatura a respeito das descontinuidades das bandas de valência nestes materiais [174].

Tabela 4.4: Parâmetros do *bulk* para o GaAs e o InAs, obtidos da literatura [187, 189].

	GaAs	InAs	AlAs
γ_1	7,65	19,67	4,04
γ_2	2,41	8,37	0,78
γ_3	3,28	9,29	1,57
Δ (eV)	0,34	0,38	0,28
a (\AA)	5,65	6,058	5,66
$m_{hh}^*(m_0)$	0,34	0,35	0,41
$m_{lh}^*(m_0)$	0,094	0,026	0,153
E_g^F (eV)	1,52	0,418	3,13
b (eV)	-2	-1,8	-2
C_{11} (GPa)	112,6	83,3	120,2
C_{12} (GPa)	57,1	45,3	57,0

Na Figura 4.6 apresentamos a estrutura de bandas para o sistema descrito acima. A linha tracejada indica que estamos considerando parâmetros de Luttinger iguais e a linha

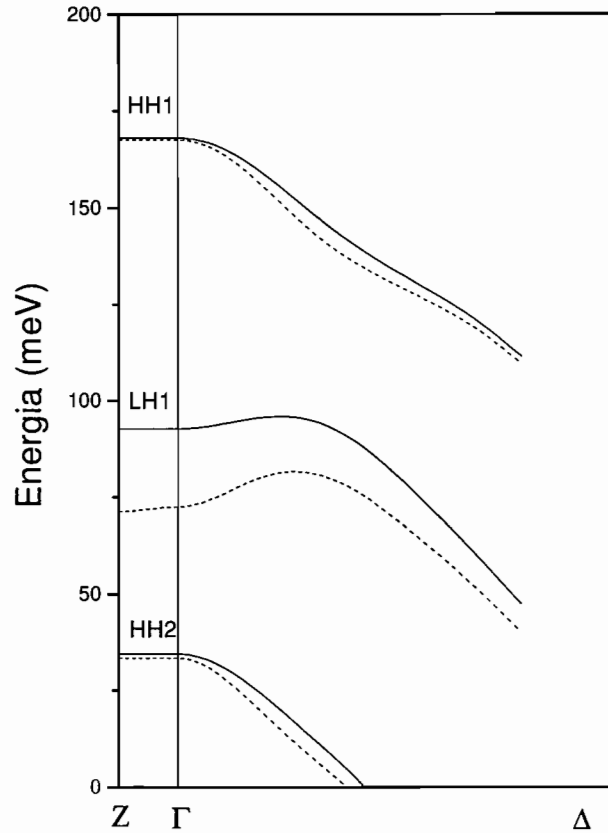


Figura 4.6: Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ para uma heteroestrutura de múltiplos poços quânticos de GaAs/In_{0,5}Ga_{0,5}As, sem tensão, com $d_1 = 200$ Å e $d_2 = 30$ Å. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é 220,4 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.

sólida indica que estamos considerando estes parâmetros diferentes no poço e na barreira. Podemos observar um comportamento similar ao obtido anteriormente para sistemas de AlGaIn/GaN e GaN/InGaIn. Contudo as diferenças entre os parâmetros de Luttinger do InAs e do GaAs são maiores do que entre o AlN(InN) e o GaN (ver Tabela 4.4 e Tabelas 3.2), logo a diferença entre os níveis de energia, linhas sólidas e linhas tracejadas, será ainda mais significativa. Particularmente a diferença é maior para o estado de buraco leve, e a razão, de novo, vem do fato de que a massa efetiva do buraco leve é muito menor do que a de buraco pesado, sendo portanto mais afetado. A diferença em energia observada para níveis de buracos leves pode alcançar $\sim 25\%$. É interessante notar também que a energia do *gap* é menor para os arsenetos, logo a altura das barreiras serão menores quando comparada com os nitretos. O efeito imediato disto é o menor número de estados confinados no poço.

Feita a análise dos efeitos dos parâmetros de Luttinger, onde pudemos ver que são importantes, iremos estudar os sistemas de GaAs/InGaAs dopados tipo-p.

4.3.2 Poço Quântico e Super-Rede de GaAs/InGaAs Dopados

Estudaremos nesta seção os sistemas dopados de GaAs/In_{0,3}Ga_{0,7}As para uma super-rede, com $d = 70 \text{ \AA}$, e múltiplos poços quânticos, com $d = 300 \text{ \AA}$ [170]. Consideraremos que a descontinuidade da banda de valência é 40%, de forma que, em ambos os casos, como $x = 0,3$, a altura da barreira é 132,2 meV. Em relação à tensão, assumiremos que a espessura crítica é $d_c \approx 80 \text{ \AA}$ [190] para um poço quântico de GaAs/InGaAs. Logo, para a super-rede não haverá tensão, pois a tensão na barreira compensa a tensão no poço, e para múltiplos poços quânticos haverá tensão (compressiva) apenas dentro do poço (ver seção (2.8)). Quanto à dopagem, esta será feita em toda a extensão da barreira para os dois sistemas.

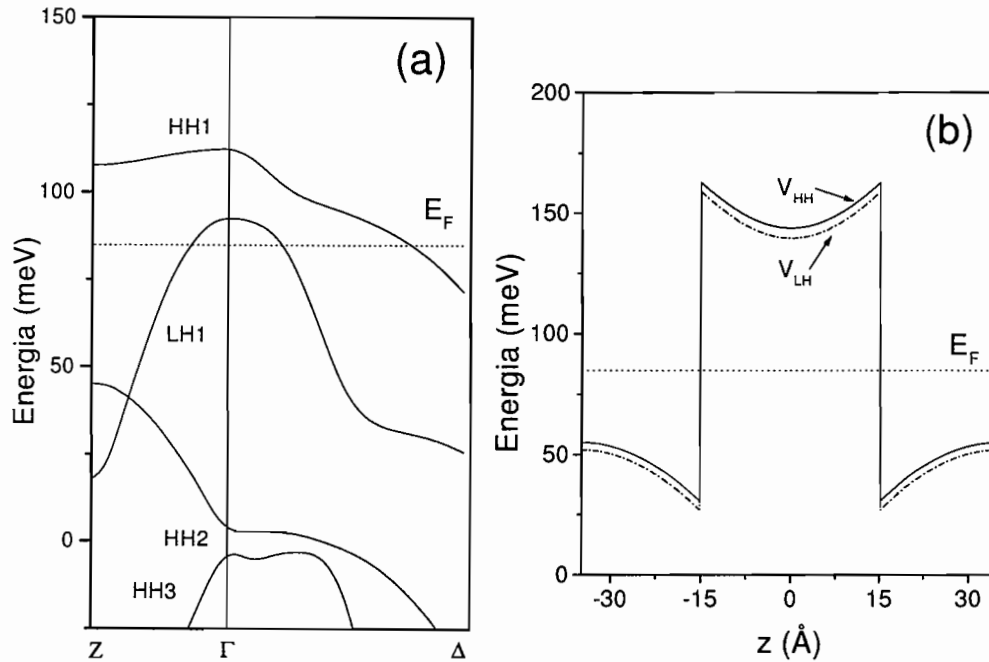


Figura 4.7: Estrutura de sub-bandas e minibandas de valência (a) e perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida) e buracos leves, V_{LH} (linha pontilhada-tracejada) (b) para uma super-rede, não tensionada de GaAs/In_{0,3}Ga_{0,7}As, com $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$, e $N_A = 1,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 3.17.

Na Figura 4.7 apresentamos os resultados para a super-rede de GaAs/In_{0,3}Ga_{0,7}As, não tensionada, com $d_1 = 40 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$ e concentração de aceitadores $N_A = 1,5 \times$

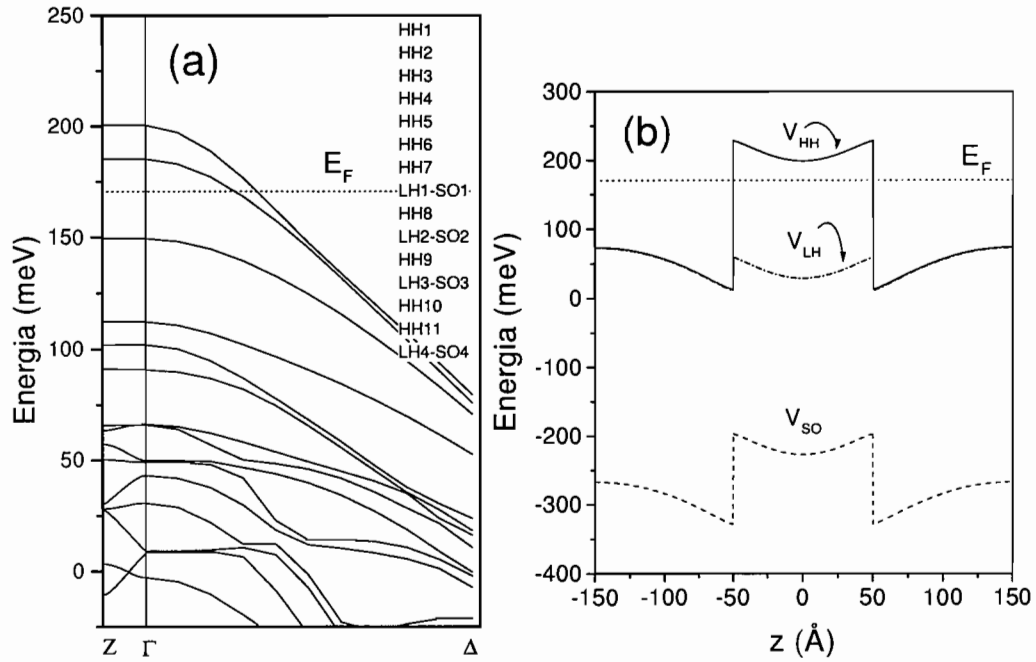


Figura 4.8: Estrutura de sub-bandas e minibandas de valência (a) e perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida), buracos leves, V_{LH} (linha pontilhada-tracejada) e buracos de *split-off* (linha tracejada), V_{SO} (b) para múltiplos poços quânticos, tensionados, de GaAs/In_{0,3}Ga_{0,7}As, com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$, e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 4.7.

10^{19} cm^{-3} ($N_{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Para este caso ainda, desprezaremos os efeitos de *spin-órbita* nos cálculos, pois o desdobramento devido ao *spin-órbita* é muito grande (ver Tabela 4.4). Na Figura 4.7 (a) mostramos a estrutura de sub-bandas e minibandas para buracos pesados HH e buracos leves LH, e em (b) mostramos os perfis de potencial para os buracos pesados, V_{HH} (linha sólida), e buracos leves, V_{LH} (linha tracejada-pontilhada). O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). Podemos perceber que há duas minibandas ocupadas, HH1 e LH1. Também notamos que existe dispersão ao longo da direção Γ -Z, já para o primeiro nível, HH1. Os principais fatores responsáveis por estas características neste sistema são a altura da barreira e os valores das massas efetivas. Como as massas efetivas de buracos para os arsenetos são muito menores do que para os nitretos, os estados da banda de valência são mais delocalizados. Outro fator que aumenta a delocalização é o fato de que as barreiras tendem a ser mais rasas para os arsenetos, como já foi mencionado anteriormente.

Na Figura 4.8 mostramos os resultados para múltiplos poços quânticos de GaAs/In_{0,3}Ga_{0,7}As, tensionado (compressivamente), com $d_1 = 200 \text{ \AA}$, $d_2 = 100 \text{ \AA}$ e concentração

de aceitadores $N_A = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). O valor da energia de *strain* é $\epsilon = 83,5 \text{ meV}$. Como a profundidade do poço aumenta para buracos pesados e o potencial de buracos de *split-off* aproxima-se das energias do poço para buracos leves, faz-se necessário considerarmos os efeitos da inclusão da banda de *split-off* nos cálculos. A consequência disto é que os primeiros sete níveis são de buracos pesados (no ponto Γ), sendo que os dois primeiros estão ocupados (Figura 4.8(a)). No acoplamento das bandas de buracos leves com buracos de *split-off*, o caráter deste último é muito pequeno na mistura. Isto acontece porque o potencial de *split-off* está situado na região do *continuum* dos potenciais de buracos pesados e buracos leves (Figura 4.8(b)). Porém, apesar disto, devemos levar em conta os três tipos de portadores da banda de valência nos cálculos autoconsistentes, principalmente em sistemas onde a tensão é compressiva.

Na próxima seção iremos apresentar um sistema de AlGaAs/GaAs com dopagem-delta tipo-p no centro do poço, comprovando que o método pode ser aplicado à qualquer tipo (perfil) de dopagem.

4.3.3 Poço Quântico de AlGaAs/GaAs com Dopagem Planar tipo-p no Centro do Poço

Os poços quânticos com dopagem planar (δ -doping) no centro do poço vêm sendo estudados, principalmente os com dopagem tipo-n [34,35,211]. Estes sistemas permitem que portadores sejam confinados não só dentro do poço delta como também dentro do poço quadrado. Medidas óticas foram realizadas no nosso grupo LNMS [211], além de estudos teóricos [34,35]. Estas estruturas são importantes do ponto de vista experimental, como por exemplo, em dispositivos optoeletrônicos e δ -FETs (*Field Effect Transistors*). Contudo os poços quânticos com dopagem planar tipo-p no centro do poço são pouco estudados na literatura e estes são importantes, pois permitem um estudo melhor das transições eletrônicas envolvendo estados confinados no poço-delta [178,179,212].

Os resultados a seguir foram obtidos para poços quânticos com dopagem planar tipo-p no centro do poço (ver Figura 4.9) ao longo da direção $\langle 001 \rangle$. Simulamos aqui uma estrutura $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, com $x = 0,15$ e concentração de aceitadores bidimensional no poço $N_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. A largura do poço é de 300 \AA e a da barreira é de 700 \AA , valor grande o suficiente para que o sistema esteja isolado. Como a energia de *split-off* tem um valor alto (ver Tabela 4.4), não vamos considerar o efeito da banda de *split-off* nas bandas de buracos pesados e leves. Assim utilizamos a matriz 4×4 de Luttinger-Kohn, ao invés da matriz 6×6 . Além disso não consideramos tensão neste sistema, uma vez que o descasamento de parâmetro de rede é desprezível. Os outros parâmetros utilizados para o GaAs e a liga, sendo que na liga os parâmetros foram

interpolados linearmente entre o GaAs e o AlAs, estão na Tabela 4.4. Para a altura da barreira adotamos 30% de descontinuidade na banda de valência, o que equivale a um valor de 78,45 meV. Particularmente, para o potencial tipo delta, consideramos que a distribuição de aceitadores é gaussiana, modelo mais realístico para descrever estes sistemas [5, 7, 8, 182], com Δz largura a meia altura da distribuição gaussiana, da ordem de 23,5 Å. A estrutura de bandas é apresentada na Figura 4.10.

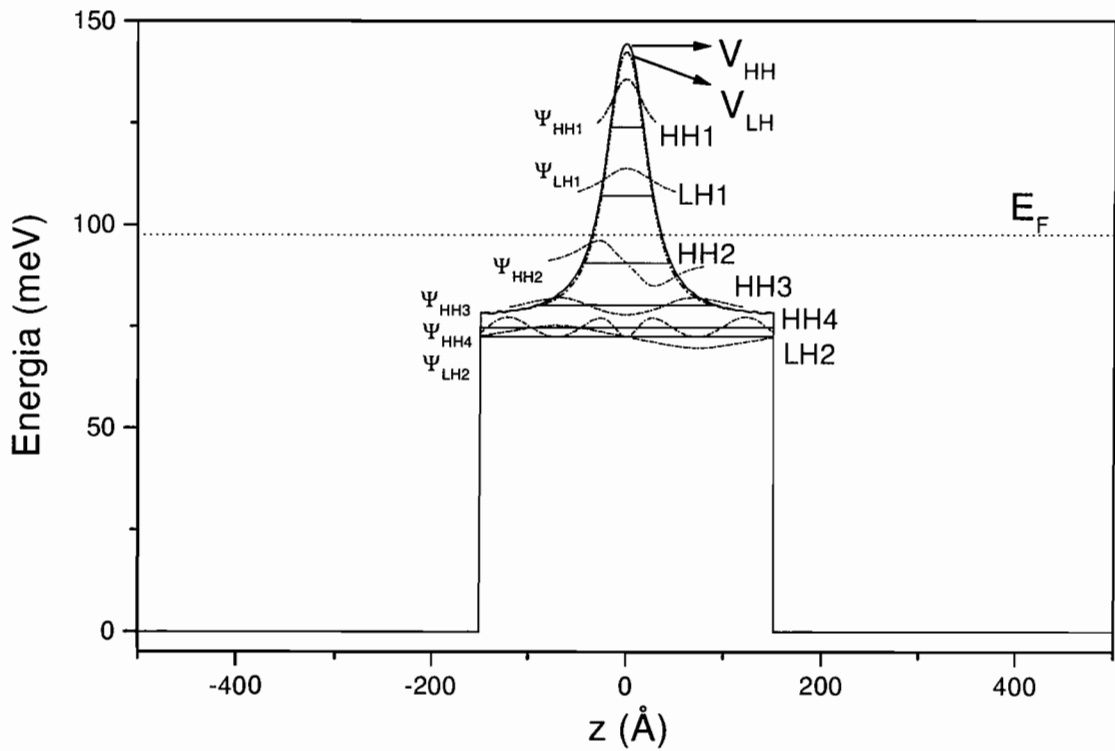


Figura 4.9: Perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida) e buracos leves, V_{LH} (linha pontilhada-tracejada), para um poço quântico de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}/\text{GaAs}$ com dopagem tipo-p centrada no poço. A concentração de aceitadores é $N_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, a largura do poço é $d_2 = 300 \text{Å}$ e da barreira é $d_1 = 700 \text{Å}$. O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). Os níveis de energia e suas respectivas funções de onda (linha tracejada curta-pontilhada), Ψ , dentro do poço também são apresentadas. A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 3.17.

A partir das Figuras 4.9 e 4.10, notamos que todos os níveis estão isolados, sendo que existem dois níveis ocupados, um de buraco pesado (HH1) e outro de buraco leve (LH1). São também mostrados mais quatro níveis acima do nível de Fermi (HH2, HH3, HH4 e LH2). Também são apresentadas as suas respectivas funções de onda (linha tracejada curta-pontilhada). V_{HH} (linha sólida) e V_{LH} (linha pontilhada-tracejada) são os potenciais de buracos pesados e leves, respectivamente. Como podemos observar o potencial

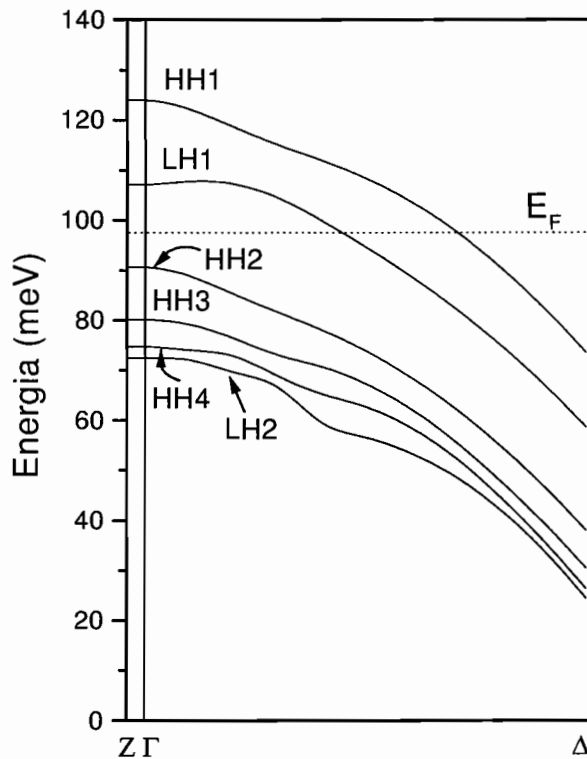


Figura 4.10: Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas $\Gamma - Z$ e $\Gamma - \Delta$ para o sistema da Figura 4.9. O nível de Fermi, E_F , é indicado (linha pontilhada). A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 3.17. Apenas as primeiras seis sub-bandas são mostradas.

de buraco pesado é ligeiramente mais profundo do que o potencial de buraco leve, o que é devido ao termo do potencial de troca-correlação, que é diferente para cada portador.

Resultados bastante similares aos obtidos aqui para sistemas de poços quânticos delta-dopados já foram reportados na literatura [13, 179].

Desta forma podemos concluir que o modelo e método adotados podem ser aplicados para qualquer perfil de dopagem e para qualquer tipo de material. A inclusão da diferença dos parâmetros de Luttinger, efeitos de tensão e *spin-órbita* serão fundamentais para descrevermos corretamente a estrutura de bandas de valência destes sistemas, bem como os efeitos de troca-correlação que determinarão, juntamente com o potencial de Coulomb, a forma do potencial autoconsistente total (ver Capítulo 3). A massa efetiva e a altura da barreira irão determinar o número de estados ocupados, seu posicionamento e sua dispersão.

A seguir faremos comparações dos resultados teóricos com dados experimentais, calculando os espectros de fotoluminescência para poços de GaN/InGaN com e sem tensão. Estes resultados estão servindo de guia para a interpretação de medidas experimentais, tais como fotoluminescência, obtidas em nosso grupo LNMS, em colaboração com o grupo

de Paderborn, na Alemanha. Também faremos comparações com dados experimentais da literatura para poços de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ tensionados, onde analisaremos as transições intra-banda e espectros de fotoluminescência.

Capítulo 5

Comparação com Resultados Experimentais

5.1 Introdução

Como mencionado em capítulos anteriores, tanto os nitretos, quanto os arsenetos possuem diversas aplicações, sendo que uma das mais importantes é a utilização destes materiais em dispositivos optoeletrônicos. Logo é necessário compreender e estudar fenômenos óticos nestes sistemas. Estes processos óticos envolvem emissão de radiação da amostra (cristal semiconductor) [2]. Um destes processos é a luminescência que é utilizada na maioria das experiências reportadas na literatura. Numa luminescência, os elétrons na banda de valência são excitados eletricamente (eletroluminescência) [74,200] ou opticamente (fotoluminescência) [2,75,115,125,132,135,138,139,178,179,198,199,209,213–216]. Depois de relaxados, os elétrons excitados retornam ao estado fundamental com a emissão de luz. Na eletroluminescência a amostra é excitada através da injeção de elétrons e buracos via uma corrente externa. Já na fotoluminescência um feixe de luz com energia maior do que a energia do *gap* incide sobre a amostra, um elétron é excitado do seu estado fundamental para um estado na banda de condução [217] e um buraco é gerado na banda de valência com carga oposta, originando um par elétron-buraco. Como estes portadores têm energias mais altas que a energia do *gap*, estes relaxam para o fundo da banda através de interações elétron-elétron e elétron-fônon. Como o tempo de relaxação é menor do que o tempo de vida do portador, os portadores fotogerados se recombinam no fundo da banda de condução e no topo da banda de valência, emitindo um fóton, de frequência ω . A este processo chamamos fotoluminescência. A seguir iremos descrever a teoria para o cálculo do espectro de fotoluminescência e aplicar a sistemas de GaN/InGaAs e AlGaAs/InGaAs.

5.2 Teoria do Cálculo do Espectro de Fotoluminescência

Para obtermos o espectro de fotoluminescência precisaremos determinar simultaneamente os estados de elétrons e buracos, para isso será necessário utilizarmos a Hamiltoniana 8×8 de Kane para o cálculo da estrutura de bandas. No Capítulo 2 apresentamos a matriz 6×6 de Luttinger-Kohn, generalizada para vários materiais. Iremos aqui, introduzir a matriz de Kane, com a adição dos termos extras referentes à diferença de materiais.

5.2.1 Matriz de Kane

Dentro do modelo 8×8 de Kane, o Hamiltoniano não perturbado, $\langle jm_j K | H_0 | j' m'_j K' \rangle$, é escrito da seguinte maneira [4, 6, 7]:

$$\langle jm_j K | H_0 | j' m'_j K' \rangle = \begin{bmatrix} \hat{E}_g + \hat{A}k^2 & 0 & i\hat{P}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_- & 0 & i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z & \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_- \\ 0 & \hat{E}_g + \hat{A}k^2 & 0 & -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_+ & i\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & -\hat{P}_- & i\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z \\ -i\hat{P}_- & 0 & \hat{Q} & \hat{S} & \hat{R} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_- & \hat{S}^* & \hat{T} & 0 & \hat{R} & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_z & \hat{R}^* & 0 & \hat{T} & -\hat{S} & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) \\ 0 & -\hat{P}_+ & 0 & \hat{R}^* & -\hat{S}^* & \hat{Q} & -i\sqrt{2}\hat{R}^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z & -i\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_- & -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S} & -i\sqrt{2}\hat{R} & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{P}_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}\hat{P}_z & i\sqrt{2}\hat{R}^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{S}^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - \hat{T}) & \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{S} & 0 & \frac{1}{2}(\hat{Q} + \hat{T}) - \Delta(z) \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

onde os operadores \hat{Q} , \hat{T} , \hat{R} , \hat{S} e $\hat{\Delta}$ foram definidos na seção (2.4). Para os outros termos temos que,

$$\hat{A}(z)k^2 = A(k_x^2 + k_y^2) + \hat{p}_z^\dagger \frac{A}{\hbar^2} \hat{p}_z \quad (5.2)$$

$$\hat{E}_g(z) = E_g \quad (5.3)$$

$$\hat{P}_\pm = P(k_x \pm ik_y) \quad (5.4)$$

$$\hat{P}_z = \frac{1}{2\hbar} (\hat{p}_z^\dagger P + P \hat{p}_z) \quad (5.5)$$

sendo que $A = \hbar^2/m_e^*$ é o parâmetro de massa efetiva para os elétrons da banda de condução e sendo m_e^* a massa efetiva do elétron, $E_g(z)$ é a energia do *gap* entre as bandas de condução e valência no ponto Γ , $\hat{P} = i(\hbar/m_0) \langle c | p_x | x \rangle$ é o elemento de matriz de momentos entre estados das bandas de condução e valência. Além disso, deveremos considerar os parâmetros modificados de Luttinger, dados pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \gamma_1^L - \frac{1}{3} \frac{E_p}{E_g} \\ \gamma_2 &= \gamma_2^L - \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_g} \\ \gamma_3 &= \gamma_3^L - \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_g},\end{aligned}\tag{5.6}$$

onde γ_1^L , γ_2^L e γ_3^L são os parâmetros de Luttinger e $E_p = (2m_0/\hbar^2)P^2$ é a energia de Kane.

Generalizando as expressões (5.2)-(5.5) para n materiais, analogamente como fizemos no Capítulo 2, obtemos,

$$\hat{A}k^2 = k^2 \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n A_i (z_i - z_{i-1})\tag{5.7}$$

$$\hat{E}_g = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^n E_{g_i} (z_i - z_{i-1})\tag{5.8}$$

$$\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{d} (k_x \pm k_y) \sum_{i=1}^n P_i (z_i - z_{i-1})\tag{5.9}$$

$$\hat{P}_z = \frac{1}{d} K \sum_{i=1}^n P_i (z_i - z_{i-1})\tag{5.10}$$

para $K' = K$, e

$$\hat{A}k^2 = -i \frac{1}{d} \frac{(k_x^2 + k_y^2 + KK')}{(K' - K)} \left[(A_n - A_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (A_i - A_{i+1}) e^{i(K' - K)z_i} \right]\tag{5.11}$$

$$\hat{E}_g = -i \frac{1}{d} \frac{1}{(K' - K)} \left[(E_{g_n} - E_{g_1}) + \sum_{i=1}^{n-1} (E_{g_i} - E_{g_{i+1}}) e^{i(K' - K)z_i} \right]\tag{5.12}$$

$$\hat{P}_{\pm} = -i \frac{1}{d} \frac{(k_x \pm ik_y)}{(K' - K)} \left[(P_n - P_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (P_i - P_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (5.13)$$

$$\hat{P}_z = -i \frac{1}{2d} \frac{(K + K')}{(K' - K)} \left[(P_n - P_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (P_i - P_{i+1}) e^{i(K'-K)z_i} \right] \quad (5.14)$$

para $K' \neq K$.

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

$$\hat{A}k^2 = \frac{1}{d} k^2 (A_1 d_1 + A_2 d_2) \quad (5.15)$$

$$\hat{E}_g = \frac{1}{d} (E_{g1} d_1 + E_{g2} d_2) \quad (5.16)$$

$$\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{d} (k_x \pm ik_y) (P_1 d_1 + P_2 d_2) \quad (5.17)$$

$$\hat{P}_z = \frac{1}{d} K (P_1 d_1 + P_2 d_2) \quad (5.18)$$

para $K' = K$ e,

$$\hat{A}k^2 = -\frac{i(k_x^2 + k_y^2 + KK')}{(K' - K)d} (A_2 - A_1) \left[1 - e^{(K'-K)d_1} \right] \quad (5.19)$$

$$\hat{E}_g = -\frac{i}{(K' - K)d} (E_{g2} - E_{g1}) \left[1 - e^{(K'-K)d_1} \right] \quad (5.20)$$

$$\hat{P}_{\pm} = -\frac{i(k_x \pm ik_y)}{(K' - K)d} (P_2 - P_1) \left[1 - e^{(K'-K)d_1} \right] \quad (5.21)$$

$$\hat{P}_z = -\frac{i(K + K')}{(K' - K)2d} (P_2 - P_1) \left[1 - e^{(K'-K)d_1} \right] \quad (5.22)$$

para $K' \neq K$.

Determinados os termos da matriz de Kane podemos obter a EME, dada pela expressão (2.7), calculando os estados da banda de condução e da banda de valência. A seguir iremos descrever as expressões para determinar o espectro de fotoluminescência.

5.2.2 Determinação da Intensidade no Espectro de Fotoluminescência

Num experimento de fotoluminescência os pares elétron-buraco são excitados opticamente por uma energia externa (excitação). Os pares excitados relaxam em torno de distribuições de quase-equilíbrio térmico (termalização). Os pares elétron-buraco termalizados recombinaem radiativamente para produzir a emissão (recombinação) [2]. A intensidade de fotoluminescência é dada de forma geral pela seguinte expressão [6, 7]:

$$I(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{c} \frac{e^2}{m_0c^2} \sum_{if} f_{if} N_i (1 - N_f) \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{if}}{(E_i - E_f - \hbar\omega)^2 + \gamma_{if}^2}, \quad (5.23)$$

onde,

$$f_{ij} = \frac{2 |\langle i | p_x | f \rangle|^2}{m_0(E_i - E_f)} \quad (5.24)$$

é a força do oscilador da transição de dipolo ótica entre o estado inicial $|i\rangle$ e o estado final $|f\rangle$ sob luz polarizada na direção x , E_i e E_f , são os estados de energia inicial e final, respectivamente, N_i e N_f , as probabilidades de ocupação desses estados e γ_{if} é o alargamento da transição devido ao tempo médio finito. No caso que estudaremos os estados iniciais e finais são os auto-estados de energia confinados dentro do poço quântico.

Os estados da banda de condução e valência (buracos pesados, leves e de *split-off*) serão indexados por n_e e n_q ($q=hh, lh$ e *so*), respectivamente. As bandas são bidegeneradas em toda extensão da zona de Brillouin, desta forma, introduziremos os estados quânticos adicionais de *spin*, σ_e para elétrons e σ_q ($q=hh, lh$ e *so*) para buracos, que assumem os valores \uparrow e \downarrow . Então, os estados iniciais são $|n_e \uparrow \vec{k}\rangle$ e $|n_e \downarrow \vec{k}\rangle$ e os finais são $|n_{hh} \uparrow \vec{k}\rangle$, $|n_{hh} \downarrow \vec{k}\rangle$, $|n_{lh} \uparrow \vec{k}\rangle$, $|n_{lh} \downarrow \vec{k}\rangle$, $|n_{so} \uparrow \vec{k}\rangle$ e $|n_{so} \downarrow \vec{k}\rangle$. As energias do estado inicial, E_{n_e} e final, E_{n_h} independem de σ_e e σ_q . Desta forma, podemos reescrever a expressão (5.23) em função destas novas notações,

$$I(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{c} \frac{e^2}{m_0c^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{n_e} \sum_{n_q, q=hh, lh, so} f_{n_e n_q}(\vec{k}) N_{n_e \vec{k}} [1 - N_{n_q \vec{k}}] \times \frac{\gamma_{n_e \vec{k} n_q \vec{k}}}{\pi [E_{n_e}(\vec{k}) - E_{n_q}(\vec{k}) - \hbar\omega]^2 + \gamma_{n_e \vec{k} n_q \vec{k}}^2} \quad (5.25)$$

onde,

$$f_{n_e n_q}(\vec{k}) = \frac{2}{m_0} \sum_{\sigma_e \sigma_q} \frac{|\langle n_e \sigma_e \vec{k} | p_x | n_q \sigma_q \vec{k} \rangle|^2}{E_{n_e}(\vec{k}) - E_{n_q}(\vec{k})}. \quad (5.26)$$

Fazendo manipulações algébricas, podemos reescrever a expressão (5.26) como (ver Apêndice 2):

$$f_{n_e n_q}(\vec{k}) = \frac{4}{m_0 [E_{n_e}(\vec{k}) - E_{n_q}(\vec{k})]} [|\langle n_e \uparrow | p_x | n_q \uparrow \rangle|^2 + |\langle n_e \downarrow | p_x | n_q \uparrow \rangle|^2]. \quad (5.27)$$

O próximo passo é determinar as probabilidades de ocupação na equação (5.25). Como estamos tratando sistemas de poços quânticos, onde os níveis de energia estão confinados, a ocupação destes estados, em função de uma dada temperatura, é descrita pela função de distribuição de Fermi. Portanto, a função probabilidade de ocupação para elétrons é dada por:

$$N_{n_e \vec{k}} = \frac{1}{e^{[E_F - E_{n_e}(\vec{k})]/kT} + 1} \quad (5.28)$$

e para buracos

$$[1 - N_{n_q \vec{k}}] = \frac{1}{e^{[E_F - E_{n_q}(\vec{k})]/kT} + 1}, \quad (5.29)$$

onde k é a constante de Boltzmann.

Os resultados experimentais que apresentaremos foram obtidos a bem baixas temperaturas, desta forma, não iremos considerar a variação da energia do *gap* com a temperatura, apenas iremos incluir a parte hidrostática da tensão, pois esta afetará bastante a energia do *gap* dos sistemas. Mostraremos a seguir os resultados experimentais e compararemos com nossos resultados teóricos para sistemas de GaN/InGaN e AlGaAs/InGaAs.

5.3 Sistemas de GaN/InGaN

5.3.1 Mecanismos de Emissão de Luz

As heteroestruturas mais utilizadas para emissão de luz na região azul-verde são as baseadas em GaN/In_xGa_{1-x}N, isto porque dependendo da composição da liga x , a energia do *gap* varia de 3,2 (GaN) a 1,9 eV (InN). Na Figura 5.1 são apresentadas as energias do

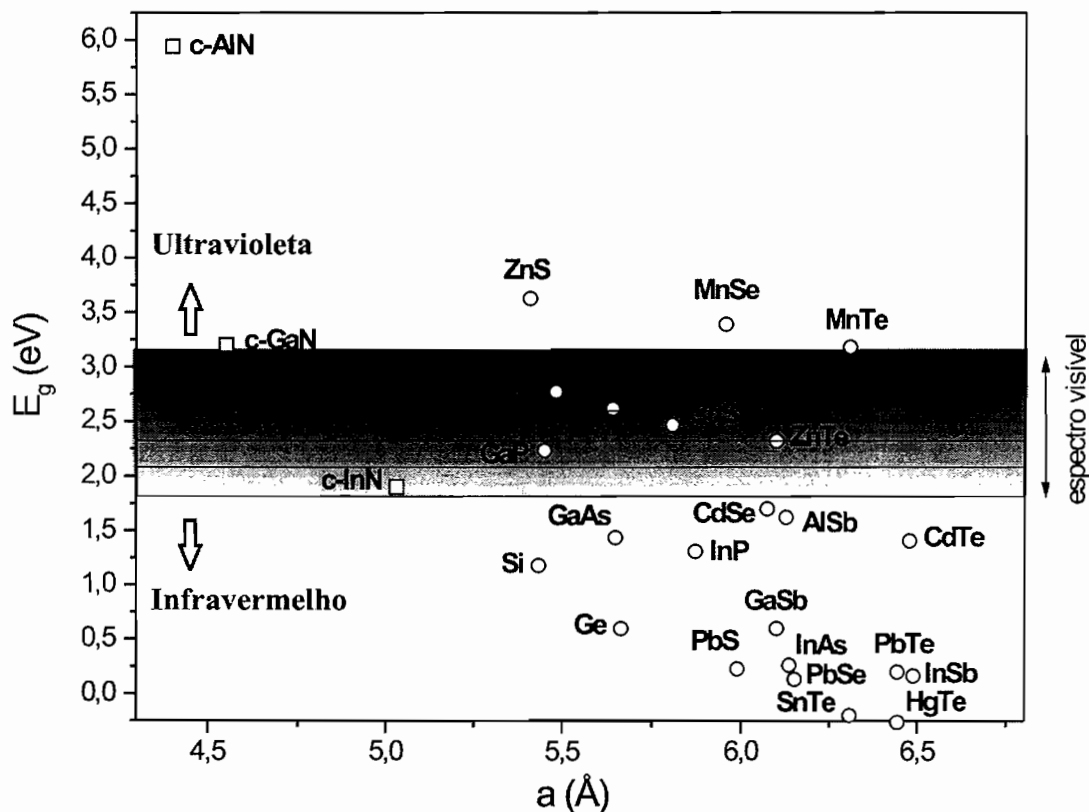


Figura 5.1: Energia do *gap* em função do parâmetro de rede a para diversos materiais. A região visível do espectro é indicada, bem como as regiões do infra-vermelho e do ultra-violeta. Também são indicados os nitretos do grupo-III (quadrados) na estrutura cúbica.

gap de diversos materiais, inclusive os nitretos cúbicos, em função do parâmetro de rede a . Também é indicada a faixa da região do infra-vermelho ao ultra-violeta [25, 73, 189].

A origem da emissão observada nos experimentos de fotoluminescência em poços quânticos de GaN/InGaN têm sido assunto de discussão na literatura [75, 135, 137, 138, 213]. Um dos modelos usados para explicar o mecanismo de emissão é a recombinação de portadores localizados dentro dos *quantum dots* (QDs), os quais possuem uma energia do *gap* menor do que da liga. Os QDs são “ilhas” formadas no material devido ao processo de segregação durante o crescimento [135, 137, 213]. Como a ligação química entre o In e o N é maior do que entre o Ga e o N, haverá regiões onde a concentração de In é maior e outras regiões onde a concentração de Ga é maior, estas regiões são chamadas regiões ricas no cátion (In ou Ga), propícias para a formação dos QDs. As flutuações na composição da liga e a formação de QDs surgem da separação de fase no equilíbrio termodinâmico durante o crescimento do InGa_xN_{1-x}, numa dada temperatura de crescimento [135, 137]. Isto

dá origem a dois valores diferentes da composição da liga x .

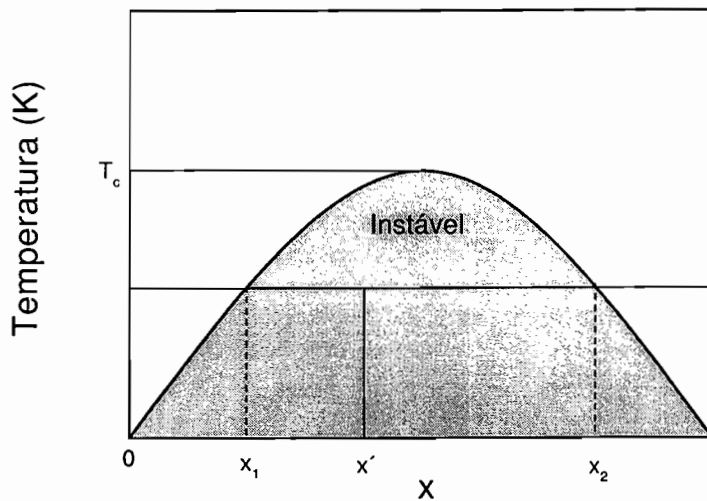


Figura 5.2: Representação esquemática de um diagrama de fase da temperatura em função da composição da liga, x , em equilíbrio termodinâmico.

