OK

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

"PROPRIEDADES ELETRÔNICAS
DE HETERO-ESTRUTURAS DE
SEMICONDUCTORES ZINCBLÉNDE"

Valmir Antonio Chitta

Dissertação apresentada ao
Instituto de Física e
Química de São Carlos,
para obtenção do título de
Mestre em Física Básica.

Orientador: Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques

Departamento de Física e Ciência dos Materiais
São Carlos - 1987

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
VALMIR ANTONIO CHITTA APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI
DADE DE SÃO PAULO, EM 27 DE outubro DE 1987.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Gilmar Eugênio Marques Orientador

Dr. José Roberto Leite

Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Junior

A Sílvia, cujo amor e compreensão
foram e são fundamentais.

A minha família. Sem seu apoio
e incentivo tudo seria muito mais
difícil.

Ao Gilmar, muito mais que
um orientador, um grande
amigo.

INDICE

Índice	v
Lista de Figuras e Tabelas	vii
Agradecimentos	ix
Vitae, Publicações e Campos de Estudos	x
Resumo	xii
Abstract	xiii
 Capítulo I - INTRODUÇÃO	 1
 Capítulo II - "APROXIMAÇÃO DE MASSA-EFETIVA"	 7
II.1 - Introdução	7
II.2 - Aproximação de Massa-efetiva: Modelo de uma Banda	 8
 Capítulo III - O MÉTODO $\vec{k} \cdot \vec{p}$	 15
III.1 - Introdução	15
III.2 - Bandas de Energia para Semicondutores Zincblende	 16
III.3 - Modelo de Kane para Semicondutores dos Grupos III - V e II - V (Modelo de Oito Bandas)	 21

Capítulo IV - NÍVEIS DE LANDAU	30
IV.1 - Introdução	30
IV.2 - Modelo de Dito Bandas	30
Capítulo V - SISTEMAS BI-DIMENSIONAIS	38
V.1 - Introdução	38
V.2 - Modelo de Kane para Hetero-estruturas (Modelo de Seis Bandas)	43
V.3 - Campo Magnético Externo	52
Capítulo VI - POÇO QUÂNTICO DE GaAs - $Ga_{1-x}Al_xAs$	58
VI.1 Introdução	58
VI.2 Poço Finito de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$	59
VI.3 Poço Finito de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ na Presença de um Campo Magnético Externo	67
Capítulo VII - SEMICONDUTORES SEMIMAGNÉTICOS	71
VII.1 - Introdução - Propriedades de Bulk	71
VII.2 - Poços Quânticos de CdTe - $Cd(Mn)Te$	74
VII.3 - Poço Quântico de CdTe - $Cd_{1-x}Mn_xTe$ na Presença de um Campo Magnético Externo	80
Capítulo VIII - CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	87
Capítulo IX - REFERÊNCIAS	92

LISTA DE FIGURAS E TABELAS

FIGURAS

1.	Estrutura esquemática de bandas dos compostos dos grupos III - V e II - VI	18
2.	A estrutura MISFET	40
3.	Filmes de Hélio líquido	41
4.	Esquema de uma hetero-estrutura	44
5.	Poço quântico de GaAs - $Ga_{1-x}Al_xAs$	61
6.	Relação de dispersão para a banda de condução de um poço quântico de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de 100 Å	63
7.	Relação de dispersão para a banda de valência de um poço quântico de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de 100 Å	64
8.	Anisotropia das Bandas	66
9.	Nível de Landau $N=2$	68
10.	Energia versus campo magnético para um poço quântico de 100 Å de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$	70
11.	Hetero-estrutura de CdTe - $Cd_{1-x}Mn_xTe$	75
12.	Estrutura de bandas para um poço quântico de 50 Å de CdTe - $Cd_{0.94}Mn_{0.06}Te$	79
13.	Efeito do potencial magnético de troca sobre os níveis de Landau	84

14.	Energia versus campo magnético para um poço quântico de CdTe - $\text{Cd}_{0.94}\text{Mn}_{0.06}\text{Te}$ de 50 Å	36
15.	Massa efetiva de elétrons	36
16.	Energia de transição em função do campo magnético para um poço quântico de GaAs - Ga(Al)As	39
17.	Energia de transição em função do campo magnético para um poço quântico de CdTe - Cd(Mn)Te	30

TABELAS

I	- Tabela de caracteres do grupo duplo de Γ .	23
II	- Parâmetros para $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	58
III	- Parâmetros para $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$	77

AGRADECIMENTOS

Agradeço profundamente todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho e em particular:

Ao Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques pela dedicação, interesse, competência e amizade com que orientou este trabalho.

Aos colegas Abraham M. Cohen e Marcos H. Degani pelas estimulantes discussões, pelo apoio e incentivo em todos os momentos.

A todos os amigos do Departamento pelo companheirismo e solidariedade.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento e Pesquisa (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo auxílio financeiro.

VITRE

06/06/1963 - Nascimento - Serra Negra, São Paulo - Brasil

1985 - Bacharel - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, São Paulo - Brasil

1987 - Mestre em Física Básica - Universidade de São Paulo - Instituto de Física e Química de São Carlos, São Carlos, São Paulo - Brasil

PUBLICAÇÕES

Nonparabolicity Due to Conduction-Valence Band Coupling, G. E. Marques and V. A. Chitta, J. Phys. C (to be published)

Electronic Structure of Semimagnetic Semiconductor Heterostructures, V. A. Chitta and G. E. Marques, Semic. Sci. Technol. (to be published)

Impurity Shifted Polaron Energy in Semimagnetic $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ - CdTe Quantum Wells, G. E. Marques, V. A. Chitta, M. H. Degani and D. Hipolito, Phys. Rev. B (to be published)

x

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

Bound Magnetic Polaron in Semimagnetic Semiconductor
Heterostructure, G. E. Marques, V. A. Chitta, M. H. Degani and D.
Hipolito, Surf. Sci (to be published)

Dynamical Mass Effect on Confined Exciton States, V. A. Chitta,
M. H. Degani, A. M. Cohen, and G. E. Marques, Phys. Rev. Lett.
(submitted).

CAMPOS DE ESTUDO

Física do Estado Sólido : Semicondutores

Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques

Universidade de São Paulo - IFQSC, São Carlos.

RESUMO

Utilizou-se um Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (6x6) do tipo Kane para, se estudar a estrutura de bandas e níveis de Landau para heteroestruturas de semicondutores zincblende dos grupos III - V e II-VI. Os efeitos do acoplamento entre as bandas de condução e valência, da mistura dos estados da banda de valência, da não-parabolicidade dos níveis, da total degenerescência dos níveis, do warping e das discontinuidades das massas efetivas nas heterointerfaces são levados em conta.

Mostrou-se que a interação entre as bandas de condução e valência não pode ser desprezada, mesmo para semicondutores de gap largo, como citado em trabalhos existentes na literatura.

Para um estudo sistemático do modelo, utilizou-se um poço quântico de GaAs - Ga(Al)As e então aplicou-se o modelo a um sistema de semicondutores semimagnéticos (poço quântico de CdTe - Cd(Mn)Te).

ABSTRACT

A Kane-like (6×6) $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Hamiltonian is used to study the subband structure and Landau levels for group III - V and group II - VI zincblende semiconductor heterostructures. The effects of conduction-valence band coupling, valence band states mixing, nonparabolicity of the levels, the full degeneracy of the levels, warping and effective masses discontinuities at the heterointerfaces are taken into account.

It is shown that the interaction between conduction-valence bands cannot be neglected, even so the semiconductor have wide gap, as claimed in previous work in the literature.

GaAs - Ga(Al)As quantum well was used as a model for a systematic study of the effects of each effective $\vec{k} \cdot \vec{p}$ parameters. Then, it was applied to the study the subband structure of semimagnetic semiconductor system (a quantum well of CdTe - Cd(Mn)Te).

I. INTRODUÇÃO

As pesquisas sobre hetero-estruturas semicondutoras artificiais tais como: super-redes, poços quânticos, hetero-junções, etc, iniciaram-se em 1970, com a proposta de Esaki e Tsu [1], para produzir um potencial periódico unidimensional, alternando-se camadas semicondutoras. O objetivo principal era o de construir um sistema onde o livre caminho médio dos elétrons fosse maior que o comprimento de confinamento do sistema. Inicialmente foi enfatizado que, em tais estruturas, poderiam ocorrer fenômenos de transporte não usuais, decorrentes da separação das bandas de condução e valência em estreitas mini-bandas ou sub-bandas. Esta separação é uma consequência da redução da zona de Brillouin original devido à introdução de uma super-periodicidade sobre o período do cristal determinado pelo parâmetro de rede.

O primeiro problema enfrentado, foi o de "como se produzir tais hetero-estruturas", já que, para se obter amostras de boa qualidade seria necessário um bom casamento entre as interfaces (parâmetros de rede) dos materiais constituintes. Esse problema foi resolvido, graças ao progresso alcançado pelas técnicas de crescimento, tais como: Molecular Beam Epitaxy (MBE) [2], Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) [3] e mais recentemente

Chemical Beam Epitaxy (CBE) [4], com as quais atualmente obtem-se amostras ultra-finas de altíssima qualidade e superfícies abruptas.

A primeira hetero-estrutura artificial crescida por MBE [5] consistia de camadas alternadas de GaAs e $Ga_{1-x}Al_xAs$ com x variando de 0.15 à 0.35, e períodos variando de 50 Å a 200 Å. As primeiras experiências com hetero-estruturas foram feitas para investigar anomalias no transporte [6] e para demonstrar o comportamento quântico do elétron (partícula em uma caixa) [7]. A introdução da dopagem modulada [8], subsequentemente modificou o conceito estabelecido de poço quadrado, e estendeu as pesquisas para fenômenos físicos fundamentais totalmente novos, incluindo o efeito Hall quantizado [9], estados de resistência quase zero [10] e localização do elétron em um gás de elétrons bi-dimensional em altos campos magnéticos [11,12].

Atualmente, os sistemas mais estudados são hetero-estruturas de GaAs - $Ga_{1-x}Al_xAs$. O bom casamento dos parâmetros de rede dos dois semicondutores ($\Delta a/a \approx 0.06\%$ para GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$) permite a obtenção de interfaces praticamente livres de tensões, sem rugosidades e abruptas. Tais hetero-estruturas são assim o protótipo ideal para se estudar os fenômenos associados ao gás de elétrons quasi-bi-dimensional, obtido pelo confinamento dos portadores no poço de GaAs inserido entre duas barreiras de $Ga_{1-x}Al_xAs$.

Recentemente, hetero-estruturas formadas por semicondutores

do grupo II - VI, tem despertado um crescente interesse. Particularmente, hetero-estruturas de semicondutoras semimagnéticas [13]. Neste sistema a dependência de suas propriedades com uma variação do campo magnético externo aplicado e/ou uma variação da temperatura, torna-os fascinantes objetos de estudo e promissores sistemas para serem explorados tecnologicamente.

~ Os novos materiais, que constituem as hetero-estruturas semicondutoras, possibilitam o estudo de uma grande variedade de efeitos e aplicações. Com uma simples hetero-junção pode-se obter altas mobilidades eletrônicas [14], o que permite a fabricação de componentes ultra-rápidos. Os poços quânticos possuem várias aplicações tecnológicas, particularmente lasers [15] e moduladores eletro-óticos rápidos, além de ser o sistema mais explorado teoricamente. As super-redes podem ser utilizadas em dispositivos eletrônicos, como por exemplo, em dispositivos que possam explorar efeitos da resistência diferencial negativa [16], propriedades de tunelamento [17], etc. ~

As fascinantes propriedades físicas do gás de elétrons bidimensional e a grande importância da pesquisa de novos materiais, suscitou o desenvolvimento de novas teorias. Um dos modelos utilizados no cálculo de estruturas eletrônicas é a "Aproximação de Função Envelope" (ou "Aproximação de Massa-Efetiva"), desenvolvida por White and Sham, G. Bastard e M. Altarelli [18-21]. Sua simplicidade e eficiência permitem o

estudo das propriedades eletrônicas de diversas hetero-estruturas, assim como, uma análise comoda dos resultados experimentais.

Neste trabalho pretende-se estudar a estrutura eletrônica de poços quânticos constituídos de semicondutores com estrutura cristalina zincblende e gap direto, na presença ou não de campos externos aplicados. O modelo utilizado para calcular a relação de dispersão para as sub-bandas baseia-se, fundamentalmente, no método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, desenvolvido por Luttinger [22,23] e Kane [24]. Utiliza-se um Hamiltoniano (6x6), o qual leva em conta a interação entre as bandas de condução e valência, a descontinuidade das massas nas interfaces, anisotropias dos materiais, etc. Este cálculo é de extrema importância, pois através dele pode-se determinar a densidade de estados, e portanto, pode-se determinar as propriedades óticas, a estrutura de excitons, os estados de impureza e a quantização das sub-bandas em, níveis de Landau, na presença de um campo magnético externo.

No capítulo II é apresentada uma breve revisão dos aspectos principais da "Aproximação de Massa-Efetiva" para o modelo de uma banda sendo esta uma introdução ao método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ apresentado no capítulo III. Neste capítulo é discutido um modelo (8x8) [25], o qual descreve as bandas de condução, valência e split-off, duplamente degeneradas no ponto .

A aplicação de um campo magnético externo, ao semicondutor,

provoça o aparecimento de um espectro completamente discreto, ou seja, uma completa quantização em níveis de Landau. O Hamiltoniano para o cálculo destes níveis é apresentado no capítulo IV, bem como, uma breve discussão dos parâmetros envolvidos.

No capítulo V é apresentada uma rápida introdução aos sistemas bi-dimensionais e ao modelo de Hamiltoniano aqui utilizado para descrever os mesmos.

Como dito anteriormente, o sistema constituído por GaAs - $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, por ser o mais conhecido atualmente, é o candidato preferencial para se fazer um estudo detalhado do modelo. Isto é feito no capítulo VI, onde são apresentadas as principais características do modelo, bem como, uma comparação dos resultados obtidos, com o método aqui desenvolvido, e os já existentes na literatura.

No capítulo VII, o método descrito no capítulo V, é utilizado para estudar hetero-estruturas mais recentes: poços quânticos de semicondutores semimagnéticos (tomou-se como exemplo $\text{CdTe} - \text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$). É feita uma breve introdução a esses materiais e os resultados obtidos são apresentados.

Finalmente, no capítulo VIII, discute-se de forma geral os resultados aqui obtidos e as perspectivas de futuros trabalhos.

Deve-se ainda salientar que a comparação dos resultados aqui apresentados, com os resultados experimentais existentes na literatura, é uma tarefa bastante difícil desde que existem

incertezas nos valores de alguns parâmetros. Além disso, evitou-se um ajuste dos resultados experimentais, pois não se tinha acesso aos detalhes de como tinham sido obtidos.

II. "APROXIMAÇÃO DE MASSA-EFETIVA"

II.1 - Introdução

Este capítulo é dedicado à uma breve revisão dos aspectos fundamentais da "Aproximação de Massa-Efetiva". A idéia básica é substituir um problema complicado de cálculo de estrutura eletrônica, por um problema simples, como veremos a seguir.

Quando deseja-se tratar o problema de um potencial externo $U(\vec{r})$ superposto ao potencial cristalino $V_c(\vec{r})$, o Hamiltoniano do cristal

$$H_c = \frac{p^2}{2m_0} + V_c(\vec{r}) \quad (1)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre, possui auto-valores $E_n(\vec{k})$, que são funções bastante complicadas do vetor de onda $\vec{k}$ e, além disso, dependem fortemente das simetrias do cristal. Estes ainda, dividem-se em um número muito grande de bandas (índice n). Isto tudo torna o problema bastante difícil.

Em determinadas situações é possível e desejável substituir

o Hamiltoniano $\mathcal{H}_c$ por um operador energia cinética efetivo

$$T_{\text{eff}} = \frac{\vec{p}^2}{2m^*} \quad (2)$$

onde m^* é agora uma massa efetiva que carrega toda a informação do potencial cristalino $V_c(\vec{r})$. Impõe-se porém que, as auto-energias do operador $\mathcal{H}_c$ sejam iguais as auto-energias do operador T_{eff} , nas proximidades de um ponto de máximo k_0 . Dessa forma, tratar o problema do potencial externo superposto $U(\vec{r})$, torna-se muito mais simples, pois deve-se encontrar a solução de:

$$[T_{\text{eff}} + U(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

II.2 - "Aproximação de Massa-Efetiva": Modelo de uma Banda

Considere uma partícula de massa m , propagando-se em um

cristal cujo potencial periódico é $V_c(\vec{r})$. Suponha que um potencial externo $U(\vec{r})$ é superposto a $V_c(\vec{r})$. Para determinar os estados eletrônicos dessa partícula, tem-se que resolver o seguinte Hamiltoniano:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_c(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3)$$

Por simplicidade, suponha que a solução desejada, $\psi(\vec{r})$, possui energia E dentro da primeira banda ($n=0$) e, que as bandas superiores estejam muito distantes desta (aproximação de uma banda). Assim a função de onda $\psi(\vec{r})$ pode ser expandida no subconjunto de ondas de Bloch $\{\psi_{0\vec{k}}(\vec{r})\}$, com auto-estados do Hamiltoniano cristalino não perturbado $\{E_0(\vec{k})\}$. Omitindo-se o índice de banda, pode-se escrever a expansão como:

$$\psi(\vec{r}) = \int a(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{k} \quad (4)$$

Substituindo-se (4) em (3) e usando a ortonormalidade de $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ tem-se:

$$[E(\vec{k}) - E] a(\vec{k}) + \int a(\vec{k}') \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{k}' = 0 \quad (5)$$

Uma vez que a onda de Bloch é da forma:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

onde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ possui a mesma periodicidade de $V_c(\vec{r})$, tem-se:

$$[E(\vec{k}) - E] a(\vec{k}) + \int a(\vec{k}') U(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}' = 0 \quad (6)$$

onde

$$U(\vec{k}, \vec{k}') = \int \exp[i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}] u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (7)$$

Desde que $u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r})$ é uma função periódica de $\vec{r}$, ela pode ser expandida como:

$$u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} Q_{\vec{k}, \vec{k}'}^{(\vec{p})} \exp(-i \vec{G}_{\vec{p}} \cdot \vec{r}) \quad (8)$$

onde $\vec{G}_{\vec{p}}$ é um vetor da rede recíproca e a somatória cobre todo o espaço recíproco. A eq. (7) torna-se

$$U(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{\vec{p}} Q_{\vec{k}, \vec{k}'}^{(\vec{p})} \int \exp[i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{G}_{\vec{p}}) \cdot \vec{r}] U(\vec{r}) d\vec{r} \quad (9)$$

Para se obter uma forma simples para (6) duas suposições devem ser feitas:

- (i) - $U(\vec{r})$ varia suavemente dentro de uma célula unitária
- (ii) - $E(\vec{k})$ é uma função quadrática em $\vec{k}'$, na vizinhança do extremo $\vec{k}_0$.