Para entender este processo, geralmente utilizamos o diagrama de fase que é obtido através do cálculo da energia livre do sistema, utilizando relações da termodinâmica [134, 201]. Na Figura 5.2 é mostrado esquematicamente o diagrama de fase da temperatura em função da composição da liga. Do ponto de vista microscópico a liga ternária de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ se divide nas ligas binárias de GaN ($x=0$) e InN ($x=1$). O descasamento de parâmetro de rede entre elas é grande o suficiente para gerar uma tensão interna [134,137]. Esta tensão interna causa mudanças nos coeficientes de expansão térmica e no equilíbrio das constantes de rede. Isto modificará a miscibilidade da liga e conseqüentemente a formação das fases ricas. Analisando a Figura 5.2 vemos que para uma dada composição da liga x' , crescida abaixo de uma certa temperatura crítica T_c , esta se situará numa região de instabilidade (área preenchida abaixo da curva na Figura 5.2). Neste caso, a composição da liga se divide em duas composições x_1 e x_2 , sendo que para x_1 a região é rica em Ga e para x_2 a região é rica em In, a isto chamamos de separação de fase. Ambas as regiões coexistem na liga e são observadas experimentalmente [134,135,137]. Todavia quando consideramos os efeitos de uma tensão externa (biaxial) proveniente do fato da liga ser crescida sobre GaN, estes tendem a compensar a tensão interna da liga, inibindo a formação de fases ricas e portanto a formação de QDs. Este trabalho foi desenvolvido no grupo do LNMS do IFUSP por uma aluna de doutoramento, utilizando métodos *ab initio* para calcular as propriedades termodinâmicas e estruturais de ligas de InGaN e AlGaN [134, 137, 201]. Para as ligas de AlGaN a temperatura crítica é baixa, logo a separação de fase não ocorre. Para as ligas de InGaN a T_c alcança valores de

aproximadamente 1250 K, muito próxima da temperatura de crescimento, proporcionando a existência da separação de fase. Outro ponto a ser mencionado é que a separação de fase também pode ocorrer em estruturas hexagonais. Recentemente foi comprovado experimentalmente, para a fase cúbica, que a emissão de luz, abaixo da energia do *gap* da liga, conforme mostra a Figura 5.3, está relacionada diretamente com os QDs formados através da separação de fase e correspondem à fase rica em In [135]. A energia do *gap* para a liga, obtida experimentalmente, é a mesma adotada na seção (3.4.1). Também são apresentadas na Figura 5.3 as energias dos *gaps* dos QDs a $T=300$ K (círculos) e 30K (quadrados).

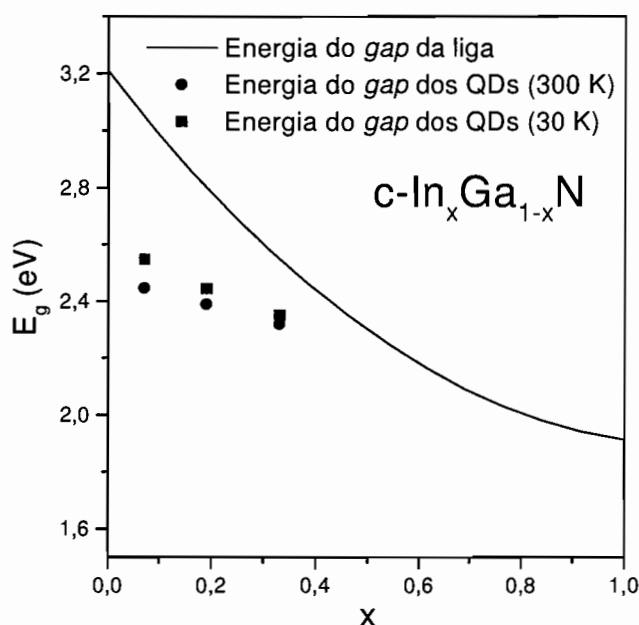


Figura 5.3: Energia do *gap* em função da composição da liga, x , obtida a partir de dados experimentais (linha sólida) para o $c\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. As energias do *gap* dos QDs a 300 K (círculos) e a 30K (quadrados) também são indicados. Dados extraídos da Ref [135].

Contudo, quando a liga está sob tensão, podemos ter a emissão acima da energia de seu *gap* (da liga). Neste caso há supressão da separação de fase e portanto não haverá formação de QDs. Assim, dependendo do sistema, isto é, se tensionado ou não, a emissão poderá vir tanto da recombinação dos portadores nos múltiplos poços quânticos, como dos QDs [75,213]. Dentro deste contexto iremos analisar as transições eletrônicas oriundas de poços quânticos de $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sob efeitos de tensão e compararemos com resultados experimentais obtidos pelos grupos da Alemanha, em Paderborn, e da USP no LNMS.

5.3.2 Espectros de Fotoluminescência

Os espectros de fotoluminescência foram calculados para múltiplos poços quânticos de GaN/In_xGa_{1-x}N com tensão, para $x = 0,37$ e $0,45$. Utilizamos 40% para a descontinuidade da banda de valência, o que corresponde adotar 60% para a descontinuidade da banda de condução. Tomamos para a largura da barreira $d_1 = 200$ Å, de forma que os poços estejam isolados, e para a largura do poço utilizamos três valores, $d_2 = 20, 30$ e 40 Å. Adotamos os parâmetros descritos na Tabela 3.5 para determinar a estrutura de bandas de valência, sendo que para a liga interpolamos linearmente estes parâmetros. Para a energia do *gap*, empregamos a curva apresentada na Figura 5.3. Os valores das massas efetivas do elétron são mostrados na Tabela 5.1. Adotamos para a energia de Kane, E_P , os valores de 25,4 eV (GaN) e 29,9 eV (InN) [147]. Para a liga, interpolamos linearmente estes valores. Como estamos considerando os efeitos de tensão, iremos determinar a componente hidrostática da tensão na banda de valência e na banda de condução.

Conforme descrito no Capítulo 2, a componente hidrostática da tensão provoca apenas um deslocamento (*shift*) “rígido” de energia, isto é, muda a energia do *gap* E_g do sistema. Como estamos considerando um sistema biaxialmente compressivo a componente hidrostática da tensão irá aumentar a energia do *gap*, como explicado na seção (2.8). Assim, iremos utilizar as seguintes expressões para determinarmos as contribuições da parte hidrostática para as bandas de condução, H_{hid}^c , e valência H_{hid}^v , (ver Apêndice 1):

$$H_{hid}^c = a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (5.30)$$

e

$$H_{hid}^v = a_v (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}), \quad (5.31)$$

onde a_c e a_v são os potenciais de deformação hidrostático da banda de condução e de valência, respectivamente. Utilizando a expressão (2.108) e tomando $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel}$, podemos escrever a tensão hidrostática total como

$$H_{hid} = H_{hid}^c + H_{hid}^v = 2\epsilon_{\parallel}(a_v + a_c) \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \quad (5.32)$$

Tabela 5.1: Parâmetros do *bulk* para o GaN e InN, extraídos da literatura.

	m_e^*	a_v (eV)	a_c (eV)
GaN	0,16 ^a	3,3 ^c	-11,8 ^c
InN	0,10 ^b	4,05 ^c	-8,93 ^c

^a extraída da Ref. [157]

^b extraída da Ref. [147]

^c extraída da Ref. [143]

Finalmente podemos, então, determinar as transições eletrônicas entre o primeiro nível de buraco pesado (HH1) e o primeiro nível de elétron (E1). Os valores utilizados para os potenciais de deformação hidrostáticos são apresentados na Tabela 5.1.

Na Figura 5.4 mostramos esquematicamente os potenciais das bandas de condução e valência, considerando os efeitos da tensão biaxial compressiva nos potenciais dos portadores e que pode ser separada em duas componentes: hidrostática e uniaxial. Assim podemos escrever a transição eletrônica T_E da seguinte forma:

$$T_E = E_g + H_{hid} - \epsilon + HH1 + E1 \quad . \quad (5.33)$$

Na Tabela (5.2) apresentamos os valores para a energia do *gap*, E_g e as componentes devido à tensão hidrostática, H_{hid} , e tensão uniaxial, ϵ , para $x=0,37$ e $0,45$.

Tabela 5.2: Energia do *gap* da liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, E_g , energia de *strain*, referente a tensão hidrostática, H_{hid} , e energia de *strain*, referente a tensão uniaxial, ϵ , para composições da liga $x=0,37$ e $0,45$.

x	E_g (eV)	H_{hid} (meV)	ϵ (meV)
0,37	2,4841	227,24	117,49
0,45	2,3655	257,45	139,76

Nas Figuras 5.5 e 5.6 apresentamos em (a) as estruturas das bandas de condução e de valência calculadas para poços de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x=0,37$ e $0,45$, respectivamente, $d_1=200$ Å e $d_2=30$ Å e em (b) os perfis de potencial para buracos pesados (linha cheia), V_{HH} , buracos leves (linha tracejada-pontilhada), V_{LH} , buracos de *split-off* (linha tracejada), V_{SO} e elétrons (linha pontilhada), V_E . Mostramos apenas as quatro primeiras bandas para buracos e elétrons. A notação é a mesma adotada nos capítulos anteriores. Como já discutido no Capítulo 3, notamos a forte influência da banda de *split-off* e da tensão nestes sistemas. A presença de dispersão nas minibandas ocorre somente para a

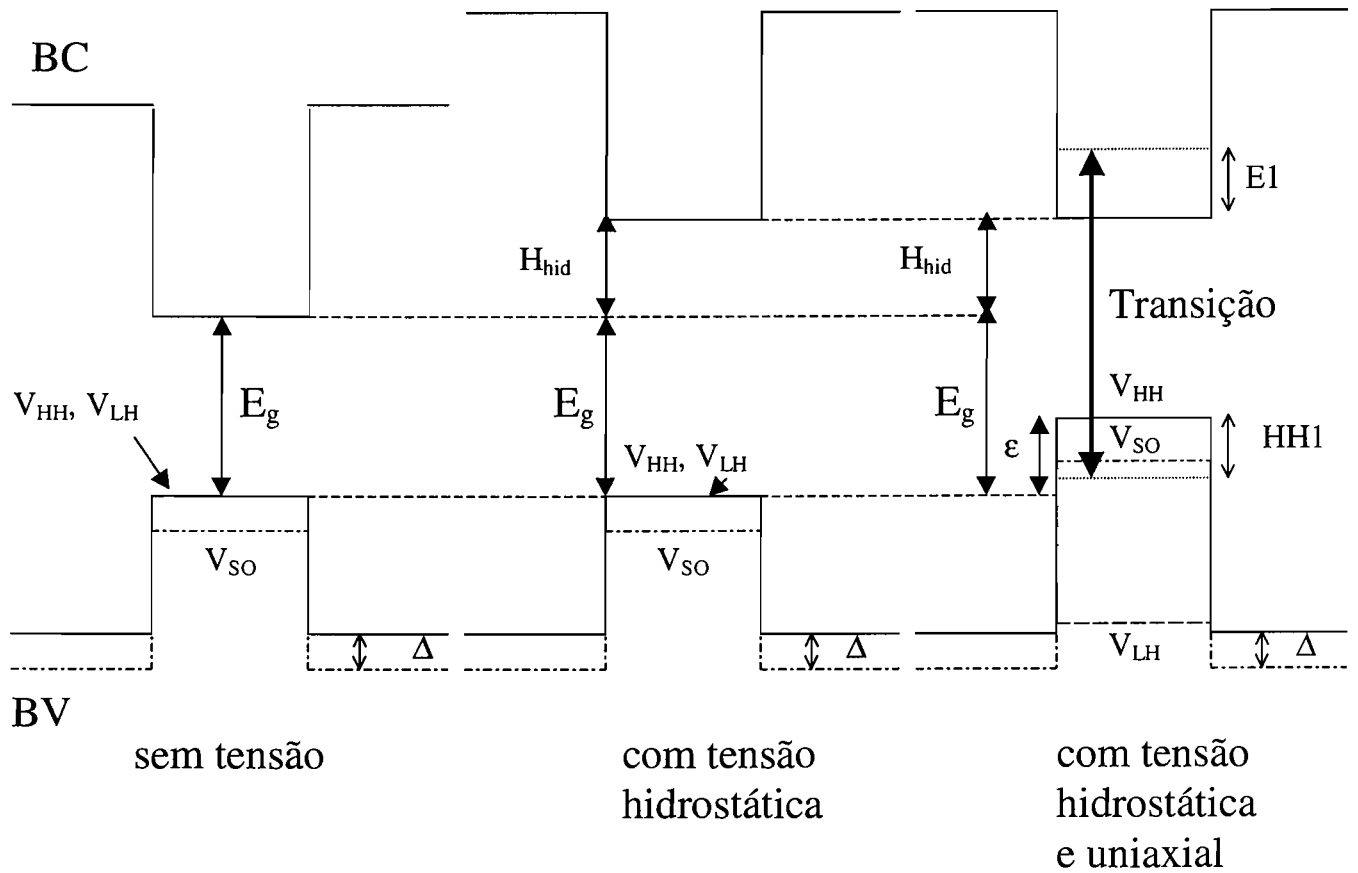


Figura 5.4: Esquema dos potenciais da banda de condução (BC) e banda de valência (BV) sob efeito da tensão biaxial compressiva (hidrostática mais uniaxial). Os potenciais de buracos pesados, V_{HH} , buracos leves, V_{LH} e buracos de *split-off*, V_{SO} são indicados. Também são mostrados as contribuições devido à tensão hidrostática, H_{hid} , e uniaxial, ϵ , bem como ao desdobramento de *spin-órbita*, Δ . São apresentados também o primeiro nível eletrônico, $E1$ e o primeiro nível de buracos pesados, $HH1$, em relação aos fundos dos respectivos poços não tensionados e a respectiva transição eletrônica.

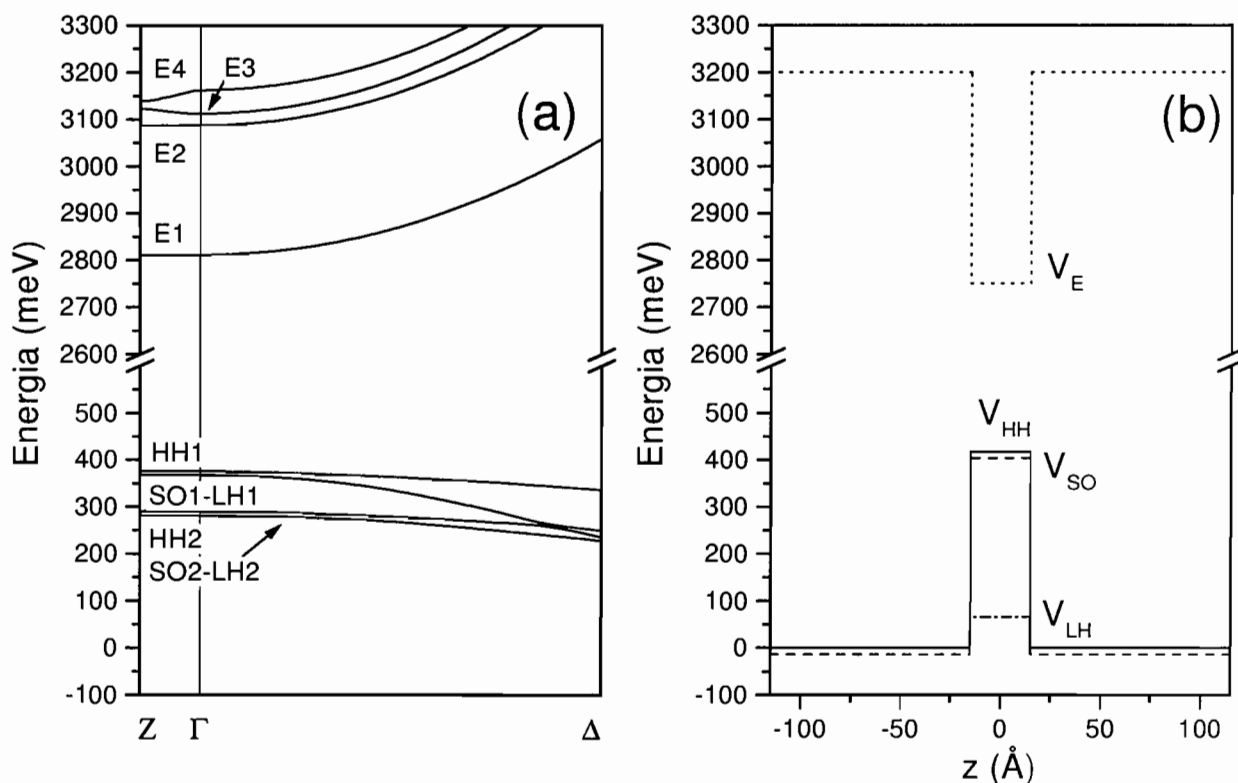


Figura 5.5: Múltiplos poços quânticos tensionados compressivamente de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x = 0,37$, $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) Estrutura das bandas de valência e de condução ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ . (b) Perfis de potencial: a linha cheia indica buraco pesado V_{HH} , a linha tracejada-pontilhada indica buraco leve V_{LH} , a linha tracejada indica buraco de *split-off* V_{SO} e a linha pontilhada indica elétron V_E . São mostradas apenas as quatro primeiras bandas de buracos e elétrons.

banda de condução, pois a massa efetiva do elétron é menor do que a de buracos. A consequência disto é que o número de estados confinados é maior para buracos, no caso buracos pesados e *split-off*, do que para elétrons. Como esperado, conforme aumentamos x , os poços ficam mais profundos e os níveis de energia para buracos e elétrons tendem ao topo da barreira.

Na Figura 5.7 mostramos o espectro de fotoluminescência de duas heteroestruturas de múltiplos poços quânticos de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x = 0,37$ e $0,45$, crescidas por MBE na Universidade de Paderborn, na Alemanha. A largura do poço é $d_2 = 30 \text{ \AA}$ e a barreira é suficientemente larga para o poço estar isolado. A medida foi realizada a uma temperatura $T = 2 \text{ K}$ e o sistema foi excitado pelas linhas de 351 nm ($3,53 \text{ eV}$) e 363 nm ($3,42 \text{ eV}$) do *laser* de Argônio. As camadas do poço estão tensionadas compressivamente, como verificado experimentalmente através de medidas de raios-X [137]. A composição da liga x foi obtida através de medidas de raios-X e espectroscopia Raman pelo grupo do

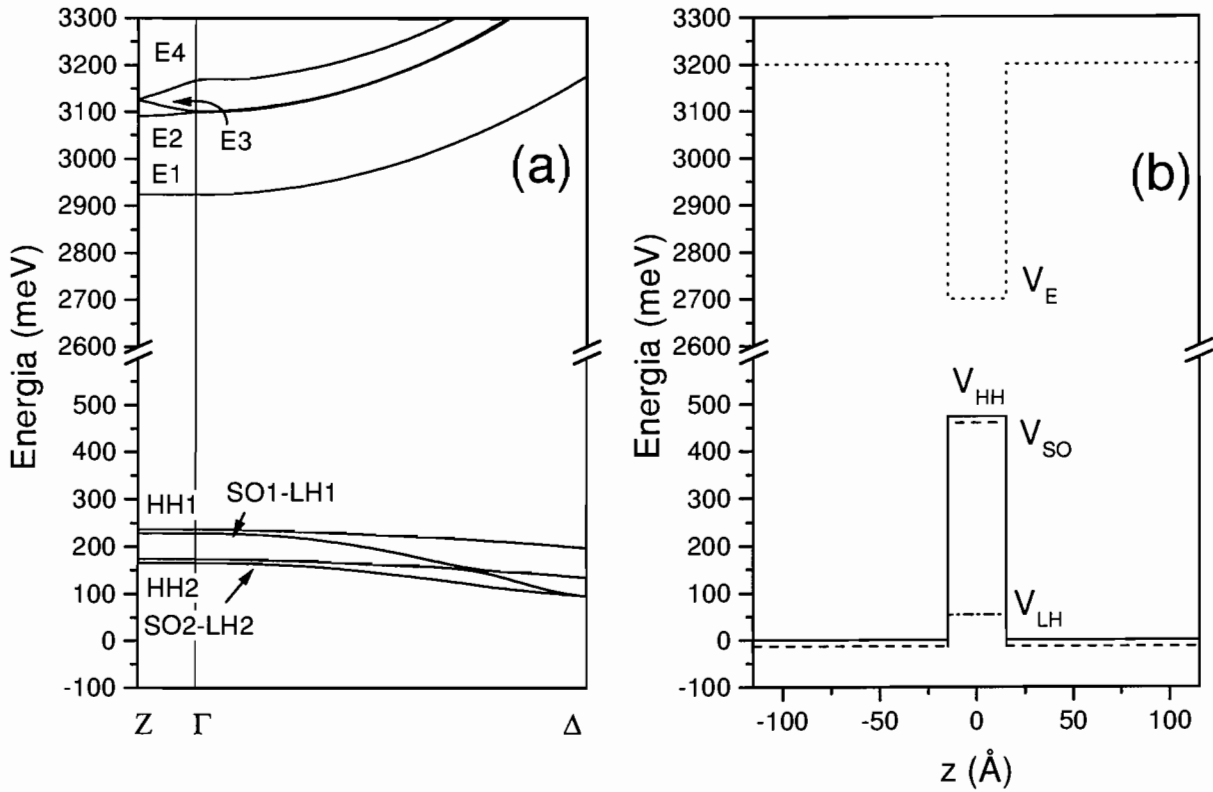


Figura 5.6: Múltiplos poços quânticos tensionados compressivamente de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x=0,45$, $d_1=200$ Å e $d_2=30$ Å (a) Estrutura das bandas de valência e de condução ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ . (b) Perfis de potencial: a linha cheia indica buraco pesado V_{HH} , a linha tracejada-pontilhada indica buraco leve V_{LH} , a linha tracejada indica buraco de *split-off* V_{SO} e a linha pontilhada indica elétron V_E . São mostradas apenas as quatro primeiras bandas de buracos e elétrons.

LNMS [137]. Além disso foi comprovado também pelas medidas Raman, analisando os picos de energia nos espectros, que nestas amostras não há a existência de QDs [137].

Com relação a Figura 5.7, para energias menores do que 2,8 eV os valores obtidos foram aumentados oito vezes, a fim de visualizar melhor a região. A linha pontilhada indica a energia do *gap* do GaN. As setas T_E indicam os valores obtidos teoricamente com nosso modelo para a energia da transição eletrônica. A linha horizontal acima da seta indica a faixa de energia obtida quando consideramos $d_2=20$ e 40 Å em torno da energia obtida para $d_2=30$ Å. Como podem existir imperfeições na interface e a largura do poço é bem estreita, pode haver uma incerteza quanto ao seu verdadeiro valor. Podemos notar que uma variação de 5 Å em d_2 já altera a energia em cerca de ≈ 20 -50 meV. Isto pode ser visto na Figura 5.8, onde são apresentados os espectros teóricos de fotoluminescência para $d_2=20$, 30 e 40 Å e (a) $x=0,37$ e (b) $x=0,45$. O comportamento observado pode ser entendido da seguinte forma: conforme a largura do poço aumenta, os níveis de

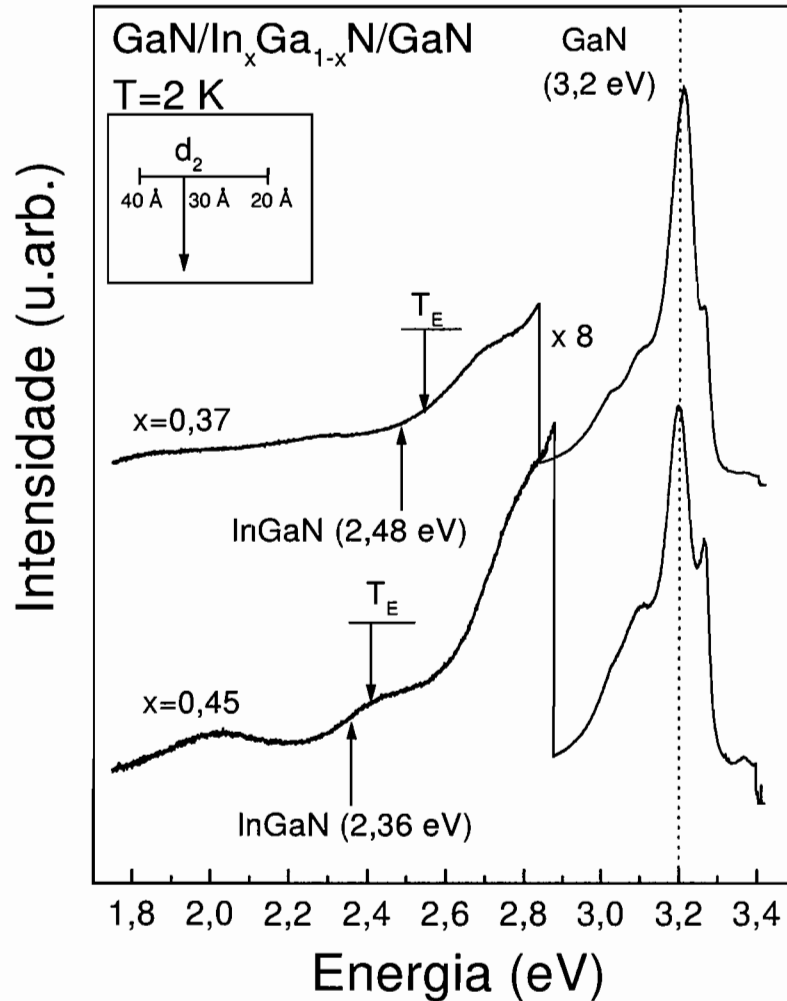


Figura 5.7: Espectros de fotoluminescência medidos a $T=2$ K e excitados através das linhas de 351 e 363 nm (3,53 e 3,42 eV) do *laser* de Argônio para múltiplos poços quânticos de GaN/In_xGa_{1-x}N com $x=0,37$ e $0,45$ e $d_2=30$ Å. A linha pontilhada indica a energia do *gap* do GaN. As transições eletrônicas T_E , e energia do *gap*, E_g da liga são indicadas. Também são mostrados os intervalos de energia entre as transições para poços de $d_2=20$ Å a 40 Å, com a seta vertical correspondendo à transição para $d_2=30$ Å (veja esquema na figura inserida).

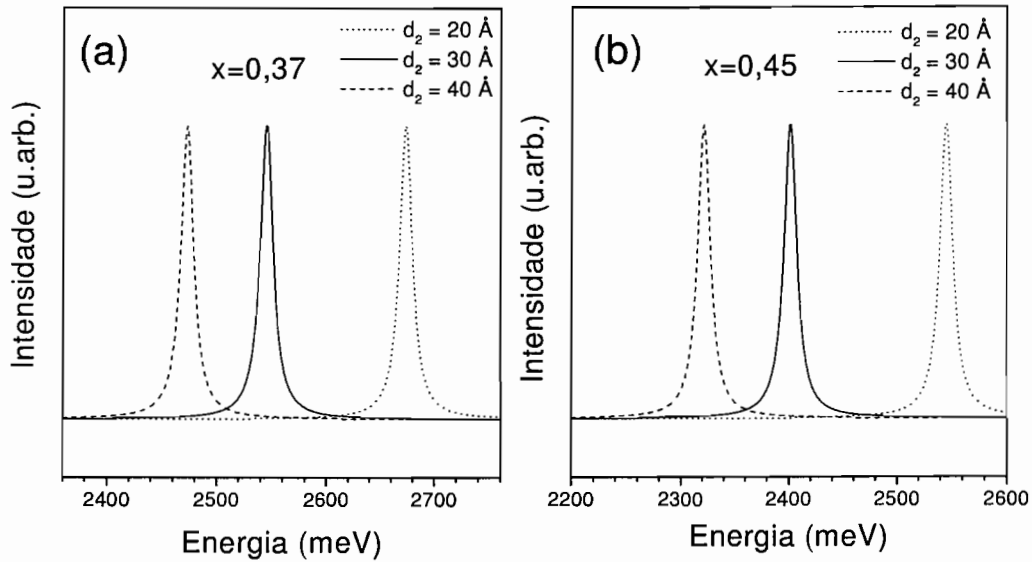


Figura 5.8: Espectros de fotoluminescência teóricos para a transição E1-HH1, calculados a $T=2$ K para múltiplos poços quânticos de GaN/In_xGa_{1-x}N com (a) $x=0,37$ e (b) $x=0,45$ e $d_2=20$ Å (linha pontilhada), $d_2=30$ Å (linha sólida) e $d_2=40$ Å (linha tracejada).

energia de elétrons e buracos se aproximam do fundo do poço, diminuindo assim a energia de transição do sistema. Os valores obtidos teoricamente situam-se em regiões onde há indícios de uma transição no poço. Não há medidas experimentais mais apuradas até este momento que comprovem a emissão, elas estão em andamento. Este resultado é a primeira tentativa de comparar resultados experimentais e teóricos em nitretos cúbicos. A seguir estudaremos sistemas envolvendo arsenetos e analisaremos as transições intra-banda e espectros de fotoluminescência.

5.4 Sistemas de AlGaAs/InGaAs

5.4.1 Transições Intra-banda

Nos últimos anos têm sido amplamente investigados os fotodetectores no infravermelho de poços quânticos (*Quantum-Well Infrared Photodetectors-QWIP*) tipo-n de semicondutores III-V [218]. Recentemente nota-se ainda um aumento do interesse nas aplicações de QWIPs tipo-p tensionados, uma vez que, a tensão compressiva biaxial pode reduzir a massa efetiva dos buracos pesados [176, 218]. Os QWIPs tensionados tipo-p de Al_xGa_{1-x}As/In_xGa_{1-x}As detectam comprimentos de ondas entre 5,5 a 7,4 μm , chegando a 10 μm , valores superiores aos QWIPs não tensionados [216]. O estudo da dopagem tipo-p nestes sistemas é fundamental para a melhoria do desempenho dos QWIPs. Zhang

et al. [216, 218], realizaram medidas experimentais em tais sistemas, obtendo espectros de fotoluminescência e espectros de absorção. O processo de absorção consiste na aniquilação de um fóton com a excitação de um portador de um estado preenchido abaixo do nível de Fermi para um estado vazio acima dele. A transição ótica intra-banda, neste processo, acontece quando os estados inicial e final se encontram dentro da mesma banda [2]. Iremos aqui confrontar nossos resultados para cálculos intra-banda com os resultados experimentais obtidos por Zhang *et al.* [216, 218] para amostras de QWIPs tipo-p de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ tensionadas, com $d_1 = 300 \text{ \AA}$ e $d_2 = 25 \text{ \AA}$.

As concentrações nos poços para as três estruturas são $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Através de medidas de raios-X, os autores mediram o des-casamento dos parâmetros de rede nas três amostras, obtendo os valores de 1,14, 1,37 e $1,67 \times 10^{-3}$, respectivamente para cada concentração. Estes valores, no entanto são muito pequenos, e portanto, praticamente não há tensão nestes sistemas. Os parâmetros utilizados nos cálculos para AlAs, GaAs e InAs estão na Tabela 4.4. Para o InGaAs e o AlGaAs interpolamos linearmente os parâmetros. Adotamos 34% de descontinuidade na banda de valência, conforme proposto pelos autores. Utilizamos no cálculo do espectro de fotoluminescência, um mesmo valor de energia de Kane, $E_P = 29,12 \text{ eV}$ [6] para ambos os materiais, pois E_P não difere muito entre os arsenetos [184]. Os resultados obtidos por nós e pelos autores são apresentados na Tabela 5.3 e na Figura 5.9, respectivamente.

Tabela 5.3: Energias de transição HH1-HH2 e seus respectivos vetores de onda k em função de N_A , para um sistema de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$.

N_A ($\times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)	HH1-HH2 (meV)	k (cm^{-1})
0,1	153,36	1251
1	155,90	1272
20	162,84	1329

Podemos notar que nossos resultados indicam uma transição nas regiões que se encontram os picos de energia de absorção. Outra característica interessante é o fato de que estes picos se deslocam para mais altos valores de k , indicando que a diferença de energia HH1-HH2 aumenta conforme aumentamos N_A . Do ponto de vista teórico, se aumentamos a concentração dentro do poço, o potencial dos buracos se torna mais profundo, principalmente por causa dos efeitos de troca-correlação, logo a diferença em energia entre os estados irá aumentar. O alargamento dos espectros de absorção também aumenta com a N_A . Isto ocorre por que o nível de Fermi se desloca para o topo da barreira, conforme a concentração aumenta. Logo, a ocupação do HH1 (único nível ocupado para os três casos) também aumenta nas direções paralelas e portanto a possibilidade de transição

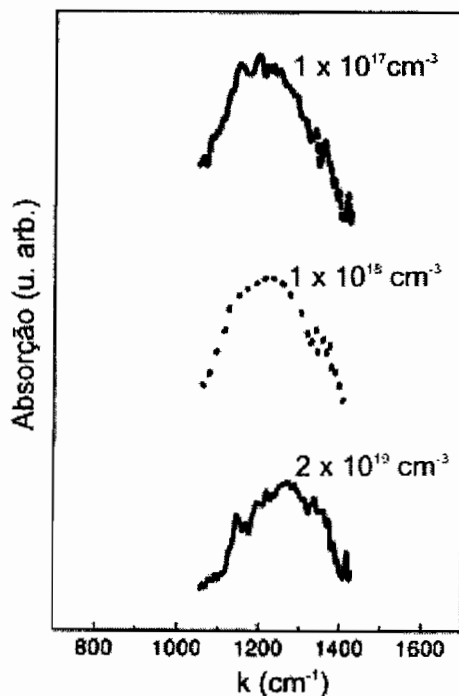


Figura 5.9: Espectros de absorção extraídos da Ref. [218] para QWIPs tipo-p de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ não tensionados, com $d_1 = 300 \text{ \AA}$ e $d_2 = 25 \text{ \AA}$, para $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

aumenta, o que gera um alargamento maior no espectro de absorção.

5.4.2 Espectros de Fotoluminescência

Feita a análise para medidas de absorção, iremos agora analisar os espectros de fotoluminescência, obtidos experimentalmente por Zhang *et al.* [216] para amostras de QWIPs tipo-p (dopadas com Be) de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ tensionadas, com $d_2 = 25 \text{ \AA}$ e $d_1 = 300 \text{ \AA}$. As concentrações nos poços para as três estruturas são $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Todas as considerações e parâmetros discutidos na sub-seção acima serão aplicados em nosso cálculo. Para o caso em que a concentração é $N_A = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, temos que o descasamento de parâmetros de rede é $1,51 \times 10^{-3}$. Iremos desprezar a componente hidrostática na energia do *gap*, pois o descasamento de parâmetros de rede é muito pequena. Os resultados obtidos por nós e pelos autores são apresentados nas Figuras 5.10 e 5.11, respectivamente.

Analisando as figuras, podemos perceber que as posições dos picos calculados, comparados com os picos de mais alta energia dos autores diferem em cerca de 30 meV. Isto se deve ao fato de que não estamos considerando de maneira completa a renormalização da energia do *gap*, mas apenas parcialmente, através dos efeitos de troca-correlação. É ne-

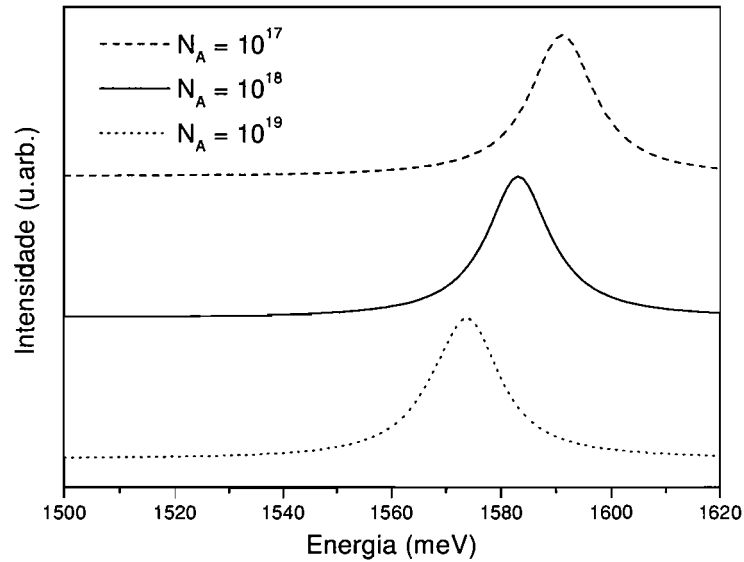


Figura 5.10: Espectros de fotoluminescência calculados para QWIPs tipo-p de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ não tensionados com $d_1 = 300 \text{ \AA}$ e $d_2 = 25 \text{ \AA}$, para $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

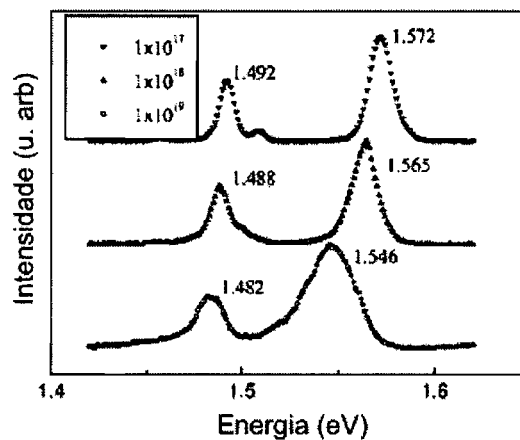


Figura 5.11: Espectros de fotoluminescência para os mesmos sistemas da Figura 5.10, extraídos da Ref. [216], medidos a $T=5 \text{ K}$ e excitados através do *laser* de Argônio.

cessário levar em conta outros efeitos de muitos corpos nestas transições, o que implicará numa redução da energia do *gap*, provavelmente da ordem da diferença que obtivemos. Os picos de menor energia, localizados abaixo do *gap* são atribuídos pelos autores à absorção envolvendo o nível de impureza de Be. Em ambos os gráficos observamos que conforme a concentração aumenta, os picos de energia se deslocam para mais baixas energias (*red-shift*), comportamento esperado já que a dopagem encontra-se dentro do poço.

A partir dos resultados obtidos, podemos afirmar que nosso modelo, quando levado

em conta os parâmetros adequados, pode servir de guia para medidas experimentais em sistemas de poços quânticos dopados e não dopados baseados nos nitretos, arsenetos ou qualquer outro tipo de material. Este método é uma ferramenta importante e poderosa que permite uma descrição realista de heteroestruturas semicondutoras.

A seguir iremos apresentar as conclusões finais deste trabalho e previsões futuras, a partir do que já foi abordado.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho apresentamos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ autoconsistente para investigar heteroestruturas dopadas tipo-p, com base no tratamento previamente desenvolvido no grupo do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores do IFUSP para homoeestruturas dopadas tipo-p, e aqui estendido para tratar diferentes materiais. A equação da massa efetiva de multibandas dentro do modelo 6×6 de Luttinger-Kohn e a equação de Poisson para a distribuição de cargas são resolvidas simultaneamente de maneira autoconsistente. A generalização do termo de energia cinética é inserido explicitamente na Hamiltoniana de Luttinger-Kohn levando em conta os efeitos de diferentes materiais pela : (i) inclusão de conjuntos distintos de parâmetros de Luttinger para o poço e para a barreira e (ii) inclusão dos elementos adicionais na matriz, que aparecem na Hamiltoniana para a heteroestrutura e que não aparecem naquela para homoeestruturas. Os efeitos de troca-correlação, dentro da aproximação da densidade local, foram levados em conta nos cálculos.

Aplicamos este método para determinar as estruturas de bandas de valência, perfis de potencial e posições do nível de Fermi em heteroestruturas baseadas nos nitretos e arsenetos. Os resultados foram apresentados para vários sistemas de múltiplos poços quânticos e super-redes de AlGa_xN/GaN e GaN/InGa_xN na fase cúbica e GaAs/InGaAs, onde foram variados a concentração de aceitadores, o período da super-rede e a composição da liga. Foram analisados os efeitos da tensão biaxial devido ao descasamento de parâmetros de rede na estrutura de sub-bandas e minibandas de valência e nos perfis de potencial para os portadores. A inclusão da banda de *split-off* resulta em forte não parabolicidade das sub-bandas e afeta os estados de buracos pesados e buracos leves, mesmo quando há apenas estados de buracos pesados ocupados. Isto reforça o fato de que a Hamiltoniana 6×6 de Luttinger-Kohn deve ser resolvida para descrever corretamente a estrutura de bandas de valência. O uso de diferentes parâmetros de Luttinger na barreira e no poço afeta os níveis de energia, mais ou menos fortemente dependendo dos tipos de materiais.

Analisando as estruturas de bandas para um dado sistema percebemos que os estados de buracos leves são os mais afetados por causa dos seus valores pequenos de massa efetiva. Os efeitos de tensão são mais fortes para as interfaces de GaN/InGaN por causa do grande descasamento dos parâmetros de rede entre o poço e a barreira. Além disso a energia do desdobramento de *split-off*, Δ , se torna menor conforme a composição da liga x aumenta. Estes fatores contribuirão para o aumento do número de bandas de *split-off* em GaN/InGaN quando comparado com sistemas de AlGaIn/GaN. Portanto os efeitos de tensão, os efeitos da inclusão da banda de *split-off* e o uso de diferentes parâmetros de Luttinger são fundamentais na determinação da estrutura de bandas de poços quânticos e super-redes de AlGaIn/GaN e GaN/InGaN cúbicos e sistemas de GaAs/InGaAs, pois podem modificar as propriedades óticas destes sistemas.