A suposição (i) assegura que $p=0$ é o termo dominante em (9), assim sendo, $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ são tomados na vizinhança de $\vec{k}_0$. Desde que $Q_{\vec{k}, \vec{k}'}^{(0)} = (2\pi)^{-3}$, e devido a (i) e (ii) pode-se escrever:

$$U(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp[i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}] U(\vec{r}) d\vec{r} \quad (10)$$

e

$$E(\vec{k}) = E_0 + \sum_j \frac{\hbar^2}{2m_j^*} (\vec{k}_0 - \vec{k}_j)^2 \quad (11)$$

definindo-se agora:

$$A(\vec{r}) = \int a(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}] d\vec{k} \quad (12)$$

e substituindo-se (10, 11 e 12) em (6) tem-se:

$$\sum_j \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \right) + U(\vec{r}) - (E - E_0) \right] A(\vec{r}) = 0 \quad (13)$$

Esta é facilmente reconhecida como a equação de Schrödinger de uma partícula com massa efetiva m_j^* movendo-se no potencial $U(\vec{r})$. Como (13) é válida somente na vizinhança de $\vec{k}_0$, a equação (4) pode ser aproximada por:

$$\psi(\vec{r}) \cong u_{\vec{k}_0}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) \int \exp[i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}] a(\vec{k}) d\vec{k} \quad (14)$$

onde o termo fora da integral é a onda de Bloch em $\vec{k}_0$, $\psi_{\vec{k}_0}(\vec{r})$,

e então assim:

$$\psi(\vec{r}) \cong \psi_{\vec{k}_0}(\vec{r}) A(\vec{r})$$

Assim sendo, $A(\vec{r})$ é o coeficiente da expansão da função de onda total $\psi(\vec{r})$ na onda de Bloch no extremo $\vec{k}_0$ ou, da mesma maneira, $A(\vec{r})$ é a amplitude de modulação (ou também função envelope) da onda de Bloch. A densidade de probabilidade total $|\psi(\vec{r})|^2$ é o produto da densidade de probabilidade $|\psi_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2$ determinada pelo potencial cristalino $V_c(\vec{r})$, vezes a densidade de probabilidade devida ao fator de modulação $|A(\vec{r})|^2$, sendo este determinado pelo potencial superposto $U(\vec{r})$.

Note que a "Aproximação de Massa-Efetiva" corresponde à substituição do efeito do potencial cristalino $V_c(\vec{r})$, através de um operador energia cinética efetivo que produz, na vizinhança de $\vec{k}_0$, soluções idênticas às soluções do cristal. A grande vantagem desta aproximação reside no fato de se poder encontrar soluções em casos onde o potencial $U(\vec{r})$ estende-se por muitas células unitárias, ou mesmo quando se trata de imperfeições nas interfaces. Campos elétricos e magnéticos podem ser tratados com relativa facilidade nesta abordagem.

Uma situação mais complexa ocorre quando um certo número de bandas são degeneradas. A função de onda, neste caso, deve ter

tantas componentes quanto o número de bandas degeneradas, e a equação de Schrödinger torna-se uma matriz envolvendo o acoplamento entre cada banda.

III. O MÉTODO $k.p$

III.1 - Introdução

O estudo da estrutura eletrônica em semicondutores teve início nos anos 40/50. Alguns métodos foram desenvolvidos para isso. O método $\vec{k}.\vec{p}$, com o qual calcula-se perturbativamente a relação de dispersão $E_n(\vec{k})$ na vizinhança de $\vec{k} = \vec{k}_0$, foi desenvolvido por Luttinger [22,23] e Kane [24] na década de 50 e é muito simples para ser usado. Este método, contudo, não pode ser utilizado para calcular a estrutura de bandas em toda a zona de Brillouin. Para isto, outros métodos foram desenvolvidos, como por exemplo o método do pseudo-potencial, desenvolvido por Phillips [26]. Contudo este método tem a inconveniência de necessitar de um trabalhoso cálculo computacional. Assim sendo, a simplicidade de descrição característica do método $\vec{k}.\vec{p}$ é preferível e às vezes a única maneira de se calcular a estrutura eletrônica (presença de campos externos).

A principal razão pela qual o método $\vec{k}.\vec{p}$ é indicado para o cálculo da estrutura eletrônica de semicondutores, deve-se ao fato de que as propriedades eletrônicas usuais, tais como, transporte, absorção ótica entre bandas, etc, dependem de

detalhes da estrutura de bandas nas proximidades dos seus extremos. Assim, o conhecimento da relação de dispersão na vizinhança dos extremos das banda é fundamental e o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ tem sempre fornecido bons resultados em comparação com os resultados experimentais.

III.2 - Bandas de Energia para Semicondutores Zincblende

A simetria dos compostos III-V e II-VI ocorre no grupo T_d , mais frequentemente referido como estrutura zincblende. A estrutura zincblende tem associada a ela um conjunto de operações de simetria as quais são ilustradas na figura (1a) e esta difere da estrutura do diamante (por exemplo, Si e Ge) na quebra do centro de simetria de inversão. A primeira zona de Brillouin é mostrada na figura (1b) junto com os nomes convencionais dos pontos de simetria. Contudo uma típica estrutura de banda de um composto III - V ou II - VI mostra um gap fundamental direto em $k=0$, ou seja no ponto Γ . O ramo mais baixo da banda de condução é usualmente bem separado dos mais altos.

Na ausência da interação spin-órbita, a banda de valência tem três ramos, dois dos quais são degenerados através da zona de

Brillouin. Além disso, todos os três ramos são também degenerados em Γ . O acoplamento spin-órbita quebra a degenerescência da banda de valência em Γ , separando um ramo (banda split-off) dos outros dois (bandas heavy-hole e light-hole) como mostrado na figura (1c). O acoplamento spin-órbita é grande e usualmente atribuído ao grande momento angular dos elétrons das camadas atômicas internas dos elementos dos grupos V ou VI nos respectivos compostos

O Hamiltoniano para a parte periódica da onda de Bloch $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ é obtido de:

$$H_0 \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1)$$

e de

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2)$$

Assim tem-se:

$$H_{\vec{k}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3)$$

Figura 1. Estrutura esquemática das bandas dos compostos dos grupos III - V e II - VI

- Mostra um cubo o qual contém as mesmas operações de simetria que a estrutura zincblende.
- Mostra a primeira zona de Brillouin de um cristal com estrutura zincblende e os três pontos de maior simetria: Γ em $(0,0,0)$, X em $(0,1,0)$ e L em $(1,1,1)$.
- Mostra esquematicamente a estrutura de bandas dos compostos III - V e II - VI na vizinhança do ponto Γ , mostrando o gap fundamental E_g e a energia de spin-órbita Δ . Os símbolos Γ referem-se à representação das funções de Bloch $u_{n0}(\vec{r})$ sem spin (grupo simples, do lado esquerdo) e com spin (grupo duplo, do lado direito). Os números entre parenteses dão a degenerescência total de $u_{n0}(\vec{r})$ em cada caso.

onde

$$H_{\vec{k}} = \exp(-i \vec{k} \cdot \vec{r}) H_0 \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (4)$$

A dependência deste método sobre a forma de H_0 é talvez mais aparente se a expansão das exponenciais em (4) é feita dando a seguinte série de potências:

$$H_{\vec{k}} = H_0 - i \vec{k} \cdot [\vec{r}, H_0] - \frac{1}{2!} \sum_{i,j} k_i k_j [r_i, [r_j, H_0]] + \dots \quad (5)$$

onde $[,]$ denota o comutador entre os operadores. O Hamiltoniano do cristal na presença do acoplamento spin-órbita é

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V_c(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_c(\vec{r}) \right) \cdot \vec{p} \quad (6)$$

onde $\vec{\sigma}$ é o operador de spin de Pauli, $\vec{\nabla}_{\vec{r}}$ é o gradiente com respeito à coordenada $\vec{r}$ e c é a velocidade da luz.

Usando-se a relação de comutação geral [27]

$$[\vec{r}, g(\vec{r}, \vec{p})] = i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}} g(\vec{r}, \vec{p}) \quad (7)$$

$\vec{\nabla}_{\vec{p}}$ sendo o gradiente com respeito à variável momento, a equação (5) dá:

$$\mathcal{H}_{\vec{k}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 \quad (8)$$

onde

$$\mathcal{H}_1 = \hbar \vec{k} \cdot \left[\frac{\vec{p}}{m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_c(\vec{r})) \right] \quad (9)$$

e

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (10)$$

$\mathcal{H}_1$ vem do termo linear em $\vec{k}$ e também dá o nome do método, enquanto $\mathcal{H}_2$ vem do termo quadrático. Todos os comutadores de ordem mais alta são zero e (8) é um Hamiltoniano exato para a

onda de Bloch $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$.

O cálculo usual da estrutura de banda envolve a diagonalização de $H_{\vec{k}}$ para uma certa escolha de $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ e este procedimento funciona bem para potenciais periódicos. No caso de um potencial não periódico $U(\vec{r})$ o qual se estende à algumas células, a diagonalização torna-se praticamente impossível devido à matriz ficar excessivamente grande e um tratamento tal como "aproximação de massa-efetiva" é mais apropriado.

A próxima seção discute um modelo analítico simples. Ele consiste em selecionar um pequeno número de ondas de Bloch para H_0 em (6) e calcular os elementos de matriz de $H_{\vec{k}}$. As soluções analíticas são expressas em termos de um pequeno número de parâmetros os quais são então ajustados usando-se os resultados de absorção ótica do material.