Para múltiplos poços quânticos e super-redes de AlGaIn/GaN e GaN/InGaN dopados tipo-p, a existência de um gás de buracos bidimensional (2DHG) é possível somente para $x \geq 0,3$, isto por causa da profundidade do nível aceitador que é bastante alta, cerca de 200 meV nos nitretos. Para o limite inferior $x=0,3$, temos que para múltiplos poços quânticos com largura da barreira de 200 Å, a concentração mais alta de aceitadores que pode ser alcançada, considerando que todos os aceitadores estejam ionizados, é da ordem de $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D}=2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). Este valor, no entanto, pode aumentar se aumentarmos x . Quando diminuimos o período da super-rede abaixo de $d = 70$ Å, podemos ter $N_A = 1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$, valor 100 vezes maior do que o possível em múltiplos poços quânticos (poços isolados). As minibandas com uma dispersão significativa aparecem para períodos $d \leq 100$ Å para as bandas misturadas de buraco leve-*split-off*, devido aos valores altos de massa efetiva nos buracos. Ao contrário dos nitretos, as super-redes baseadas nos arsenetos, com mesmos valores de d_1 e d_2 , exibem minibandas mais largas, isto porque as massas efetivas dos buracos nestes sistemas são bem menores, possibilitando a ocupação da banda de buraco leve. Outro ponto é que como o nível aceitador dos arsenetos é aproximadamente sete vezes menor (26-30 meV) quando comparado aos nitretos, a densidade de buracos aumenta em pelo menos 50%.

Os efeitos de troca-correlação podem alterar drasticamente a forma do “entortamento” (*bending*) do potencial total. Para múltiplos poços quânticos temos a formação de *duplos poços quânticos* e a forma do *bending* é repulsiva para os níveis de buracos, enquanto que para super-redes, ao contrário, a forma do *bending* torna os poços mais atrativos para os estados de buracos. A mudança nos níveis confinados de energia é cerca de 10-20% quando comparado com sistemas onde o potencial é plano. Logo, a inclusão dos efeitos de troca-correlação é crucial para descrever corretamente os sistemas estudados aqui.

Existem poucos resultados experimentais reportados na literatura em poços quânticos de nitretos na fase cúbica. E estes resultados são discutíveis, uma vez que podemos ter

emissões advindas dos *quantum dots* (QDs) ou do poço e não há nada conclusivo sobre a origem destas emissões. Neste trabalho estudamos as transições eletrônicas em poços quânticos de GaN/InGaN, e comparamos com os espectros de fotoluminescência, obtidos pelo grupo da Universidade de Paderborn, na Alemanha. Nossos cálculos, utilizando parâmetros adequados, mostram uma região nos espectros onde há indicativos de emissão, na ausência de QDs. Esta é a primeira tentativa de comparação de resultados teóricos e experimentais em heteroestruturas derivadas dos nitretos do grupo-III cúbicos.

Os estudos das propriedades óticas de super-redes e poços quânticos em nitretos cúbicos estão se iniciando e dentro deste contexto este trabalho é importante, pois servirá de guia para interpretar as experiências futuras. Além disso, também obtivemos bons resultados teóricos quando comparamos com os espectros de absorção e de fotoluminescência fornecidos pela literatura, para poços quânticos de AlGaAs/InGaAs. Isto mostra que para outros materiais como os arsenetos, poderemos interpretar de forma mais correta as experiências, bem como fazer previsões.

A partir do trabalho desenvolvido aqui iremos continuar o estudo, mais profundo, das interpretações experimentais. Como complementação deste trabalho poderemos analisar os efeitos da temperatura, que modificam as condições limites para a existência do gás bidimensional, já que o aumento de temperatura promove o aumento da concentração de buracos livres. Outro ponto a ser explorado é uma análise mais detalhada de quantos aceitadores estão realmente ionizados num dado sistema.

Outro trabalho interessante de ser desenvolvido é aplicar o método à estruturas de nitretos na fase wurtzita. Isto é interessante, pois não há um estudo teórico para sistemas de heteroestruturas tipo múltiplos poços quânticos e super-redes dopados tipo-p nesta fase. Para isso será necessário modificar o termo de energia cinética e utilizar a Hamiltoniana de Rashba-Sheka-Pikus (RSP), que descreve a banda de valência de semicondutores em estruturas wurtzita, considerando a diferença de materiais na barreira e no poço. Porém antes deveremos alterar a descrição da célula da super-rede no espaço recíproco. A seguir também será necessário incluir efeitos da polarização espontânea e polarização piezoelétrica, que não existem em sistemas *zincblende* e analisar seus efeitos. Assim será possível comparar os resultados com as experiências existentes na literatura.

Este trabalho também abre perspectivas para estudar diversos outros sistemas envolvendo não apenas poços quânticos, bem como sistemas com diferentes configurações, como por exemplo, poços e barreiras quadradas com uma camada delta dopada, entre outras, além de poder considerar diferentes materiais e outras direções de crescimento, como a $\langle 111 \rangle$ e $\langle 311 \rangle$. Do ponto de vista experimental, isto será muito importante para interpretar corretamente os resultados.

Apêndice A

Determinação da Hamiltoniana de *Strain* H_S

A.1 Banda de Condução

Vamos primeiro examinar o estado Γ_6 que representa o fundo da banda de condução, não levando em conta, contudo, a parte de *spin*, examinando portanto somente a parte espacial. Este estado é do tipo *s* e tem simetria cúbica (lembrando que estamos tratando do caso cúbico). O próximo passo é determinar o potencial de deformação utilizando argumentos de simetria sobre o cubo da Figura 2.5. Aplicando uma rotação de 120° em torno do eixo $\langle 111 \rangle$, obtemos a seguinte transformação de eixos:

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

Conseqüentemente nós temos:

$$\left. \begin{aligned}D_{xx} &= D_{z'z'} \\D_{yy} &= D_{x'x'} \\D_{zz} &= D_{y'y'}\end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{xx} = D_{yy} = D_{zz}\tag{A.2}$$
$$\left. \begin{aligned}D_{xy} &= D_{z'x'} \\D_{zx} &= D_{y'z'} \\D_{yz} &= D_{x'y'}\end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{xy} = D_{yz} = D_{zx}$$

Rotacionando agora de 90° em torno do eixo $\langle 001 \rangle$ temos a seguinte transformação:

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

Os potenciais se transformam como:

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

Então $D_{xy} = 0$, e por simetria, $D_{xy} = D_{yz} = D_{zx} = 0$. Desta forma para os estados Γ_6 existe somente um potencial de deformação não nulo, D_{xx} e está relacionado à pressão hidrostática. O efeito da tensão neste caso é o de produzir um deslocamento rígido na energia. Logo:

$$H_\epsilon = a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})\tag{A.5}$$

onde é usual denominar $D_{xx} = a_c$ (potencial de deformação hidrostático da banda de condução) [189].

A.2 Banda de Valência

Os estados da banda de valência são definidos pelos estados de base p_x , p_y e p_z . Vamos considerar o elemento de matriz H_ϵ^{xx} , conforme equação (2.109) temos:

$$H_\epsilon^{xx} = \langle p_x | H_\epsilon | p_x \rangle = \sum_{ij} D_{ij}^{xx} \epsilon_{ij}.\tag{A.6}$$

Novamente vamos utilizar argumentos de simetria como fizemos acima. Vamos rotacionar de 90° em torno do eixo $\langle 100 \rangle$. Isto gerará a seguinte transformação:

$$\begin{aligned}x' &= x \\y' &= z \\z' &= -y\end{aligned}\tag{A.7}$$

De forma a obter:

$$\begin{aligned}
 D_{xx}^{xx} &= D_{x'x'}^{x'x'} \\
 \left. \begin{aligned}
 D_{yy}^{xx} &= D_{z'z'}^{x'x'} \\
 D_{zz}^{xx} &= D_{y'y'}^{x'x'}
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{yy}^{xx} = D_{zz}^{xx} \\
 \left. \begin{aligned}
 D_{xy}^{xx} &= -D_{x'x'}^{x'y'} \\
 D_{xz}^{xx} &= D_{x'y'}^{x'y'}
 \end{aligned} \right\} = 0 \\
 D_{yz}^{xx} &= -D_{x'y'}^{x'y'} = 0.
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

Também examinaremos termos como H_ϵ^{xy} , rotacionando de 90° em torno do eixo $\langle 001 \rangle$, obtemos:

$$\left. \begin{aligned}
 D_{xx}^{xy} &= -D_{y'y'}^{x'y'} \\
 D_{yy}^{xy} &= -D_{x'x'}^{x'y'}
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{xx}^{xy} = -D_{yy}^{xy}. \tag{A.9}$$

Estes termos serão zero se considerarmos uma reflexão através de $x = y$ e:

$$\begin{aligned}
 D_{zz}^{xy} &= -D_{z'z'}^{x'y'} = 0, \\
 \left. \begin{aligned}
 D_{xz}^{xy} &= D_{y'z'}^{x'y'} \\
 D_{yz}^{xy} &= -D_{x'z'}^{x'y'}
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow D_{xz}^{xy} = D_{yz}^{xy} = 0.
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

Logo os únicos potenciais de deformação que sobram são definidos como:

$$\begin{aligned}
 D_{xx}^{xx} &= l, \\
 D_{zz}^{xx} &= D_{yy}^{xx} = m, \\
 D_{xx}^{xy} &= n.
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Freqüentemente usamos a seguinte definição que é mais útil para a base do momento angular:

$$\begin{aligned}
 a_v &= \frac{l + 2m}{3}, \\
 b &= \frac{l - m}{3}, \\
 d &= \frac{n}{\sqrt{3}}.
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

O potencial de deformação a_v está relacionado à deformação hidrostática na banda de valência, cujo efeito é um deslocamento rígido na energia, enquanto b e d estão relacionados à potenciais de deformação uniaxial, adequado a *strains* de simetrias tetragonal e romboédrica, respectivamente. Para o caso que estamos tratando aqui teremos apenas *strain* de simetria tetragonal, isto porque estamos estudando estruturas crescidas na direção $\langle 001 \rangle$. Se o crescimento se desse na direção $\langle 111 \rangle$ teríamos *strain* de simetria romboédrica.

Temos ainda as seguintes relações, as quais já foram discutidas anteriormente na seção (2.8):

$$\begin{aligned}\epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_{zz} &= -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon_{\parallel} .\end{aligned}\quad (\text{A.13})$$

Vamos 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* :

$$\begin{aligned}|3/2 \ 3/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |x + iy\rangle \\ |3/2 \ 1/2\rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}} [-2|z\rangle + |x + iy\rangle] \\ |3/2 \ -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [2|z\rangle + |x - iy\rangle] \\ |3/2 \ -3/2\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} |x - iy\rangle \\ |1/2 \ 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [|z\rangle + |x + iy\rangle] \\ |1/2 \ -1/2\rangle &= \frac{i}{\sqrt{3}} [|z\rangle + |x - iy\rangle] .\end{aligned}\quad (\text{A.14})$$

Usando (A.6),(A.11) e (A.14) temos que:

$$\begin{aligned}\langle 3/2 \ 3/2 | H_\epsilon | 3/2 \ 3/2 \rangle &= \frac{1}{2} \langle p_x - ip_y | H_\epsilon | p_x + ip_y \rangle \\ &= \frac{1}{2} [\langle p_x | H_\epsilon | p_x \rangle + i \langle p_x | H_\epsilon | p_y \rangle - i \langle p_y | H_\epsilon | p_x \rangle + \langle p_y | H_\epsilon | p_y \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [l\epsilon_{xx} + m(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + l\epsilon_{yy} + m(\epsilon_{zz} + \epsilon_{xx})] \\ &= \frac{1}{2} [\epsilon_{xx}(l + m) + \epsilon_{yy}(l + m) + 2m\epsilon_{zz}] .\end{aligned}\quad (\text{A.15})$$

Note que os termos mistos se anulam. Escrevendo a expressão acima em termos do potencial de deformação a_v , b e d e utilizando as seguintes expressões, obtidas a partir de (A.12),

$$\begin{aligned} l &= a_v + 2b \\ m &= a_v - b \\ n &= \sqrt{3}d \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

obtemos,

$$\begin{aligned} \langle 3/2 \ 3/2 | H_\epsilon | 3/2 \ 3/2 \rangle &= \frac{1}{2} [\epsilon_{xx} (2a_v + b) + \epsilon_{yy} (2a_v + b) + (2a_v - 2b) \epsilon_{zz}] \\ &= a_v (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + \frac{b}{2} (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Usando as relações dadas em (A.13) temos:

$$\langle 3/2 \ 3/2 | H_\epsilon | 3/2 \ 3/2 \rangle = a_v 2\epsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right). \quad (\text{A.18})$$

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

$$\langle p_z | H_\epsilon | p_z \rangle = l\epsilon_{zz} + m (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (\text{A.19})$$

temos então,

$$\langle 3/2 \ 1/2 | H_\epsilon | 3/2 \ 1/2 \rangle = a_v 2\epsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (\text{A.20})$$

$$\langle 3/2 \ -1/2 | H_\epsilon | 3/2 \ -1/2 \rangle = a_v 2\epsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (\text{A.21})$$

$$\langle 3/2 \ -3/2 | H_\epsilon | 3/2 \ -3/2 \rangle = a_v 2\epsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (\text{A.22})$$

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

$$\langle 3/2 \ -1/2 | H_\epsilon | 1/2 \ -1/2 \rangle = a_v 2\epsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - i\sqrt{2}b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) , \quad (\text{A.24})$$

e sabendo que:

$$\langle ab | H_\epsilon | cd \rangle = \langle cd | H_\epsilon | ab \rangle^* , \quad (\text{A.25})$$

então:

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

$$\langle 1/2 \ -1/2 | H_\epsilon | 3/2 \ -1/2 \rangle = a_v 2\epsilon_{\parallel} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + i\sqrt{2}b\epsilon_{\parallel} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) . \quad (\text{A.27})$$

Apêndice B

Determinação da Força do Oscilador

Utilizando os autoestados de Luttinger-Kohn $\langle \vec{r}_s | jm_j \vec{k} K \rangle$, podemos reescrever o termo $\langle n_e \sigma_e \vec{k} | p_x | n_q \sigma_q \vec{k} \rangle$ como [7]:

$$\begin{aligned} \langle n_e \sigma_e \vec{k} | p_x | n_q \sigma_q \vec{k} \rangle = \\ G_z G_{\parallel} \sum_K \sum_{jm_j} \sum_{j'm'_j} \langle n_e \sigma_e \vec{k} | jm_j K \rangle \langle jm_j | p_x | j'm'_j \rangle \langle j'm'_j | n_q \sigma_q \vec{k} \rangle \quad . \quad (\text{B.1}) \end{aligned}$$

Nos sistemas que estaremos tratando, a banda de condução praticamente não interage com a banda de valência. Os valores das energias dos *gaps* são altos, principalmente para os nitretos. Logo temos que:

$$\left\langle \frac{3}{2} m_{\frac{3}{2}} K \left| n_e \sigma_e \vec{k} \right. \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m_{\frac{1}{2}} K \left| n_e \sigma_e \vec{k} \right. \right\rangle = 0 \quad . \quad (\text{B.2})$$

Desta forma, temos que os termos não nulos são $\langle cm_c | p_x | 3/2 m_{3/2} K \rangle$ e $\langle cm_c | p_x | 1/2 m_{1/2} K \rangle$, onde *c* define os estados da banda de condução. Utilizando,

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

podemos escrever estes termos em função de P , definido na seção (5.2.1), da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \langle c \ 1/2 | p_x | 3/2 \ 3/2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} P \\
 \langle c \ -1/2 | p_x | 3/2 \ -3/2 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} P \\
 \langle c \ 1/2 | p_x | 3/2 \ 1/2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} P \\
 \langle c \ -1/2 | p_x | 3/2 \ -1/2 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}} P \\
 \langle c \ 1/2 | p_x | 1/2 \ -1/2 \rangle &= \frac{-i}{\sqrt{3}} P \\
 \langle c \ -1/2 | p_x | 1/2 \ 1/2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} P \ ,
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

os outros termos se anulam.

Com relação ao termo $\langle n_e \sigma_e \vec{k} | p_x | n_q \sigma_q \vec{k} \rangle$, considerando que nem todos os elementos são independentes, temos as seguintes relações:

$$\begin{aligned}
 \left| \langle n_e \uparrow \vec{k} | p_x | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right|^2 &= \left| \langle n_e \uparrow \vec{k} | p_x | n_q \downarrow \vec{k} \rangle \right|^2 \\
 \left| \langle n_e \downarrow \vec{k} | p_x | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right|^2 &= \left| \langle n_e \uparrow \vec{k} | p_x | n_q \downarrow \vec{k} \rangle \right|^2
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

para $q=hh, lh$ e so.

Aplicando as expressões (B.2) e (B.4) em (B.5), obtemos:

$$\begin{aligned}
 \left| \langle n_e \uparrow \vec{k} | p_x | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right|^2 &= G_z G_{\parallel} \frac{|P|^2}{2} \left| \sum_K \langle n_e \uparrow \vec{k} | c \frac{1}{2} K \rangle \left[\langle \frac{33}{22} K | n_q \uparrow \vec{k} \rangle + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle \frac{3}{2} - \frac{1}{2} K | n_q \uparrow \vec{k} \rangle - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2} K | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right] \right|^2 \quad (\text{B.6})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left| \langle n_e \downarrow \vec{k} | p_x | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right|^2 &= G_z G_{\parallel} \frac{|P|^2}{2} \left| \sum_K \langle n_e \downarrow \vec{k} | c \frac{1}{2} K \rangle \left[\langle \frac{3}{2} - \frac{3}{2} K | n_q \uparrow \vec{k} \rangle + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle \frac{31}{22} K | n_q \uparrow \vec{k} \rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \langle \frac{11}{22} K | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right] \right|^2. \quad (\text{B.7})
 \end{aligned}$$

Portanto, com os termos calculados, podemos finalmente obter a força de oscilador para uma transição eletrônica, dada por:

$$\begin{aligned}
 f_{n_e n_q}(\vec{k}) &= \\
 &= \frac{4}{m_0 [E_{n_e}(\vec{k}) - E_{n_q}(\vec{k})]} \left[\left| \langle n_e \uparrow \vec{k} | p_x | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right|^2 + \left| \langle n_e \downarrow \vec{k} | p_x | n_q \uparrow \vec{k} \rangle \right|^2 \right]. \quad (\text{B.8})
 \end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] R. Dingle, *Applications of Multiquantum Wells, Selective Doping, and Superlattices*, volume 24 de *Semiconductor and Semimetals* (Academic Press, 1987).
- [2] P. Y. Yu e M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties* (Springer, 1996).
- [3] J. M. Luttinger e W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [4] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 82 (1956).
- [5] G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *Phys. Rev.* **B53**, 9930 (1996).
- [6] G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, E. C. F. da Silva e A. Levine, *Phys. Rev.* **B57**, 9168 (1998).
- [7] G. M. Sipahi, *Teoria do Confinamento de Buracos em Heteroestruturas Semicondutoras do Tipo δ -Doping*, Tese de doutorado, IFUSP, São Paulo (1997).
- [8] A. L. Rosa, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein, G. M. Sipahi e J. R. Leite, *Phys. Rev.* **B58**, 15675 (1998).
- [9] A. L. Rosa, L. M. R. Scolfaro, G. M. Sipahi, R. Enderlein e J. R. Leite, *Microelet. Eng.* **43/44**, 489 (1998).
- [10] L. E. Ramos, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein e J. R. Leite, *Superlatt. Microstruct.* **22**, 443 (1997).
- [11] A. L. Rosa, L. M. R. Scolfaro, G. M. Sipahi e J. R. Leite, *Superlatt. Microstruct.* **25**, 67 (1999).
- [12] M. Kemerink, P. M. Koenraad, P. C. Christianen, A. K. Geim, J. C. Maan, J. H. Wolter e M. Henini, *Phys. Rev.* **B53**, 10000 (1996).

- [13] M. Kemerink, P. M. M. Thomassen, P. M. Koenraad, P. A. Bobbert, J. C. M. Henning e J. H. Wolter, *Phys. Rev.* **B58**, 1424 (1998).
- [14] M. Kucharczyk e M. S. Wartak, *Superlatt. Microstruct.* **24**, 17 (1998).
- [15] B. W. Kim e A. Majerfeld, *J. Appl. Phys.* **77**, 4552 (1995).
- [16] B. W. Kim, E. Mao e A. Majerfeld, *J. Appl. Phys.* **81**, 1883 (1997).
- [17] A. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 572 (1997).
- [18] S. Ekbote, M. Cahay e K. Roenker, *Phys. Rev.* **B58**, 16315 (1998).
- [19] J. R. Hoff, M. Razeghi e G. J. Brown, *Phys. Rev.* **54**, 10773 (1996).
- [20] S. S. Li, J. Chu e Y. H. Wang, *Superlatt. Microstruct.* **19**, 229 (1996).
- [21] D. Ahn, S. J. Yoon, S. L. Chuang e C.-S. Chang, *J. Appl. Phys.* **78**, 2489 (1995).
- [22] R. Oberhuber, G. Zandler e P. Vogl, *Phys. Rev.* **B58**, 9941 (1998).
- [23] S. K. Chun, D. S. Pan e K. L. Wang, *Phys. Rev.* **B47**, 15638 (1993).
- [24] R. Winkler, M. Merkler, T. Darnhofer e U. Rössler, *Phys. Rev.* **B53**, 10858 (1996).
- [25] J. I. Pankove e T. D. Moustakas, *Gallium Nitride (GaN) I*, volume 50 de *Semiconductor and Semimetals* (Academic Press, 1998).
- [26] D. Ahn, *J. Appl. Phys.* **79**, 7731 (1996).
- [27] W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong e J. B. Xia, *J. Appl. Phys.* **80**, 3471 (1996).
- [28] W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong e J. B. Xia, *Solid State Commun.* **98**, 737 (1996).
- [29] Y. M. Sirenko, J. B. Jeon, B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, M. A. Stroscio e G. J. Iafrate, *Phys. Rev.* **B55**, 4360 (1997).
- [30] A. C. R. Bittencourt, A. M. Cohen e G. E. Marques, *Phys. Rev.* **B57**, 4525 (1998).
- [31] A. M. de Paula, C. R. M. de Oliveira, G. E. Marques, A. M. Cohen, R. D. Feldman, R. F. Austin, M. N. Islam e C. L. Cesar, *Phys. Rev.* **B59**, 10158 (1999).
- [32] L. M. R. Scolfaro, D. Beliaev, R. Enderlein, J. R. Leite, A. T. Lino e K. Takahashi, *Int. J. Quant. Chem* **S28**, 667 (1994).

- [33] L. M. R. Solfaro, D. Beliaev, R. Enderlein e J. R. Leite, *Phys. Rev.* **B50**, 8699 (1994).
- [34] A. T. Lino, E. K. Takahashi, L. M. R. Solfaro e J. R. Leite, *Int. J. Quantum Chem.* **S30**, 347 (1996).
- [35] C. A. C. Mendonça, L. M. R. Solfaro, J. B. B. Oliveira, F. Plentz, M. Miçovic, J. R. Leite e E. A. Meneses, *Superlatt. Microstruct.* **12**, 257 (1992).
- [36] S. C. P. Rodrigues, *Propriedades de Transporte Vertical em Super-Redes de Poços Deltas tipo-n em GaAs*, Tese de mestrado, IFUSP, São Paulo (1997).
- [37] J. R. Leite, S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Solfaro, R. Enderlein e D. Beliaev, *Mat. Sci. and Eng.* **B35**, 250 (1995).
- [38] S. C. P. Rodrigues, A. L. Rosa, L. M. R. Solfaro, D. Beliaev, J. R. Leite, R. Enderlein e J. L. A. Alves, *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 981 (1998).
- [39] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan e R. van Overstraeten, *J. Appl. Phys.* **87**, 965 (2000).
- [40] O. Ambacher, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**, 2653 (1998).
- [41] J. W. Orton e C. T. Foxon, *Rep. Prog. Phys* **61**, 1 (1998).
- [42] J. H. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano e C. Wetzel, *Properties, Processing and Applications of Gallium Nitride and Related Semiconductors* (EMI Datareview Series, 1999).
- [43] S. Strite e H. Morkoç, *J. Vac. Sci. Technol.* **B10**, 1237 (1992).
- [44] S. Nakamura, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, R27 (1999).
- [45] H. G. Grimmeiss e H. Koelmans, *Zeitschrift fur Naturforschung A* **14a**, 264 (1959).
- [46] H. P. Maruska e J. J. Tietjen, *Appl. Phys. Lett.* **15**, 327 (1969).
- [47] W. Seifert, R. Franzheld, E. Butter, H. Sobotta e V. Riede, *Cryst. Res. Technol.* **18**, 383 (1983).
- [48] J. I. Pankove, E. A. Miller e J. E. Berkeyheiser, *J. Lumin.* **5**, 84 (1972).
- [49] H. P. Maruska, W. C. Rhines e D. A. Stevenson, *Mater. Res. Bull.* **7**, 777 (1972).
- [50] S. Yoshida, S. Misawa e S. Gonda, *Appl. Phys. Lett.* **42**, 427 (1983).

- [51] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu e I. Akasaki, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2*, **28**, L2112 (1989).
- [52] H. Amano, I. Akasaki, T. Kozawa, K. Hiramatsu, N. Sawak, K. Ikeda e Y. Ishi, *J. Lumin.* **40/41**, 121 (1988).
- [53] I. Akasaki, H. Amano, M. Kito e K. Hiramatsu, *J. Lumin.* **48/49**, 666 (1991).
- [54] J.-Y. Leem, C.-R. Lee, J.-I. Lee, S. K. Noh, Y.-S. Kwon, Y.-H. Ryu e S.-J. Son, *J. Cryst. Growth* **193**, 491 (1998).
- [55] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa e S.-I. Nagahama, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2*, **34**, L797 (1995).
- [56] S. Nakamura, M. Senoh, S.-I. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku e Y. Sugimoto, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2* **35**, L74 (1996).
- [57] S. Nakamura, M. Senoh, S.-I. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano e K. Chocho, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2*, **36**, L1568 (1997).
- [58] A. Y. Polyakov, N. B. Smirnov, A. V. Govorkov, M. G. Mil'vidskii, A. S. Usikov, B. V. Pushnyi e W. V. Lundin, *Sol. Stat. Electron.* **43**, 1929 (1999).
- [59] I. Akasaki e H. Amano, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 1*, **36**, 5393 (1997).
- [60] B. Schineller, A. Guttzeit, F. Vertommen, O. Schön, M. Heuken, K. Heime e R. Beccard, *J. Cryst. Growth* **189/190**, 798 (1998).
- [61] C. Nomura, K. Kishino e A. Kikuchi, *Sol. Stat. Electron.* **41**, 283 (1997).
- [62] T. F. Kuech, R. T. Collins, D. L. Smith e C. Maihiot, *J. Appl. Phys.* **67**, 2650 (1990).
- [63] N. Maeda, T. Nishida, N. Kobayashi e M. Tomizawa, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1856 (1998).
- [64] Q. Chen, J. W. Yang, M. Blasingame, C. Faber, A. T. Ping e I. Adesita, *Mat. Sci. and Eng.* **B59**, 395 (1999).
- [65] R. Gaska, M. S. Shur, A. D. Byhovski, A. O. Orlov e G. L. Snider, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 287 (1999).
- [66] R. Oberhuber, G. Zandler e P. Vogl, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 818 (1998).

- [67] J. C. Zolper, R. J. Shul, A. G. Baca, R. G. Wilson, S. J. Pearton e R. A. Stall, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2273 (1996).
- [68] M. A. Khan, R. A. Skogman e J. M. van Hove, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 1257 (1990).
- [69] K. Itoh, T. Kawamoto, H. Amano, K. Hiramatsu e I. Akasaki, *Jpn. J. Appl. Phys, Parte 1*, **30**, 1924 (1991).
- [70] S. Nakamura, T. Mukai e M. Senoh, *Jpn. J. Appl. Phys, Parte 2*, **32**, L8 (1993).
- [71] M. A. Khan, J. N. Kuznia, A. R. Bhattarai e D. T. Olsen, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 1786 (1993).
- [72] F. D. Sala, A. D. Carlo, P. Lugli, F. Bernardini, V. Fiorentini, R. Scholz e J.-M. Jancu, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2002 (1999).
- [73] J. I. Pankove e T. D. Moustakas, *Gallium Nitride (GaN) II*, volume 57 de *Semiconductor and Semimetals* (Academic Press, 1999).
- [74] N. Grandjean, J. Massies, S. Dalmaso, P. Vennéguès, L. Sizade e L. Hirsch, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3616 (1999).
- [75] S. F. Chichibu, A. C. Abare, M. P. Mack, M. S. Minsky, T. Deguchi, D. Cohen, P. Kozodoy, S. B. Fleischer, S. Keller, J. S. Speck, J. E. Bowers, E. Hu, U. K. Mishra, L. A. Coldren, S. P. DenBaars, K. Wada, T. Soda e S. Nakamura, *Mat. Sci. and Eng.* **B59**, 298 (1999).
- [76] L. J. Schowalter, J. C. Rojo, G. A. Slack, Y. Shusterman, R. Wang, I. Bhat e G. Arunmazi, *J. Cryst. Growth* **211**, 78 (2000).
- [77] X. Zhang, S.-J. Chua, W. Liu e P. Li, *phys. stat. sol.(b)* **216**, 307 (1999).
- [78] H. M. Ng, D. Doppalapudi, D. Korakakis, R. Singh e T. D. Moustakas, *J. Cryst. Growth* **189/190**, 349 (1998).
- [79] N. Grandjean e J. Massies, *Mat. Sci. and Eng.* **B59**, 39 (1999).
- [80] T. Böttcher, S. Einfeldt, S. Figge, V. Kirchner, H. Heinke, D. Hommel, D. Rudloff, T. Riemann e J. Christen, *phys. stat. sol.(a)* **176**, 291 (1999).
- [81] O. Brandt, H. Yang, J. R. Müllhäuser, A. Trampert e K. H. Ploog, *Mat. Sci. and Eng.* **B43**, 215 (1997).

- [82] O. Brandt, J. R. Müllhäuser, A. Trampert e K. H. Ploog, *Mat. Sci. and Eng.* **B59**, 73 (1999).
- [83] D. J. As, *phys. stat. sol.(b)* **210**, 445 (1998).
- [84] D. J. As e K. Lischka, *phys. stat. sol.(a)* **176**, 475 (1999).
- [85] M. A. L. Johnson, J. D. Brown, N. A. El-Masry, J. W. Cook, F. Schetzina, H. S. Kong e J. A. Edmond, *J. Vac. Sci. Technol.* **B16**, 1282 (1998).
- [86] W. V. Lundin, A. S. Usikov, A. V. Sakharov, V. V. Tretyakov, D. V. Poloskin, N. N. Ledentsov e A. Hoffmann, *phys. stat. sol.(a)* **176**, 379 (1999).
- [87] H. Yaguchi, J. Wu, H. Akiyama, M. Baba, K. Onabe e Y. Shiraki, *phys. stat. sol.(b)* **216**, 237 (1999).
- [88] A. Nakadaira e H. Tanaka, *phys. stat. sol.(a)* **176**, 529 (1999).
- [89] A. Tabata, A. P. Lima, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, V. Lemos, B. Schöttker, T. Frey, D. Shikora e K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 362 (1999).
- [90] A. Tabata, J. R. Leite, A. P. Lima, E. Silveira, V. Lemos, T. Frey, D. J. As, D. Shikora e K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 1095 (1999).
- [91] E. T. Yu, X. Z. Dang, P. M. Asbeck, S. S. Lau e G. J. Sullivan, *J. Vac. Sci. Technol.* **B17**, 1742 (1999).
- [92] V. Fiorentini e F. Bernardini, *Phys. Rev.* **B60**, 8849 (1999).
- [93] S.-H. Park e S.-L. Chuang, *J. Appl. Phys.* **87**, 353 (2000).
- [94] J. Wagner, A. Ramakrishnan, H. Obloh e M. Maier, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3863 (1999).
- [95] S.-H. Park e S.-L. Chuang, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3103 (1998).
- [96] L. Hsu, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 339 (1998).
- [97] A. D. Bykhovski, R. Gaska e M. S. Sur, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3577 (1998).
- [98] L.-H. Peng, C.-W. Chuang e L.-H. Lou, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 795 (1999).
- [99] L. Hsu e W. Walukiewicz, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2405 (1999).
- [100] K. Kumakura e N. Kobayashi, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2*, **38**, L1012 (1999).

- [101] J. S. Im, H. Kollmer, J. Off, F. Scholz e A. Hangleiter, *Mat. Sci. and Eng.* **B59**, 315 (1999).
- [102] D. K. Gaskill, A. E. Wickenden, K. Doverspike, K. Tadayon e L. B. Rowland, *J. Electron. Mater.* **24**, 1525 (1995).
- [103] K. H. Ploog e O. Brandt, *J. Vac. Sci. Technol.* **A16**, 1609 (1998).
- [104] C. Stampfl, J. Neugebauer e C. G. van de Walle, *Mat. Sci. and Eng.* **B59**, 253 (1999).
- [105] A. Salvador, G. Liu, W. Kim, Ö. Aktas, A. E. Botchkarev e H. Morkoç, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 3322 (1995).
- [106] W. Kim, A. E. Botchkarev, H. Morkoç, Z.-Q. Fang, D. C. Look e D. J. Smith, *J. Appl. Phys.* **84**, 6680 (1998).
- [107] I.-H. Lee, I.-H. Choi, C.-R. Lee, E.-J. Shin, D. Kim, S. K. Noh, S.-J. Son, K. Y. Lim e H. J. Lee, *J. Appl. Phys.* **83**, 5787 (1998).
- [108] M. A. Jacobson, D. K. Nelson e S. O. Romanovsky, *phys. stat. sol.(b)* **210**, 475 (1998).
- [109] S. Hess, R. A. Taylor, J. F. Ryan, N. J. Cain, V. Roberts e J. Roberts, *phys. stat. sol.(b)* **210**, 465 (1998).
- [110] W. Knap, S. Contreras, H. Alause, C. Skierbiszewski, J. Camassel, M. Dyakonov, J. L. Robert, J. Yang, Q. Chen, M. A. Khan, M. L. Sadowski, S. Huant, F. H. Yang, M. Goiran, J. Leotin e M. S. Shur, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2123 (1997).
- [111] T. Wang, J. Bai, S. Sakai, Y. Ohno e H. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2737 (2000).
- [112] M. Fanciulli, T. Lei e T. D. Moustakas, *Phys. Rev.* **B48**, 15144 (1993).
- [113] B. Shen, T. Someya e Y. Arakawa, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2746 (2000).
- [114] M. E. Mora-Ramos e L. M. Gaggero-Sager, *phys. stat. sol.(b)* **220**, 175 (2000).
- [115] J. Dalfors, J. P. Bergman, P. O. Holtz, B. E. Sernelius, B. Monemar, H. Amano e I. Akasaki, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3299 (1999).
- [116] M. Marques, L. E. Ramos, L. M. R. Scolfaro, L. K. Teles e J. R. Leite, *Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductors- ICPS25* (2000), em Osaka, Japão.

- [117] M. Marques, *Propriedades eletrônicas das ligas AlGaN e InGaN e da impureza aceitadora de C*, Tese de mestrado, IFUSP, São Paulo (2001).
- [118] F. Bernardini, V. Fiorentini e A. Bosin, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2990 (1997).
- [119] A. Saxler, W. C. Mitchel, P. Kung e M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2023 (1999).
- [120] F. Mireles e S. E. Ulloa, *Phys. Rev.* **B58**, 3879 (1998).
- [121] P. Kozodoy, M. Hansen, S. P. DenBaars e K. Mishra, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3681 (1999).
- [122] T. Yamamoto, H. Katayama e H. K. Yoshida, *J. Cryst. Growth* **189/190**, 532 (1998).
- [123] I. D. Goepfert, E. F. Schubert, A. Osinsky, P. E. Norris e N. N. Faleev, *J. Appl. Phys.* **88**, 2030 (2000).
- [124] K. Kumakura, T. Makimoto e N. Kobayashi, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2*, **39**, L195 (2000).
- [125] X. L. Sun, Y. T. Wang, H. Yang, L. X. Zheng, D. P. Xu, J. B. Li e Z. G. Wang, *J. Appl. Phys.* **87**, 3711 (2000).
- [126] J. Wu, H. Yagushi, K. Onabe e Y. Shiraki, *J. Cryst. Growth* **197**, 73 (1999).
- [127] S.-H. Park e D. Ahn, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 398 (1997).
- [128] D. Ahn e S.-H. Park, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 1*, **35**, 6079 (1996).
- [129] D. Ahn, *J. Appl. Phys.* **76**, 8206 (1994).
- [130] G. Frankowsky, F. Steuber, V. Härle, F. Scholz e A. Hangleiter, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 3746 (1996).
- [131] W. W. Chow, A. F. Wright e J. S. Nelson, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 296 (1996).
- [132] J. Holst, L. Eckey, A. Hoffmann, I. Broser, B. Schöttker, D. J. As, D. Schikora e K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1439 (1998).
- [133] J. B. Jeon, , B. C. Lee, Y. M. Sirenko, K. W. Kim e M. A. Littlejohn, *J. Appl. Phys.* **82**, 386 (1997).
- [134] L. K. Teles, J. Furthmüller, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite e F. Bechstedt, *Phys. Rev.* **B62**, 2475 (2000).

- [135] V. Lemos, E. Silveira, J. R. Leite, A. Tabata, R. Trentin, L. M. R. Scolfaro, T. Frey, D. J. As, D. Schikora e K. Lischka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3666 (2000).
- [136] L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. Furthmüller, J. R. Leite e F. Bechstedt, *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors, IPAP Conf. Series* **1**, 689 (2000).
- [137] A. Tabata, T. Frey, A. Kharchenko, L. K. Teles, J. Furthmüller, L. M. R. Scolfaro, D. J. As, D. Schikora, K. Lischka, F. Bechstedt e J. R. Leite, *Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductors- ICPS25* (2000), em Osaka, Japão.
- [138] T. Kitamura, S.-H. Cho, Y. Ishida, X.-Q. Shen, H. Nakanishi, S. Chichibu e H. Okumura, *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors, IPAP Conf. Series* **1**, 93 (2000).
- [139] T. Kitamura, S.-H. Cho, Y. Ishida, T. Ide, X.-Q. Shen, H. Nakanishi, S. Chichibu e H. Okumura, *J. Cryst. Growth* (2001), a ser publicado.
- [140] D. W. Jenkins, R.-D. Hong e J. D. Dow, *Superlatt. Microstruct.* **3**, 365 (1987).
- [141] B. Jogai, *Solid State Commun.* **7**, 345 (1998).
- [142] T. Yang, S. Nakajima e S. Sakai, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 1*, **34**, 5912 (1995).
- [143] A. Tadjer, B. Abbar, M. Rezki, H. Aourag e M. Certier, *J. Phys. and Chem. Solids* **60**, 419 (1999).
- [144] D. Vogel, P. Krüger e J. Pollmann, *Phys. Rev.* **55**, 12836 (1997).
- [145] J. A. Majewski, M. Städele e P. Vogl, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **449**, 887 (1997).
- [146] S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand e R. A. Abram, *J. Appl. Phys.* **86**, 3768 (1999).
- [147] S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand e R. A. Abram, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, 23 (1999).
- [148] W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong e J. B. Xia, *J. Appl. Phys.* **79**, 188 (1996).
- [149] K. Shimada, T. Sota e K. Suzuki, *J. Appl. Phys.* **84**, 4951 (1998).
- [150] A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).
- [151] K. Karch, J. M. Wagner e F. Bechstedt, *Phys. Rev.* **B57**, 7043 (1998).

- [152] Y. C. Yeo, T. C. Chong e M. F. Li, *J. Appl. Phys.* **83**, 1429 (1998).
- [153] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall e M. van Schilfgaarde, *Phys. Rev.* **B56**, 7363 (1997).
- [154] K. Kim, W. R. L. Lambrecht e B. Segall, *Phys. Rev.* **B53**, 16310 (1996).
- [155] K. Kim, W. R. L. Lambrecht e B. Segall, *Phys. Rev.* **B56**, 7018 (1997).
- [156] N. E. Christensen e I. Gorczyca, *Phys. Rev.* **B50**, 4397 (1994).
- [157] L. E. Ramos, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite e J. L. P. Castineira, *Phys. Rev.* **B63**, 165210 (2001).
- [158] M. Suzuki, T. Uenoyama e A. Yanase, *Phys. Rev.* **B52**, 8132 (1995).
- [159] Y. M. Sirenko, J. B. Jeon, K. W. Kim, M. A. Littlejohn e M. A. Stroscio, *Phys. Rev.* **B53**, 1997 (1996).
- [160] G. B. Ren, Y. M. Liu e P. Blood, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1117 (1999).
- [161] M. Suzuki e T. Uenoyama, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3378 (1996).
- [162] M. Suzuki e T. Uenoyama, *J. Appl. Phys.* **80**, 6868 (1996).
- [163] D. J. Dugdale, S. Brand e R. A. Abram, *Phys. Rev.* **61**, 12933 (2000).
- [164] J. B. Jeon, Y. M. Sirenko, K. W. Kim, M. A. Littlejohn e M. A. Stroscio, *Solid State Commun.* **99**, 423 (1996).
- [165] C.-H. Kim e B.-H. Han, *J. Kor. Phys. Soc.* **31**, 629 (1997).
- [166] S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1015 (2000).
- [167] S. L. Chuang e C.-S. Chang, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1657 (1996).
- [168] S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors, IPAP Conf. Series* **1**, 74 (2000).
- [169] S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *Physica B* **302/302**, 106 (2001).
- [170] S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *Phys. Rev.* (2001), submetido.

- [171] S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 3381 (2001).
- [172] R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3712 (1997), *ibid.* **80**, 3160 (1998).
- [173] D. Beliaev, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite e G. M. Sipahi, *phys. stat. sol.(b)* **210**, 777 (1998).
- [174] S. C. Jain, M. Willander e H. Maes, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 641 (1996).
- [175] L. F. Lester, S. D. Offsey, B. K. Ridley, W. J. Schaff, B. A. Foreman e L. F. Eastman, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 1162 (1991).
- [176] J. Lee, C. Shieh e M. O. Vassell, *J. Appl. Phys.* **69**, 1882 (1991).
- [177] E. O. Kane, *Semiconductors and Semimetals*, volume 1 (Cambridge University Press, 1966), p. 75.
- [178] D. Richards, J. Wagner, H. Schneider, G. Hendorfer, M. Maier, A. Fischer e K. Plog, *Phys. Rev.* **B47**, 9629 (1993).
- [179] M. Kemerink, P. M. Koenraad, P. C. M. Christianen, R. van Schaijk, J. C. Maan e J. H. Wolter, *Phys. Rev.* **B56**, 4853 (1997).
- [180] M. Kemerink, P. M. Koenraad e J. H. Wolter, *Physica B* **256/258**, 503 (1998).
- [181] R. van Dalen, C. Roberts, P. M. Koenraad e J. J. Harris, *Phys. Rev.* **B61**, 4445 (2000).
- [182] A. L. da Rosa, *Estrutura Eletrônica de Poços Quânticos de Dopagem Planar Tipo-p em Silício*, Tese de mestrado, IFUSP, São Paulo (1997).
- [183] L. E. Ramos, *Estrutura de Minibandas de Super-Redes de GaAs com Dopagem Planar Tipo-p*, Tese de mestrado, IFUSP, São Paulo (1998).
- [184] R. Enderlein e N. J. M. Horing, *Fundamentals of Semiconductors Physics and Devices* (World Scientific, 1997).
- [185] R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, *phys. stat. sol.(b)* **206**, 623 (1998).
- [186] M. G. Burt, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 6651 (1992).

- [187] G. Harbeke, O. Madelung e U. Rössler, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, volume 17 de *New Series, Group III* (Spring-Verlag, Berlim, 1982).
- [188] L. Hedin e B. I. Lundqvist, *J. Phys. C* **4**, 2064 (1971).
- [189] T. P. Pearsall, *Strained-Layer Superlattices: Physics*, volume 32 de *Semiconductor and Semimetals* (Academic Press, 1990).
- [190] T. P. Pearsall, *Strained-Layer Superlattices: Material Science and Technology*, volume 33 de *Semiconductor and Semimetals* (Academic Press, 1991).
- [191] J. Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures* (McGraw Hill International Editions, 1993).
- [192] R. People e S. K. Spitz, *Phys. Rev.* **B41**, 8431 (1990).
- [193] M. J. Reed, N. A. El-Masry, C. A. Parker, J. C. Roberts e S. M. Bedair, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 4121 (2000).
- [194] S. Einfeldt, H. Heinke, V. Kirchner e D. Hommel, *J. Appl. Phys.* **89**, 2160 (2001).
- [195] C. A. Parker, J. C. Roberts, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu e N. A. El-Masry, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2776 (1999).
- [196] M. E. Sherwin e T. J. Drummond, *J. Appl. Phys.* **69**, 8423 (1991).
- [197] T. Frey, D. J. As, M. Bartels, A. Pawlis, K. Lischka, A. Tabata, J. R. L. Fernandez, M. T. O. Silva, J. R. Leite, C. Haug e R. Breen, *J. Appl. Phys.* **89**, 2631 (2001).
- [198] J. Holst, A. Hoffmann, I. Broser, B. Schöttker, D. J. As, D. Schikora e K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1966 (1999).
- [199] J. Holst, A. Hoffmann, D. Rudloff, F. Bertram, T. Riemann, J. Christen, T. Frey, D. J. As, D. Schikora e K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 2832 (2000).
- [200] D. J. As, A. Richter, J. Busch, M. Lübbbers, J. Mimkes e K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 13 (2000).
- [201] L. K. Teles, *Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas dos Nitretos do Grupo-III e suas Ligas*, Tese de doutorado, IFUSP, São Paulo (2001).
- [202] S.-H. Wei e A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2719 (1996).

- [203] C. G. van de Walle e J. Neugebauer, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2577 (1997).
- [204] C. Manz, M. Kunzer, H. Obloh, A. Ramakrishnan e U. Kaufmann, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3993 (1999).
- [205] C. Stampfl e C. G. van de Walle, *Phys. Rev.* **B59**, 5521 (1999).
- [206] R. Zheng, T. Taguchi e M. Matsuura, *J. Appl. Phys.* **87**, 2526 (2000).
- [207] K. Kumakura, T. Makimoto e N. Kobayashi, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 1*, **39**, 2428 (2000).
- [208] G. M. Sipahi (2001), a ser publicado.
- [209] S. Cho, A. Sanz-Hervás, O. V. Kovalenkov, A. Marjerfeld, C. Villar e B. W. Kim, *Mat. Sci. and Eng.* **B66**, 123 (1999).
- [210] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, 1976).
- [211] A. Tabata, A. M. Ceschin, A. A. Quivy, A. Levine, J. R. Leite, R. Enderlein, J. B. B. Oliveira, E. Laureto e J. L. Gonçalves, *Mat. Sci. and Eng.* **B35**, 401 (1995).
- [212] L. M. Gaggero-Sager, M. E. Mora-Ramos e D. A. Contreras-Solorio, *Phys. Rev.* **57**, 6286 (1998).
- [213] G. Pozina, J. P. Bergman, B. Monemar, T. Takeuchi, H. Amano e I. Akasaki, *J. Appl. Phys.* **88**, 2677 (2000).
- [214] H. S. Kim, J. Y. Lin, H. X. Jiang, W. W. Chow, A. Botchkarev e H. Morkoç, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3426 (1998).
- [215] S. Wongmanerod, P. Holtz, B. Sernelius, K. Reginski, M. Bugajski, M. Godlewski, O. Mauritz, Q. X. Zhao, J. P. Bergman e B. Monemar, *phys. stat. sol.(b)* **210**, 615 (1998).
- [216] D. H. Zhang, W. Shi, P. H. Zhang e S. F. Yoon, *Jpn. J. Appl. Phys., Parte 2*, **38**, L360 (1999).
- [217] S. Martini, *Propriedades Óticas de Poços Quânticos de InGaAs/GaAs Crescidos por MBE sobre Substratos Desorientados de GaAs*, Tese de mestrado, IFUSP, São Paulo (1997).
- [218] D. H. Zhang, W. Shi, P. H. Zhang, S. F. Yoon e X. Shi, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1570 (1999).

Lista de Figuras

2.1	Representação esquemática (a) do período da super-rede de poços quânticos, onde d_1 é a largura da barreira e d_2 é a largura do poço e (b) da primeira zona de Brillouin (ZB) da super-rede de poços quânticos.	15
2.2	Esquema de descasamento e casamento de dois materiais com parâmetros de rede diferentes.	32
2.3	Representação esquemática da força mecânica \vec{F} atuando na camada (compressão) e causando sua deformação.	32
2.4	Representação esquemática, em materiais cúbicos, de uma camada biaxialmente tensionada nos casos de: (a) compressão e (b) distensão.	33
2.5	Componente de <i>stress</i> (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 <i>stress</i> σ_{xy} , que é a força aplicada na direção \vec{x} por unidade de área de um plano normal à direção \vec{y}	35
2.6	Representação esquemática da estrutura de bandas de valência para materiais cúbicos ao longo das direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$, (a) sem acoplamento <i>spin-órbita</i> ; (b) com acoplamento <i>spin-órbita</i> . HH, LH e SH(SO) são as bandas de buraco pesado, buraco leve e <i>split-off</i> , respectivamente. A separação de energia Δ_{SO} devida à interação <i>spin-órbita</i> é indicada. Esta figura foi extraída da Ref. [42].	37
2.7	Representação esquemática da estrutura de bandas para a wurtzita, (a) sem acoplamento <i>spin-órbita</i> para GaN; (b) com acoplamento <i>spin-órbita</i> para GaN; (c) sem acoplamento <i>spin-órbita</i> para AlN e (d) com acoplamento <i>spin-órbita</i> para AlN. HH, LH e SO(CH) são as bandas de buracos pesados, buracos leves e <i>split-off</i> , respectivamente. Δ_{SO} corresponde ao desdobramento devido à interação <i>spin-órbita</i> . Também é indicada a separação de energia Δ_{cr} devida ao campo cristalino. Esta figura foi extraída da Ref. [42].	38

2.8	Representação esquemática da banda de valência (BV) e banda de condução (BC) (a) sem tensão; (b) com tensão compressiva e (c) com tensão distensora. HH e LH representam bandas de buracos pesados e leves, respectivamente. E_g é a energia do <i>gap</i> , E'_g é a energia do <i>gap</i> no caso compressivo e E''_g no caso distensor.	40
2.9	Representação esquemática do potencial de portadores da banda de valência (BV) (a) sem tensão; (b) com tensão compressiva e (c) com tensão distensora. V é o potencial periódico, V_{HH} é o potencial de buracos pesados, V_{LH} é o potencial de buracos leves e V_{SO} é o potencial de buracos de <i>split-off</i>	40
2.10	Representação esquemática da espessura crítica em função do descasamento dos parâmetros de rede, extraída da Ref. [189]. A linha sólida se aplica à sistemas isolados e a linha tracejada se aplica à super-redes.	42
2.11	Espessura crítica d_c em função da composição x , como obtida através da expressão (2.114), para o sistema $Al_xGa_{1-x}N$ crescido sobre GaN, extraída da Ref. [197].	43
2.12	Diagrama esquemático do cálculo autoconsistente para determinação da estrutura de bandas de valência.	45
3.1	Estrutura de bandas de valência do <i>bulk</i> de GaN, próxima ao ponto Γ , na direção $\langle 001 \rangle$. Os símbolos HH, LH e SO se referem às bandas de buracos pesados, leves e <i>split-off</i> , respectivamente.	49
3.2	Estrutura de bandas para um poço quântico não tensionado de $Al_{0,15}Ga_{0,85}N/GaN$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$. Os níveis de energia são indicados HHn para buracos pesados, LHn para buracos leves e SOn para buracos de <i>split-off</i> . O zero de energia se encontra no fundo do poço. . .	51
3.3	Estrutura de bandas para um poço quântico tensionado de $Al_{0,15}Ga_{0,85}N/GaN$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$. Os níveis de energia são indicados HHn para buracos pesados, LHn para buracos leves e SOn para buracos de <i>split-off</i> . O zero de energia se encontra no fundo do poço sem tensão. A energia de <i>strain</i> é 14,5 meV.	51
3.4	Estrutura de bandas para um poço quântico não tensionado de $Al_{0,15}Ga_{0,85}N/GaN$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$, como obtido da Ref [27]. Os níveis de energia são indicados hhn para buracos pesados, lhn para buracos leves e son para buracos de <i>split-off</i> . O zero de energia se encontra no fundo do poço. L corresponde ao período da super-rede d , adotado neste trabalho.	52

3.5	Estrutura de bandas para um poço quântico tensionado de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$, com $d_1=200 \text{ \AA}$ e $d_2=100 \text{ \AA}$, extraída da Ref [27]. Os níveis de energia são indicados hhn para buracos pesados, lhn para buracos leves e son para buracos de <i>split-off</i> . O zero de energia se encontra no fundo do poço. L corresponde ao período da super-rede d , adotado neste trabalho.	53
3.6	Dependência da energia do <i>gap</i> , E_g , em função da composição x da liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, obtida da Ref. [135].	56
3.7	Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas $\Gamma\text{-Z}$ e $\Gamma\text{-}\Delta$ para uma super-rede de $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}/\text{GaN}$ sem tensão. (a) $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$ e (b) $d_1 = d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é de 420 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.	57
3.8	Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas $\Gamma\text{-Z}$ e $\Gamma\text{-}\Delta$ para uma super-rede de AlN/GaN sem tensão com $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é de 840 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.	58
3.9	Estrutura da banda de valência ao longo das linhas $\Gamma\text{-Z}$ e $\Gamma\text{-}\Delta$ para uma super-rede de GaN/InN sem tensão com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é de 400 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira.	59
3.10	Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas $\Gamma\text{-Z}$ e $\Gamma\text{-}\Delta$ para uma super-rede de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}/\text{GaN}$ sem tensão com $d_1 = 100 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. Também é mostrado em (a) cálculos incluindo(linha sólida) e desprezando (linha tracejada) a interação <i>spin-órbita</i> . A profundidade do poço é de 126 meV considerando a super-rede sem tensão. O zero de energia se encontra no topo da barreira. A energia de <i>strain</i> é de 16,5 meV.	60
3.11	Níveis de energia para buracos, confinados dentro do poço, em função da largura do poço (largura da barreira $d_1 = d_2$) para super-redes de $\text{Al}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{N}/\text{GaN}$ não dopadas e não tensionadas. A profundidade do poço é 109,6 meV. As áreas hachuradas correspondem à dispersão das minibandas ao longo da direção $\Gamma\text{-Z}$. O zero de energia se encontra no topo da barreira.	61

- 3.12 Níveis de energia para buracos, confinados dentro do poço, em função da largura do poço (largura da barreira $d_1 = d_2$) para super-redes de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ não dopadas e tensionadas. A profundidade do poço é 328,8 meV e a energia de *strain* é 33 meV. As áreas hachuradas correspondem à dispersão das minibandas ao longo da direção Γ -Z. O zero de energia se encontra no topo da barreira. 62
- 3.13 Estrutura de bandas de valência para a super-rede de $\text{GaN}/\text{In}_{0,10}\text{Ga}_{0,90}\text{N}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) sem tensão e (b) com tensão. Também são mostrados em (a) cálculos incluindo (linha sólida) e desprezando (linha tracejada) a interação *spin-órbita*. A profundidade do poço é 40 meV considerando-se a super-rede sem tensão. A energia de *strain* é 34,23 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira. 63
- 3.14 Estrutura de bandas de valência para a super-rede de $\text{GaN}/\text{In}_{0,30}\text{Ga}_{0,70}\text{N}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) sem tensão e (b) com tensão. Também são mostrados em (a) cálculos incluindo (linha sólida) e desprezando (linha tracejada) a interação *spin-órbita*. A profundidade do poço é 240 meV considerando-se a super-rede sem tensão. A energia de *strain* é 97,11 meV. O zero de energia se encontra no topo da barreira. 64
- 3.15 Estrutura de bandas de valência para a super-rede de $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$ sem tensão. (a) $x = 0,3$ e (b) $x = 0,1$. A profundidade do poço é 240 meV e 80 meV, respectivamente. O zero de energia se encontra no topo da barreira. 65
- 3.16 Representação esquemática do topo da banda de valência de múltiplos poços quânticos dopados tipo-p: (a) perfil de dopagem na barreira e (b) o perfil de potencial correspondente. O nível de Fermi, E_F , a profundidade mínima, V_{min} , e o nível de aceitadores, E_A são indicados. O zero de energia se situa no potencial de Coulomb no topo da barreira. 67

- 3.17 Múltiplos poços quânticos tensionados compressivamente de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. A concentração é $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $d_p = 200 \text{ \AA}$). (a) Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas $\Gamma\text{-Z}$ e $\Gamma\text{-}\Delta$. Os níveis de buracos para o mesmo sistema, porém não dopado, também são mostrados para comparação (linhas tracejadas-pontilhadas-pontilhadas). (b) Perfis de potencial, a linha cheia indica buraco pesado V_{HH} , a linha tracejada-pontilhada indica buraco leve V_{LH} , a linha tracejada indica buraco de *split-off* V_{SO} e a linha pontilhada indica o nível de Fermi E_F . O zero de energia se encontra no topo do potencial de Coulomb na barreira. A profundidade do poço é 328,8 meV e a energia de *strain* é 33 meV. 69
- 3.18 Mesmo que a Figura 3.17 para um sistema com $d_p = 60 \text{ \AA}$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). 70
- 3.19 Mesmo que a Figura 3.17 para um sistema de múltiplos poços quânticos tensionados de $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_p = 60 \text{ \AA}$ e $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). A energia de *strain* é 44 meV. Os níveis HH1 e HH2 e suas respectivas autofunções, Ψ_1 e Ψ_2 , dentro do poço, são mostrados em (b). 71
- 3.20 Mesmo que a Figura 3.17 para um sistema com múltiplos poços quânticos tensionados de $\text{GaN}/\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ com $d_p = 200 \text{ \AA}$ e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). A energia de *strain* é 97,11 meV. 72
- 3.21 Múltiplos poços quânticos tensionados de $\text{GaN}/\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$, $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. São graficados os sete primeiros níveis de energia, a profundidade do potencial, V_{min} e o nível de Fermi, E_F em função da espessura de dopagem d_p (escala indicada embaixo) e em função da concentração N_{2D} (escala indicada no topo). 73
- 3.22 Densidade de carga de buracos livres 3D, $p(z)$, como função de z para múltiplos poços quânticos tensionados de $\text{GaN}/\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. A espessura de dopagem d_p é variada de 60 \AA a 200 \AA (escala indicada a esquerda), e a concentração N_{2D} é variada de 6 a $20 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (escala indicada a direita). 74
- 3.23 Estrutura de bandas (a) e perfis de potencial (b) para uma super-rede de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ com $d_1 = 60 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$, $d_p = 60 \text{ \AA}$, $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). A notação e o zero de energia são os mesmos da Figura 3.17. 75

- 3.24 Estrutura de bandas (a) e perfis de potencial (b) para uma super-rede de GaN/ In_{0,3}Ga_{0,7}N com $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 1,8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$) e $d_1 = 60 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$. A notação e o zero de energia são os mesmos da Figura 3.17. 76
- 3.25 Estrutura de bandas (a) e perfis de potencial (b) para uma super rede semelhante à da Figura 3.24, com $d_1 = 40 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$, $d_p = 40 \text{ \AA}$, $N_A = 3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 1,2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). São apresentados os perfis de potencial para dois poços quânticos adjacentes. A notação e o zero de energia são os mesmos da Figura 3.17. 77
- 3.26 Potenciais de troca-correlação (V_{XC}), Coulomb (V_C) e total ($V_{XC} + V_C$) que os buracos pesados sentem numa heteroestrutura de Al_{0,3}Ga_{0,7}N/GaN dopada completamente na barreira com: (a) $d_1 = 60 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$. A concentração de aceitadores é $N_A = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ em ambos os casos. O zero de energia é o mesmo da Figura 3.17, e mostramos os perfis de potencial somente na região interna ao poço. 78
- 3.27 Mesmo que Figura 3.26, para sistemas de GaN/In_{0,3}Ga_{0,7}N com: (a) $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$ 79
- 3.28 Mesmo sistema da Figura 3.26(a). A notação e o zero de energia são os mesmos utilizados na Figura 3.17. Em (a) é apresentada a estrutura de bandas (linha sólida). Para comparação é mostrada também a estrutura de bandas sem a inclusão dos efeitos de troca-correlação (linha tracejada-pontilhada-pontilhada). Em (b) apresentamos os perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida), buracos leves, V_{LH} (linha tracejada-pontilhada) e buracos de *split-off*, V_{SO} (linha tracejada). O nível de Fermi E_F (linha pontilhada) também é indicado. V_{NOXC} e E_F^{NOXC} são o potencial de buracos pesados e o nível de Fermi, respectivamente, sem os efeitos de troca-correlação. 80
- 4.1 Estrutura de bandas para um poço isolado de AlGaAs/GaAs com $d_1 = 500 \text{ \AA}$, $d_2 = 50 \text{ \AA}$ e $N_{2D} = 1,43 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ (são mostrados apenas os três primeiros níveis). Os níveis de energia são indicados HHn para buracos pesados e LHn para buracos leves. O zero de energia se encontra no fundo do poço. A energia de Fermi E_F é indicada por uma linha tracejada. 86

- 4.2 Estrutura de bandas obtida para o mesmo sistema da Figura 4.1, como extraída da Ref. [17]. O zero de energia se encontra também no fundo do poço. A direção Γ - Δ da Figura 4.1 corresponde a direção k_x . Os níveis HH1, LH1 e HH2, correspondem a $n=1, 2$ e 3 , respectivamente. 86
- 4.3 Perfis de potencial para uma super-rede de AlGaAs/GaAs dopada uniformemente no poço com $N_A = 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$. A linha sólida é o potencial total obtido autoconsistentemente, a linha tracejada é o potencial de Coulomb e a linha pontilhada é o potencial de troca-correlação. O zero de energia se encontra no nível de Fermi. 88
- 4.4 Perfis de potencial para uma super-rede de AlGaAs/GaAs dopada em uma região de 60 \AA no centro da barreira com $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. A linha sólida é o potencial total obtido autoconsistentemente, a linha tracejada é o potencial de Coulomb e a linha pontilhada é o potencial de troca-correlação. O zero de energia se encontra no nível de Fermi. 88
- 4.5 Perfis de potencial para uma super-rede de AlGaAs/GaAs, extraídos da Ref. [15], com (a) $N_A = 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$, dopada uniformemente no poço e (b) $N_A = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, dopada em uma região de 60 \AA no centro da barreira. A linha sólida é o potencial total obtido autoconsistentemente, a linha pontilhada é o potencial de Hartree (que se compara ao nosso potencial de Coulomb) e a linha pontilhada é o potencial de troca-correlação. O zero de energia se encontra no nível de Fermi [15]. 89
- 4.6 Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ para uma heteroestrutura de múltiplos poços quânticos de GaAs/In_{0,5}Ga_{0,5}As, sem tensão, com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. As linhas sólidas (tracejadas) correspondem a parâmetros de Luttinger diferentes (iguais) para os materiais na barreira e no poço. A profundidade do poço é $220,4 \text{ meV}$. O zero de energia se encontra no topo da barreira. 91
- 4.7 Estrutura de sub-bandas e minibandas de valência (a) e perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida) e buracos leves, V_{LH} (linha pontilhada-tracejada) (b) para uma super-rede, não tensionada de GaAs/In_{0,3}Ga_{0,7}As, com $d_1 = 40 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$, e $N_A = 1,5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$). O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 3.17. 92

4.8	Estrutura de sub-bandas e minibandas de valência (a) e perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida), buracos leves, V_{LH} (linha pontilhada-tracejada) e buracos de <i>split-off</i> (linha tracejada), V_{SO} (b) para múltiplos poços quânticos, tensionados, de GaAs/In _{0,3} Ga _{0,7} As, com $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 100 \text{ \AA}$, e $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 4.7.	93
4.9	Perfis de potencial para buracos pesados, V_{HH} (linha sólida) e buracos leves, V_{LH} (linha pontilhada-tracejada), para um poço quântico de Al _{0,15} Ga _{0,85} As/GaAs com dopagem tipo-p centrada no poço. A concentração de aceitadores é $N_{2D} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, a largura do poço é $d_2 = 300 \text{ \AA}$ e da barreira é $d_1 = 700 \text{ \AA}$. O nível de Fermi, E_F , também é indicado (linha pontilhada). Os níveis de energia e suas respectivas funções de onda (linha tracejada curta-pontilhada), Ψ , dentro do poço também são apresentadas. A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 3.17.	95
4.10	Estrutura de bandas de valência ao longo das linhas $\Gamma - Z$ e $\Gamma - \Delta$ para o sistema da Figura 4.9. O nível de Fermi, E_F , é indicado (linha pontilhada). A notação e o zero de energias são os mesmos da Figura 3.17. Apenas as primeiras seis sub-bandas são mostradas.	96
5.1	Energia do <i>gap</i> em função do parâmetro de rede a para diversos materiais. A região visível do espectro é indicada, bem como as regiões do infravermelho e do ultra-violeta. Também são indicados os nitretos do grupo-III (quadrados) na estrutura cúbica.	105
5.2	Representação esquemática de um diagrama de fase da temperatura em função da composição da liga, x , em equilíbrio termodinâmico.	106
5.3	Energia do <i>gap</i> em função da composição da liga, x , obtida a partir de dados experimentais (linha sólida) para o c-In _{x} Ga _{1-x} N. As energias do <i>gap</i> dos QDs a 300 K (círculos) e a 30K (quadrados) também são indicados. Dados extraídos da Ref [135].	107

- 5.4 Esquema dos potenciais da banda de condução (BC) e banda de valência (BV) sob efeito da tensão biaxial compressiva (hidrostática mais uniaxial). Os potenciais de buracos pesados, V_{HH} , buracos leves, V_{LH} e buracos de *split-off*, V_{SO} são indicados. Também são mostrados as contribuições devido à tensão hidrostática, H_{hid} , e uniaxial, ϵ , bem como ao desdobramento de *spin-órbita*, Δ . São apresentados também o primeiro nível eletrônico, $E1$ e o primeiro nível de buracos pesados, $HH1$, em relação aos fundos dos respectivos poços não tensionados e a respectiva transição eletrônica. 110
- 5.5 Múltiplos poços quânticos tensionados compressivamente de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x = 0,37$, $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) Estrutura das bandas de valência e de condução ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ . (b) Perfis de potencial: a linha cheia indica buraco pesado V_{HH} , a linha tracejada-pontilhada indica buraco leve V_{LH} , a linha tracejada indica buraco de *split-off* V_{SO} e a linha pontilhada indica elétron V_E . São mostradas apenas as quatro primeiras bandas de buracos e elétrons. 111
- 5.6 Múltiplos poços quânticos tensionados compressivamente de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x = 0,45$, $d_1 = 200 \text{ \AA}$ e $d_2 = 30 \text{ \AA}$ (a) Estrutura das bandas de valência e de condução ao longo das linhas Γ -Z e Γ - Δ . (b) Perfis de potencial: a linha cheia indica buraco pesado V_{HH} , a linha tracejada-pontilhada indica buraco leve V_{LH} , a linha tracejada indica buraco de *split-off* V_{SO} e a linha pontilhada indica elétron V_E . São mostradas apenas as quatro primeiras bandas de buracos e elétrons. 112
- 5.7 Espectros de fotoluminescência medidos a $T=2 \text{ K}$ e excitados através das linhas de 351 e 363 nm (3,53 e 3,42 eV) do *laser* de Argônio para múltiplos poços quânticos de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com $x = 0,37$ e 0,45 e $d_2 = 30 \text{ \AA}$. A linha pontilhada indica a energia do *gap* do GaN. As transições eletrônicas T_E , e energia do *gap*, E_g da liga são indicadas. Também são mostrados os intervalos de energia entre as transições para poços de $d_2 = 20 \text{ \AA}$ a 40 \AA , com a seta vertical correspondendo à transição para $d_2 = 30 \text{ \AA}$ (veja esquema na figura inserida). 113
- 5.8 Espectros de fotoluminescência teóricos para a transição E1-HH1, calculados a $T=2 \text{ K}$ para múltiplos poços quânticos de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ com (a) $x = 0,37$ e (b) $x = 0,45$ e $d_2 = 20 \text{ \AA}$ (linha pontilhada), $d_2 = 30 \text{ \AA}$ (linha sólida) e $d_2 = 40 \text{ \AA}$ (linha tracejada). 114
- 5.9 Espectros de absorção extraídos da Ref. [218] para QWIPs tipo-p de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ não tensionados, com $d_1 = 300 \text{ \AA}$ e $d_2 = 25 \text{ \AA}$, para $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 116

5.10	Espectros de fotoluminescência calculados para QWIPs tipo-p de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ não tensionados com $d_1 = 300 \text{ \AA}$ e $d_2 = 25 \text{ \AA}$, para $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	117
5.11	Espectros de fotoluminescência para os mesmos sistemas da Figura 5.10, extraídos da Ref. [216], medidos a $T=5 \text{ K}$ e excitados através do <i>laser</i> de Argônio.	117

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros do <i>bulk</i> obtidos em nosso grupo através de cálculos <i>ab initio</i> , FLAPW [157].	48
3.2	Massas efetivas dos buracos pesados(HH), leves(LH) e <i>split-off</i> (SO), na direção $\langle 001 \rangle$, para o GaN, AlN, InN, GaAs e Si em função da massa do elétron livre, m_0	49
3.3	Parâmetros utilizados para o GaN nos cálculos dos poços quânticos de AlGaIn/GaN [27,28].	50
3.4	Classificação das bandas a partir das densidades de probabilidade no ponto Γ . Os valores mostrados (em porcentagem de caráter relativo à cada tipo de portador) correspondem às estruturas de bandas calculadas das Figuras 3.2 (sem tensão) e 3.3 (com tensão).	52
3.5	Parâmetros do <i>bulk</i> para o GaN, AlN e InN.	55
3.6	Massas efetivas dos buracos pesados(HH), leves(LH) e de <i>split-off</i> (SO), nas direções $\langle 001 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$, para o GaN e AlN obtidas a partir de cálculos <i>ab initio</i> FLAPW em nosso grupo [157, 201] e em função da massa do elétron livre, m_0 , e para o InN, como extraídas da Ref. [147]. Também são indicados os valores das massas isotrópicas para cada portador, \bar{m}	68
4.1	Parâmetros utilizados para múltiplos poços quânticos de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ($x = 0,27$) na direção $\langle 001 \rangle$. As massas efetivas são dadas em função da massa do elétron m_0 [5]. A altura da barreira, também é indicada.	85
4.2	Transições eletrônicas para múltiplos poços quânticos de AlGaAs/GaAs.	85
4.3	Parâmetros utilizados para super-redes de poços quânticos de AlGaAs/GaAs, extraídos das Refs. [15,16]. A altura da barreira também é indicada.	87
4.4	Parâmetros do <i>bulk</i> para o GaAs e o InAs, obtidos da literatura [187,189].	90
5.1	Parâmetros do <i>bulk</i> para o GaN e InN, extraídos da literatura.	109

5.2	Energia do <i>gap</i> da liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, E_g , energia de <i>strain</i> , referente a tensão hidrostática, H_{hid} , e energia de <i>strain</i> , referente a tensão uniaxial, ϵ , para composições da liga $x = 0,37$ e $0,45$	109
5.3	Energias de transição HH1-HH2 e seus respectivos vetores de onda k em função de N_A , para um sistema de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$	115

Lista de Artigos Publicados

A. Doutorado

1- *Exchange-correlation effects on the hole miniband structure and confinement potential in zincblende AlGa_N/Ga_N superlattices.*

S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite
Journal of Physics Condensed Matter, **13**, 3381 (2001).

2- *Self-consistent $\vec{k} \cdot \vec{p}$ theory of p-doped zincblende Ga_N/InGa_N and GaAs/InGaAs semiconductor heterostructures.*

S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite
Physical Review B, submetido (2001).

3- *Valence-band structure of undoped and p-doped cubic InGa_N/Ga_N multiple quantum wells.*

S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite
Physica B, **302**, 106 (2001).

4- *Valence band structure of cubic AlGa_N/Ga_N superlattices.*

S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite e G. M. Sipahi
Applied Physics Letters, **76**, 1015 (2000).

5- *Cubic AlGa_N/Ga_N and Ga_N/InGa_N heterostructures: effects of p-type doping.*

S. C. P. Rodrigues, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite
Proc. of International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN2000), **1**, 74 (2000).

B. Mestrado

6- *Raman measurement of vertical conductivity and localization effects in strongly coupled semiconductor periodical structures.*

Yu. A. Pusep, M. T. O. Silva, J. C. Galzerani, S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, A. P. Lima, A. A. Quivy, J. R. Leite, N. T. Moshegov e P. Basmaji
Journal of Applied Physics, **87**, 1825 (2000).

7- *Miniband structures and effective masses of n-type δ -doping superlattices in cubic GaN.*

S. C. P. Rodrigues, A. L. Rosa, L. M. R. Scolfaro, D. Beliaev, J. R. Leite, R. Enderlein e J. L. A. Alves
Semiconductor Science and Technology, **13**, 981 (1998).

8- *Investigation of the vertical transport in GaAs- δ -doping SLs by Raman studies of coupled plasmon phonon modes.*

S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein, A. A. Quivy, A. P. Lima, J. R. Leite, Yu. A. Pusep, S. W. da Silva, M. T. O. Silva e J. C. Galzerani
Proc. of 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors, **1**, 2343 (1996).

9- *Electrical conductivity of δ -doping superlattices parallel to the growth direction.*

J.R. Leite, S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein, D. Beliaev e A. A. Quivy
Materials Science & Engineering, **B35**, 250 (1995).

Anexos dos Artigos Publicados

Anexo 1

” Exchange-correlation effects on the hole miniband structure and confinement potential in zincblende AlGa_N/Ga_N superlattices.”

Exchange–correlation effects on the hole miniband structure and confinement potential in zinc-blende $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ superlattices

S C P Rodrigues, G M Sipahi, L M R Scolfaro and J R Leite

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, CP 66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil

E-mail: srodrigu@macbeth.if.usp.br (S C P Rodrigues)

Received 25 January 2001

Abstract

We present valence band-structure calculations for undoped and p-doped cubic $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ superlattices (SLs), in which the coupling between the heavy-hole, light-hole, and spin–orbit-split-hole bands and strain effects due to lattice mismatch are taken into account. The calculations are performed within a self-consistent approach to the $k \cdot p$ theory by means of a full six-band Luttinger–Kohn Hamiltonian. Exchange–correlation effects within the two-dimensional hole gas are included in the calculations in the local density approximation. Results for hole minibands and potential profiles are shown as functions of the SL period. It is shown that exchange and correlation play an important role in the correct description of the systems.

1. Introduction

The III–V nitride semiconductors GaN, AlN, and AlGaN exhibit interesting physical properties such as high thermal conductivity, large band-gap energies, and both conduction and valence band offsets for carrier confinement. They are attractive for optoelectronic device applications in the blue–ultraviolet spectral region, as well as at high power and high temperature [1, 2]. Although most of the progress achieved so far is based on the hexagonal (wurtzite) phase of the materials, the cubic (c) metastable phase is seen as an advantageous and promising alternative for similar applications [3, 4]. For devices, the production of highly conductive p-type GaN and AlGaN layers is of crucial importance. However, controlled doping and its efficiency, especially in AlGaN alloys, have been limited by the level of the acceptor (usually Mg, C, or Be) being deep: it lies at around 0.2 eV [5, 6]. Recently, several attempts have been made to enhance the acceptor doping efficiency by using multiple quantum wells and superlattices (SLs) made up of alternate layers of AlGaN and GaN. It has been demonstrated that p-doping of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ SLs increases the free-hole concentration as compared to that of bulk p-type GaN [7, 8]. It has been proposed that piezoelectric (PZ) field effects cause free-carrier enhancement in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ SLs [9–12]. Contrary to the case for wurtzite structures, in p-doped c-AlGaN/GaN the free-hole concentration can be higher, even in the

absence of PZ fields. Despite the potentiality recently suggested for cubic-structure-derived AlGa_xN heterostructures, very little is known about their hole sub-band structure and potential profiles, particularly for p-doped systems [13].

In this work we study the valence band structure and the two-dimensional hole gas (2DHG) in p-doped c-Al_xGa_{1-x}N/GaN SLs by carrying out self-consistent band-structure calculations within the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model in a plane-wave representation. The 6×6 Luttinger–Kohn (LK) effective-mass and Poisson equations are solved self-consistently, including many-body effects such as exchange and correlation within the local density approximation. The role played by strain effects on the hole sub-bands and minibands is analysed. We discuss particularly the effects of exchange and correlation on the band structure and potential profiles.

2. The method applied to heterostructures

We adopt an approach using a super-cell model that comprises the barrier (thickness d_1) and the well (thickness d_2) regions of the SL. The method is an extension of a previous version developed to study p-delta-doping layers in GaAs and Si [14–16]. We assume an infinite SL of square wells along the [001] direction. Figure 1 shows schematically one superlattice period. The multiband effective-mass equation (EME) is represented with respect to plane waves with wavevectors $K = (2\pi/d)l$ (l an integer and d the SL period) equal to reciprocal SL vectors. The rows and columns of the 6×6 LK Hamiltonian relate to the Bloch-type eigenfunctions $|jm_j\mathbf{k}\rangle$ of the Γ_8 heavy- and light-hole bands, and the Γ_7 spin-orbit-split-hole band; \mathbf{k} denotes a vector of the first SL Brillouin zone (BZ) shown schematically in figure 2. Expanding the EME with respect to plane waves ($z|K\rangle$) means representing this equation in terms of the Bloch functions $\langle x|jm_j\mathbf{k} + K\mathbf{e}_z\rangle$. For a Bloch-type eigenfunction $\langle z|E\mathbf{k}\rangle$ of the SL of energy E and

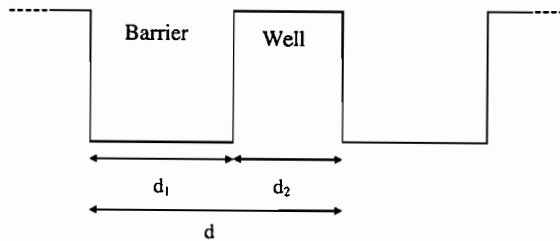


Figure 1. A schematic representation of a superlattice emphasizing one period d , with barrier thickness d_1 and well thickness d_2 .

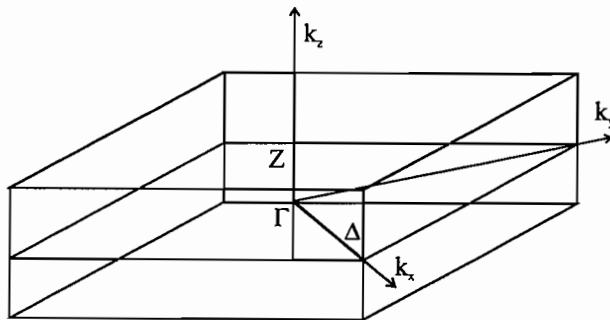


Figure 2. The first Brillouin zone of the superlattice. Γ – Z represents a symmetry line along the growth direction and Γ – Δ represents a symmetry line along the direction k_x , perpendicular to the SL axis.

wavevector k , the EME takes the form

$$\sum_{j'm'_j K'} (jm_j kK | T + H_S + V_{\text{HET}} + V_C + V_{\text{xc}} | j'm'_j kK') (j'm'_j kK' | E k) = E(k) (j'm'_j kK') \quad (1)$$

where T is the unperturbed kinetic energy term, generalized for a heterostructure [17], H_S is the strain energy term originating from the lattice mismatch, V_{HET} is the square potential due to the difference between the energy gaps, V_{xc} is the exchange–correlation potential, and V_C is the Coulomb potential given by the sum of the Hartree potential and the ionized acceptor potential. The self-consistent potentials and charge densities are obtained by solving the multiband EME (equation (1)) and the Poisson equation given by

$$(jm_j kK | V_C | j'm'_j kK') = \frac{4\pi e^2}{\kappa} \frac{1}{|K - K'|^2} (K | p - N_A | K') \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j} \quad (2)$$

where κ is the dielectric constant ($\kappa = 9.5$ for GaN [2]), and where N_A is the acceptor doping concentration and p is the hole charge distribution, both expressed in the plane-wave representation. Details of the theoretical model can be found elsewhere [14].

The Luttinger parameters and other parameters used in the calculations are taken for each epitaxial layer of the SL. A biaxial compressive strain is considered which is decomposed into two parts: a hydrostatic strain and a uniaxial strain. The former shifts the gap energy; thus it does not influence the confined hole levels. The latter changes the valence band potential depth and may be calculated assuming that the strain, $\epsilon(z)$, is zero in the barrier, and is given inside the well by the Fourier coefficients of [13, 17]:

$$\epsilon(z) = -(2/3) D_u \epsilon_{\parallel} (1 + 2C_{12}/C_{11}) \quad (3)$$

where $-(2/3)D_u$ is the shear deformation potential, C_{11} and C_{12} are the elastic constants, and $\epsilon_{\parallel} = (a_b - a_w)/a_w$ is the lattice mismatch, with a_b and a_w being the lattice parameters of the unstrained barrier and the well, respectively. We can then express the strain term of the Hamiltonian, H_S , as follows:

$$(jm_j kK | H_S | j'm'_j kK') = (K | \epsilon(z) | K') M_{jm_j}^{j'm'_j} \quad (4)$$

where $M_{jm_j}^{j'm'_j}$ is defined as

$$M_{jm_j}^{j'm'_j} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

The square potential (V_{HET}) is diagonal with respect to jm_j , $j'm'_j$, and is defined by

$$(jm_j kK | V_{\text{HET}} | j'm'_j kK') = (K | V_{\text{HET}} | K') \delta_{jj'} \delta_{m_j m'_j} \quad (6)$$

where $(K | V_{\text{HET}} | K')$ are the Fourier coefficients of V_{HET} .