III.3 - Modelo de Kane para Semicondutores dos Grupos III - V e II - VI. (Modelo de Oito Bandas)

O gap relativamente estreito nos compostos III - V e em alguns compostos II - VI causa uma forte interação entre a banda de condução mais baixa e as três bandas de buraco. O modelo de Kane leva em conta esta forte interação, escolhendo as oito

funções de onda de Bloch em Γ e calculando os elementos de matriz de $\hat{H}_c$ dado em (8). A Tabela I mostra a tabela de caracteres do grupo de operações em Γ indicando a representação das funções de onda das bandas de condução e valência no ponto Γ . Uma análise detalhada da simetria da estrutura zincblende na referência [28] mostra que as ondas de Bloch para a banda de condução, em Γ , são orbitais do tipo s pertencentes a representação Γ_1 . Também as três ondas de Bloch, degeneradas no topo da banda de valência, tem a simetria dos orbitais p. Os orbitais tipo s, $|s\rangle$, transformam-se, sob o conjunto de operações indicadas na Tabela I, como um orbital de momento angular $l=0$, enquanto os orbitais do tipo p transformam-se, sob o mesmo conjunto de operações, como orbitais de momento angular $l=1$. Estas funções são similares aos harmônicos esféricos no grupo de rotação contínua e são chamados harmônicos cristalinos ou cúbicos. Para $l=1$ eles são usualmente escritos como $|x\rangle$, $|y\rangle$ e $|z\rangle$. De agora em diante, todos os quatro orbitais são supostos normalizados dentro de uma célula unitária.

Na presença do acoplamento spin-órbita é conveniente construir uma combinação linear destes quatro orbitais e as duas funções de spin $1/2$, $\uparrow$ e $\downarrow$, de maneira que o termo de spin-órbita torne-se diagonal. Isto é conseguido usando o conjunto de base $|J, m_J\rangle$, com $J=\vec{L}+\vec{S}$. Para $l=0$ e $S=1/2$, existem dois orbitais pertencentes à Γ_6 ($J=1/2$) e para $l=1$ e $S=1/2$, existem seis orbitais, dois dos quais pertencentes à Γ_7 ($J=1/2$) e os outros

TABELA I

Tabela de caracteres do grupo duplo de Γ

Γ	E	$\bar{E}$	$6C_4^2$	$8C_3$	$8\bar{C}_3$	$6I \times C_4$	$6I \times \bar{C}_4$	$12I \times C_2$
$\Gamma_1(s)$	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	1	-1	-1	-1
Γ_3	2	2	2	-1	-1	0	0	0
$\Gamma_4(x, y, z)$	3	3	-1	0	0	-1	-1	1
Γ_5	3	3	-1	0	0	1	1	-1
Γ_6	2	2	0	1	-1	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8	4	-4	0	-1	1	0	0	0
Γ_i	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5			
$\Gamma_i \times D_{1/2}$	Γ_6	Γ_7	Γ_8	$\Gamma_7 + \Gamma_8$	$\Gamma_6 + \Gamma_8$			

Regras de Seleção

Γ_i	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4
$\Gamma_i \times \Gamma_4$	Γ_4	Γ_5	$\Gamma_4 + \Gamma_5$	$\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$

Γ_5	Γ_6	Γ_7	Γ_8
$\Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$	$\Gamma_7 + \Gamma_8$	$\Gamma_6 + \Gamma_8$	$\Gamma_6 + \Gamma_7 + 2\Gamma_8$

TABELA 1 (continuação)

Funções de onda de Bloch em $k=0$	Auto-valores de $\mathcal{H}_{\text{eff}}$
$ u_1^0\rangle = 1/2, -1/2\rangle = -(i/\sqrt{3})[(X-iY)\uparrow - 2Z\downarrow]$	$E_0 - 2\Delta/3$
$ u_2^0\rangle = 1/2, 1/2\rangle = 5\uparrow$	E_0
$ u_3^0\rangle = 3/2, 3/2\rangle = -(i/\sqrt{2})(X+iY)\uparrow$	$E_0 + \Delta/3$
$ u_4^0\rangle = 3/2, -1/2\rangle = (i/\sqrt{6})[(X-iY)\uparrow + 2Z\downarrow]$	$E_0 + \Delta/3$
$ u_5^0\rangle = 3/2, 1/2\rangle = -(i/\sqrt{6})[(X+iY)\downarrow - 2Z\uparrow]$	$E_0 + \Delta/3$
$ u_6^0\rangle = 3/2, -3/2\rangle = (i/\sqrt{2})(X-iY)\downarrow$	$E_0 + \Delta/3$
$ u_7^0\rangle = 1/2, -1/2\rangle = 5\downarrow$	E_0
$ u_8^0\rangle = 1/2, 1/2\rangle = (i/\sqrt{3})[(X+iY)\downarrow + 2Z\uparrow]$	$E_0 - 2\Delta/3$

quatro pertencentes a $\Gamma_8 (J=3/2)$. Essa combinação linear deve satisfazer a reversão temporal, $-i\sigma_y C$, onde σ_y é a componente y do operador de spin de Pauli e C é o operador complexo conjugado.

Os orbitais de Kane e seus respectivos auto-valores para (8) são mostrados na sequência da Tabela I. Nestas expressões, os coeficientes das combinações lineares são reconhecidos como os coeficientes de Clebsch-Gordan da decomposição de $|J, m_j\rangle$ na base $|l, m_l; S, m_s\rangle$. Além disso, os conjuntos superior e inferior são dubletos degenerados. Para o ordenamento escolhido, $\mathcal{H}_\pm$ fornece um Hamiltoniano matricial (8x8) da forma [25]:

$$\begin{bmatrix} D_s & M^- & Q^+ & -R & Y^- & W^- & X^- & C \\ M^+ & D_c & A^+/\sqrt{2} & -A^-/\sqrt{6} & -B^+ & -L & 0 & X^+ \\ Q^- & A^+/\sqrt{2} & D^+ & C^+ & S^+ & -\bar{L} & L & W^+ \\ -R & -A^-/\sqrt{6} & C^+ & D^- & \bar{C}^+ & S^- & B^+ & Y^+ \\ Y^+ & -B & S^+ & \bar{C} & D^- & C^- & -A^-/\sqrt{6} & R \\ W^- & -L & -\bar{C} & S^- & C^- & D^+ & A^+/\sqrt{2} & Q^+ \\ X^- & 0 & L & B & -A^-/\sqrt{6} & A^+/\sqrt{2} & D_c & M^+ \\ 0 & X^+ & W^+ & Y^+ & R & Q^+ & M^+ & D_s \end{bmatrix} \tag{11}$$

onde

$$D_5 = -\Delta - \frac{1}{2} \gamma'_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$M^\pm = \frac{1}{\sqrt{3}} P' k_+ \pm \frac{1}{\sqrt{3}} G' \{k_z, k_-\}$$

$$Q^\pm = \pm \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma'_2 (k_x^2 - k_y^2) + i \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma'_3 \{k_x, k_y\} + \frac{1}{\sqrt{2}} T' k_z$$

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \gamma'_2 (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2)$$

$$Y^\pm = \frac{3}{\sqrt{8}} \gamma'_3 \{k_z, k_+\} \pm \sqrt{\frac{3}{8}} T' k_-$$

$$W^\pm = -\sqrt{\frac{3}{8}} \gamma'_3 \{k_z, k_+\} \pm \frac{1}{\sqrt{8}} T' k_-$$

$$X^\pm = \pm \frac{1}{\sqrt{3}} P' k_z + \frac{i}{\sqrt{3}} G' \{k_x, k_y\}$$

$$D_6 = E_g + \left(F + \frac{1}{2}\right) (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2).$$

$$D^{\pm} = -\frac{1}{2} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \pm \frac{1}{2} \gamma_2 (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2)$$

$$A^{\pm} = P k_{+} \pm G \{k_z, k_{-}\}$$

$$B = \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z + i \sqrt{\frac{2}{3}} G \{k_x, k_y\} - \sqrt{3} N_z (k_x^2 - k_y^2)$$

$$L = N_z (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2)$$

$$C^{\pm} = \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_3 \{k_x, k_y\} \pm T k_z$$

$$S^{\pm} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_3 \{k_z, k_{+}\} - \frac{1}{2}$$

$$G = \frac{\sqrt{3}}{2} T k_{+}$$

onde $k^{\pm} = k_x + i k_y$ e $\{ , \}$ denota o anticomutador. As energias, E_g (energia de gap) e Δ (energia de spin-órbita) são medidas a partir do topo da banda de valência e (11) é dada em unidades atômicas ($\hbar = m_0 = 1$).

Todos os parâmetros utilizados aqui são reais e independentes. γ_1 , γ_2 e γ_3 fornecem a interação entre $\Gamma_6 \times \Gamma_6$, sendo conhecidos como parâmetros de Luttinger. Os parâmetros de interação entre $\Gamma_4 \times \Gamma_4$ e $\Gamma_4 \times \Gamma_2$ são γ_1' , γ_2' e γ_3' . F é o parâmetro de massa efetiva da banda de condução (Γ_6), T é o parâmetro linear em $\vec{k}$ para Γ_6 e P e G são os parâmetros de interação entre $\Gamma_6 \times \Gamma_3$. A interação entre $\Gamma_6 \times \Gamma_4$ e $\Gamma_4 \times \Gamma_6$ é dada por T' , P' e G' . N_2 representa um acoplamento adicional entre a banda de condução Γ_6 e as bandas de valência Γ_8 .

O parâmetro $\mu \equiv (\gamma_3 - \gamma_2)/2$ é chamado parâmetro de warping, porque, se este fosse zero em materiais com simetria de inversão como Ge, Si ou Diamante, as bandas de energia seriam isotrópicas, ou seja, independentes da direção de $\vec{k}$. Os parâmetros T , G e N_2 são chamados parâmetros de assimetria de inversão, porque eles são iguais a zero em materiais que possuem simetria de inversão, como Diamante, mas diferentes de zero em materiais com simetria zincblende.