The exchange–correlation effects were taken into account in the local density approximation (LDA), by adopting a parametrized expression for an inhomogeneous hole gas of heavy, light, and spin–orbit-split-off holes. The expressions for the exchange–correlation term may be found in our previous works [15, 16]; thus no further details will be provided here.

In table 1 we show the bulk parameters used in the calculations, obtained from *ab initio* full-potential linear augmented-plane-wave (FLAPW) band-structure calculations performed

Table 1. Bulk parameters as obtained from *ab initio* FLAPW calculations performed by us (reference [18]) and extracted from the literature. The effective masses along [001] are in units of the free-electron mass.

	AlN	GaN
γ_1	1.57	2.83
γ_2	0.36	0.85
γ_3	0.60	1.14
Δ (meV)	19	14
a (Å)	4.40	4.55
m_{HH}^*	1.29	0.85
m_{LH}^*	0.41	0.22
m_{SO}^*	0.60	0.34
E_{g}^{Γ} (meV) [2]	6.0	3.2
$(2/3)D_{\text{u}}$ (eV)	1.5 [19]	1.6 [20]
C_{11} (GPa) [21]	304	293
C_{12} (GPa) [21]	160	159

by us [18] or extracted from the literature. For the alloys, all of the parameters were interpolated linearly. We adopted 40% for the valence band offset and we assumed in the calculations that the acceptor level is located at about 0.2 eV above the top of the valence band in bulk GaN and AlGaN [5].

3. Results and discussion

First we will discuss the results for undoped AlGaN/GaN SLs. Figure 3 shows the miniband dispersions along the growth direction Γ -Z for undoped and *unstrained* $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ SLs as a function of the well width d_2 (barrier width $d_1 = d_2$). The hole levels are labelled according to their main character at Γ . The notation $\text{SO}i\text{-LHi}$ ($\text{LHi-SO}i$) means that the mixing character of band i is dominated by the SO (LH). Since the spin-orbit splitting in the nitrides is very small ($\Delta \approx 14$ meV for GaN) [2], the LH and SO levels are already coupled at the Γ point. In figure 3, the SL period is varied from $d_1 = d_2 = 30$ to 60 Å. When the SL period increases, the interaction between the wells decreases, so the miniband dispersion becomes smaller and the levels are deeper in the well, as expected. Only for very short periods (≤ 40 Å) do the minibands appear significantly broader, mainly for SO- and LH-derived bands. This is due to the high values of the effective masses in the nitrides—especially the heavy-hole mass (see table 1).

Similar results are depicted in figure 4, now for *strained* $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ SLs (with $x = 0.3$). In the systems of figure 3 we assumed that the strain in the barrier and the well were compensated, due to the small value of x . On the other hand, in figure 4 the layers are compressively strained inside the well. However, it is worth pointing out that the critical thickness in these nitrides is still under discussion in the literature [22, 23]. In figure 4 the hole levels are deeper in energy due to the higher value of the barrier height, which places more hole bands as confined within the well. Minibands occur only for higher-lying levels, and for $d_1 = d_2 \leq 45$ Å. The compressive strain affects the potential felt by the holes in the following way: the heavy- and split-off-hole potentials become deeper while the light-hole potential becomes shallower. As a consequence, the lower levels are HH and SO-LH ones. Here, once again the high effective-mass values also contribute to this behaviour.

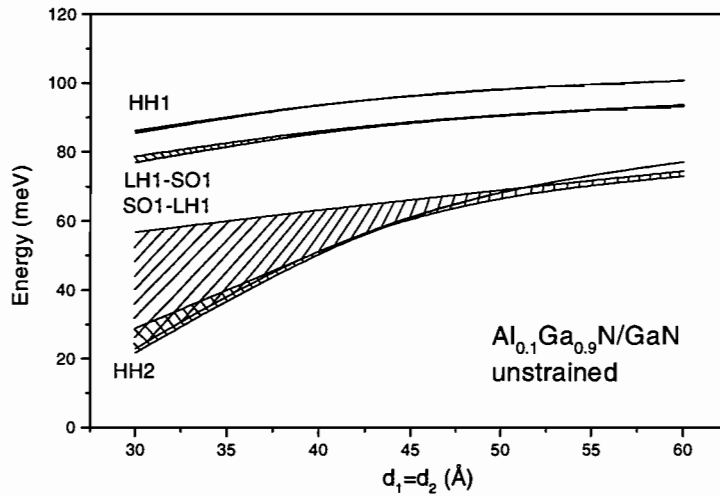


Figure 3. Confined hole energies as a function of the well width d_2 (barrier width $d_1 = d_2$) for undoped and *unstrained* $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ SLs. The well depth equals 109.6 meV. The shaded areas correspond to the miniband dispersions along Γ -Z. The energy zero was taken to be at the top of the AlGaN barrier.

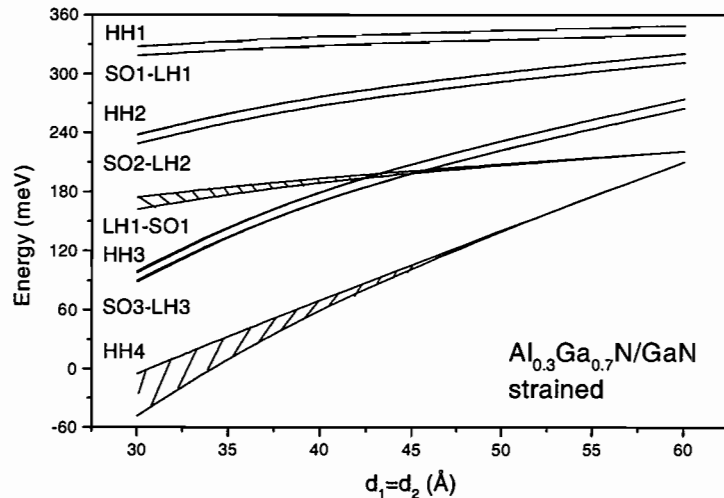


Figure 4. Confined hole energies as a function of the well width d_2 (barrier width $d_1 = d_2$) for *strained* $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ SLs. The strain energy is 33 meV. The well depth equals 328.8 meV. The shaded areas and energy zero are as in figure 3.

We will discuss now the effects of p-doping in AlGaN/GaN SLs. In figure 5 we show the self-consistent hole sub-bands and potential profiles obtained for a fully p-doped-barrier $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ SL ($x = 0.3$), with $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, well width (d_2) of 30 Å, and barrier width (d_1) of 60 Å. An *unstrained* SL was assumed. The hole sub-band levels (left-hand panel in figure 5) for an equivalent situation but neglecting exchange–correlation effects

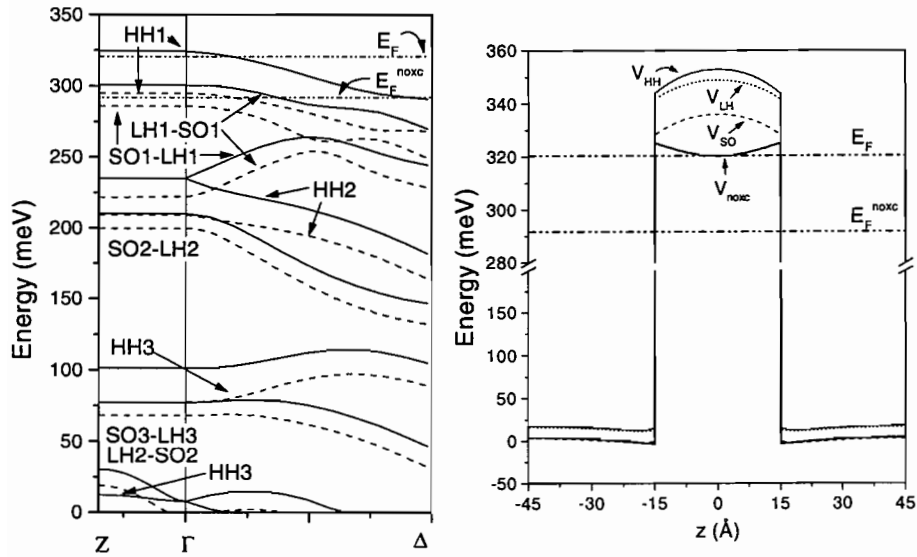


Figure 5. The fully p-doped-barrier $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ SL (unstrained), with $d_1 = 60 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$, and $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (the equivalent two-dimensional hole concentration is $N_{2D} = 6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). Left-hand panel: hole sub-bands along (solid lines) the SL symmetry lines Γ -Z (growth axis) and Δ (perpendicular to the growth axis). Hole levels for which exchange-correlation effects have been neglected (dashed lines) are also shown for comparison. Right-hand panel: V_{HH} (solid line), V_{LH} (dotted line), and V_{SO} (dashed line) are the heavy-, light- and split-off-hole potentials, respectively. E_{F} (dash-dotted line) indicates the Fermi level. V_{nox} (thick solid line) and $E_{\text{F}}^{\text{nox}}$ (dash-dotted line) are the heavy-hole potential and the Fermi level, respectively, without exchange-correlation effects. Note that V_{SO} is shifted by the spin-orbit splitting, 14 meV, relative to V_{HH} . The energy zero was placed at the top of the Coulomb potential at the AlGaN barrier.

are also shown (dashed lines) for comparison. It is clearly seen that for this short-period SL no miniband dispersion of the low-lying levels occurs (a small dispersion may be observed only for very high hole bands which appear close to the top of the AlGaN barrier). It is interesting to note that the exchange-correlation effects drastically modify the behaviour of the valence band structure, as well as the potential bending (right-hand panel in figure 5) which has its shape completely changed. The contributions for the total potential due to the Coulomb potential V_{nox} and due to the exchange-correlation potential are very important, since their sum will determine the shape of the bending of the total potential inside the well. This is a consequence of the charge-density localization, which in these short-period SLs is mostly concentrated at the centre of the well. Once the exchange-correlation potential depends on the local charge density, it dominates over the Coulomb potential, thus determining the self-consistent total potential. It is found that only one heavy-hole level, HH1, is occupied. This is also due to the high value of the heavy-hole effective mass for the nitrides. In spite of the occupation of only the first heavy-hole state, the light- and split-off-hole bands cannot be neglected. Moreover, while the splitting between the HH1 and the LH1-SO1 levels is of $\approx 10 \text{ meV}$ in the calculation which neglects exchange-correlation effects, it reaches a value of $\approx 25 \text{ meV}$ when these effects are taken into account. The Fermi level also changes by approximately 30 meV. These findings will certainly have important implications for optical measurements, such as in luminescence or absorption experiments.

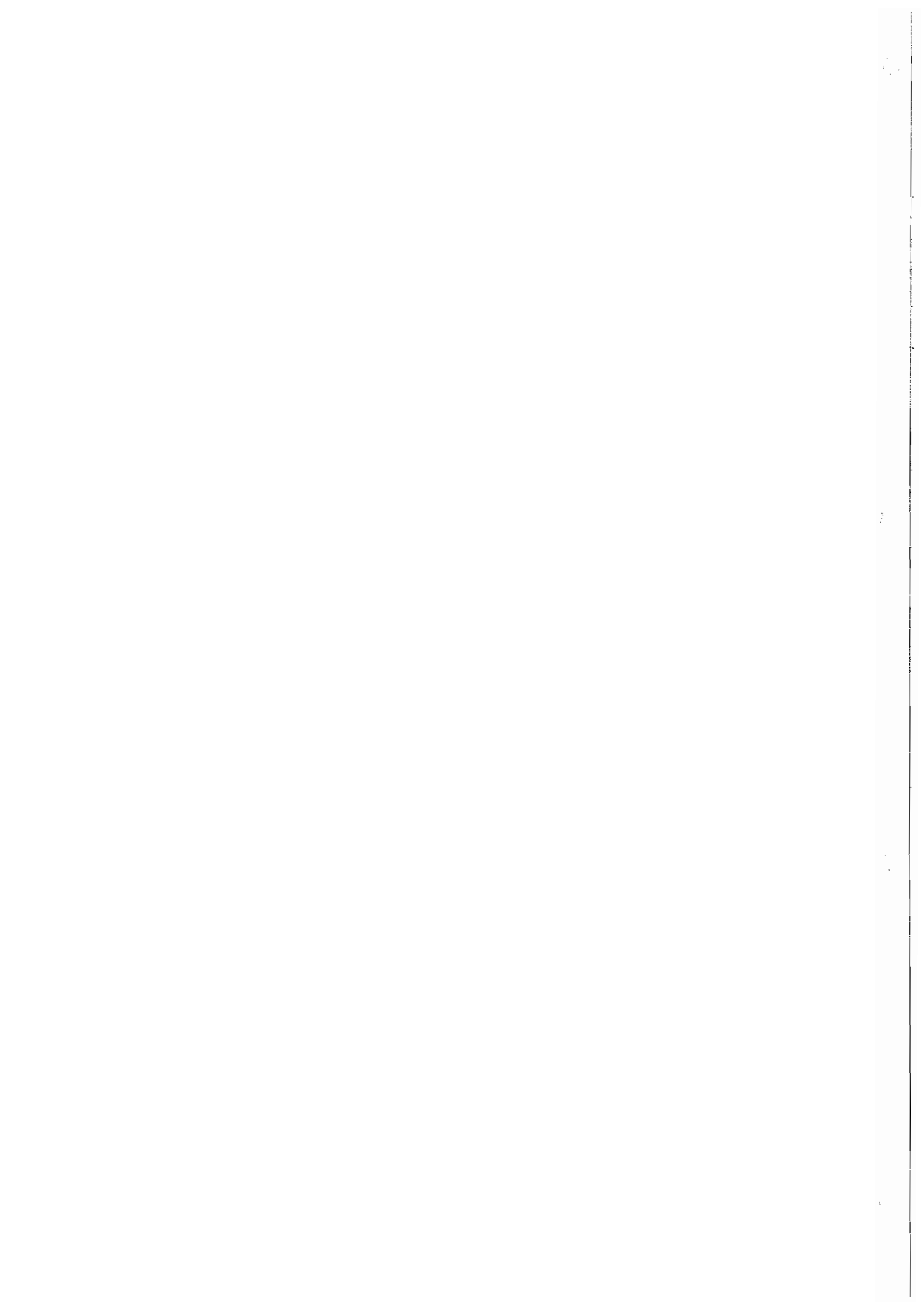
In summary, our investigations show that the effects of strain and of the inclusion of the spin-orbit interaction play an important role in the description of the valence band structure in undoped and p-doped $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ SLs. Hole minibands with significant dispersion occur only for small well widths ($\leq 40 \text{ \AA}$). The exchange-correlation effects within the 2DHG are crucial for explaining the different behaviour observed in the potential bending. As in other systems involving confined hole gases [14, 15], the present results show that also in modulation-p-doped $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ heterostructures, the many-body effects, such as exchange and correlation, must be taken into account for a realistic description of the hole bands and potentials in these systems.

Acknowledgments

We would like to thank the Brazilian funding agencies FAPESP and CNPq for partial support.

References

- [1] Orton J W and Foxon C T 1998 *Rep. Prog. Phys.* **61** 1
- [2] Edgar J H (ed) 1994 *Properties of Group-III Nitrides* (London: INSPEC)
- [3] As D J, Richter A, Busch J, Lübbbers M, Mimkes J and Lischka K 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 13
- [4] Wu J, Yaguchi H, Onabe K and Shiraki Y 1999 *J. Cryst. Growth* **197** 73
- [5] Pankove J I and Moustakas T D (ed) 1998 *Gallium Nitride (GaN): I (Semiconductors and Semimetals vol 50)* (San Diego, CA: Academic)
- [6] Marques M, Ramos L E, Scolfaro L M R, Teles L K and Leite J R 2001 *Proc. 25th Int. Conf. on Physics of Semiconductors (Osaka, Japan)* at press
- [7] Kozodoy P, Hansen M, DenBaars S P and Mishra U K 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3681
- [8] Saxler A, Mitchel W C, Kung P and Razezghi M 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 2023
- [9] Hsu L and Walukiewicz W 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 2405
- [10] Goepfert I D, Schubert E F, Osinsky A, Norris P E and Faleev N N 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 2030
- [11] Kumakura K, Makimoto T and Kobayashi N 2000 *Japan. J. Appl. Phys.* **39** 2428
- [12] Kumakura K and Kobayashi N 1999 *Japan. J. Appl. Phys.* **38** L1012
- [13] Rodrigues S C P, Scolfaro L M R, Leite J R and Sipahi G M 2000 *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors (IPAP Conf. Ser. vol 1)* p 74
- [14] Sipahi G M, Enderlein R, Scolfaro L M R and Leite J R 1996 *Phys. Rev. B* **53** 9930
- [15] Rosa A L, Scolfaro L M R, Enderlein R, Sipahi G M and Leite J R 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15 675
- [16] Enderlein R, Sipahi G M, Scolfaro L M R and Leite J R 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3712
- [17] Enderlein R, Sipahi G M, Scolfaro L M R and Leite J R 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3160
- [18] Rodrigues S C P, Scolfaro L M R, Leite J R and Sipahi G M 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 1015
- [19] Ramos L E, Teles L K, Scolfaro L M R, Castineira J L P, Rosa A L and Leite J R 2001 *Phys. Rev. B* **63** at press
- [20] Van de Walle C G and Neugebauer J 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 2577
- [21] Fan W J, Li M F, Chong T C and Xia J B 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 3471
- [22] Wright A F 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 2833
- [23] Frey T, As D J, Bartels M, Pawlis A, Lischka K, Tabata A, Fernandez J R L, Silva M T O, Leite J R, Haug C and Brenn R 2001 *J. Appl. Phys.* at press
- [24] Parker C A, Roberts J C, Bedair S M, Reed M J, Liu S X and El-Masry N A 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2776



Anexo 2

” Self-consistent $\vec{k} \cdot \vec{p}$ theory of p-doped zincblende GaN/InGaN and GaAs/InGaAs semiconductor heterostructures.”

Self-consistent $k.p$ theory of p-doped zinc-blende GaN/InGaN and GaAs/InGaAs semiconductor heterostructures

S. C. P. Rodrigues,[†] G. M. Sipahi,[‡] L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo,
CP 66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil*

(Dated: May 18, 2001)

Abstract

We present a self-consistent $\mathbf{k.p}$ theory of p-doped semiconductor heterostructures which solves the full six-band Luttinger-Kohn Hamiltonian, generalized to treat different materials, in conjunction with the Poisson equation in a plane-wave representation, and includes exchange-correlation effects within the local density approximation. Self-consistent solutions of the multiband effective-mass-Poisson equations are obtained for unstrained and biaxially strained zinc-blende GaN/In_xGa_{1-x}N and GaAs/In_xGa_{1-x}As quantum wells and superlattices (SLs), in which acceptor doping concentration and its profile, SL period, and the alloy content x are varied. The use of different Luttinger parameters, associated with the presence of distinct materials, is shown to be particularly important for GaAs/In_xGa_{1-x}As SLs. Exchange-correlation effects within the confined two-dimensional hole gas in GaN/InGaN heterostructures are found to play a fundamental role in the correct description of the systems, leading to confinement potentials of opposite character depending on the well- and barrier-layer thicknesses.

PACS numbers: 73.20.Dx, 71.15.-m

I. INTRODUCTION

In the past few years a growing interest has been observed in the III-N derived heterostructures, such as AlGa_N/Ga_N and Ga_N/InGa_N multiple quantum wells (QWs) and superlattices (SLs) due to their important applications in several devices. High-power microelectronics, blue and green light emitting diodes, blue semiconductor lasers, and modulation-doped field effect transistors are examples of such devices.¹⁻⁴ The devices have been demonstrated in both, the stable hexagonal (wurtzite)¹ and cubic (c)^{2,3} phases. Although most of the progress achieved so far is based on the wurtzite materials, the c-metastable phase layers are emerging as promising alternatives for similar applications.^{5,6} One of the known advantages of the c-nitrides is that they can be easily cleaved along with the substrate facets, as usual for GaAs-based devices. Moreover, they also show to possess larger optical gain as compared to their wurtzite counterparts.⁷⁻¹⁰

Controlled p-type doping of the III-N material layers is of crucial importance for the electronic as well as for the transport-based devices performances. Nevertheless, this has shown to be difficult by virtue of the deep nature of the acceptors in the nitrides. In contrast to GaAs-derived heterostructures in which acceptor levels are only few *meV* apart from the band edge, hence high carrier densities can be easily achieved, in the nitrides the most common p-dopants (Mg, C, and Be) are found to introduce an acceptor level around 0.1-0.2 eV above the top of the valence band in the bulk materials.¹¹ Several attempts have been made trying to enhance the acceptor doping efficiency in wurtzite structures, for example by using multiple QWs and SLs of alternate layers of Ga_N and AlGa_N or InGa_N.¹²⁻¹⁴ This also provided evidence for the formation of a two-dimensional hole gas (2DHG) in the well regions of the heterostructures, which is induced by piezoelectric (PZ) effects. Contrary to hexagonal material systems, in p-doped cubic structures a 2DHG may arise, even in the absence of PZ fields, provided adequate design parameters for the heterostructures are employed.

For the description of the electronic structure of n-type doping in e.g. III-V heterostructures, the self-consistent solution of the one-band effective mass equation (EME), in con-

junction with the Poisson equation for the confined electron gas, suffices. Contrarily, for p-doped systems the three uppermost heavy-, light-, and spin-orbit split-off-hole bands must be taken into consideration in a realistic calculation of the valence- and sub-band structures and their related properties. The hole sub-bands of undoped wurtzite- and zincblende-type AlGa_N/Ga_N multiple QWs and SLs have been calculated by several authors through the use of 6×6 Rashba-Sheka or Luttinger-Kohn (LK) Hamiltonians.^{15–20} Similar calculations have also been reported for undoped arsenide-derived structures such as, InGaAs/InP²¹, InGaAs/AlGaAs²², and AlGaAs/GaAs QWs²³. While in the works reported in Refs.^{15–19} the differences in effective-mass parameters between the two materials forming the heterostructure have been neglected, in Refs.^{20,22,23} these differences are accounted explicitly in the LK matrix elements. The results reported in Ref.²⁰ represent, to the best of our knowledge, the first time the difference in the LK parameters is accounted for in a nitride-based, i.e. AlGa_N/Ga_N heterostructure.

Self-consistent band structure calculations for a hole gas in the most common III-V's AlGaAs/GaAs QWs and SLs have been carried out by Kim and Majerfeld²⁴ and Kim et al²⁵ using the LK multiband EME of the Γ_8 and Γ_7 valence band complex. The differences in the band parameters between GaAs and AlGaAs, as well as the anisotropy in the $x - y$ plane (perpendicular to the growth axis z) have been neglected in these calculations. Exchange and correlation effects have been considered, however in a simple way which takes into account only the heavy holes. More complete self-consistent calculations have been reported by Kemerink et al on p-doped asymmetric AlGaAs/GaAs double QWs²⁶ and p- δ -doped multiple AlGaAs/GaAs QWs²⁷, which are based on the 4×4 -LK model and include non-parabolicity in the $x - y$ plane and exchange-correlation effects within the 2DHG. For doped nitride heterostructures, the investigations reported so far deal only with wurtzite systems such as magnesium doping in AlGa_N/Ga_N single heterojunctions²⁸ or in AlGa_N/Ga_N QWs²⁹ and SLs³⁰. In Refs.^{28,30}, a simple parabolic one-band model is adopted for the valence band structure. Although the heavy-hole effective mass in the nitrides is rather large, hence occupation of higher light and/or split-off hole energy levels is unlikely, the neglecting of mixing with the two latter levels may give rise to quite different results.²⁰ Moreover, many-

body effects such as exchange and correlation have been shown to play an important role, particularly in systems where confined hole gases are present.^{27,31-33} From the published results we conclude that the self-consistent band structure calculations carried out so far for a hole gas in the III-V's QWs and SLs neglect important effects which, unlike the AlGaAs/GaAs systems are found to play important roles.

In our previous work we have applied a **k.p** method within the framework of a plane-wave representation to calculate the hole-band structures of undoped group-III nitride heterostructures.²⁰ The aims of this work are to present the extension of the method to the self-consistency limit and to report on self-consistent hole-band structure calculations for zinc-blende GaN/In_xGa_{1-x}N and GaAs/In_xGa_{1-x}As QWs and SLs. Preliminary results for selected p-type modulation-doping in GaN/InGaN and AlGaAs/GaN heterostructures have been recently reported by us.³⁴ Here a more detailed study is presented for GaN/InGaN along with a comparison with results for GaAs/InGaAs for which no self-consistent calculations have been reported so far. The multiband EME, which includes strain effects and the hetero-interfaces derived potential is solved in conjunction with the Poisson equation for the carriers charge density. Exchange-correlation effects within the 2DHG are taken into account in a rigorous way, as it was done in our previous investigations of p- δ -doped layers.^{32,33} Valence sub-band and mini-band structures are obtained for the heterostructures in which acceptor doping concentration and its profile, SL period, i.e., well- and barrier-thicknesses, and alloy content x are varied. The paper is organized as follows. In section II we give a brief presentation of the self-consistent **k.p** theory with the generalized kinetic energy term in the multiband EME, for unstrained and biaxially-strained layers, and show how the self-consistent potentials are obtained. In section III we present results for the studied GaN/InGaN and GaAs/InGaAs heterostructures. The role played by the use of different Luttinger parameters in these In-related systems is discussed. The importance of the inclusion of exchange-correlation effects in the obtained self-consistent potential profiles is also analyzed in this section. In section IV we draw the conclusions.

II. MODEL AND THEORETICAL METHOD

A Self-consistent effective mass equations

We adopt a supercell model approach that comprises the QWs and barrier regions of a zinc-blende-based heterostructure. The multiband effective mass equation (EME) in the formulation proposed by Luttinger and Kohn³⁵ is represented with respect to a basis set of plane waves. The method as applied for homostructures, such as δ -doping SLs, has been previously reported for p-type δ -doping layers in GaAs³¹ and in Si³². Here we extend the theoretical method in order to study p-doped heterostructures with any acceptor doping profile, and apply the self-consistent generalized procedure to investigate the hole sub-band structures and the 2DHG in p-doped GaN/InGaN and GaAs/InGaAs QWs and SLs. Therefore, the method will be described only briefly.

An infinite SL of a number n of square wells of thicknesses d_n , along the growth direction [001] coincident with the z axis, is assumed. The multiband EME is, hence, represented with respect to plane waves with wave vectors $K = (2\pi/d)l$ (l being an integer, and $d=d_1 + d_2 + \dots + d_n$ the SL period) equal to the reciprocal SL vectors.³¹ The rows and columns of the 6×6 LK Hamiltonian refer to the Bloch-type eigenfunctions $|jm_j\mathbf{k}\rangle$ of the Γ_8 heavy- and light-hole bands, and the Γ_7 spin-orbit split-off hole band; \mathbf{k} denotes a vector of the first SL BZ. The expansion of the EME with respect to plane waves ($z|K\rangle$) means to represent this equation with respect to Bloch functions ($x|jm_j\mathbf{k} + K\mathbf{e}_z\rangle$). For a Bloch-type eigenfunction ($z|\nu\mathbf{k}\rangle$) of the SL of energy E_ν , associated with the band index ν , and wavevector \mathbf{k} the EME has the form

$$\sum_{j'm'_jK'} \left(jm_j\mathbf{k}K | H_0 + H_S + V_{HET} + V_A + V_H + V_{XC} | j'm'_j\mathbf{k}K' \right) \left(j'm'_j\mathbf{k}K' | E_\nu\mathbf{k} \right) = E_\nu(\mathbf{k}) \left(jm_j\mathbf{k}K | E_\nu\mathbf{k} \right), \quad (1)$$

where H_0 is the unperturbed kinetic energy term described by generalizing the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian for heterostructures, H_S is the strain term originated from the lattice mismatch between the different layers of the system, V_{HET} is the valence band discontinuity potential,

V_A is the ionized acceptor charge distribution potential, V_H is the Hartree potential due to the hole charge distribution, and V_{XC} is the exchange-correlation potential, considered within the local density approximation (LDA).

As the potentials V_H and V_{XC} entering Eq. (1) depend on the carriers charge distribution itself, one has to solve self-consistently the EME (Eq. (1)) and the Poisson equation for the Coulomb potential V_C , given by the sum of V_H and V_A , i.e.

$$(K|V_C|K') = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} \frac{1}{|K - K'|^2} [(K|N_A|K') - (K|p|K')], \quad (2)$$

where ϵ is the dielectric constant, $(K|N_A|K')$ are the Fourier coefficients of the ionized acceptors profile function $N_A(z)$, and $(K|p|K')$ is calculated through the following expression³¹

$$(K|p|K') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{\nu\mathbf{k} \\ \text{empty}}} \sum_{j m_j} \sum_{K''} (j m_j \mathbf{k} K'' | \nu\mathbf{k}) (\nu\mathbf{k} | j m_j \mathbf{k} K'' - K + K'), \quad (3)$$

with Ω being the volume of a bulk unit cell, and the sum being performed over all the unoccupied (hole) states.

The valence band discontinuity potential (V_{HET}) is given by

$$(j m_j \mathbf{k} K | V_{HET} | j' m'_j \mathbf{k} K') = (K | V_{HET} | K') \delta_{j j'} \delta_{m_j m'_j}, \quad (4)$$

where, according to the effective-mass theory, the off-diagonal elements with respect to $j m_j$, $j' m'_j$ have been neglected. In expression (4), $(K | V_{HET} | K')$ are the Fourier coefficients of $V_{HET}(z)$, the valence band potential in the growth direction.

In the case of homostructures the parameters entering the effective kinetic energy operator are spatially constant, i.e., the Hamiltonian H_0 is diagonal with respect to K , K' , and its diagonal elements are given by the LK Hamiltonian with wavevector $\mathbf{k} + K\mathbf{e}_z$. This is no longer true for heterostructures, where these parameters are different in the various material layers. If the multiband EME is solved in direct space, these differences are accounted for by non-trivial matching conditions for the multicomponent envelope function and its first derivatives. The matching conditions themselves are subject of continuing discussions in the literature (see e.g. Ref.³⁶). While the hermiticity of the effective kinetic energy operator may

be taken for granted, there are still different ways to achieve the hermitian expressions. In the one-band effective mass theory, the continuity of the current density provides a plausible argument to remove this ambiguity and to uniquely define a hermitian effective kinetic energy operator. In a multiband effective mass theory the continuity demand of the current density does not completely fix the hermitian form of the kinetic energy operator, but makes the correct form very likely. In our method, the EME is represented with respect to plane waves, thus the spatial inhomogeneity of the parameters of the kinetic energy operator is not expressed by particular matching conditions but by the occurrence of non-diagonal elements in the kinetic energy matrix with respect to K , K' . The general form of the unperturbed effective kinetic energy matrix can be found in Ref. ²⁰, and a more detailed description of its elements for n different material layers will be published elsewhere.³⁷ Thus, no further details will be given here.

We assume in the calculations presented here a unique dielectric constant (ϵ) throughout the whole SL. In principle, one could also consider the variation of ϵ across the different layers. However, we do not expect that this assumption will lead to significant changes in sub-band energies and potential profiles. While variations in the effective masses may induce energy changes of first order in perturbation theory, the influence on the energy levels due to variations in the dielectric constant is of second order. Furthermore, concerned to the nitride-derived structures for which the hole effective masses are large, a small amount of the charge density is found to penetrate the barriers. On the other hand, for the arsenide-based heterostructures the dielectric constants of wells and barriers differ only by a few percent³⁸ or, even less if we consider in particular small values of the alloy compositions as in the systems investigated here.

Exchange-correlation effects within LDA were taken into account by applying a generalization of the parameterized expression for a homogeneous electron gas³⁹ to a heterogeneous hole gas (composed by heavy, light and split-off holes), as described in our previous works³¹⁻³³. Therefore, details will be omitted here.

B Biaxial strain

In order to take into account in the calculations the biaxial strain due to lattice mismatch we followed the procedure described below. The biaxial strain can be decomposed into two terms: a hydrostatic term and an uniaxial term. Since the hydrostatic term changes the gap energy, thus not affecting the valence band potential depth, only the uniaxial strain component will be considered.⁴⁰ As the systems investigated here are heterostructures (multiple QWs and SLs) consisting of repeated cells composed by successive layers of two different materials, we will analyze the strain according to the definition of strain in epilayers used by Jain *et al.*⁴¹ The uniaxial strain in an epilayer along the [001] direction may then be calculated by the following expression

$$\epsilon = -2/3D_u\epsilon_{xx}(1 + 2C_{12}/C_{11}), \quad (5)$$

where $-2/3D_u$ is the shear deformation potential, C_{11} and C_{12} are the elastic constants of the epilayer, and ϵ_{xx} is the lattice mismatch which is given by

$$\epsilon_{xx} = (a_{\text{barrier}} - a_{\text{well}})/a_{\text{well}}. \quad (6)$$

The strain term of the Hamiltonian, H_S , derived from the operator for uniaxial strain in III-V semiconductors⁴⁰⁻⁴² is given by

$$(jm_j\mathbf{k}K | H_S | j'm'_j\mathbf{k}K') = (K | \epsilon | K') M_{jm_j}^{j'm'_j}, \quad (7)$$

with $M_{jm_j}^{j'm'_j}$ being the 6×6 strain matrix, and $(K | \epsilon | K')$ the Fourier coefficients of the strain operator.²⁰

III. RESULTS AND DISCUSSION

A Undoped structures

We first discuss the influence of the use of different Luttinger parameters for the material layers forming the well and barrier regions of a heterostructure composed of two different compounds, with barrier thickness d_1 and well thickness d_2 . In Fig. 1 we depict

band structures along the Γ -Z and Γ - Δ lines of the SL BZ for unstrained GaN/InN and GaAs/In_{0.5}Ga_{0.5}As multiple QWs, with $d_1 = 200 \text{ \AA}$, and $d_2 = 30 \text{ \AA}$. The Γ - Δ line corresponds to wavevectors k_x perpendicular to the SL axis (Γ -Z). The hole levels are labeled according to their main character at Γ . The notation SO $_i$ -LHi (LHi-SO $_i$) means that the mixing character of band i is dominated by SO (LH). The parameters used in the calculations are displayed in Table I. The values of Δ , the spin-orbit splitting energy, the lattice parameter a , and the effective masses m^* for the binary GaN and InN compounds were obtained through *ab initio* full-relativistic linear augmented plane-waves (FLAPW) band structure calculations⁴³ (exception is made for the effective masses of InN, which were taken from Ref.⁴⁴). For GaAs and InAs the values of these quantities, as well as all the other quantities needed for InN have been extracted from the literature. The Luttinger parameters γ_i are connected to the effective masses by using standard relations which may be found elsewhere⁴⁸. For the alloys, the parameters were obtained by linearly interpolating between the bulk binary materials values, except the energy gap of In $_x$ Ga $_{1-x}$ N for which we adopted a parabolic dependence on x , with a bowing parameter of 1.05 eV⁴⁵. The values adopted for the dielectric constant were 9.5⁴ and 12.35³⁸, for the nitride- and arsenide-based heterostructures, respectively, in units of the vacuum permittivity, ϵ_0 . For the valence-band offset we adopted 40% in both kinds of systems.^{40,49}

The effect of utilizing different effective-mass parameters is more pronounced for light-hole bands, due to their smaller effective masses. Similar behavior was recently obtained by us for Al $_x$ Ga $_{1-x}$ N/GaN multiple QWs.²⁰ These changes are found to increase with the alloy composition x . In InGaAs-based structures, the effect of the use of different Luttinger parameters is particularly remarkable, since the light-hole mass in this case is even smaller. For the nitrides, in virtue of the strong coupling between light- and split-off-bands already at the Γ -point, the mixed SO $_i$ -LHi (LHi-SO $_i$) states are the ones which are more affected.¹⁵

Another feature seen in Fig. 1 for the GaN/InN multiple QWs is that the HH and SO-LH states always show up in couples separated by approximately Δ , the spin-orbit splitting energy. This may be explained by the very high values of the effective masses of the heavy- and of the mixed split-off-light-holes. As there is no dispersion along the Γ -Z direction

for these large period SLs, we only observe the folding of the sub-bands caused by the SL periodicity. This is no longer true in the case of the mixed light-split-off hole bands, due to their much smaller effective mass.

B Hole band structures and potentials of doped GaN/InGaN multiple QWs and SLs

In this section we will discuss the results of doped GaN-based heterostructures. In Fig. 2 schematic representations of the doping and potential profiles in a doped SL (or multiple QWs) are depicted. In order to allow for a more rigorous analysis of the results, we will consider the 3D ionized acceptor concentration, N_A , as constant and fixed, and will increase the 2D acceptor concentration in our systems by increasing the thickness of the doping layer (d_p), which is placed at the center of the barrier. This doping profile is schematically shown in Fig. 2(a). As the acceptor binding energies in group-III nitrides possess values between 0.1 and 0.2 eV^{4,50}, and in the systems investigated here the barrier heights are higher than 200 meV, we may safely assume in the calculations that all acceptors are ionized and the total hole density is equal to the total acceptor density.

The inclusion of exchange-correlation effects in our calculations gives rise to different exchange-correlation potentials (XC) for each different kind of hole. Contrarily, all particles feel the same total Coulomb potential. Therefore, an appropriate choice for a reference for the potential energy of the doped heterostructure would be the total Coulomb potential at the top of the barrier. Fig. 2(b) schematically shows this choice. The energy zero has been placed at the top of the total Coulomb potential, and the potential depicted is the total potential, with the inclusion of the XC term. The ionized acceptor level (E_A), the Fermi level (E_F) and the minimum depth of the well due to the potential bending (V_{min}) are also represented. Because of the different XC energies, each kind of carrier will feel a different total potential.

In Fig. 3 we analyze the dependence of the hole sub-bands on the doping concentration. There are presented the energy levels at the Γ -point for strained GaN/In_xGa_{1-x}N ($x=0.3$) multiple QWs with $d_1=200$ Å and $d_2=100$ Å. For this alloy composition the barrier height

is 240.4 meV and the wells are compressively strained ($\epsilon=97.1$ meV). We assumed all the parameters needed to calculate the strain linearly interpolated between the bulk values depicted in Table I. Since the critical thicknesses in the nitrides are still not well established, we were guided here by recent photoluminescence measurements carried out on wurtzite $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ samples for x values ≤ 0.2 and by an analytical estimative^{51,52} performed for cubic $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ layers grown on $\text{GaN}(001)$ for $0 \leq x \leq 1$ ⁵³. The 3D acceptor doping concentration is fixed at $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, and the doping layer thickness, d_p , varies from 60 Å to 200 Å. According to the values of d_p , the 2D acceptor concentration varies in the interval $6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} < N_A^{2D} < 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. The Fermi level, E_F , and the minimum of the potential depth due to bending, V_{\min} , are also shown. One can easily understand from the picture shown in Fig. 2 that the two lowest states (HH1 and HH2) appearing in Fig. 3 are a doublet, which results from the interaction of two different wells created by the bending of the potential caused by the self-consistent charge distribution. From here on we will call these two interacting wells as double QW. This feature can indeed be inferred from the spatial localization of the wave-functions associated with the HH1 and HH2 states (not shown), with the former symmetric and the latter asymmetric, both with maxima centered at each well forming the double QW. The crossings of the second heavy-hole sub-band (HH2) with E_F and with V_{\min} allow us to divide the range of values of the doping layer thicknesses into three different regions: a region where only one sub-band is occupied ($d_p < 100$ Å), a region where two sub-bands are occupied and one can see a transition from a single QW to a double QW ($100 \text{ Å} < d_p < 170 \text{ Å}$), and a region where two sub-bands are occupied in a double QW ($d_p > 170 \text{ Å}$). These findings may have important implications in the interpretation of optical measurements, as e. g., photoluminescence spectra, in nitride-based heterostructures.

From Fig. 3 one can also notice that the minimum of the potential depth (V_{\min}) decreases almost linearly with the increase of N_A^{2D} . This behavior is expected since the potential bending is enhanced by the increase of N_A^{2D} . A different behavior (not linear) is observed for the trend in the position of the energy levels. This difference can be explained by the different regions defined above. In the one-occupied sub-band region, the increase of the

bending push down the levels towards the top of the barrier, delocalizing them. In the transition region this effect is less pronounced due to the fact that two distinct sub-bands are being occupied. In the double QW region, the increase of the hole density enhances the localization of the holes, pulling the levels up towards the bottom of the well.

In order to better emphasize the degree of localization of the hole charge density distribution in such systems, we show in Fig. 4 a contour plot of the 3D hole density as a function of z , $p(z)$, for the same systems shown in Fig. 3. As in Fig. 3, d_p varies from 60 Å to 200 Å. One can see from this figure that for smaller 2D hole concentrations, $p(z)$ has a maximum at the center of the well, with a broad distribution. As the 2D hole concentration increases, the system starts to present two maxima. The charge distribution profile shown in Fig. 4 indicates a behavior similar to the one seen in Fig. 3, where the majority of the charge density is concentrated inside the double QW defined by the potential bending and the QW barriers. Therefore, for higher N_A^{2D} (above $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), one can assume that two different carrier channels are present in these systems.

In Fig. 5 we present the XC potential, the Coulomb potential, and the total potential (Coulomb + XC) as felt by the heavy-holes in doped GaN/In_xGa_{1-x}N ($x = 0.3$) heterostructures for two different periods, a SL of period $d = 70$ Å and a multiple QW of $d = 300$ Å. The energy zero was placed at the bottom of the Coulomb potential in the QW in order to stress the relative importance of the different contributions, XC and Coulomb, to the total potential. The two systems shown in Fig. 5 correspond to fully-doped barriers with $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. It is worth noting that for the alloy composition considered ($x = 0.3$), this value approaches the maximum 3D doping concentration achieved for bulk nitride systems¹¹. Therefore, the corresponding values for the 2D doping concentrations are expected to be the highest values which can be achieved. The systems depicted are: (a) a SL with $d_1 = 40$ Å, $d_2 = 30$ Å, and $N_A^{2D} = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; and (b) a multiple QW with $d_1 = 200$ Å, $d_2 = 100$ Å, and $N_A^{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Even if the total potential profiles look completely different, the maximum value of the XC potential is very close for the two systems (approximately 25 meV for the SL and 29 meV for the multiple QW). The remarkable difference seen in the Coulomb potentials is the key for understanding the differences observed in these

two systems. While in the short-period SL the Coulomb potential is very shallow (less than 2 meV), in the multiple QW it is considerably deep (around 40 meV). This is due to the charge localization caused by the large effective mass value. From one side it screens the Coulomb potential very fast, while from the other it enhances the effect of the XC potential which depends exclusively on the hole charge density.

C Doped GaAs/InGaAs systems: isolated wells and SLs

This section is devoted to the presentation of results for doped GaAs/InGaAs heterostructures, and to a comparison of the results with those for GaN/InGaN systems. We have chosen heterostructures which involve InGaAs layers since biaxial strain also plays a role if these layers are on top of GaAs for example. In Fig. 6 we show the valence band structure, potential profiles, and Fermi level position for an unstrained GaAs/In_xGa_{1-x}As ($x = 0.3$) SL, with $d_1 = 40 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$, in which the GaAs barriers are fully-doped. The 2D doping concentration is $N_A^{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($N_A = 1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) and the valence-band barrier height is 132.2 meV. For such small period the strain in the SL may be considered as compensated⁵⁴, i.e., one can assume in the calculation an unstrained system. Since the spin-orbit splitting energy is large in this case (see Table I), the influence of the split-off band is negligible, as expected. One can observe a remarkable SL behavior which is seen from the miniband dispersions along the Γ -Z direction. Even the first heavy hole level (HH1) shows a noticeable dispersion. Two minibands are found to be occupied for this short-period SL. Two main characteristics are responsible for the particular features of the system: the barrier heights and the values of the effective masses. Since the hole effective masses for the arsenides are in general much smaller than those for the nitrides, the valence states in the former are expected to be more delocalized. This delocalization is still enhanced by the shallower nature of the barrier height. It is interesting to note that, contrarily to what has been observed for the nitride-based QWs and SLs, the Fermi level approaches now the top of the barrier, and the first light-hole mini-band (LH1) is also found occupied. Besides, contrary to GaN/InGaN, in the GaAs/InGaAs based structures, with the same well-

and barrier-thicknesses, very broad mini-bands occur, characterizing very strong interacting wells. Since the acceptor level binding energy in GaAs is of $\approx 26\text{-}30$ meV (usually C or Be),³⁸ 2D hole gases of at least 50 % higher densities can be achieved.

In Fig. 7 the hole band structure, potential profiles and Fermi level position are depicted for a compressive strained GaAs/In_xGa_{1-x}As multiple QW ($x = 0.3$) with a larger period, $d_1 = 200$ Å and $d_2 = 100$ Å, and fully-doped barriers with $N_A^{2D} = 2 \times 10^{12}$ cm⁻² ($N_A = 1 \times 10^{18}$ cm⁻³). The value of the strain energy is $\epsilon = 83.5$ meV. For this system the effective heavy-hole potential well, V_{HH} , becomes more than four times deeper than the light-hole potential well, V_{LH} , (see the right hand side of Fig. 7). As a consequence, the first seven minibands are of heavy hole character at Γ . Even if we consider the parallel Γ - Δ direction, where a mixing of heavy- and light-hole states takes place, and therefore the well known strong anti-crossing behavior is expected^{31,32}, one can still see the effects of the strong heavy-hole character which is revealed by the small non-parabolicity of the (parallel) sub-bands. Examining the mixed light-split-off (LHi-SOi) hole bands one observes a very small split-off-hole character; this is explained by the fact that the split-off hole potential well lies inside the continuum energy region defined by the others, the heavy- and the light-hole potentials. It is worth mentioning that, nevertheless, the split-off band should be included in the self-consistent calculation since it does influence the valence band structure, particularly that of strained systems.

IV. CONCLUSIONS

We have presented a self-consistent **k.p** method generalized to investigate p-type doped heterostructures with any valence-band potential profile, and includes biaxial strain and exchange-correlation effects in the 2DHG within LDA. The method relies on a plane-wave expansion of the full six-band Luttinger-Kohn Hamiltonian which is solved together with the Poisson equation, in the reciprocal space.

The method is applied to study the valence sub-band and mini-band structures, potential profiles, and Fermi level positions in nitride- and arsenide-derived heterostructures. Results

were presented for zinc-blende GaN/InGaN and GaAs/InGaAs multiple QWs and superlattices, in which the acceptor doping concentration, the superlattice period, and the alloy composition were varied. The use of different Luttinger parameters, associated with the distinct materials comprising the heterostructure, affects particularly the light-hole bands due to their smaller effective masses. It is demonstrated that in the case of InGaAs-derived structures this effect can be very drastic, specially for higher In content.

For p-doped GaN/In_xGa_{1-x}N superlattices and multiple QWs, only if $x \geq 0.3$, the existence of a confined 2DHG is likely in virtue of the deep nature of the acceptor levels (~ 200 meV) in the nitrides. For $x \sim 0.3$ and multiple QWs with barriers 200 Å wide, the highest acceptor concentration which can be achieved is of the order of $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, corresponding to 2DHG densities of about $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Mini-bands with significative dispersion are found to occur only for periods ≤ 100 Å and mostly for higher light-split-off mixed bands. The remarkable differences seen in the GaAs/InGaAs structures when compared to GaN/InGaN were emphasized.

Exchange-correlation effects were found to play a crucial role in the determination of the total self-consistent potential, being responsible for changes in the confined energy levels of about 10-20 %. In particular, for InGaN-derived heterostructures these effects were shown to lead to confinement potentials of entirely opposite character depending on the well- and barrier-layer thicknesses. This finding may have important implications in optical experiments involving the confined 2DHG in c-GaN/InGaN structures.

No attempts were made by us at this stage to make direct comparisons between our calculations and experimental results. As far as the cubic nitrides are concerned, only very recently GaN/InGaN/GaN double heterostructures grown on GaAs (001) substrates⁵⁵ and InGaN/GaN multiple QW structures grown on 3C-SiC (001) substrates⁵⁶ have been reported. Since the studies of the optical properties of superlattices and QWs based on the c-nitrides are at an early stage, the results reported here will provide important guidelines for the interpretation of the forthcoming experiments. Concerning the GaAs/InGaAs heterostructures, absorption and luminescence spectra calculations as performed in Ref.⁵⁷ are underway, aiming a direct comparison with experiment.

Acknowledgements

We thank FAPESP and CNPq (Brazilian funding agencies) for partial support of this work. One of us (SCPR) thanks Prof. G.H. Döhler for many fruitful discussions and for the critical reading of the manuscript.

REFERENCES

- † Electronic address: {\itContactauthor}:srodrigu@macbeth.if.usp.br
- ‡ Electronic address: {\itPermanentaddress:Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo,}
- ¹ See e.g., S. Nakamura, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, R27 (1999); S. Nakamura and G. Fasol, *The Blue Laser Diode* (Springer, Berlin, 1997).
 - ² J. W. Orton and C. T. Foxon, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 1 (1998).
 - ³ H. Yang, L. X. Zheng, J. B. Li, X. J. Wang, D. P. Xu, Y. T. Wang, X. W. Hu, and P. D. Han, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2498 (1999).
 - ⁴ *Properties of Group-III Nitrides*, ed. J. H. Edgar, (INSPEC, London, 1994).
 - ⁵ J. Wu, H. Yaguchi, K. Onabe, and Y. Shiraki, *J. Cryst. Growth* **197**, 73 (1999).
 - ⁶ D. J. As, A. Richter, J. Busch, M. Lübbbers, J. Mimkes, and K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 13 (2000).
 - ⁷ J. Holst, A. Hoffmann, I. Broser, B. Schöttker, D. J. As, D. Schikora, and K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1966 (1999).
 - ⁸ J. Holst, L. Eckey, A. Hoffmann, I. Broser, B. Schöttker, D. J. As, D. Schikora, and K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1439 (1998).
 - ⁹ J. Wu, H. Yaguchi, K. Onabe, and Y. Shiraki, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1931 (1998).
 - ¹⁰ D. Ahn and S.-H. Park, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3303 (1996).
 - ¹¹ *Gallium Nitride (GaN) I*, *Semiconductors and Semimetals*, edited by J. I. Pankove and T. D. Moustakas, (Academic Press, San Diego, 1998) vol. **50**.
 - ¹² A. Saxler, W. C. Mitchel, P. Kung, and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2023 (1999).
 - ¹³ P. Kozodoy, M. Hansen, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3681 (1999).
 - ¹⁴ K. Kumakura, T. Makimoto, and N. Kobayashi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L195 (2000); *ibid.* **39**, 2428 (2000)
 - ¹⁵ D. Ahn, *J. Appl. Phys.* **79**, 7731 (1996).
 - ¹⁶ T. Uenoyama and M. Suzuki, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2527 (1995).

- ¹⁷ Yu. M. Sirenko, J.-B. Jeon, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, and M. A. Stroscio, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2504 (1996); Yu. M. Sirenko, J. B. Jeon, B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, M. A. Stroscio, and G. J. Iafrate, *Phys. Rev.* **B 55**, 4360 (1997).
- ¹⁸ M. Suzuki and T. Uenoyama, *J. Appl. Phys.* **80**, 6868 (1996).
- ¹⁹ W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong, and J. B. Xia, *J. Appl. Phys.* **80**, 3471 (1996).
- ²⁰ S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, and G. M. Sipahi, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1015 (2000).
- ²¹ D. Ahn, S. J. Yoon, S. L. Chuang, and C.-S. Chang, *J. Appl. Phys.* **78**, 2489 (1995).
- ²² J. Lee, C. Shieh, and M. O. Vassel, *J. Appl. Phys.* **69**, 1882 (1991).
- ²³ G. Goldoni and A. Fasolino, *Phys. Rev.* **B51** 9903 (1995).
- ²⁴ B. W. Kim and A. Majerfeld, *J. Appl. Phys.* **77**, 4552 (1995).
- ²⁵ B. W. Kim, E. Mao, and A. Majerfeld, *J. Appl. Phys.* **81**, 1883 (1997).
- ²⁶ M. Kemerink, P. M. Koenraad, P. C. M. Christianen, A. K. Geim, J. C. Maan, J. H. Wolter, and M. Henini, *Phys. Rev.* **B53**, 10000 (1996).
- ²⁷ M. Kemerink, P. M. M. Thomassen, P. M. Koenraad, P. A. Bobbert, J. C. M. Henning, and J. H. Wolter, *Phys. Rev.* **B58**, 1424 (1998).
- ²⁸ L. Hsu and W. Walukiewicz, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2405 (1999).
- ²⁹ S.-H. Park and S.-L. Chuang, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3103 (1998).
- ³⁰ I. D. Goepfert, E. F. Schubert, A. Osinsky, P. E. Norris, and N. N. Faleev, *J. Appl. Phys.* **88**, 2030 (2000).
- ³¹ G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, *Phys. Rev.* **B 53**, 9930 (1996).
- ³² A. L. Rosa, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein, G. M. Sipahi, and J. R. Leite, *Phys. Rev.* **B 58**, 15675 (1998).
- ³³ R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3712 (1997); R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3160 (1998).
- ³⁴ S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, and G. M. Sipahi, *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors*, IPAP Conf. Series **1**, 74 (2000).

- ³⁵ J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- ³⁶ M. G. Burt, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 6651 (1992).
- ³⁷ S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, and G. M. Sipahi, to be published.
- ³⁸ G. Harbeke, O. Madelung, and U. Rössler, in *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, edited by O. Madelung, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 17 (Springer-Verlag, Berlin, 1982).
- ³⁹ L. Hedin and J. Lundqvist, *J. Phys. C* **4**, 2064 (1971).
- ⁴⁰ *Strained-Layer Superlattices: Physics*, edited by T. P. Pearsal, Semiconductors and Semimetals, Vol. 32 (Academic, New York, 1990).
- ⁴¹ S. C. Jain, M. Willander, and H. Maes, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 641 (1996).
- ⁴² J. Singh, in *Semiconductor Optoelectronics, Physics and Technology*, McGraw Hill International Editions, New York, 1995.
- ⁴³ L. E. Ramos, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. L. P. Castineira, A. L. Rosa, and J. R. Leite, *Phys. Rev. B* **63**, xxx (2001).
- ⁴⁴ S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand, and R. A. Abram, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, 23 (1999).
- ⁴⁵ V. Lemos, E. Silveira, J. R. Leite, A. Tabata, R. Trentin, L. M. R. Scolfaro, T. Frey, D. J. As, D. Schikora, and K. Lischka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3666 (2000).
- ⁴⁶ A. Tadjer, B. Abbar, M. Rezki, H. Aourag, and M. Certier, *J. Phys. Chem. Solids* **60**, 419 (1999).
- ⁴⁷ A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).
- ⁴⁸ R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, *phys. stat. sol. (b)* **206**, 623 (1998).
- ⁴⁹ The valence band offset in nitride-based hetero-interfaces has been discussed by several authors. See e.g., Ch. Manz, M. Kunzer, H. Obloh, A. Ramakrishnan, and U. Kaufmann, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3993 (1999); S. -H. Wei and A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2719 (1996); G. Martin et al., *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2541 (1996).
- ⁵⁰ M. Marques, L. E. Ramos, L. M. R. Scolfaro, L. K. Teles, and J. R. Leite, *Proc. 25th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, Japan (2000)*-in press.

- ⁵¹ C. A. Parker, J. C. Roberts, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu, and N. A. El-Masry, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2776 (1999); M. J. Reed, N. A. El-Masry, C. A. Parker, J. C. Roberts, and S. M. Bedair, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 4121 (2000).
- ⁵² M. E. Sherwin and T. J. Drummond, *J. Appl. Phys.* **69**, 8423 (1991).
- ⁵³ T. Frey, D. J. As, M. Bartels, A. Pawlis, K. Lischka, A. Tabata, J. R. L. Fernandez, M. T. O. Silva, J. R. Leite, C. Haug, and R. Brenn, *J. Appl. Phys.* **89**, 2631 (2001).
- ⁵⁴ G. Sęk, J. Misiewicz, D. Radziewicz, M. Tlaczala, M. Panek, and R. Korbutowicz, *Vacuum* **50**, 219 (1998).
- ⁵⁵ A. Tabata, L. K. Teles, T. Frey, A. Kharchenko, J. Furthmüller, L. M. R. Scolfaro, D. J. As, D. Schikora, K. Lischka, F. Bechstedt, and J. R. Leite, *Proc. 25th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, Japan (2000)*- in press.
- ⁵⁶ T. Kitamura, S. -H. Cho, Y. Ishida, X. -Q. Shen, H. Nakanishi, S. Chichibu, and H. Okumura, *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors, IPAP Conf. Series 1*, 93 (2000).
- ⁵⁷ G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, E. C. F. da Silva, and A. Levine, *Phys. Rev. B* **57**, 9168 (1998).

TABLE I: Bulk parameters as obtained from *ab initio* calculations performed by us [Ref. 43] and extracted from the literature. Effective masses along [001] direction in units of the free electron mass.

	GaN	InN	GaAs	InAs
γ_1	2.83	3.77	7.65 ^a	19.67 ^a
γ_2	0.85	1.33	2.41 ^a	8.37 ^a
γ_3	1.14	1.60	3.28 ^a	9.29 ^a
Δ (meV)	14	3	0.34 ^a	0.38 ^a
a (Å)	4.55	5.03	5.65 ^a	6.058 ^a
m_{hh}^*	0.85	0.84 ^b	0.34 ^c	0.35 ^c
m_{lh}^*	0.22	0.16 ^b	0.094 ^c	0.026 ^c
m_{so}^*	0.34	0.24 ^b	-	-
E_g^Γ (meV)	3.2	1.9 ^d	1.52 ^c	0.418 ^c
$2/3 D_u$ (eV)	1.6 ^e	1.2 ^f	2 ^a	1.8 ^a
C_{11} (GPa)	293 ^g	187 ^g	112.6 ^c	83.3 ^c
C_{12} (GPa)	159 ^g	125 ^g	57.1 ^c	45.3 ^c

^a Ref. 40 ^b Ref. 44 ^c Ref. 38 ^d Ref. 45 ^e Ref. 19 ^f Ref. 46 ^g Ref. 47

FIG. 1: Valence band structures for undoped and unstrained multiple QWs along high symmetry lines Γ - Z and Γ - Δ , with $d_1 = 200$ Å and $d_2 = 30$ Å. Left: GaN/InN; right: GaAs/In_{0.5}Ga_{0.5}As. Solid (dashed) lines correspond to different (equal) Luttinger parameters for barrier and well materials. The energy zero was taken at the top of the barrier. The labels LH_{*i*}-SO_{*i*} (SO_{*i*}-LH_{*i*}) refer to mixed light and split-off hole states with higher contribution of LH (SO) to the wavefunction at the Γ -point.

FIG. 2: Schematic representation of doped multiple QWs: (a) doping profile in the barrier, and (b) the corresponding potential profile. The Fermi level, E_F , the minimum of the potential depth, V_{min} , and the ionized acceptor level, E_A , are also indicated. The energy zero was placed at the Coulomb potential at the top of the barrier.

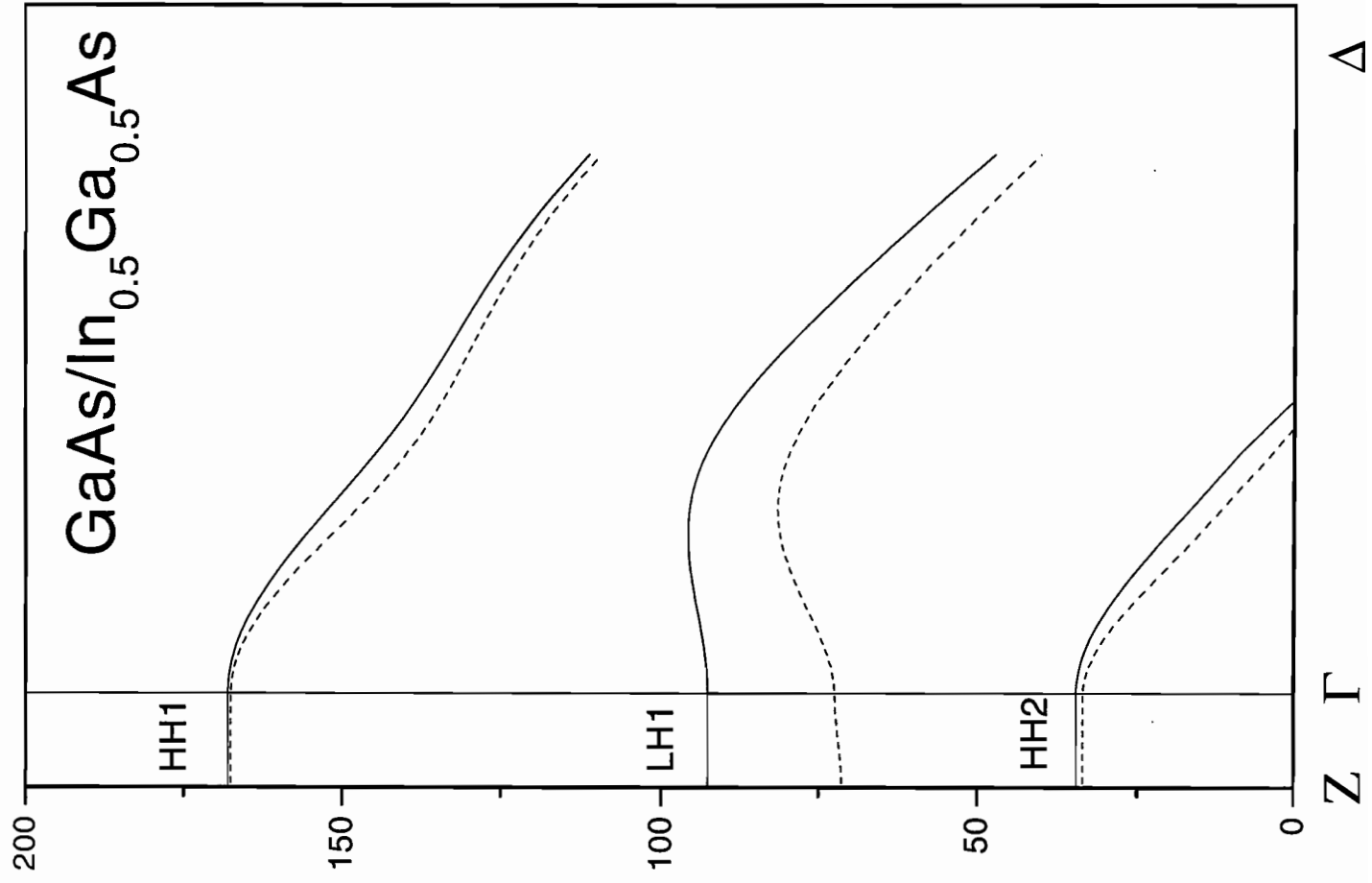
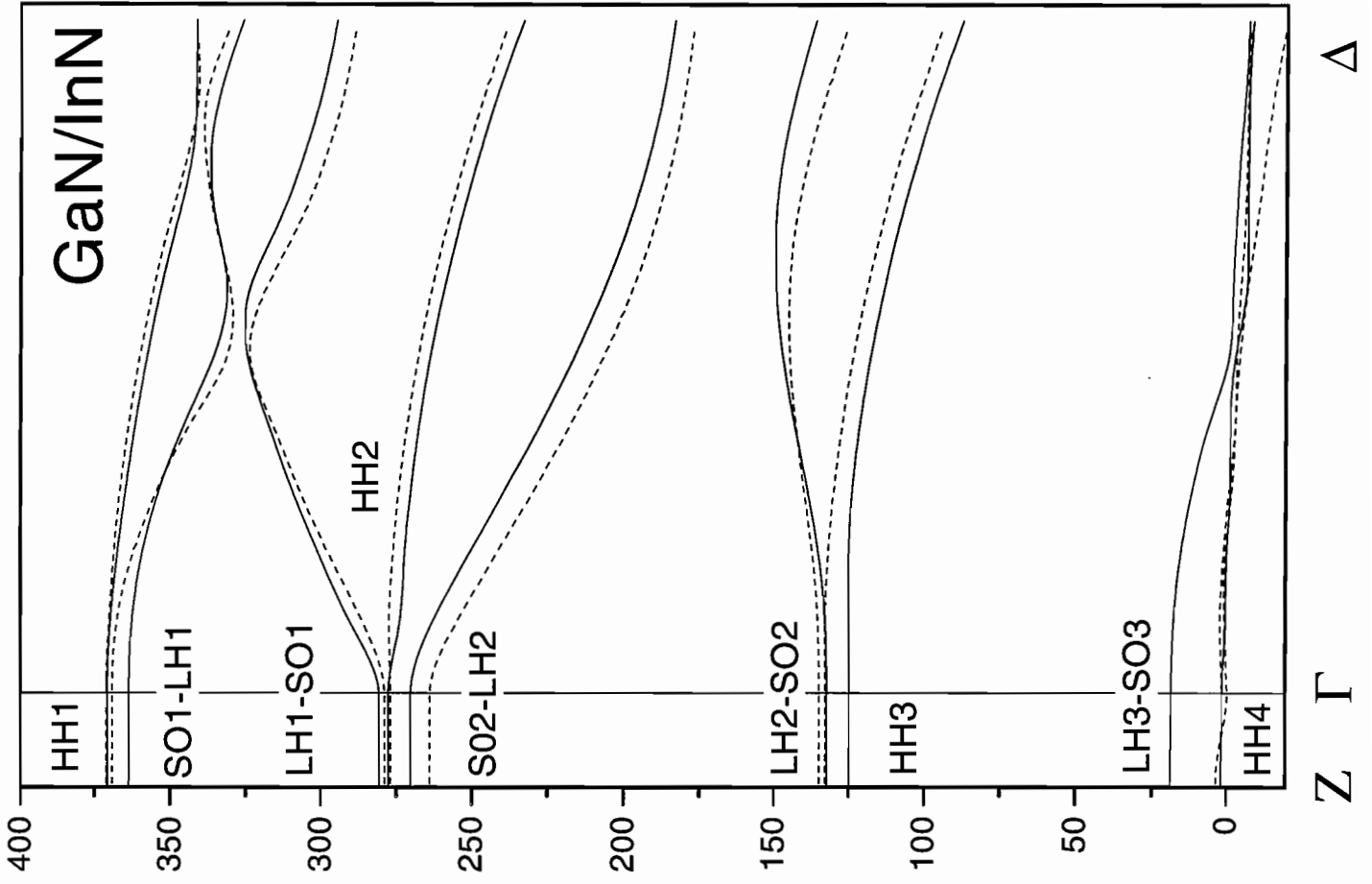
FIG. 3: Lowest seven energy levels, minimum of the potential depth, V_{min} , and Fermi level, E_F , plotted against the doping layer thickness d_p (scale on the bottom), and against the 2D acceptor concentration N_A^{2D} (scale on the top) for strained GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N SLs with $d_1 = 200$ Å and $d_2 = 100$ Å. Energy zero and labels as in Figs. 1 and 2.

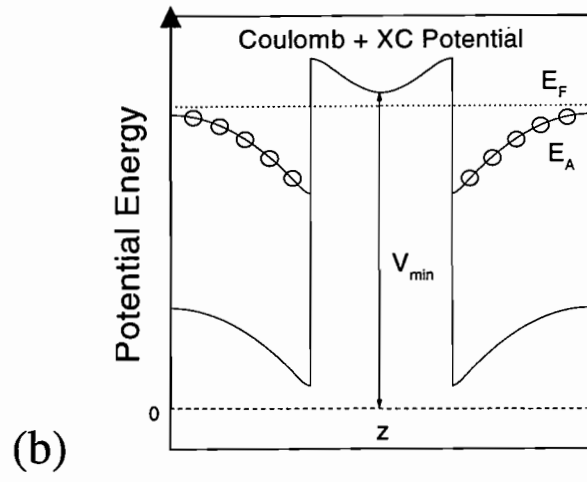
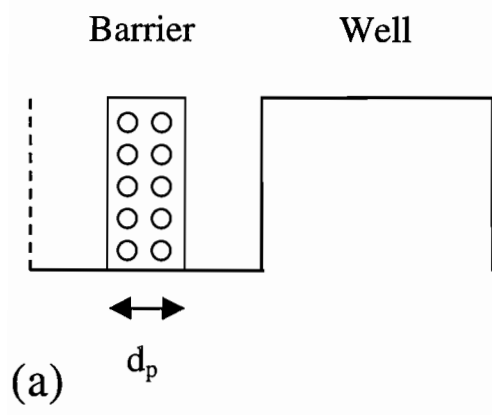
FIG. 4: Contour plot showing the hole density distribution $p(z)$ along the growth axis z for a strained GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N multiple QW, with $d_1 = 200$ Å and $d_2 = 100$ Å. The doping layer thickness d_p is varied from 60 to 200 Å (scale on the left), and the corresponding 2D acceptor concentration N_A^{2D} varied from 6 to $20 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (scale on the right).

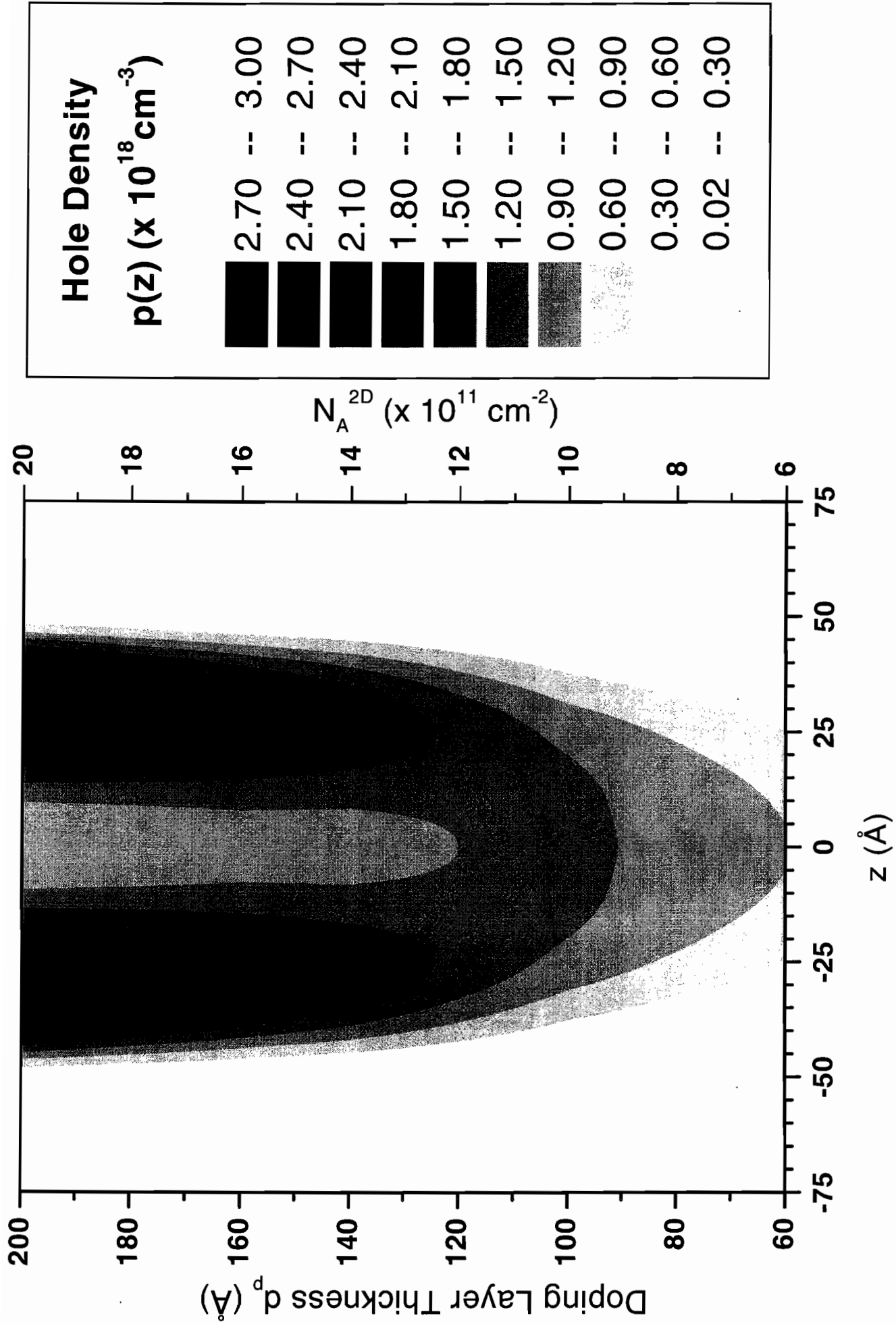
FIG. 5: Exchange-correlation (XC), Coulomb, and total (Coulomb + XC) potentials as felt by heavy-holes for two different fully-doped barrier GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N multiple QWs: (a) $d_1 = 40$ Å and $d_2 = 30$ Å; (b) $d_1 = 200$ Å and $d_2 = 100$ Å. The acceptor doping concentration is $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in both cases. Energy zero as in Fig. 3.

FIG. 6: Valence band structure (left) and potential profiles (right) for an unstrained fully-doped barrier GaAs/In_{0.3}Ga_{0.7}As SL, with $d_1 = 40$ Å and $d_2 = 30$ Å, and $N_A = 1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ($N_A^{2D} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). E_F indicates the Fermi level. Energy zero and labels as in Fig. 3.

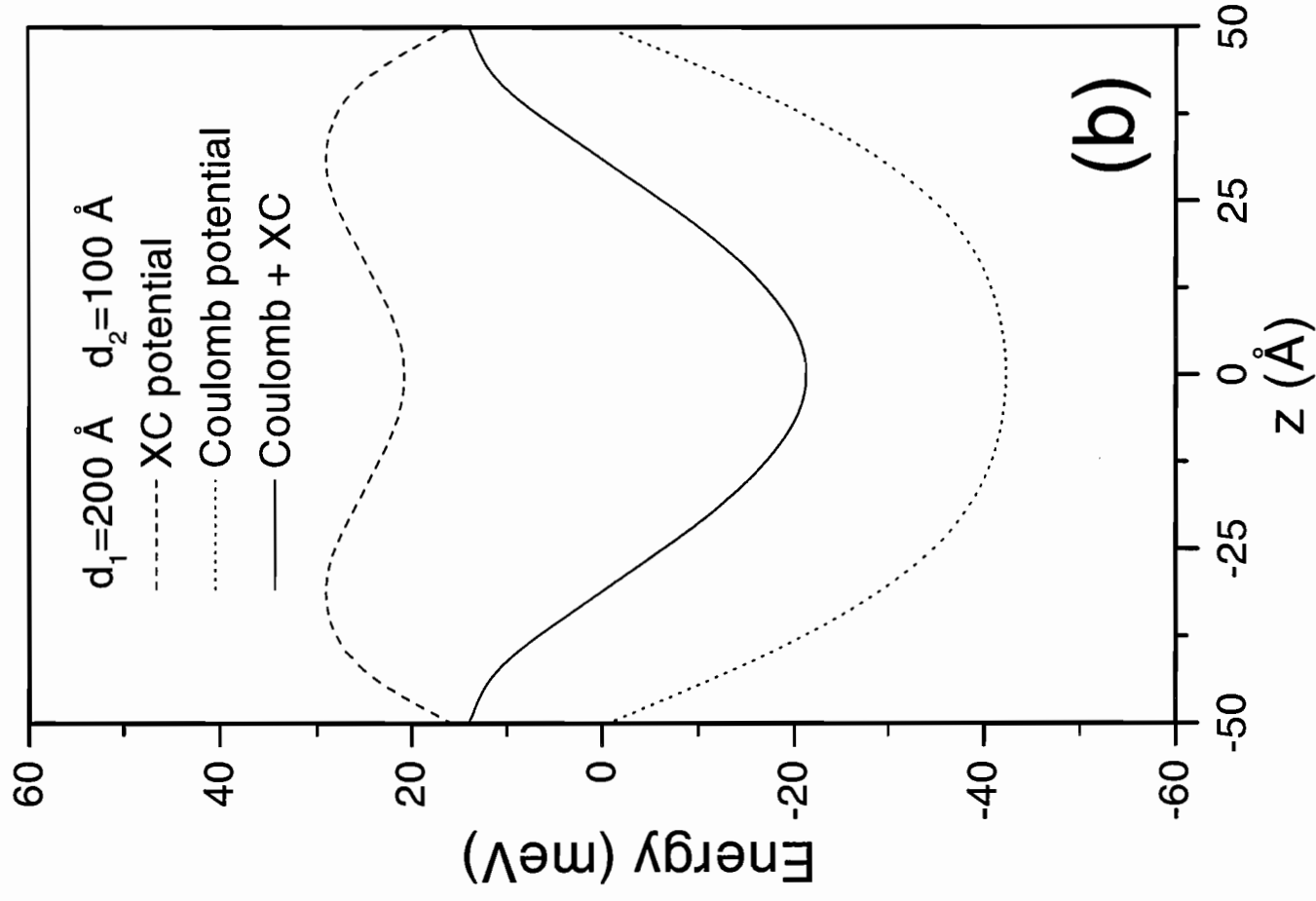
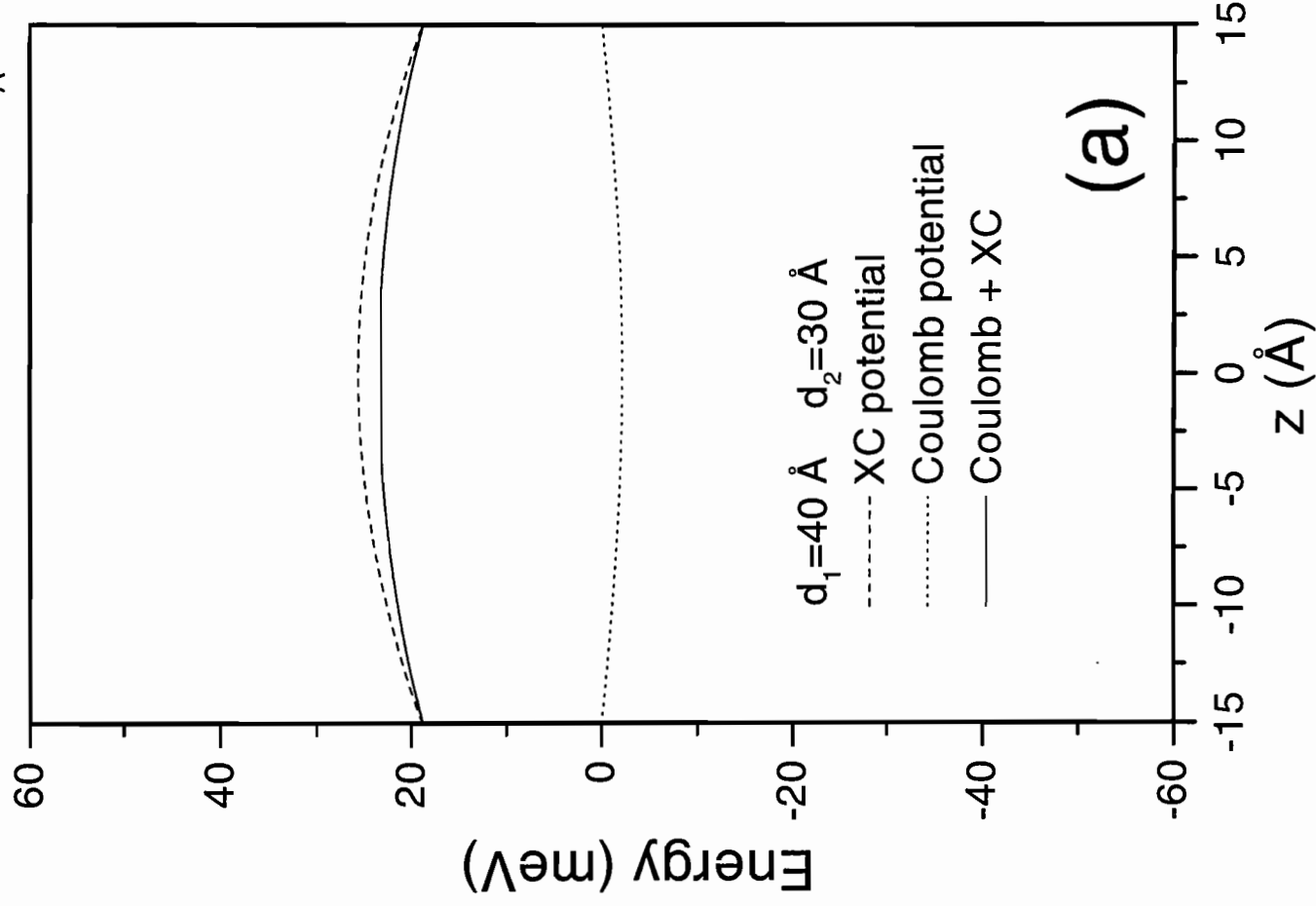
FIG. 7: Valence band structure (left) and potential profiles (right) for a strained fully-doped barrier GaAs/In_{0.3}Ga_{0.7}As SL, with $d_1 = 200 \text{ \AA}$ and $d_2 = 100 \text{ \AA}$, and $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. E_F indicates the Fermi level. Energy zero and labels as in Fig. 3. The split-off hole potential, V_{SO} , has been shifted by Δ_{so} relative to the heavy-hole potential, V_{HH} .