Neste modelo, o efeito das bandas de condução superiores é adicionado como uma perturbação. Na obtenção de (11) o tipo de teoria de perturbação utilizada é descrita por Löwdin [29]. Na teoria de perturbação usual, tenta-se diagonalizar o Hamiltoniano completamente, por um processo iterativo, o qual é útil quando todo elemento de matriz fora da diagonal é muito pequeno quando comparado com a energia de separação dos níveis não perturbados, que estão interagindo. No método de Löwdin, supõe-se que todos os

estados podem ser divididos em duas classes A e B. Estados na categoria A, interagem fortemente entre si, mas estados em A interagem fracamente com estados em B. As interações conectando estados em A com estado em B, são então removidas inteiramente, como na teoria de perturbação usual. Os elementos de matriz que conectam estados pertencentes somente a A não são removidos. Depois disto, os estados em A são considerados "renormalizados" e a matriz com estas interações "renormalizadas" deve ser diagonalizada exatamente.

Para hetero-estruturas de compostos III - V e II - VI algumas simplificações podem ser feitas nesse modelo. Essas simplificações serão discutidas nos próximos capítulos.

IV. NÍVEIS DE LANDAU

IV.1 - Introdução

O Hamiltoniano que descreve os níveis de energia magnéticos nas bandas de condução e valência no centro da zona de Brillouin é obtido fazendo-se uma modificação no método de massa-efetiva de Luttinger e Kohn [22]. Seguindo o tratamento de Kane para o caso de campo zero [24], inclui-se o acoplamento entre as bandas de condução e valência exatamente, e os efeitos das bandas mais altas na ordem de k^2 . Assim, os efeitos de não parabolicidade, anisotropia e os efeitos quânticos das bandas de condução e valência são incluídos.

IV.2 - Modelo de Oito Bandas

Para um campo magnético B aplicado em uma direção arbitrária definida pelos ângulos polares esféricos θ e φ pode-se fazer a seguinte transformação de coordenadas [25]

$$K_x = \cos \psi \cos \theta K_1 - \sin \theta K_2 + \cos \theta \sin \psi K_3$$

$$K_y = \cos \psi \sin \theta K_1 + \cos \theta K_2 + \sin \theta \sin \psi K_3 \quad (1)$$

$$K_z = -\sin \psi K_1 + \cos \psi K_3$$

onde o campo magnético está na direção do eixo 3. A rotação correspondente dos estados de base resulta em uma transformação do Hamiltoniano $\vec{K} \cdot \vec{p}$. Então tem-se:

$$K_1 = \frac{1}{\lambda \sqrt{2}} (a + a^+)$$

$$K_2 = \frac{i}{\lambda \sqrt{2}} (a - a^+) \quad (2)$$

$$K_3 = K_B$$

onde $\lambda = (\hbar c / eB)^{1/2}$ é o raio de Landau, $\hbar K_B$ é o componente do momento ao longo da direção do campo magnético aplicado, e a^+ e a são os operadores de levantamento e abaixamento para as funções de oscilador harmônico H_n (polinômios de Hermite)

$$a^+ H_n = \sqrt{n+1} H_{n+1} \quad (3)$$

$$a H_n = \sqrt{n} H_{n-1}$$

N é o operador número

$$N H_n = a^+ a H_n = n H_n \quad (4)$$

e

$$[a^+, a] = a^+ a - a a^+ = 1 \quad (5)$$

O Hamiltoniano transformado $\mathcal{H}(\theta, \varphi)$ é dado por:

Ds	M-	Q*	R*	Y-	W*	X*	δ
M*	Dc	A	α^*	-B*	L*	β^*	X*
Q-	A*	Dh	C*	S*	$\bar{C}^*$	L*	W*
R-	α	C+	DI	γ^*	S*	B*	Y+
Y*	-B	S+	γ	DI*	C*	α^*	R+
W-	L-	$\bar{C}$	S-	C-	Dh	A	Q+
X-	β	L+	B	α	A*	Dc*	M+
δ^*	X+	W+	Y*	R*	Q*	M*	Ds*

(6)

onde

$$D_s = -\Delta - \frac{1}{2} \gamma'_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + i \left(R' + \frac{1}{2} \right) [k_x, k_y]$$

$$M^\pm = \frac{1}{\sqrt{3}} P' k^+ \pm \frac{1}{\sqrt{3}} G' \{k_z, k^-\}$$

$$Q^\pm = \pm \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma'_2 (k_x^2 - k_y^2) + i \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma'_3 \{k_x, k_y\} + \frac{1}{\sqrt{2}} T' k_z$$

$$R^\pm = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \gamma'_2 (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) + \frac{i}{\sqrt{2}} (R'' + 1) [k_x, k_y]$$

$$Y_{\pm} = \frac{3}{\sqrt{8}} \gamma_3' \{k_z, k_{\pm}\} \pm \sqrt{\frac{3}{8}} T' k_{-} \pm \frac{1}{\sqrt{8}} (R''+1) [k_{-}, k_z]$$

$$W_{\pm} = -\sqrt{\frac{3}{8}} \gamma_3' \{k_z, k_{\pm}\} \pm \frac{1}{\sqrt{8}} T' k_{-} \pm \sqrt{\frac{3}{8}} (R''+1) [k_{\pm}, k_z]$$

$$X_{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}} P' k_z + \frac{i}{\sqrt{3}} G' \{k_x, k_y\}$$

$$J = \left(R' + \frac{1}{2}\right) [k_{+}, k_z]$$

$$D_C = E_g + \left(F + \frac{1}{2}\right) (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + i \left(N_3 + \frac{1}{2}\right) [k_x, k_y]$$

$$D_h = -\frac{1}{2} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \frac{1}{2} \gamma_2 (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) + i \frac{3}{2} \left(R + \frac{q}{4}\right) [k_x, k_y]$$

$$D_L = -\frac{1}{2} \gamma_3 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \frac{1}{2} \gamma_2 (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) + \frac{i}{2} \left(R + \frac{1}{4} q\right) [k_x, k_y]$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} P k_{+} + \frac{1}{\sqrt{2}} G \{k_z, k_{-}\} + \frac{1}{2} N_3 [k_{-}, k_z]$$

$$\alpha = -\frac{1}{\sqrt{6}} P k_{+} + \frac{1}{\sqrt{6}} G \{k_z, k_{-}\} - \frac{\sqrt{3}}{2} N_3 [k_{-}, k_z]$$

$$B = \sqrt{\frac{2}{3}} P K_z + i \sqrt{\frac{2}{3}} G \{K_x, K_y\} - \sqrt{3} N_2 (K_x^2 - K_y^2)$$

$$L_{\pm} = \pm N_2 (2K_z^2 - K_x^2 - K_y^2) + i N_3 [K_x, K_y]$$

$$\beta = \left(N_1 + \frac{1}{2} \right) [K_+, K_-]$$

$$C_{\pm} = \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_3 (K_x^2 - K_y^2) + i \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_3 \{K_x, K_y\} \pm T K_z$$

$$S_{\pm} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_3 \{K_z, K_{\pm}\} - \frac{1}{2} T K_{\mp} - \frac{\sqrt{3}}{2} \left(R + \frac{7}{4} q \right) [K_+, K_-]$$

$$\zeta = - \frac{\sqrt{3}}{2} T K_+ + \frac{3}{4} q [K_-, K_z]$$

$$\eta = \frac{\sqrt{3}}{2} T K_+ + \left(R + \frac{5}{2} q \right) [K_-, K_z]$$

onde $K_{\pm} = K_x + iK_y$, $\{ , \}$ denota o anticomutador e $[,]$ denota o comutador. As energias E_g (energia de gap) e Δ (energia de spin-órbita) são medidas a partir do topo da banda de valência e (G) é dada em unidades atômicas ($\hbar = m_0 = 1$).

Os novos parâmetros que aparecem aqui, também são reais e independentes. k e q fornecem a interação entre $\Gamma_8 \times \Gamma_8$, $k' = k''$ fornecem a interação entre $\Gamma_7 \times \Gamma_8$ e $\Gamma_7 \times \Gamma_7$. N_1 contribui para o fator giromagnético da banda de condução e, do mesmo modo, k contribui para o fator giromagnético da banda de valência. b_3 representa um acoplamento adicional entre a banda de condução e as bandas de valência Γ_8 . Todos os três últimos parâmetros são definidos por Weiler em [25].

As soluções da equação de Schrödinger:

$$H(\theta, \phi) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (7)$$

são da forma:

$$|\psi(n)\rangle = \begin{bmatrix} u_1^n & H_n \\ u_2^n & H_{n-1} \\ u_3^n & H_{n-2} \\ u_4^n & H_n \\ u_5^n & H_{n-1} \\ u_6^n & H_{n+1} \\ u_7^n & H_n \\ u_8^n & H_{n-1} \end{bmatrix} \quad (8)$$

e com isso obtem-se quatro tipos de níveis de Landau, soluções da eq. (6).

No primeiro tipo, o nível de Landau $N=-1$ é um estado singlete de heavy-hole totalmente desacoplado e determinado pelo operador diagonal D_h quando $n=-1$ na eq. (6). Para esta solução o spinor, na eq. (8), tem todas as componentes iguais a zero exceto a sexta componente. Este é o estado fundamental da banda de valência.

No segundo tipo, a solução é um quadruplete envolvendo somente componentes com spin para baixo. Estas são obtidas na solução da matriz 4×4 formada pelas linhas e colunas em que aparecem, na diagonal, os operadores D_s , D_l , D_h e D_c^* na eq. (6). Convencionou-se chamar este conjunto de estados, dois em Γ_8 , um em Γ_7 e um em Γ_6 (estado fundamental da banda de condução) de nível de Landau $N=0$.

O próximo nível de Landau, $N=1$, é composto de sete estados soluções da eq. (6) onde somente a linha e a coluna em que o elemento da diagonal é o operador D_h^* são eliminadas. Tem-se então dois estados na banda de condução e cinco na banda de valência, onde, dois são light-hole, um heavy-hole e dois split-off.

Finalmente, o último tipo de solução é o octuplete que envolve todas as oito componentes, onde $n \geq 2$.

V. SISTEMAS BI-DIMENSIONAIS

V.1 - Introdução

Nos últimos anos a área de maior crescimento dentro da física de semicondutores, tem sido, sem dúvida, a que estuda sistemas bi-dimensionais. Estas estruturas consistem, principalmente, de camadas semicondutoras com a geometria das interfaces, níveis de dopagem e composição química definidas com precisão na escala atômica. Os materiais constituintes devem ter parâmetros de rede com valores bem próximos, de modo que monocristais de alta qualidade possam ser crescidos.

Durante a década de 70, o MISFET (Metal-Insulator-Semiconductor-Field-Effect-Transistor) de Si [30] foi a estrutura mais proeminente no estudo das propriedades de um gás de elétrons bi-dimensional. Neste sistema, figura (2a), o semicondutor substitue a segunda placa de um capacitor, para o qual o isolante desempenha o papel do dielétrico. No modo mais comum de operação, uma polarização positiva do eletrodo de metal (gate) atrai elétrons para a interface Si/SiO₂ produzindo uma densidade suficientemente alta a ponto de induzir uma inversão local da densidade de portadores majoritários no substrato tipo p.

Existiam duas razões principais para o MISFET atrair toda a atenção. A primeira era que a densidade de portadores na interface podia ser variada externamente em duas ordens de magnitude ($\sim 10^{11}$ a 10^{13} cm^{-2}), limitada inferiormente pela voltagem de limiar (tipicamente da ordem de 0.5 V) necessária para induzir a camada de inversão, e superiormente pela voltagem que provocava o rompimento do dielétrico (tipicamente da ordem de 100 V para camadas de óxido com espessura de 1000 a 1500 Å). A segunda razão era que as energias relevantes na camada de inversão são todas da ordem de meV (mili-elétron volt).

Neste sistema, os elétrons são confinados na interface Si/SiO₂ pelo campo elétrico aplicado (figura (2c)) sendo que as funções de onda não podem penetrar mais do que uns poucos angstroms no óxido isolante. A solução para os estados eletrônicos, no plano da interface, é relativamente simples: os elétrons são livres para se mover no plano, com uma massa efetiva m^* associada com o mínimo da banda de condução.

Uma segunda estrutura do tipo capacitor, que é ainda mais simples, em princípio, do que o sistema Si/SiO₂, é obtida revestindo-se a placa inferior de um capacitor convencional com Hélio líquido, e introduzindo-se elétrons sobre a superfície do líquido [31,32] (figura (3)). Os elétrons ficam em um vácuo quase perfeito, atraídos para a superfície pelo potencial e repelidos pela barreira de potencial do líquido. As densidades típicas, de elétrons, são quatro ordens de magnitude menores ($\sim 10^6$ cm^{-2}) do

Figura 2. A estrutura MISFET.

- Mostra esquematicamente um sistema Metal-Insulator-Semiconductor-Field-Effect-Transistor (MISFET) indicando a posição da camada de carga.
- Mostra um diagrama de energia, como uma função da distância da interface do isolante. As bandas de condução e valência do isolante e do semiconductor e seus respectivos gaps são mostrados para a condição de banda plana.
- Mostra o mesmo diagrama de energia, como uma função de x , para uma ddp aplicada V_g . As linhas sólidas ilustram a tradicional curvatura das bandas e a linha tracejada ilustra a energia potencial $V(x)$. O valor $x=d$ define a extensão da camada de depleição.

Figura 3. Filme de Hélio líquido.

Esquema para os estado eletrônicos na superfície de um filme de Hélio em um substrato dielétrico.

que as obtidas no MISFET de Si, sendo que o limite superior ($\sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$) é alcançado quando a superfície do Hélio se rompe, permitindo uma descarga para a placa inferior.

Até recentemente, exemplos de partículas quânticas em uma caixa, tinham sido limitados a sistemas de ocorrência natural, tais como: a emissão de partículas alfa de núcleos pesados [33,34], efeito Ramsauer-Townsend [35], etc. Avanços no controle do crescimento epitaxial de hetero-estruturas semicondutoras, tem tornado possível a observação de efeitos de confinamento quântico em dispositivos óticos produzidos em laboratórios. Tais hetero-estruturas tem despertado grande interesse tanto teórico como tecnológico devido a várias propriedades fundamentais e, principalmente devido ao fato de que uma variedade de novos (e úteis) dispositivos opto-eletrônicos e eletrônicos podem ser produzidos.

Hetero-estruturas artificiais consistem de uma série de camadas alternadas de, em geral, dois componentes (I e II): Tais componentes possuem gaps de energia E_g^I e E_g^{II} e são dispostos em camadas com espessuras d^I e d^{II} . A diferença dos gaps de energia, $V_0 = E_g^{II} - E_g^I$, é dividido em uma parte V_{0c} , a qual aparece como uma descontinuidade na banda de condução $E_c(z)$, e em outra parte, V_{0v} , a qual modula a borda da banda de valência $E_v(z)$, como mostrado na figura (4a). Enquanto o movimento dos portadores paralelo às camadas é praticamente livre, sendo levemente afetado pelo potencial periódico, o movimento na direção z (a direção de

crescimento das camadas) corresponde ao movimento em um sistema de período d . Consequentemente, as curvas de dispersão $\mathcal{E}(kz)$ são reduzidas para novas mini-zonas de Brillouin definidas por $|kz| < \pi/d$. Além disso, cada banda $\mathcal{E}(kz)$ é dividida em mini-bandas $\mathcal{E}_n(kz)$ separadas por mini-gaps em $kz=0$ e nos contornos das zonas, $kz = \pm \pi/d$, como mostrado na figura (4b), por causa do potencial da hetero-estrutura.

Uma discussão mais detalhada deste sistema, será feita nos próximos capítulos.

V.2 - Modelo de Kane para Hetero-Estruturas (Modelo de Seis Bandas)

Até o presente, as teorias usadas no cálculo da estrutura eletrônica em hetero-estruturas tais como MISFETS [36-38], hetero-junções [39-42] e poços quânticos e super-redes [20,41,43-47] baseiam-se em Hamiltonianos para um único tipo de portador (elétron ou buraco). Assim sendo, esses modelos não tratam devidamente a interação entre portadores diferentes.

O modelo proposto aqui trata esta interação de maneira mais adequada, desprezando somente, como nos modelos citados acima, a interação spin-órbita, pois o desconhecimento dos parâmetros

Figura 4. Esquema de uma hetero-estrutura.

- Diagrama das bandas de energia de uma hetero-estrutura, indicando o potencial periódico proveniente da diferença de gap de energia $E_g^{II} - E_g^I$ entre os componentes.
- Splitting da banda de energia $E(k_z)$ em sub-bandas $E_n(k_z)$ devido a superposição de um potencial periódico d . O número de sub-bandas é dado por d/a .

de interação nos resultados de absorção ótica dificulta o tratamento deste acoplamento. De posse desses parâmetros pode-se, facilmente, acrescentá-lo ao modelo.

Dessa maneira, considerando-se a energia de spin-órbita infinita ($\Delta = \infty$), os orbitais de Kane, $|J, m_J\rangle$, reduzem-se a seis funções que serão reordenadas como:

$$|u_1\rangle = |1/2, 1/2\rangle = S \uparrow$$

$$|u_2\rangle = |3/2, 3/2\rangle = -i/\sqrt{2} (X + iY) \uparrow$$

$$|u_3\rangle = |3/2, -1/2\rangle = i/\sqrt{6} [(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow]$$

$$|u_4\rangle = |3/2, 1/2\rangle = -i/\sqrt{6} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow]$$

$$|u_5\rangle = |3/2, -3/2\rangle = i/\sqrt{2} (X - iY) \downarrow$$

$$|u_6\rangle = |1/2, -1/2\rangle = S \downarrow$$

Para uma hetero-estrutura onde a direção de crescimento das camadas é escolhida como direção z e o plano x-y denota o plano das interfaces, o Hamiltoniano H_z (III.11) pode ser escrito na forma de um operador energia cinética efetiva fazendo-se:

$$k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z} \quad (1)$$

assim

$$\begin{bmatrix} D_c & A/\sqrt{2} & -A^*/\sqrt{6} & B & 0 & 0 \\ A^*/\sqrt{2} & D_+ & C & S^* & 0 & 0 \\ -A/\sqrt{6} & C^* & D_- & 0 & -S^* & -B \\ B & -S & 0 & D_- & C & -A^*/\sqrt{6} \\ 0 & 0 & S & C^* & D_+ & A/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & -B & -A/\sqrt{6} & A^*/\sqrt{2} & D_c \end{bmatrix}$$

(2)

onde:

$$D_c = E_g + E_v + \left(F + \frac{1}{2}\right) k^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(F + \frac{1}{2}\right) \frac{\partial}{\partial z}$$

$$D_{\pm} = E_v - \frac{1}{2} (\gamma_1 \pm \gamma_2) k^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} (\gamma_1 \mp 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

$$A = P k e^{i\theta}$$

$$B = \frac{i}{\sqrt{6}} \left[\frac{\partial}{\partial z} P + P \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

$$C = \frac{\sqrt{3}}{4} \kappa^2 \left[(\gamma_2 + \gamma_3) e^{i2\theta} + (\gamma_2 - \gamma_3) e^{-i2\theta} \right]$$

$$S = i \frac{\sqrt{3}}{2} \kappa e^{i\theta} \left[\frac{\partial}{\partial z} \gamma_3 + \gamma_3 \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

onde as energia E_g (energia de gap) e E_v (descontinuidade da banda de valência) são medidas a partir do topo da banda de valência.

k é o módulo do vetor de onda no plano x-y e θ determina a sua direção em relação ao eixo x.