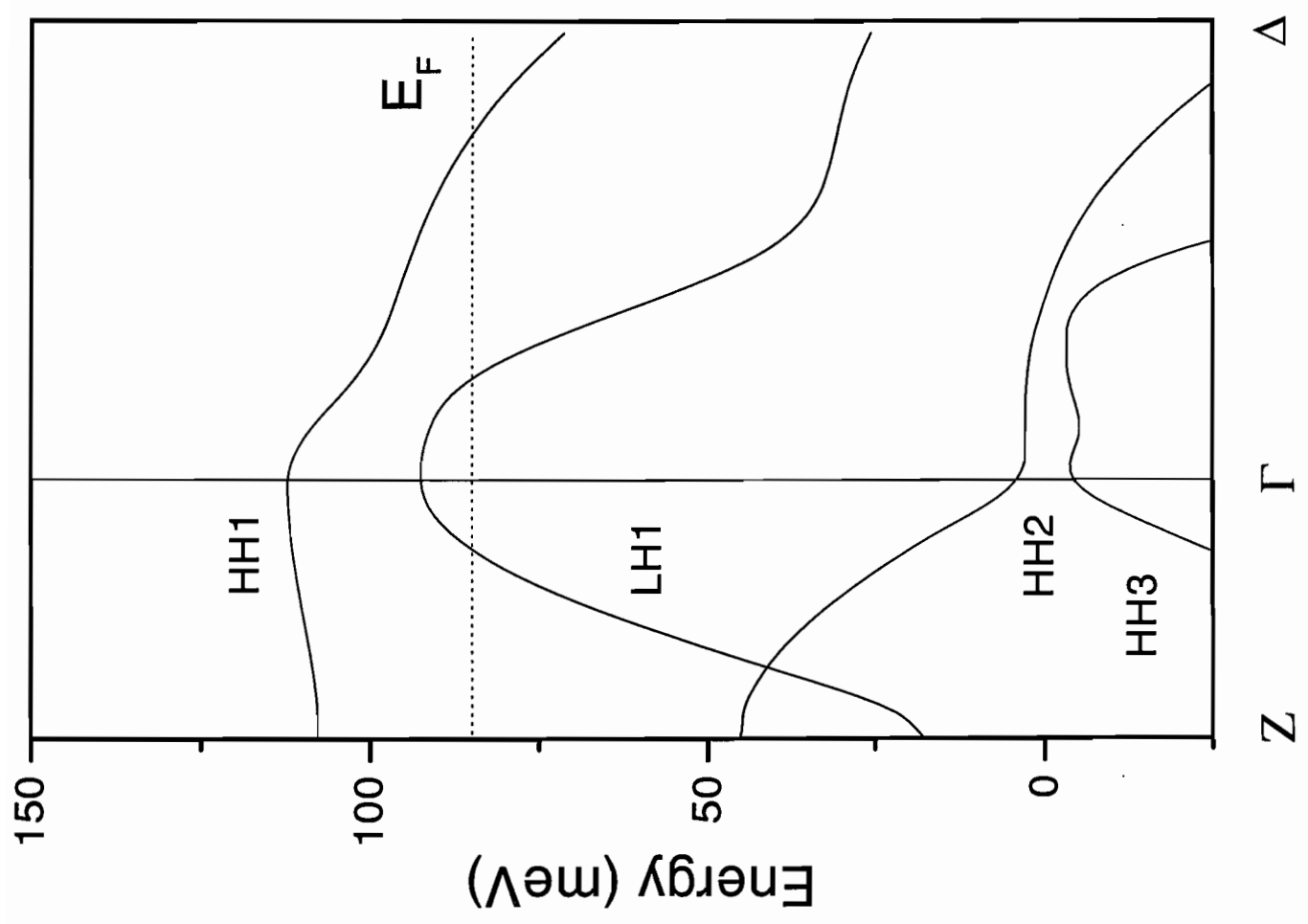
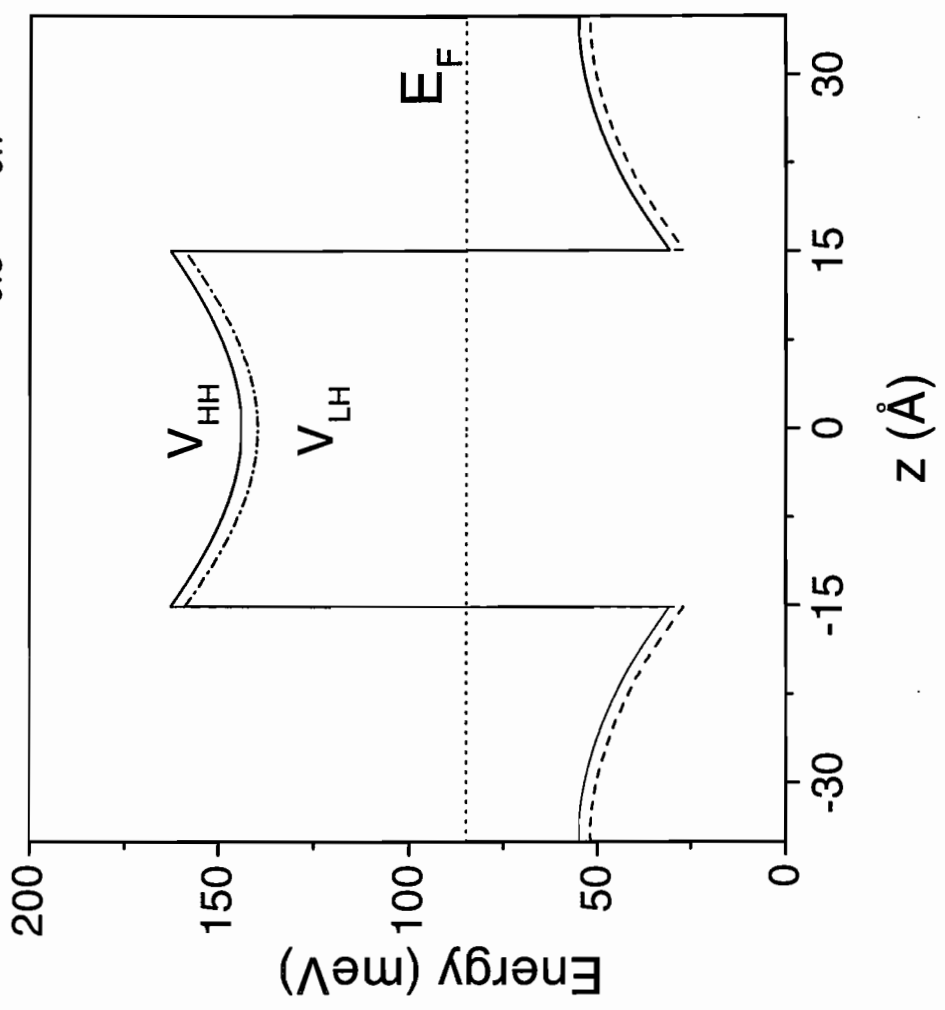


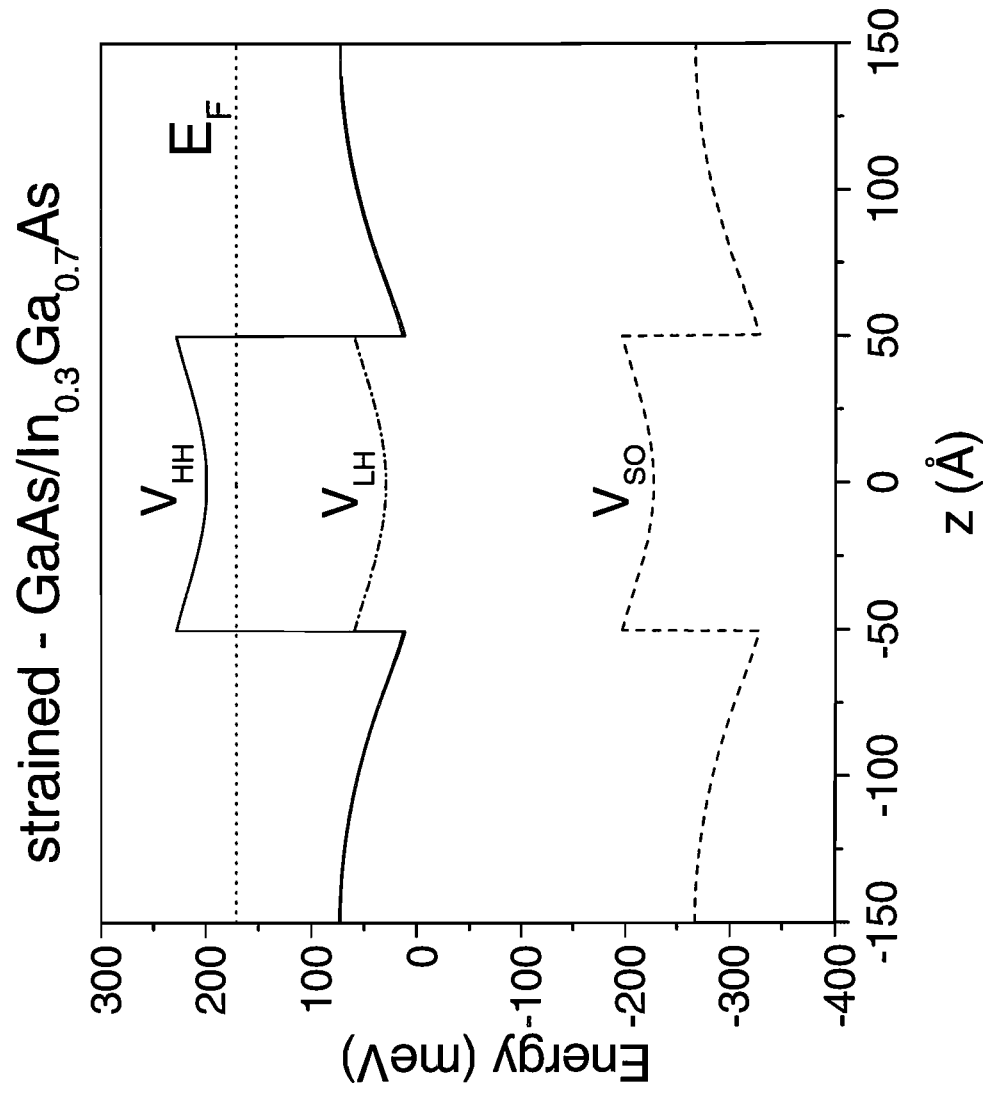
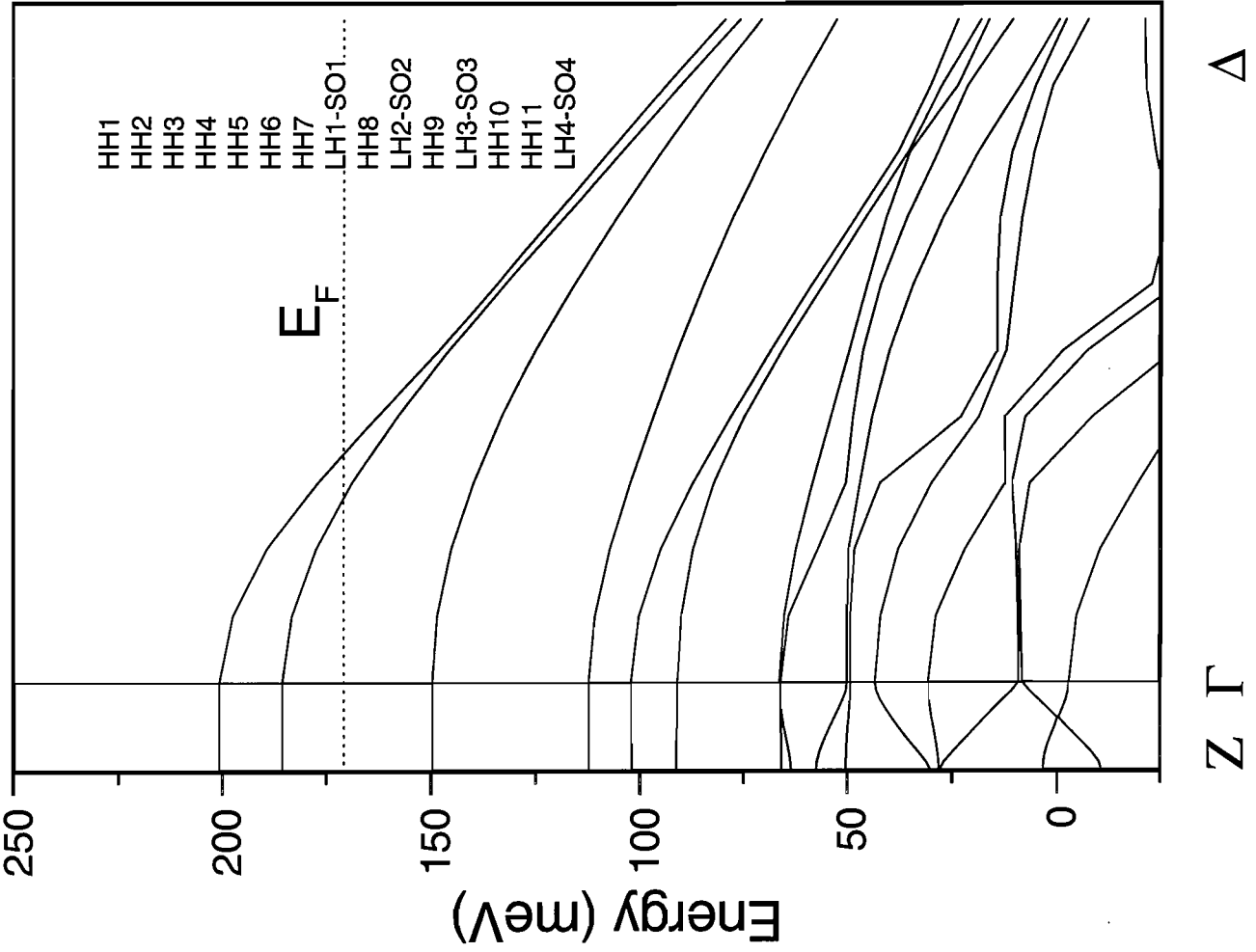


$$N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$



unstrained - GaAs/In_{0.3}Ga_{0.7}As





Anexo 3

" Valence-band structure of undoped and p-doped cubic InGaN/GaN multiple quantum wells."





ELSEVIER

Physica B 302–303 (2001) 106–113

PHYSICA B

www.elsevier.com/locate/physb

Valence-band structure of undoped and p-doped cubic GaN/InGaN multiple quantum wells

S.C.P. Rodrigues, G.M. Sipahi*, L.M.R. Scolfaro, J.R. Leite

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil

Abstract

Valence band structure calculations of cubic GaN/In_xGa_{1-x}N quantum wells and superlattices are presented, in which coupling between the heavy-, light-, and spin-orbit-split-hole bands, strain effects due to lattice mismatch, and the difference in the parameters due to the materials forming the heterostructures are considered. The calculations are performed within a self-consistent approach to the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory by means of a full six-band Luttinger–Kohn (LK) Hamiltonian. The effects of different materials are taken into account explicitly through the inclusion of different sets of Luttinger parameters and by considering the corresponding additional LK matrix elements, not present in the one-material based heterostructures. Our results show that strain effects and the inclusion of the split-off band play a fundamental role in a realistic description of the valence band structure in these systems. Due to the large difference in hole effective masses, for p-doped systems we find that only heavy-hole bands are occupied in the well. © 2001 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

PACS: 73.20.D

Keywords: GaN/InGaN quantum wells; Superlattices; p-doping; Self-consistent $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory

1. Introduction

The III-N semiconductor materials have undergone an enormous development during the past few years. InGaN quantum wells (QWs) are used in blue–green light emitting diodes, laser diodes, and modulation-doped field effect transistors, as the active media for these devices (see for a review, e.g. [1]). Although most of them are fabricated from the hexagonal (wurtzite) group-III nitride heterostructures, the cubic (c) GaN and InGaN

layers are believed to possess potential advantages, as compared to their wurtzite counterparts, such as for the fabrication of laser cavities with cleaved facets [2,3]. This has also motivated several investigations of the structural and electronic properties of the c-nitride layers [4,5]. However, until now very little is known about the valence band structure of GaN/InGaN QWs and superlattices (SLs) in the c-phase. Moreover, for the p-doped structures there are no theoretical calculations reported so far. The p-doping in these nitrides is usually achieved through the introduction of Mg in the layers, which replacing Ga atoms in the lattice leads to a shallow acceptor center at ~ 0.2 eV above the top of the valence band [6].

*Corresponding author. Tel.: +55-11-3818-6982; fax: +55-11-3818-6984.

E-mail address: sipahi@if.usp.br (G.M. Sipahi).

Recent attempts to use C as the acceptor dopant in c-GaN have shown to give rise to hole concentrations as high as 10^{18} cm^{-3} and to be responsible for a shallower acceptor level in the band gap [7].

The $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian has been used for a long time to calculate the band structure and eigenstates of zincblende semiconductors. In this work, we present a new method to calculate electronic and related properties of QW heterostructures based on the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian. This method uses a modification of the self-consistent plane wave $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory developed by us to study p-type planar-doped layers in GaAs and Silicon [8,9]. The method relies on a plane wave expansion of the multiband effective mass equation (EME) of a SL, and uses a modification of the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ kinetic energy term in the Hamiltonian. The Luttinger parameters of the kinetic energy term are calculated by convoluting the Fourier plane-wave coefficients and a step-like function with the values of the Luttinger parameters of the different regions of the heterostructure. By making this, one can use the previous self-consistent method to calculate band structures, charge distributions, self-consistent potentials and wave functions of the system. Exchange-correlation effects within the local density approximation (LDA) are taken into consideration in a consistent way which accounts for the possible occupation of heavy, light, and spin-orbit split-off hole bands [9].

The generalized method presented here is first applied to calculate the valence band structure of undoped and p-doped c-GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ QWs (large period SLs) and SLs. Strain effects due to lattice mismatch between InGaN and GaN are taken into account, and their influence on the hole band structures is analyzed. Due to the very small spin-orbit splitting energies in the III-N materials ($\Delta = 14 \text{ meV}$ for GaN), the inclusion of the split-off hole band is shown to play a fundamental role in the correct description of the confined hole states. The method is then applied to perform self-consistent band structure calculations of p-doped GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ systems for a series of acceptor doping concentrations and profiles, SL periods, and In content, x . Our results constitute the first attempt to establish the limit conditions

and design parameters of InGaN-derived heterostructures aiming to obtain a two-dimensional hole gas (2DHG) and its characteristics in such systems.

2. Theoretical model and method of calculation

The calculations are carried out by solving the 6×6 LK multiband EME which is represented with respect to a basis set of plane waves [8]. We assume an infinite SL of squared wells along $[001]$ direction. The multiband EME is represented with respect to plane waves with wave vectors $K = (2\pi/d)l$ (l integer, d the SL period) equal to reciprocal SL vectors. Rows and columns of the 6×6 LK Hamiltonian refer to the Bloch-type eigenfunctions $|jm_j\mathbf{k}\rangle$ of Γ_8 heavy and light hole bands, and Γ_7 spin-orbit-split-hole band; \mathbf{k} denotes a vector of the first SL Brillouin zone (BZ).

Expanding the EME with respect to plane waves ($z|K\rangle$) means representing this equation with respect to Bloch functions ($\mathbf{x}|jm_j\mathbf{k} + K\mathbf{e}_z\rangle$). For a Bloch-type eigenfunction ($z|E\mathbf{k}\rangle$) of the SL of energy E and wavevector \mathbf{k} the EME takes the form

$$\sum_{j'm'K'} (jm_j\mathbf{k}K|T_s + V_b|j'm'_j\mathbf{k}K') (j'm'_j\mathbf{k}K'|E\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})(jm_j\mathbf{k}K|E\mathbf{k}), \quad (1)$$

where T_s is the effective kinetic energy operator including strain, and V_b the valence-band edge potential operator. For homostructures, the kinetic energy matrix is diagonal with respect to K, K' , and its diagonal elements are given by the LK Hamiltonian with wave vector $\mathbf{k} + K\mathbf{e}_z$. In the extended version of our method presented here, the spatial inhomogeneity of the parameters of the kinetic energy operator is expressed by the occurrence of non-diagonal elements in the kinetic energy matrix with respect to K, K' [10].

If $\gamma_1^{(i)}, \gamma_2^{(i)}, \gamma_3^{(i)}$, and $\Delta^{(i)}$ are the Luttinger parameters and spin-orbit-splitting energy, respectively, of materials $i = 1, 2$, and assuming the SL period $d = d_1 + d_2$ with d_1 being the width of the barrier and d_2 the width of the well, the 6×6 LK matrix corresponding to the effective kinetic

energy operator including strain is written as

$$\left(\begin{array}{cccccc} Q + \varepsilon & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\ S^* & T - \varepsilon & 0 & R & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q - T) - i\sqrt{2}\varepsilon & i\frac{\sqrt{3}}{2}S \\ R^* & 0 & T - \varepsilon & -S & -i\frac{\sqrt{3}}{2}S^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q - T) - i\sqrt{2}\varepsilon \\ 0 & R^* & -S^* & Q + \varepsilon & -i\sqrt{2}R^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q - T) + i\sqrt{2}\varepsilon & i\frac{\sqrt{3}}{2}S & i\sqrt{2}R & \frac{1}{2}(Q + T) - \Delta & 0 \\ i\sqrt{2}R^* & -i\frac{\sqrt{3}}{2}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q - T) + i\sqrt{2}\varepsilon & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{2}(Q + T) - \Delta \end{array} \right) \quad (2)$$

where

$$Q/T = \frac{-\hbar^2}{2m_0d} [(\gamma_1^{(1)}d_1 + \gamma_1^{(2)}d_2) \pm (\gamma_2^{(1)}d_1 + \gamma_2^{(2)}d_2)](k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0d} [(\gamma_1^{(1)}d_1 + \gamma_1^{(2)}d_2) \mp 2(\gamma_2^{(1)}d_1 + \gamma_2^{(2)}d_2)],$$

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

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

for $K = K'$; with $\Delta(z) = (\Delta_1 d_1 + \Delta_2 d_2)/d$, m_0 the free electron mass; and

$$Q/T = -\frac{\hbar^2 i}{2m_0(K - K')d} [1 - \exp i(K - K')d_1] \times \{[(\gamma_1^{(2)} - \gamma_1^{(1)}) \pm (\gamma_2^{(2)} - \gamma_2^{(1)})](k_x^2 + k_y^2) + KK'[(\gamma_1^{(2)} - \gamma_1^{(1)}) \mp 2(\gamma_2^{(2)} - \gamma_2^{(1)})]\},$$

$$S = -\frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{2m_0(K - K')d} (k_x - ik_y)(K + K')(\gamma_3^{(2)} - \gamma_3^{(1)}) \times [1 - \exp i(K - K')d_1],$$

$$R = \frac{i\hbar^2 \sqrt{3}}{2m_0(K - K')} [1 - \exp i(K - K')d_1] \times [(\gamma_2^{(2)} + \gamma_2^{(1)})(k_x^2 - k_y^2) - 2i(\gamma_3^{(2)} + \gamma_3^{(1)})k_x k_y] \quad (4)$$

for $K \neq K'$, with $\Delta(z) = -(i/(K - K')d)[(\Delta_2 - \Delta_1)(1 - \exp i(K - K')d_1)]$. In order to simplify the notation $K \equiv K + k_z$ was used in expressions (3) and (4). The strain operator ε entering matrix (2) is assumed zero in the barrier, while inside the well is given by the Fourier coefficients of the expression $\varepsilon = -\frac{2}{3}D_u \varepsilon_{xx}(2C_{12}/C_{11} + 1)$, where $-\frac{2}{3}D_u$ is the shear deformation potential, C_{12} and C_{11} are the elastic constants, and $\varepsilon_{xx} = (a^{(1)} - a^{(2)})/a^{(2)}$, with $a^{(1)}$ and $a^{(2)}$ the unstrained lattice constants of materials 1 and 2, respectively. The valence-band edge potential matrix $(jm_j \mathbf{k}K | V_b | j'm_j' \mathbf{k}K')$ is diagonal with respect to jm_j , $j'm_j'$, and is set zero in the barrier, while it equals the value of the barrier height inside the well. We considered here only the case for which the well is biaxially compressive strained. The values of Δ , the lattice parameter a , and the effective masses m^* were obtained through ab initio Full-potential Linear Augmented Plane-Wave (FLAPW) band structure calculations [11]. The relations between the effective masses and the Luttinger parameters can be found elsewhere [12]. For $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, the values

Table 1

Bulk parameters for c-GaN and -InN as obtained from ab initio FLAPW band structure calculations performed by us [11] and extracted from the literature (references indicated between brackets). Effective masses along [001] in units of the free electron mass

	GaN	InN
γ_1	2.83	3.77
γ_2	0.85	1.33
γ_3	1.14	1.60
Δ (meV)	14	3
a (Å)	4.55	5.03
m_{hh}^*	0.85	0.84 [13 and references therein]
m_{lh}^*	0.22	0.16 [13]
m_{so}^*	0.34	0.24 [13]
E_g^r (meV) [5]	3.2	1.9
$\frac{2}{3}D_u$ (eV)	1.6 [16]	1.2 [14]
C_{11} (GPa) [15]	293	187
C_{12} (GPa) [15]	159	125

adopted for the parameters were obtained by linear interpolation between the GaN and InN values, except the gap energy which is expressed as a parabolic function $E_g(x) = 3.2 - 2.3x + 1.05x^2$. The bowing parameter $b = 1.05$ was recently determined for the c-In_xGa_{1-x}N alloys [5]. In the calculations, we adopted 40% for the valence-band offset. The parameters used in the calculations are displayed in Table 1.

The self-consistent potentials and charge densities are determined by solving the multiband EME (1) and the Poisson equation given by

$$(jm_j\mathbf{k}K|V_C|j'm'_j\mathbf{k}K') = \delta_{jj'}\delta_{m_jm'_j}(K|V_C|K') \quad (5)$$

with the Fourier coefficients $(K|V_C|K')$ determined as

$$(K|V_C|K') = \frac{-4\pi e^2}{\kappa|K - K'|^2}[(K|N_A|K') - (K|p|K')], \quad (6)$$

where κ is the dielectric constant, and $(K|N_A|K')$ and $(K|p|K')$ are the Fourier coefficients of the ionized acceptor charge density and of the holes charge density, respectively. The latter is determined by

$$(K|p|K') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{\mathbf{v}\mathbf{k} \\ \text{empty} \\ \text{states}}} \sum_{j m_j} \sum_{K''} (j m_j \mathbf{k} K'' | \mathbf{v} \mathbf{k}) \times (\mathbf{v} \mathbf{k} | j m_j \mathbf{k} K'' - K + K'), \quad (7)$$

with Ω being the volume of a bulk unit cell. The exchange-correlation potential contribution within

LDA is taken into account as in our previous works, therefore details can be found elsewhere [8,9].

3. Results and discussion

Fig. 1 shows the valence band structure for unstrained (a) and strained (b) undoped GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N MQWs for which $d_1 = 200$ Å and $d_2 = 30$ Å. Fig. 1(a) also depicts the hole levels for the case in which the split-off band was neglected for comparison (dashed lines). The $\Gamma\Delta(\Gamma Z)$ -line corresponds to wave vectors \mathbf{k} perpendicular (parallel) to the SL axis. The hole levels are labeled according to their main character at Γ . The notation SO*i*-LH*i* (LH*i*-SO*i*) means that the mixing character of band *i* is dominated by SO (LH). Strong non-parabolicities arise in the hole bands along the $\Gamma\Delta$ -line which lead to a remarkable anticrossing behavior. Since the HH- and SO-potentials become deeper (and the LH-potential shallower) as the well is compressive strained, the HH- and SO-derived bands are pulled up towards the well bottom, enhancing the band splitting energies. Since the hole effective masses are much larger for the nitrides when compared to other III-V compounds (such as GaAs and AlGaAs), several states are found confined in the InGaN well. The splitting between HH and SO-LH levels of the same index *i* remains practically constant

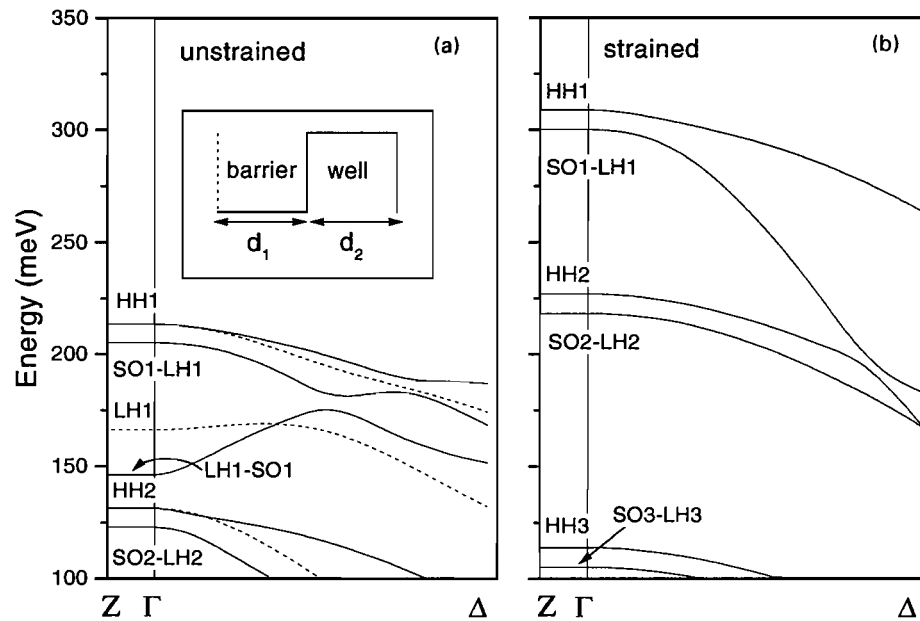


Fig. 1. Valence band structure along symmetry lines for unstrained (a) and strained (b) $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ SLs. Dashed lines in (a) are the hole levels in the case for which the split-off band has been neglected. $d_1 = 200 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$. The zero of energy was taken at the top of the Coulomb potential at the barrier.

and of the order of Δ , also a result of the small value of Δ for the nitrides.

In Fig. 2 are shown valence band structures for unstrained short period $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ SLs with $d_1 = 40 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$, and for two different In contents, $x = 0.3$ and 0.1 . In general, only for barrier widths $d_1 \leq 40 \text{ \AA}$ a SL behavior with interacting wells is observed, independently of the value of x . For hole energy levels approaching the top of the barrier, considerable miniband dispersions along ΓZ are expected once these states lie closer to the continuum. As the LH effective mass is smaller than both the heavy and split-off ones, the LH-derived states which have a larger LH character show more pronounced dispersions. This is also seen for the LH1-SO1 and SO1-LH1 levels in Fig. 2b; although their main character at the Γ -point is of light and split-off, respectively, they present a strong LH and SO mixing which inverts their main character as one moves along the ΓZ -line. For these very short period SLs, we are neglecting strain effects since in this case one might assume the structure is below the critical thickness [7].

The effect of p-doping in GaN/InGaN is analyzed in Fig. 3. There it is depicted the self-consistent hole band structure and potential profiles for an unstrained $\text{GaN}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ short period SL ($d_1 = 40 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$) with doping concentration $N_A = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Contrarily to what is observed for large period SLs, the band bending of the total potential is such that an increasing of the well depth is seen (Fig. 3b). This behavior is caused by the relative contributions of the Coulomb (V_C) and exchange-correlation (V_{XC}) potentials to the total potential of the heterostructure, with the later being more important than the former. In order to stress this result we compare in Fig. 4 the different contributions to the self-consistent heavy-hole potential obtained for p-doped $\text{GaN}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ SLs with $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $d_1 = 40 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$ (Fig. 4a) and $d_1 = 200 \text{ \AA}$, $d_2 = 100 \text{ \AA}$ (Fig. 4b). Clearly for the wider wells V_C plays the major role, in comparison with V_{XC} . Since in the short period SL the equivalent 2D hole concentration ($N_{2D} = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) is a factor of five smaller than in the wide SL

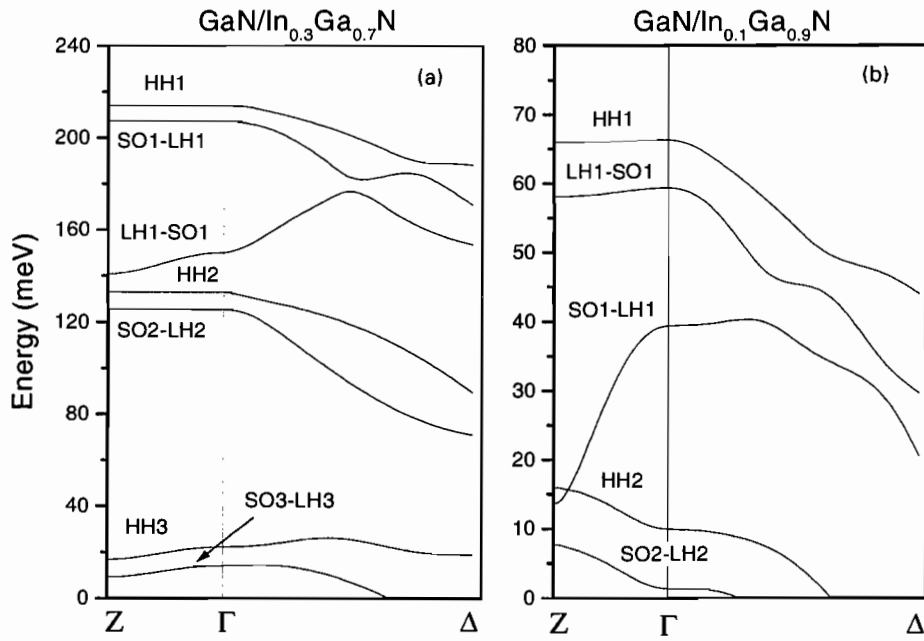


Fig. 2. Valence band structure for an unstrained GaN/In_xGa_{1-x}N SL, with $d_1 = 40 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$: (a) $x = 0.3$ and (b) $x = 0.1$. Zero of energy as in Fig. 1.

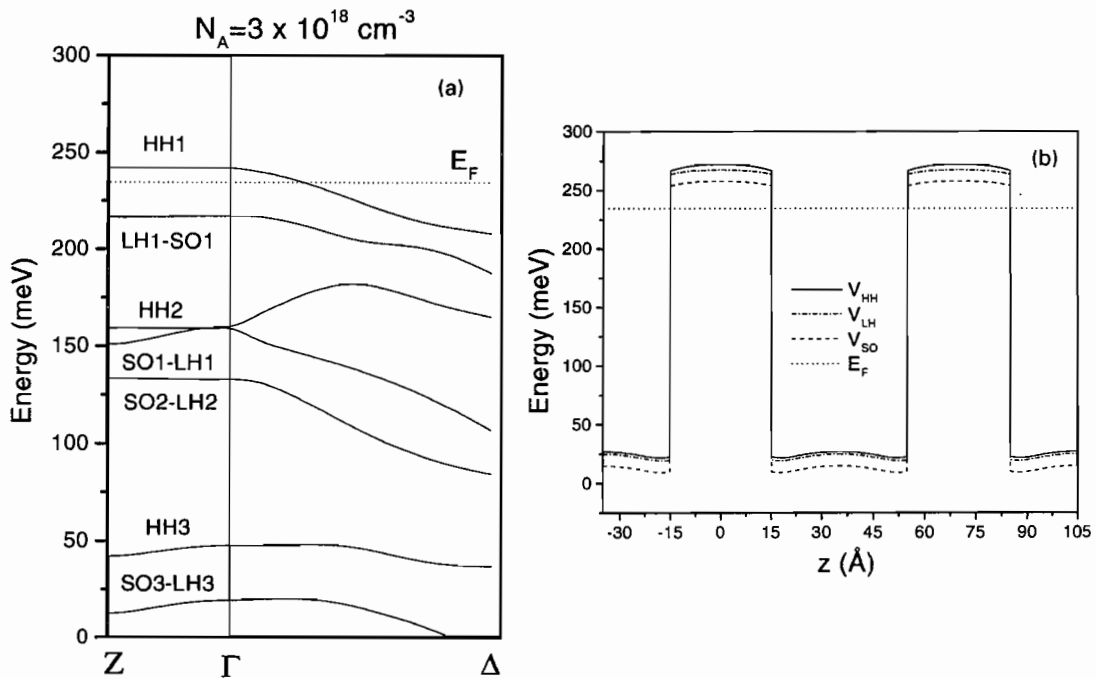


Fig. 3. p-doped unstrained GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N SL with $N_A = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $d_1 = 40 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$: (a) Self-consistent hole band structure, and (b) corresponding hole potentials. Zero of energy as in Fig. 1.

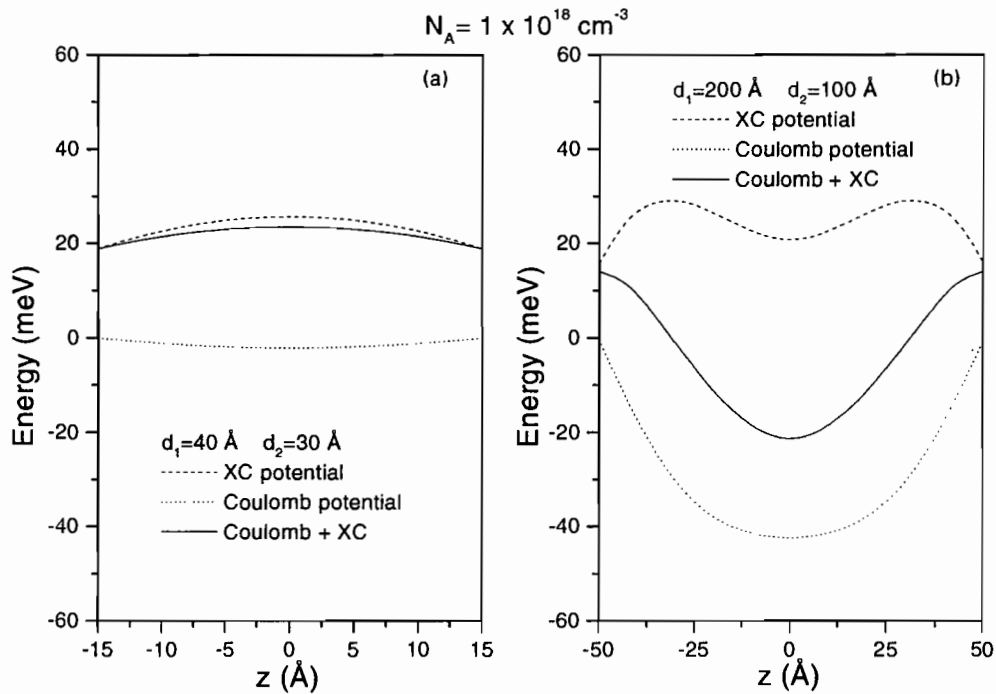


Fig. 4. Different contributions to the self-consistent heavy-hole potential for p-doped GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N SLs with $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. (a) $d_1 = 40 \text{ \AA}$, $d_2 = 30 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 200 \text{ \AA}$, $d_2 = 100 \text{ \AA}$.

($N_{2D} = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), a relative minor importance of V_{XC} would be expected for the later.

It is found that only heavy-hole levels are occupied, even for values of the 2DHG densities as high as $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. This is also due to the high value of the heavy-hole effective mass for the nitrides. It is worth pointing out however that, although only the first HH-level might be occupied the next unoccupied state (LH1-SO1) is found to lie about 25 meV only above the Fermi level (Fig. 3). One could then expect that this unoccupied state may also play a role in e.g. optical measurements involving the confined states in the well.

In summary, our investigations show that the effects of strain and of the inclusion of the spin-orbit interaction play an important role on the description of the valence band structure of undoped and p-doped GaN/InGaN MQWs and SLs. Thus, they have to be taken into account for a realistic modeling of the optical and transport

properties of these systems. Moreover, the exchange-correlation effects within the 2DHG are crucial to explain the different behavior observed as one goes from isolated to strongly interacting QWs.

Acknowledgements

We thank the Brazilian funding agencies FAPESP, CAPES and CNPq for partial support.