Todos os parâmetros são funções de z , pois são diferentes em cada um dos materiais constituintes. Por isso, nos termos onde aparecem produtos do operador $\partial/\partial z$ com algum outro parâmetro, uma simetrização deve ser feita.

Os valores dos parâmetros N_z e G são desconhecidos, mas devem ser pequenos, assim adotou-os como zero. O parâmetro T dado por Cardona et al. [48] é muito pequeno para os materiais nos quais tem-se interesse, assim sendo, também atribuiu-se zero a ele.

O parâmetro de massa efetiva de Γ_6 , F , é determinado pela massa efetiva de bulk. No limite de acoplamento spin-órbita

infinito tem-se [25]

$$\frac{1}{m^*} = 1 + 2F + \frac{4P^2}{3E_g} \quad (3)$$

onde, por conveniência, usou-se unidades atômicas.

O movimento dos elétrons e buracos na hetero-estrutura é determinado pela equação de Schrödinger para o spinor de seis componentes

$$\tilde{\Psi}(x,y,z) = (A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6) \quad (4)$$

$$(\mathcal{H} + V) \Psi(x,y,z) = E \Psi(x,y,z) \quad (5)$$

onde $\mathcal{H}$ é dado por (2) e V é uma matriz diagonal 6x6 contendo qualquer potencial externo aplicado à hetero-estrutura e também tensões internas.

Desde que as hetero-estruturas produzidas atualmente possuem interfaces de alta qualidade pode-se, sem perda da realidade, supor uma invariância translacional no plano x-y de modo que as componentes da função de onda $\Psi(x,y,z)$ podem ser escritas como:

$$A(x, y, z) = \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) A_j(z) \quad (6)$$

onde $\vec{k}$ e $\vec{r}$ são vetores no plano x-y e $j=1, \dots, 6$.

A condição de contorno generalizada em uma dada interface é uma consequência da conservação do fluxo de probabilidade e é obtida da integração da equação (2) através de uma faixa muito estreita da junção. No limite em que essa faixa vai a zero, o seguinte operador deve ser contínuo através da interface

$$\begin{bmatrix} -G_c \frac{\partial}{\partial z} & 0 & 0 & P_1 & 0 & 0 \\ 0 & G - \frac{\partial}{\partial z} & 0 & Ch^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G + \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -Ch^* & -P_1 \\ P_1 & -Ch & 0 & G + \frac{\partial}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Ch & 0 & G - \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & -P_1 & 0 & 0 & -G_c \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (7)$$

onde:

$$G_c = F + \frac{1}{z}$$

$$G_{\pm} = \frac{1}{2} (\gamma_1 \pm 2\gamma_2)$$

$$P_1 = \frac{i}{\sqrt{6}} P$$

$$C_h = i \frac{\sqrt{3}}{2} k + \gamma_3$$

A eq. (7) representa a generalização da condição de contorno dada por BenDaniel and Duke [49] para massa efetiva parabólica e por Altarelli et al. [46] para o Hamiltoniano de Luttinger.

Para obter-se as componentes $A_j(z)$ do spinor, resolve-se o sistema de equações resultante quando $k=0$:

a. banda de condução

$$\frac{d^2}{dz^2} A_1 = K_c^2 A_1 + Q_e \frac{d}{dz} A_4$$

(8a)

$$\frac{d^2}{dz^2} A_6 = K_c^2 A_6 - Q_e \frac{d}{dz} A_3$$

onde:

$$K_c^2 = \frac{(E_g + E_v - E)}{\left(F + \frac{1}{2}\right)}$$

$$Q_c = i \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{P}{\left(F + \frac{1}{2}\right)}$$

b. banda de valência (light-hole)

$$\frac{d^2}{dz^2} A_3 = -K_L^2 A_3 + Q_L \frac{d}{dz} A_4$$

(8b)

$$\frac{d^2}{dz^2} A_4 = -K_L^2 A_4 - Q_L \frac{d}{dz} A_3$$

onde:

$$K_L^2 = \frac{2 (E_v - E)}{(\gamma_1 + 2 \gamma_2)}$$

$$Q_c = \frac{2 \sqrt{\frac{2}{3}}}{(\gamma_1 + 2\gamma_2)} \frac{P}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$$

c. banda de valência (heavy-hole)

$$\frac{d^2}{dz^2} A_z = -K_h^2 A_z$$

(8c)

$$\frac{d^2}{dz^2} A_s = -K_h^2 A_s$$

onde:

$$K_h^2 = \frac{2(E_v - E)}{(\gamma_1 - 2\gamma_2)}$$

Resolver as equações acima, acopladas, é muito difícil mesmo numericamente. Desacoplando-as obtem-se um número muito elevado de equações, para as quais as condições de contorno não são conhecidas. Para resolver esse impasse, considera-se inicialmente o parâmetro P igual a zero, e com isso consegue-se desacoplar as equações. As condições de contorno para resolver tais equações são

determinadas pelo tipo de hetero-estrutura a ser estudada.

Conhecendo-se os $A_j(z)$, diagonaliza-se o Hamiltoniano da ec. (2) para os valores de k desejados, obtendo-se assim a relação de dispersão $E \times K$.

V.3 - Campo Magnético Externo

Quando aplica-se um campo magnético na direção z , direção de crescimento da hetero-estrutura, quantiza-se também o movimento dos portadores no plano $x-y$, e com isso obtem-se um espectro dos níveis de Landau inteiramente discreto.

Considerando-se, pelos mesmos motivos que os apresentados no tópico anterior, que a energia de spin-órbita é infinita ($\Delta = \infty$), novamente obtem-se uma matriz 6×6 para descrever o movimento dos portadores na hetero-estrutura.

$$\begin{bmatrix} D_1^- & A & L^+ & B & 0 & 0 \\ A^+ & D_2^- & C^+ & S^+ & 0 & 0 \\ L & C & D_3^+ & 0 & -S^+ & B^+ \\ B & -S & 0 & D_4^- & C^+ & L^+ \\ 0 & 0 & S & C & D_5^- & A \\ 0 & 0 & B^+ & L & A^+ & D_1^- \end{bmatrix}$$

(9)

onde:

$$D_1^\pm = E_g + E_v + \omega_c \left[\left(F + \frac{1}{2} \right) (2a^\dagger a \pm 1) \pm \left(N_1 + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left(F + \frac{1}{2} \right) \frac{\partial}{\partial z}$$

$$D_2^\pm = E_v - \omega_c \left[(r_1 + r_2) (a^\dagger a \mp \frac{3}{2}) \pm \frac{3}{2} \left(R + \frac{9}{4} q \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \frac{(r_1 - 2r_2)}{2} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$D_3^\pm = E_v - \omega_c \left[(r_1 - r_2) (a^\dagger a \pm \frac{1}{2}) \mp \frac{1}{2} \left(R + \frac{1}{4} q \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \frac{(r_1 + 2r_2)}{2} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$A = \sqrt{\omega_c} P e^{i\theta} a^+$$

$$L = - \sqrt{\frac{\omega_c}{3}} P e^{i\theta} a^+$$

$$B = \frac{c}{\sqrt{6}} \left(\frac{\partial}{\partial z} P + P \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$C = \frac{\sqrt{3}}{2} \omega_c (\gamma_2 + \gamma_3) e^{i2\theta} a^+ a^+$$

$$S = i \sqrt{\frac{3\omega_c}{2}} e^{i\theta} a^+ \left(\frac{\partial}{\partial z} \gamma_3 + \gamma_3 \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

onde novamente as energias E_g e E_v são medidas a partir do topo de Γ_3 e usou-se unidades atômicas. Os operadores a e a^+ foram definidos em (IV.2 eq. (3 - 5))

$\omega_c = e B / c$ é a frequência de ciclotron (em unidades atômicas) θ é o ângulo de anisotropia do cristal no plano, x-y. Novamente considera-se os parâmetros T , N_2 e G iguais a zero, além do parâmetro N_3 .

O parâmetro N_1 é obtido através do fator giromagnético de bulk de Γ_6 por Weiler [25]

$$g_c^* = 2 + 4N_1 - \frac{4P^2}{3E_g} \quad (10)$$

onde tomou-se $\Delta = \infty$.

O movimento dos portadores na hetero-estrutura é determinado pela equação de Schrödinger

$$(\mathcal{H} + V) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (11)$$

onde $\mathcal{H}$ é dado por (9) e V é uma matriz diagonal 6×6 contendo qualquer potencial externo e tensões internas. $\psi(x, y, z)$ pode ser escrito como $\tilde{\psi}(x, y, z) = (A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6)$ onde:

$$\begin{aligned} A_1(x, y, z) &= H_{n-1}(\xi / r_c) A_1(z) \\ A_2(x, y, z) &= H_{n-2}(\xi / r_c) A_2(z) \\ A_3(x, y, z) &= H_n(\xi / r_c) A_3(z) \\ A_4(x, y, z) &= H_{n-1}(\xi / r_c) A_4(z) \\ A_5(x, y, z) &= H_{n+1}(\xi / r_c) A_5(z) \\ A_6(x, y, z) &= H_n(\xi / r_c) A_6(z) \end{aligned} \quad (12)$$

$H(\xi / r_c)$ são funções de oscilador harmônico onde ξ é um vetor no plano x - y e r_c é o raio ciclotrônico dado por $r_c = (c/eB)^{1/2}$ em unidades atômicas.