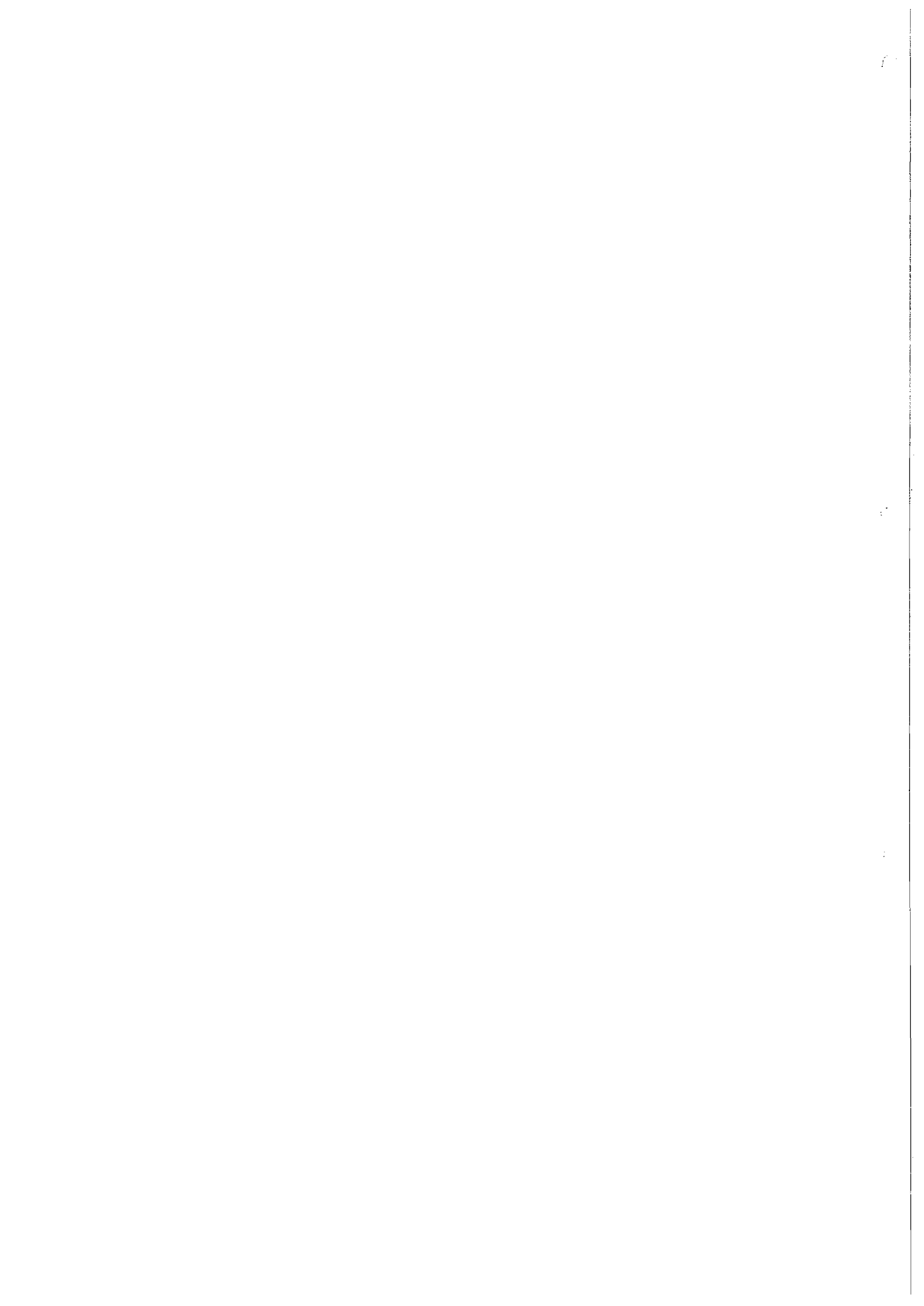
References

- [1] S. Nakamura, *Semicond. Sci. Technol.* 14 (1999) R27.
- [2] T. Frey, D.J. As, D. Schikora, K. Lischka, J. Holst, A. Hoffmann, *Phys. Stat. Sol. (B)* 216 (1999) 259.
- [3] J. Holst, A. Hoffmann, I. Broser, D. Rudloff, F. Bertram, T. Riemann, J. Christen, T. Frey, D.J. As, D. Schikora, K. Lischka, *Phys. Stat. Sol. (B)* 216 (1999) 471.

- [4] E. Silveira, A. Tabata, J.R. Leite, R. Trentin, V. Lemos, T. Frey, D.J. As, D. Schikora, K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999) 3602.
- [5] V. Lemos, E. Silveira, J.R. Leite, A. Tabata, R. Trentin, L.M.R. Scolfaro, T. Frey, D.J. As, D. Schikora, K. Lischka, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 3666.
- [6] S.C. Jain, M. Willander, J. Narayan, R. Van Overstraeten, *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 965.
- [7] D.J. As, private communication.
- [8] G.M. Sipahi, R. Enderlein, L.M.R. Scolfaro, J.R. Leite, *Phys. Rev. B* 53 (1996) 9930.
- [9] A.L. Rosa, L.M.R. Scolfaro, R. Enderlein, G.M. Sipahi, J.R. Leite, *Phys. Rev. B* 58 (1998) 15675.
- [10] S.C.P. Rodrigues, G.M. Sipahi, L.M.R. Scolfaro, J.R. Leite, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000) 1015.
- [11] L.E. Ramos, L.K. Teles, L.M.R. Scolfaro, J.L.P. Castineira, A.L. Rosa, J.R. Leite, *Phys. Rev. B*, in press.
- [12] R. Enderlein, G.M. Sipahi, L.M.R. Scolfaro, J.R. Leite, *Phys. Stat. Sol. (B)* 206 (1998) 623.
- [13] S.K. Pugh, D.J. Dugdale, S. Brand, R.A. Abram, *Semicond. Sci. Technol.* 14 (1999) 23.
- [14] A. Tadjer, B. Abbar, M. Rezki, H. Aourag, M. Certier, *J. Phys. Chem. Solids* 60 (1999) 419.
- [15] A.F. Wright, *J. Appl. Phys.* 82 (1997) 2833.
- [16] W.J. Fan, M.F. Li, T.C. Chong, J.B. Xia, *J. Appl. Phys.* 80 (1996) 3471.

Anexo 4

" Valence band structure of cubic AlGa_N/Ga_N superlattices."



Valence band structure of cubic AlGaN/GaN superlattices

S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro,^{a)} and J. R. Leite

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil

G. M. Sipahi

Laboratory of Integrated Systems, Polytechnic School, Universidade de São Paulo, 05508-900 São Paulo, SP, Brazil

(Received 30 September 1999; accepted for publication 19 December 1999)

The influence of different material parameters, spin-orbit interaction, and strain effects on the valence band structure of cubic AlGaN/GaN superlattices is investigated. One-particle hole state calculations are carried out within the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ theory by means of a full six-band Luttinger-Kohn Hamiltonian in a plane-wave representation. It is shown that the use of distinct values for the Luttinger parameters for the barrier and well regions leads to significant changes in the hole levels, particularly for large Al content. Spin-orbit interaction effects are responsible for strong nonparabolicities due to the light- and split-off-hole bands mixing. Besides, the hole levels are very sensitive to strain effects. Thus, it is demonstrated that these effects cannot be neglected in a realistic description of the valence band structure of these materials. © 2000 American Institute of Physics. [S0003-6951(00)00208-4]

In the present stage of the GaN-based semiconductors technology, manufacturing of GaN/AlGa_xN and InGa_xN/GaN heterostructures, such as multiple quantum wells (MQWs) and superlattices (SLs) has become promising issues for producing light-emitting diodes and QW lasers in the blue-green to ultraviolet wavelength region.¹ Devices have been demonstrated in both, stable hexagonal¹ and cubic (c) phases.^{2,3} From the theoretical point of view, there have been several attempts to investigate the electronic structure of nitride heterostructures, in absence and in the presence of carriers aiming to derive conduction and valence energy subbands as well as to calculate optical and transport properties.⁴⁻⁶ Most of the work has been done for the hexagonal (wurtzite) structures. However, the research efforts towards a more complete understanding of the cubic (zincblende) nitride-derived heterostructures have increased in the past few years.² Band structure calculations of MQWs have been performed by using the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ theory within the effective mass approximation. However, in none of the previously reported works on nitride heterostructures the influence on the energy levels caused by the use of different effective mass parameters for barrier and well materials has been addressed. Analysis of the dependence of the hole levels on spin-orbit interaction and strain effects is also still lacking. Moreover, the SLs systems have deserved no attention so far.

In the present letter we address these issues by performing an investigation of the valence band structure in unstrained and strained Al_xGa_{1-x}N/GaN SLs, in which the alloy compositions and SL period are varied. We extend the method previously developed by us for homostructures,⁷ to treat heterostructures. We show that the use of different values for the material parameters influences the hole levels and consequently affects the description of optical and transport properties of AlGa_xN-based heterostructures, particularly in those involving high Al content. The role played by strain

effects and by the inclusion of the spin-orbit-split band on the valence band structure of the systems is analyzed, regarding their importance with variation of well and barrier thicknesses.

The calculations are carried out by solving the 6×6 Luttinger-Kohn (LK) multiband effective-mass equation (EME) which is represented with respect to a basis set of plane waves.⁷ We assume an infinite SL of squared wells along [001] direction. The multiband EME is represented with respect to plane waves with wavevectors $K=(2\pi/d)l$ (l integer, d the SL period) equal to reciprocal SL vectors. Rows and columns of the 6×6 LK Hamiltonian refer to the Bloch-type eigenfunctions $|j m_j \mathbf{k}\rangle$ of Γ_8 heavy and light hole bands, and Γ_7 spin-orbit-split hole band; \mathbf{k} denotes a vector of the first SL Brillouin zone (BZ). Expanding the EME with respect to plane waves ($z|K\rangle$) means representing this equation with respect to Bloch functions ($\langle x|j m_j \mathbf{k} + K \mathbf{e}_z\rangle$). For a Bloch-type eigenfunction ($z|E \mathbf{k}\rangle$) of the SL of energy E and wave vector \mathbf{k} the EME takes the form

$$\sum_{j' m' \mathbf{k}'} (j m_j \mathbf{k} | T_s + V_b | j' m' \mathbf{k}') (j' m' \mathbf{k}' | E \mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) (j m_j \mathbf{k} | E \mathbf{k}). \quad (1)$$

Here, T_s is the effective kinetic energy operator including strain, and V_b the valence-band edge potential operator. For homostructures, the kinetic energy matrix is diagonal with respect to K, K' , and its diagonal elements are given by the LK Hamiltonian with wavevector $\mathbf{k} + K \mathbf{e}_z$.⁷ In this case, the parameters entering the effective kinetic energy operator are spatially constant. For a heterostructure, where layers of different materials are involved, this is no longer true. If the multiband EME is solved in direct space, these differences are accounted for by nontrivial matching conditions for the multicomponent envelope function and its first derivatives.⁸ In the extended version of our method presented here, the spatial inhomogeneity of the parameters of the kinetic energy

^{a)}Electronic mail: scolfaro@macbeth.if.usp.br

operator is expressed by the occurrence of nondiagonal elements of the kinetic energy matrix with respect to K, K' .

If $\gamma_1^{(i)}$, $\gamma_2^{(i)}$, $\gamma_3^{(i)}$, and $\Delta^{(i)}$ are the Luttinger parameters and spin-orbit-splitting energy, respectively of materials i

$= 1, 2$, and assuming the SL period $d = d_1 + d_2$ with d_1 being the width of the barrier and d_2 the width of the well, the 6×6 LK matrix corresponding to the effective kinetic energy operator including strain is written as

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

where

$$\begin{aligned} Q/T &= -\frac{\hbar^2}{2md} [(\gamma_1^{(1)}d_1 + \gamma_1^{(2)}d_2) \pm (\gamma_2^{(1)}d_1 + \gamma_2^{(2)}d_2)] \\ &\quad \times (k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2 K^2}{2md} [(\gamma_1^{(1)}d_1 + \gamma_1^{(2)}d_2) \\ &\quad \mp 2(\gamma_2^{(1)}d_1 + \gamma_2^{(2)}d_2)], \\ S &= -i\frac{\hbar^2}{md} 2\sqrt{3}(\gamma_3^{(1)}d_1 + \gamma_3^{(2)}d_2)(k_x - ik_y)K, \\ R &= -\frac{\hbar^2}{2md} \sqrt{3}[(\gamma_2^{(1)}d_1 + \gamma_2^{(2)}d_2)(k_x^2 - k_y^2) \\ &\quad - 2i(\gamma_3^{(1)}d_1 + \gamma_3^{(2)}d_2)k_x k_y]. \end{aligned} \quad (3)$$

for $K = K'$; with $\Delta(z) = (\Delta_1 d_1 + \Delta_2 d_2)/d$, m the free electron mass; and

$$\begin{aligned} Q/T &= -\frac{\hbar^2 i}{2m(K - K')d} [1 - \exp i(K - K')d_1] \\ &\quad \times \{[(\gamma_1^{(2)} - \gamma_1^{(1)}) \pm (\gamma_2^{(2)} - \gamma_2^{(1)})] \times (k_x^2 + k_y^2) \\ &\quad + KK'[(\gamma_1^{(2)} - \gamma_1^{(1)}) \mp 2(\gamma_2^{(2)} - \gamma_2^{(1)})]\}, \\ S &= -\frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{2m(K - K')d} (k_x - ik_y)(K + K')(\gamma_3^{(2)} - \gamma_3^{(1)}) \\ &\quad \times [1 - \exp i(K - K')d_1], \\ R &= -\frac{i\hbar^2}{2m(K - K')d} \sqrt{3} [1 - \exp i(K - K')d_1] \\ &\quad \times [(\gamma_2^{(2)} - \gamma_2^{(1)})(k_x^2 - k_y^2) - 2i(\gamma_3^{(2)} - \gamma_3^{(1)})k_x k_y] \end{aligned} \quad (4)$$

for $K \neq K'$, with

$$\Delta(z) = \frac{-i}{(K - K')d} (\Delta_2 - \Delta_1) [1 - \exp i(K - K')d_1].$$

In order to simplify the notation $K \equiv K + k_z$ was used in expressions (3) and (4). The strain operator ϵ entering matrix (2) is assumed zero in the barrier, while inside the well is given by the Fourier coefficients of the expression $\epsilon = -2/3 D_u \epsilon_{xx} (2C_{12}/C_{11} + 1)$, where D_u is the shear deformation potential, C_{12} and C_{11} are the elastic constants, and $\epsilon_{xx} = (a^{(1)} - a^{(2)})/a^{(2)}$, with $a^{(1)}$ and $a^{(2)}$ the unstrained lattice constants of materials 1 and 2, respectively. The valence-band edge potential matrix $(jm_j, kK | V_b | j'm_j', kK')$ is diagonal with respect to $jm_j, j'm_j'$, and is set zero inside the well, while it equals the value of the barrier height in the barrier region. We considered here only the case for which the well is subject to a biaxial compressive strain. The bulk parameters needed for solving the EME are shown in Table I. The values of Δ , the lattice parameter a , and the effective masses m^* for the binary AlN and GaN compounds were obtained through *ab initio* fully relativistic linear augmented plane-wave (LAPW) band structure calculations, and are in good agreement with results reported in the literature.^{9,10} The relations between the effective masses and the Luttinger parameters may be found elsewhere.¹¹ For D_u, C_{11} , and C_{12} of GaN we used the values 7.7 eV, 293 and 159 GPa.^{6,12} For the alloy, the values adopted for γ_i 's, Δ , and a were obtained by linear interpolation between the bulk binary values. In the calculations, we adopted 30% for the valence-band offset. The values 6.0 and 3.2 eV were assumed for the gap energy at Γ of *c*-AlN and *c*-GaN, respectively.

The dependence of the valence band structure on the use of different Luttinger parameters for barrier and well mate-

TABLE I. Bulk parameters as obtained from our *ab initio* LAPW calculations. Effective masses along [001] in units of the free electron mass. Δ (meV); a (\AA).

	γ_1	γ_2	γ_3	Δ	a	m_{hh}^*	m_{lh}^*	m_{so}^*
AlN	1.57	0.36	0.60	19	4.40	1.29	0.41	0.60
GaN	2.83	0.85	1.14	14	4.55	0.85	0.22	0.34

rials is shown in Fig. 1 for unstrained $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}$. The $\Gamma\Delta$ -line corresponds to wave vectors k_x perpendicular to the SL axis.⁷ The hole levels are labeled according to their main character at Γ . The notation $SOi-LHi$ ($LHi-SOi$) means that the mixing character of band i is dominated by $SO(LH)$. As seen in Fig. 1, the hole levels change when different material parameters are used. These changes (not shown) are found to increase with the increase in the Al content, as expected. This is a direct consequence of the difference between the Luttinger parameters of GaN and AlN (see Table I). For SL barriers as wide as 100 \AA , the wells are found to be isolated. As the SL period is decreased, miniband dispersion along ΓZ starts to occur, characteristic of interacting wells. However, due to the high values of the heavy- and split-off-hole effective masses, for confined levels significant dispersion is seen only in the case of light-hole derived bands. On the other hand, a noticeable dispersion is observed for bands which lie close to the top of the barrier.

The remarkable effect of the inclusion of the spin-orbit interaction can be seen in Fig. 2(a) for an unstrained $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ SL. Dashed lines correspond to band structures obtained by setting $\Delta = \infty$ (spin-orbit interaction neglected). Due to the small values of the spin-splitting energies for the nitrides, the inclusion of the spin-orbit-split band plays a fundamental role in the realistic description of the SL valence band structure. The light- and split-off-hole bands are coupled even at the Γ point, and their coupling is responsible for two main effects: (i) the mixed $LH1-SO1$ hole state is pushed up closer to the $HH1$ state, diminishing the splitting between the two lowest levels; (ii) strong non-

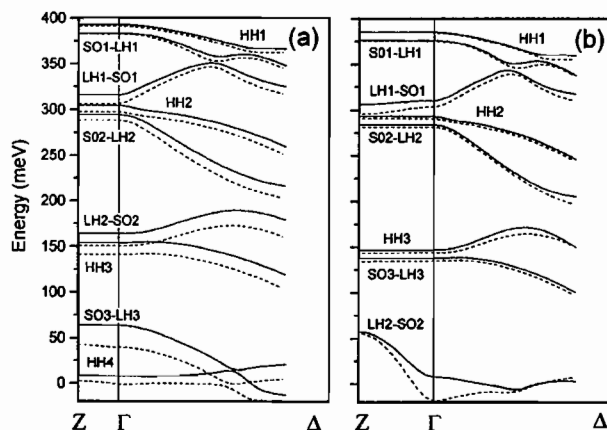


FIG. 1. Valence-band structure along ΓZ and $\Gamma\Delta$ lines for an unstrained $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}$ SL. (a) $d_1 = 100 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$ and (b) $d_1 = d_2 = 30 \text{ \AA}$. Dashed (solid) lines correspond to equal (different) Luttinger parameters for barrier and well materials. Well depth equals to 420 meV. The energy zero was taken at the top of the barrier.

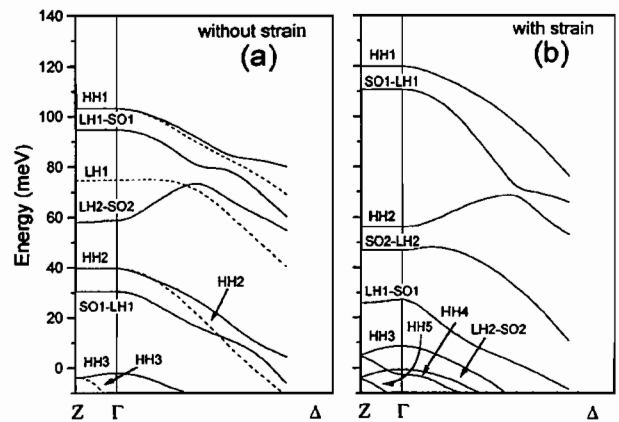


FIG. 2. Valence-band structure of a $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ SL with $d_1 = 100 \text{ \AA}$ and $d_2 = 30 \text{ \AA}$. (a) without strain and (b) with strain. It is also shown in (a) calculations including (solid line) and neglecting (dashed line) spin-orbit interaction. Well depth equals 126 meV for the unstrained SL. The energy zero as in Fig. 1.

parabolicities arise in the valence subbands along the $\Gamma\Delta$ line which lead to a remarkable anticrossing behavior.

The effects of strain are emphasized in Fig. 2(b) by comparing the solid lines in parts (a) and (b) of the figure. As the HH - and SO -hole potentials become deeper (and the LH -hole potential shallower) with strain, the HH - and SO -derived bands are pulled up towards the well bottom, enhancing the band splitting energies. Although the magnitude of the effective strain could be smaller if we consider also that the barriers might be (tensile) strained for the short-period SLs, these effects cannot be neglected in a realistic description of the system. Moreover, we may expect that these effects will be even more important in, e.g., InGaN/GaN SLs due to the larger lattice mismatch and the very small value of Δ for InN ($\approx 5 \text{ meV}$).

In summary, our investigations show that the effects of strain, use of different effective mass parameters for barrier and well materials, and spin-orbit interaction play an important role on the description of the valence band structure of $c\text{-AlGaIn}/\text{GaN}$ superlattices. Thus, they have to be taken into account for a realistic modeling of the optical and transport properties of these systems. The method presented here has shown to be a proper and efficient way to treat such systems.

¹ See, e.g., S. Nakamura, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, R27 (1999).

² J. W. Orton and C. T. Foxon, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 1 (1998).

³ H. Yang, L. X. Zheng, J. B. Li, X. J. Wang, D. P. Xu, Y. T. Wang, X. W. Hu, and P. D. Han, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2498 (1999).

⁴ L. Hsu and W. Walukiewicz, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2405 (1999).

⁵ Y. M. Sirenko, J. B. Jeon, B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, M. A. Strocio, and G. J. Iafrate, *Phys. Rev. B* **55**, 4360 (1997).

⁶ W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong, and J. B. Xia, *J. Appl. Phys.* **80**, 3471 (1996).

⁷ G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, *Phys. Rev. B* **53**, 9930 (1996); A. L. Rosa, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein, G. M. Sipahi, and J. R. Leite, *Phys. Rev. B* **58**, 15675 (1998).

⁸ M. G. Burt, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 6651 (1992).

⁹ See e.g., S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand, and R. A. Abram, *Semicond. Sci. Technol.* **14**, 23 (1999), and references therein.

¹⁰ C. Stampf and C. G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **59**, 5521 (1999).

¹¹ R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro, and J. R. Leite, *Phys. Status Solidi B* **206**, 623 (1998).

¹² A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).

Anexo 5

" Cubic AlGa_N/Ga_N and Ga_N/InGa_N heterostructures: effects of p-type doping."

Cubic AlGaN/GaN and GaN/InGaN heterostructures: effects of p-type doping

S. C. P. RODRIGUES*, G. M. SIPAHI, L. M. R. SCOLFARO and J. R. LEITE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil

The effects of p-type doping in cubic AlGaN/GaN and GaN/InGaN heterostructures, such as multiple quantum wells and superlattices are studied through band structure calculations within the effective-mass and the local density functional approximations. The multi-band effective mass equations, within the Luttinger-Kohn model, are solved self-consistently with the Poisson equation by adopting a plane-wave representation. We present results for the hole band structures and different hole potentials as functions of the acceptor doping concentration and superlattice period. Strain effects due to lattice mismatch, and their influence on the hole bands are analyzed. It is shown that a two-dimensional hole gas (2DHG) may occur if appropriate design parameters for well- and barrier-widths are used. The inclusion of the heavy, light, and split-off hole bands, as well as exchange-correlation effects within the 2DHG in the self-consistent calculation of the valence band structure is found to play a fundamental role in a realistic description of the p-doped nitride heterostructures.

KEYWORDS: cubic AlGaN, InGaN, GaN, quantum wells, valence band structure, k.p method

1. Introduction

There has been increasing interest in group-III nitride semiconductor heterostructures, such as AlGaN/GaN and GaN/InGaN quantum wells (QWs) due to their important applications in high-power microelectronic and blue-green-UV optoelectronic devices as well as modulation-doped field effect transistors.^{1,2)} Although most of the progress achieved so far is based on the hexagonal (wurtzite) III-N materials, the cubic (c) metastable-phase layers are believed to possess potential advantages arising as promising alternatives for similar applications.³⁻⁵⁾ Controlled p-type doping of GaN, AlGaN, and InGaN layers are of crucial importance for the performance of some electronic and optoelectronic devices as well as for transport-based devices. However, this has been difficulted by the deep nature of the acceptors in these nitride structures. Among the most common p-type dopants there are Mg, C, and Be, which are found to introduce an acceptor level around 0.1-0.2 eV above the top of the valence band in the bulk materials.⁶⁾ Several attempts have been made trying to enhance the acceptor doping efficiency, for example by using multiple QWs and superlattices (SLs) of alternate layers of GaN and AlGaN or InGaN. In wurtzite structures these techniques have shown to lower the acceptor ionization energy, increasing the p-type conductivity by several orders of magnitude.^{7,8)} This also provided evidence for the formation of a two-dimensional hole gas (2DHG) in the well regions of the heterostructures, which is induced by piezoelectric (PZ) and spontaneous polarization effects. Contrary to hexagonal material systems, in p-doped cubic structures a 2DHG may arise, even in the absence of PZ fields, provided adequate design parameters for the heterostructures are employed.

In the present work we investigate the effects of p-type doping and of the occurrence of a 2DHG in cubic Al_xGa_{1-x}N/GaN and GaN/In_xGa_{1-x}N multiple QWs and SLs, by carrying out self-consistent band structure calculations within a multi-band 6x6 Luttinger-Kohn (LK) model in which the heavy, light, and spin-orbit split-off hole bands are included. We analyze the

dependence of the hole sub-bands and of the different holes potentials on SL period and acceptor doping concentration. Strain effects due to lattice mismatch, and their influence on the hole sub-bands and potentials are analyzed. The results shown here constitute the first attempt to investigate the limit conditions for the formation of a 2DHG and its physical features in cubic group-III nitride heterostructures.

2. Method of Calculation

We adopted in this work a supercell model approach that comprises the QW and the barrier regions. The method is an extension of a previous version developed to study delta-doping structures in the GaAs and Si lattices.⁹⁻¹¹⁾ The calculations were carried out by self-consistently solving the 6x6 LK multiband effective mass equation (EME) and the Poisson equation for the charge distribution. We assume an infinite SL of squared wells along [001] direction. The multiband EME is represented with respect to plane waves with wavevectors $K=(2\pi/d)l$ (l integer, d SL period) equal to reciprocal SL vectors. Rows and columns of the 6x6 LK Hamiltonian refer to the Bloch-type eigenfunctions $|jm_j\mathbf{k}\rangle$ of the Γ_8 heavy and light hole bands, and Γ_7 spin-orbit-split hole band; \mathbf{k} denotes a vector of the first SL Brillouin zone (BZ). Expanding the EME with respect to plane waves ($z|K\rangle$) means representing this equation with respect to Bloch functions ($\mathbf{x}|jm_j\mathbf{k}+K\mathbf{e}_z\rangle$). For a Bloch-type eigenfunction ($z|E\mathbf{k}\rangle$) of the SL of energy E and wavevector \mathbf{k} the EME takes the form

$$\sum_{j'm'\mathbf{k}'} (jm_j\mathbf{k}K|T+T_S+V_A+V_H+V_{HET}+V_{XC}|j'm'\mathbf{k}K'), (1)$$

where T is the kinetic energy term, generalized for a heterostructure,¹²⁾ T_S is the strain energy term originated from the lattice mismatch, V_{HET} is the potential that arises from the band offset at the interfaces, V_{XC} is the exchange-correlation potential, V_A is the Coulomb potential generated by the acceptors in the doping layer and V_H is the one-particle potential felt by the carrier from the carriers charge density. The latter is obtained by means of

*E-mail:srodrigu@macbeth.if.usp.br

the self-consistent procedure, where the Poisson equation stands, in the reciprocal space as

$$(jm_j K|V_{II} + V_A|j'm'_j K') = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon|K - K'|^2} (K|p(z) - N_A|K') \delta_{j'j} \delta_{m'_j m_j}, \quad (2)$$

with N_A being the acceptor doping concentration and $p(z)$ the holes charge distribution which is given by

$$p(z) = \sum_{jm_j, k \in \text{empty}} |(zS|jm_j \mathbf{k})|^2. \quad (3)$$

The different effective-mass parameters of well and barrier regions are properly taken into account in T , by using a generalization of the LK Hamiltonian.¹²⁾ In order to calculate the strain we considered a strain operator (ϵ) that takes the value $\epsilon = 0$ in the barrier, and the value $\epsilon = -2/3 D_u \epsilon_{xx} (1 + 2C_{12}/C_{11})$ inside the well, where $2/3 D_u$ is the shear deformation potential, C_{11} and C_{12} are the elastic constants and $\epsilon_{xx} = (a_b - a_w)/a_w$ the lattice mismatch, with a_b and a_w being the lattice parameters of the unstrained barrier and well, respectively. With these definitions we can calculate the Fourier coefficients of the strain operator $(K|\epsilon(z)|K')$ and express the strain term of the Hamiltonian T_S as follows

$$(jm_j K|T_S|j'm'_j K') = (K|\epsilon(z)|K') M_{jm_j}^{j'm'_j}, \quad (4)$$

where $M_{jm_j}^{j'm'_j}$ is defined as

$$M_{jm_j}^{j'm'_j} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Exchange-correlation effects were taken into account in the local density approximation, by adopting a parameterized expression for an inhomogeneous hole gas, applying the exchange interaction only for identical particles and the correlation for all of them.⁹⁻¹¹⁾

The band shift potential (V_{HET}) is diagonal with respect to $jm_j, j'm'_j$, and is defined by

$$(jm_j K|V_{HET}|j'm'_j K') = (K|V_{HET}|K') \delta_{j'j} \delta_{m'_j m_j}, \quad (6)$$

where $(K|V_{HET}|K')$ are the Fourier coefficients of $V_{HET}(K'-K)$. In Table I the bulk parameters used in the calculations are presented. The results shown in the table were obtained from *ab initio* "Linear Augmented Plane-Wave" (LAPW) band structure calculations by us¹⁵⁾ unless mentioned otherwise. For the alloys, all the parameters were interpolated linearly, except the energy gap of InGaN, for which we adopted a parabolic dependence on x , with a bowing parameter of 1.05 eV.¹⁵⁾

3. Results and Discussion

The results presented here for the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ and $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ heterostructures were obtained for a fixed value of the alloy composition, $x=0.3$. A valence-band offset of 40% was used in both systems. We assume

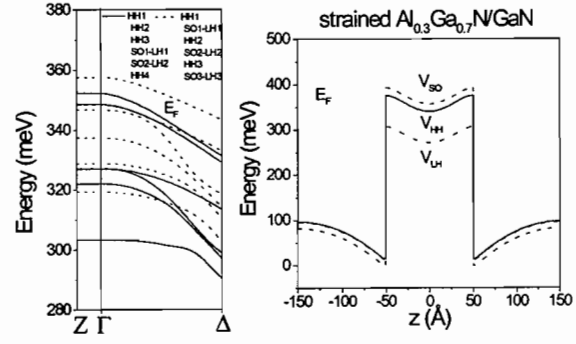


Fig.1 – Fully barrier-doped AlGa_{0.3}N/GaN multiple QW, $L_w = 100\text{\AA}$, $L_b = 200\text{\AA}$, compressive strained, $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$: (left) Hole sub-bands along SL symmetry lines ΓZ (growth-axis) and Δ (perpendicular to growth-axis). Hole levels for undoped multiple QW (dashed lines) are also shown for comparison. (right) HH, LH, and SO hole potential profiles. The Fermi level is indicated by E_F . The zero of the energy was placed at the top of the Coulomb potential at the barrier. Energy levels ordering is decrescent.

in the calculations that the acceptor level is located at about 0.2 eV above the top of the valence band in bulk GaN and AlGa_{0.3}N.

Fig. 1 shows the self-consistent hole sub-bands and potential profiles obtained for a fully *p*-doped barrier of an $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ multiple QW, compressive strained, for which $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, well-width (L_w) of 100 Å and barrier-width (L_b) of 200 Å were considered. The valence band levels for an equivalent, but undoped structure are also shown (dashed lines) for comparison. The hole levels are labeled according to their heavy (HH), light (LH), or split-off (SO) main character at the center of the SL BZ (Γ -point). Clearly, for this large period SL, the wells are isolated, no dispersion is seen along the ΓZ -direction. Since the spin-orbit splitting in the nitrides is very small ($\Delta \approx 14 \text{ meV}$ for GaN), the LH and SO levels are coupled already at the Γ -point. Only the first two heavy-hole states are found occupied and lying below the

Table I. Bulk parameters as obtained from *ab initio* calculations performed by us [Ref. 13] and extracted from the literature. Effective masses along [001] in units of the free electron mass.

	AlN	GaN	InN
γ_1	1.57	2.83	3.77
γ_2	0.36	0.85	1.33
γ_3	0.60	1.14	1.60
Δ (meV)	19	14	3
a (Å)	4.40	4.55	5.03
m_{hh}^*	1.29	0.85	0.84 ¹⁴⁾
m_{lh}^*	0.41	0.22	0.16 ¹⁴⁾
m_{so}^*	0.60	0.34	0.24 ¹⁴⁾
E_g^Γ (meV)	6.0	3.2	1.9 ¹⁵⁾
$2/3 D_u$ (eV)	1.5 ¹⁶⁾	1.6 ¹⁷⁾	1.2 ¹⁸⁾
C_{11} (GPa) ¹⁹⁾	304	293	187
C_{12} (GPa) ¹⁹⁾	160	159	125

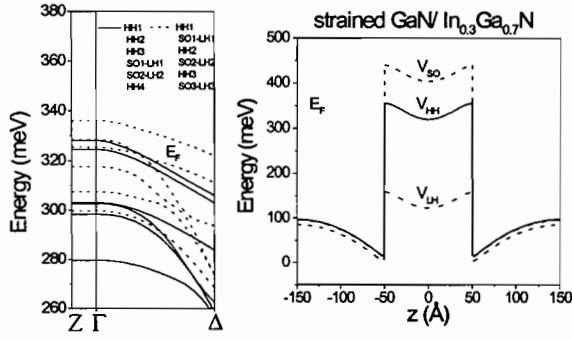


Fig. 2 – Same as in Fig.1 for a p-doped GaN/InGaN multiple QW.

bending barrier which takes place inside the well due to the presence of the free carriers. As can be seen in Fig. 1, by comparing the hole states for the undoped and doped structures, the inclusion of the LH and SO hole bands plays an important role in the correct description of the band structure.

In Fig. 2 we show the hole sub-bands and potential profiles for an GaN/In_{0.3}Ga_{0.7}N multiple QW with the same characteristics of the system AlGa_{0.3}GaN/GaN showed above. As expected, strain effects are found to be stronger in InGa_N-derived structures than in the AlGa_N ones, due to the larger lattice mismatch for the formers. A general feature, also observed for isolated AlGa_N/Ga_N multiple QWs, is that the hole states are pushed towards the top of the barrier when there is a 2DHG confined in the well.

Figs. 3 and 4 present the hole subbands and potential profiles for unstrained short-period SLs, for AlGa_{0.3}GaN/GaN and GaN/InGa_{0.3}N, respectively. We considered $L_w = 30 \text{ \AA}$ and $L_b = 60 \text{ \AA}$. The acceptor doping concentration N_A is equal to $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in both systems. For this 3D acceptor concentration, all the acceptors are assumed to be ionized in the AlGa_{0.3}GaN SL (with $N_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) but not in the GaN/InGa_{0.3}N SL. For this latter the 2D ionized acceptors concentration is only $N_{2D} = 1.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. For the case of the short-period SLs, we are assuming that the layers are relaxed, i. e., there is a strain relief. It is clearly seen, that even for short period SLs no minibands occur. Indeed we can talk about isolated systems even for barrier widths as thin as 60 \AA . This is due to the high values of the hole effective masses

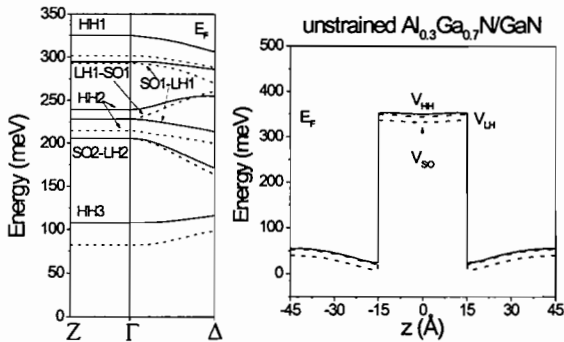


Fig. 3 – Fully barrier-doped unstrained AlGa_{0.3}GaN/GaN SL, $L_w = 30 \text{ \AA}$, $L_b = 60 \text{ \AA}$, $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($N_{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Labels and zero of energy are as in Fig.1.

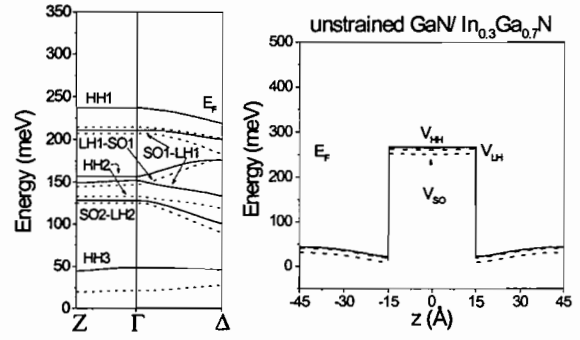


Fig. 4 – Same as in Fig.3 for an unstrained p-doped GaN/InGa_{0.3}N SL. The density of acceptors in the barrier is $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, but the effective ionized acceptors density is $N_{2D} = 1.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

in the nitride systems.

It is interesting to note that for the thinner QW widths (30 \AA), the bending is very small, as compared to the wider ones. This behavior may be attributed to the different contributions of the Coulomb and exchange-correlation potentials. In Fig. 5, we compare the contributions for the total potential due to V_{XC} and V_C for the case of AlGa_{0.3}GaN/GaN multiple QWs. One can observe that the relative importance of V_{XC} in comparison with V_C , is smaller for wider wells. In the case of 30 \AA multiple QWs the V_{XC} contribution is the main one. This is the reason why the hole bands are pushed towards the bottom of the well in the doped systems when compared to the undoped case (see Figs. 3 and 4).

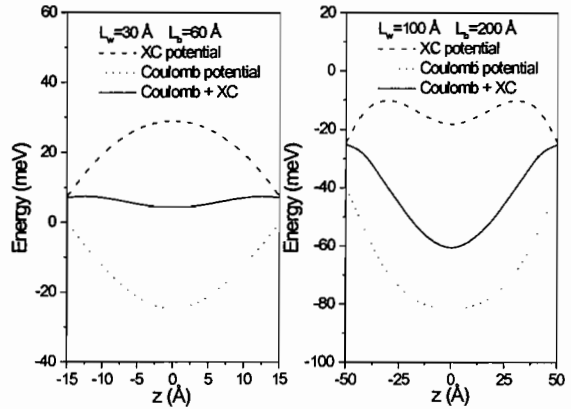


Fig. 5 – Contribution to the total potential of the Coulomb and exchange-correlation potentials for AlGa_{0.3}GaN/GaN multiple QWs. (left) $L_w = 30 \text{ \AA}$ and (right) $L_w = 100 \text{ \AA}$. Energy zero as in Fig. 1.

4. Conclusions

In the present work, we analyzed the effects of p-type doping in cubic AlGa_{0.3}GaN/GaN and GaN/InGa_{0.3}N multiple QWs and SLs for which the SL period and acceptor doping concentration were varied. The multiband effective-mass equation within the 6x6 Luttinger-Kohn model was solved together with Poisson equation in a self-consistent way by adopting a plane-wave representation. It was shown that the inclusion of the different hole bands as well as self-consistency of potential and charge density

are important to correctly describe the p-doped nitride heterostructures. Moreover, exchange-correlation effects, within the 2DHG are found to play a crucial role in the band bending potential.

Acknowledgements

We would like to thank the Brazilian funding agencies FAPESP, CAPES, and CNPq for partial support.

- 1) See e.g. S. Nakamura: *Semicond. Sci. Technol.* **14** (1999) R27.
- 2) L. Hsu, and W. Walukiewickz: *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 2405.
- 3) J. W. Orton and C. T. Foxon: *Rep. Prog. Phys.* **61** (1998) 1.
- 4) H. Yang, L. X. Zheng, J. B. Li, X. J. Wang, D. P. Xu, Y. T. Wang, X. W. Hu, and P. D. Han: *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 2498.
- 5) D.J. As, A. Richter, J. Busch, M. Lübbers, J. Mimkes and K. Lischka: *Appl. Phys. Lett.* **76** (2000) 13.
- 6) *Gallium Nitride (GaN) I*, Semiconductors and Semimetals, edited by J. I. Pankove and T. D. Moustakas, (Academic Press, San Diego, 1998) Vol. **50**.
- 7) A. Saxler, W. C. Mitchel, P. Kung and M. Razeghi: *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 2023.
- 8) P. Kozodoy, M. Hansen, S. P. DenBaars and U. K. Mishra: *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 3681.
- 9) G.M. Sipahi, R. Enderlein, L.M.R. Solfaro and J.R. Leite: *Phys. Rev.* **B53** (1996) 9930.
- 10) A.L. Rosa, L.M.R. Solfaro, R. Enderlein, G.M. Sipahi and J. R. Leite: *Phys. Rev.* **B58** (1998) 15675.
- 11) R. Enderlein, G.M. Sipahi, L.M.R. Solfaro and J.R. Leite: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997) 3712; R. Enderlein, G.M. Sipahi, L.M.R. Solfaro and J.R. Leite: *Phys. Rev. Lett.* **80** (1997) 3160.
- 12) S.C.P. Rodrigues, L.M.R. Solfaro, J.R. Leite and G.M. Sipahi: *Appl. Phys. Lett.* **76** (2000) 1015.
- 13) L.E. Ramos, L.K. Teles, L.M.R. Solfaro, A.L. Rosa, J.R. Leite and J.L.P. Castineira: unpublished.
- 14) S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand and R. A. Abram: *Semicond. Sci. Technol.* **14** (1999) 23.
- 15) V. Lemos, E. Silveira, J.R. Leite, A. Tabata, R. Trentin, L.M.R. Solfaro, T. Frey, D.J. As, D. Schikora and K. Lischka: *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 3666.
- 16) C. G. Van de Walle and J. Neugebauer: *Appl. Phys. Lett.* **70** (1997) 2577.
- 17) W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong and J. B. Xia: *J. Appl. Phys.* **80** (1996) 3471.
- 18) A. Tadjer, B. Abbar, M. Rezki, H. Aourag and M. Certier: *J. Phys. and Chem. Solids* **60** (1999) 419.
- 19) A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* **82** (1997) 2833.