Como já discutido no capítulo IV (seção IV.2) para $n=-1$ a eq. (12) pode ser escrita como

$$\left\{ E_v - \omega_c \left[\frac{(f_1 + f_2)}{2} - \frac{3}{2} \left(p + \frac{q}{4} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \frac{(f_1 - 2f_2)}{2} \frac{\partial}{\partial z} \right\} A_s(z) = E A_s(z) \quad (12)$$

o que fornece um estado de $\Gamma_3 (J=3/2, m_J=-3/2)$.

Da mesma forma para $n=0$ obtem-se três estados: $\Gamma_6 (J=1/2, m_J=-1/2)$, $\Gamma_3 (J=3/2, m_J=-3/2)$ e $\Gamma_3 (J=3/2, m_J=-1/2)$, para $n=1$ obtem-se cinco estados: $\Gamma_6 (J=1/2, m_J=\pm 1/2)$, $\Gamma_3 (J=3/2, m_J=-3/2)$ e $\Gamma_3 (J=3/2, m_J=\pm 1/2)$. Para $n \geq 2$ obtem-se todos os seis estados.

Para obter-se os $A_s(z)$ segue-se o procedimento descrito no tópico anterior e com isso pode-se determinar os níveis de Landau ($E \times B$).

VI. POÇO QUANTICO DE GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs

VI.1 - Introdução

Como dito no capítulo I, hetero-estruturas de GaAs - Ga(Al)As tem sido, nos últimos anos, intensivamente estudadas, tanto experimentalmente como teoricamente. Assim sendo, o conhecimento adquirido sobre tais materiais e hetero-estruturas é bem maior do que o adquirido para outros sistemas. Com isso, optou-se por um poço finito de GaAs - Ga(Al)As, para se fazer um estudo sistemático dos parâmetros do modelo descrito no capítulo anterior.

Apesar de ser o sistema mais conhecido atualmente, ainda existem algumas controvérsias sobre o valor de alguns parâmetros que são utilizados no modelo, para descrever as interações entre as bandas. Como estes parâmetros são obtidos através do ajuste de dados experimentais provenientes de várias técnicas, isto provoca uma discordância entre seus valores. Entre os conjuntos de parâmetros encontrados na literatura [50-53] para GaAs e AlAs, optou-se pelos apresentados nas referências [50,52] por serem os mais aceitos atualmente. Como, para a maioria desses parâmetros não se conhece sua dependência com a concentração de Alumínio (x)

para a liga ternária $Ga_{1-x}Al_xAs$, tomou-se uma aproximação de ordem zero, ou seja, fez-se uma interpolação linear entre os parâmetros do GaAs e AlAs. Estes parâmetros são apresentados na Tabela II.

Controvérsia ainda maior ocorre na determinação das descontinuidades das bandas de condução e valência (Ev). Esta descontinuidade nas interfaces determina a maioria das propriedades da hetero-estrutura e, assim, constitui o parâmetro mais importante para o projeto de um dispositivo [54]. Na literatura existem vários trabalhos sobre o valor desta descontinuidade [55-59], mas como o valor mais aceito atualmente é uma descontinuidade de 60 % da diferença dos gaps dos materiais constituintes para a banda de condução e 40 % desta diferença para a banda de valência, adotou-se estes valores para os resultados aqui apresentados (figura (5)).

Para se fazer um estudo do modelo, foi escolhido um poço quântico com uma camada de GaAs de $100 \text{ \AA}$ e com barreiras de $Ga_{1-x}Al_xAs$ com $x = 0.3$

VI.2 - Poço Finito de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$

Analisou-se primeiramente, a característica fundamental

TABELA II

Parâmetros para $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$

PARÂMETROS	DEPENDÊNCIA	UNID ($\bar{A} = 100 \text{ \AA}$)
$\gamma_1(x)$	$6.85 - 3.40 x$	meV . $\bar{A}^2$
$\gamma_2(x)$	$2.10 - 1.42 x$	meV . $\bar{A}^2$
$\gamma_3(x)$	$2.90 - 1.61 x$	meV . $\bar{A}^2$
$m^*(x)$	$0.0665 + 0.1535 x$	m_0
$P(x)$	$98.95 - 9.29 x$	meV . $\bar{A}$
$E_g(x)$	$1519.2 + 1040.0 x + 470.0 x^2$	meV
$E_v(x)$	$- 0.4 (1040.0 x + 470.0 x^2)$	meV
$F(x)$	$1/2m^* - 1/2 - 2P^2/3E_g$	meV . $\bar{A}^2$

Figura 5. Poço quântico de GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs

Diagrama das bandas de energia para um poço quântico de GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs onde estão indicadas as discontinuidades das bandas de condução e valência.

deste modelo em detrimento com os já existentes na literatura, ou seja, analisou-se o efeito da interação entre as bandas de condução e valência sobre a estrutura de sub-bandas. Esta interação é dada pelo parâmetro P .

Nos trabalhos de Ando [60], Altarelli et al. [46] e Bastard and Brum [61], apenas a interação entre as bandas de valência (heavy-holes e light-holes) é tratada. Para recobrar estes resultados, no modelo aqui descrito, basta tomar $P=0$.

Na figura (6) é apresentada a relação de dispersão para a banda de condução e na figura (7) para a banda de valência do poço citado acima. Nas figuras (6d) e (7d) as linhas sólidas são o resultado do modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (6x6), as linhas tracejadas são os resultados para $P=0$ e as linhas pontilhadas são os resultados obtidos com a aproximação parabólica e calculados com as respectivas massas de bulk.

Pode-se notar uma forte não-parabolicidade e a formação de mini-gaps, tanto na banda de condução como na banda de valência. Os mini-gaps na banda de condução (figura (6c)) são uma consequência da diferente não-parabolicidade de cada nível, assim, quando $E_n(k)$ aproxima-se de $E_{n+1}(k)$ o acoplamento do Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ produz o afastamento entre os níveis. A banda de valência (figura (7c)) é predominantemente não-parabólica para pequenos valores de k , onde a dispersão é determinada pelos termos lineares em k . Os termos da diagonal, quadráticos em k , dominam a dispersão para grandes valores de k .

Figura 6. Relação de dispersão para a banda de condução para um poço quântico de GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As de 100 Å.

- Banda de condução parabólica calculada com a massa de bulk ($m^* = 0.0665$).
- Relação de dispersão calculada sem interação entre as bandas de condução e valência ($P=0$).
- Estrutura de banda de condução calculada através do Hamiltoniano $\vec{K} \cdot \vec{p}$ (6x6).
- Comparação entre o primeiro estado da banda de condução calculado através: aproximação parabólica (linha pontilhada), sem acoplamento entre as bandas de condução e valência (linha tracejada) e Hamiltoniano $\vec{K} \cdot \vec{p}$ (6x6) (linha sólida).

Figura 7. Relação de dispersão para a banda de valência para um poço quântico de GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As de 100 Å.

- Banda de valência parabólica calculada com as massas de bulk ($m_e^* = 0.3774$ e $m_h^* = 0.090$).
- Relação de dispersão calculada sem interação entre as bandas de condução e valência ($P=0$).
- Estrutura de banda de valência calculada através do Hamiltoniano $\tilde{K} \cdot \tilde{p}$ (6×6).
- Comparação entre o primeiro estado da banda de valência calculado através: aproximação parabólica (linhas pontilhadas), sem acoplamento entre as bandas de condução e valência (linhas tracejadas) e Hamiltoniano $\tilde{K} \cdot \tilde{p}$ (6×6) (linhas sólidas).

O principal efeito do acoplamento entre as bandas de condução e valência, é alterar as massas efetivas, que, como dito acima, deve-se aos termos lineares em k . A diferença nos valores das energias em $k=0$ é devida ao acoplamento que mistura elétrons e light-holes mesmo em $k=0$ e é representado pelos elementos B no Hamiltoniano (V.2 eq. (2)). Estas características são importantes no estudo de muitas propriedades eletrônicas, tais como, a formação de excitons e fotoluminescência. Note que o exciton de heavy-hole é formado por estados em $k=0$. A massa efetiva reduzida no plano $x-y$ é determinada pela curvatura da mais baixa sub-banda de condução e pela mais alta sub-banda de valência. Por sua vez, o exciton de light-hole é formado por um elétron em $k=0$ e um buraco no máximo do segundo ramo da sub-banda de valência em $k=k_0$, o qual depende da largura do poço e da altura da barreiras. Assim sendo, a determinação precisa da relação de dispersão é fundamental para o cálculo das energias de ligação dos excitons.

Outro aspecto interessante para se analisar, é como varia a estrutura de sub-bandas em função da direção de k , no plano $x-y$. Nas figuras (8a) e (8b) é apresentada a relação de dispersão para as sub-bandas de condução e valência respectivamente, para os casos extremos, ou seja, k nas direções $[10]$ e $[11]$. Para a banda de condução a anisotropia é muito pequena, sendo notada somente para grandes valores de k nos níveis mais altos. Mas, para a banda de valência, a anisotropia é muito mais pronunciada, principalmente para os níveis mais baixos, e aumenta quando k

Figura 8. Anisotropia das bandas

Estrutura de bandas para um poço quântico de GaAs - $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ de 100 Å em função da direção do vetor k no plano x - y . As linhas sólidas e as linhas tracejadas denotam as direções $[10]$ e $[11]$ respectivamente, onde
a. banda de condução
b. banda de valência.

crece. Isto provoca uma dependência na massa efetiva dos portadores com a direção de k , o que afeta as propriedades de transporte do sistema.

VI.3 - Poço Finito de GaAs - $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ na Presença de um Campo Magnético Externo

Utilizando-se o modelo descrito na seção V.3 estudou-se o comportamento dos níveis de Landau como função do campo magnético externo. Três novos parâmetros aparecem no Hamiltoniano (V.3 ec. (9)) N_1 , R e q descritos no capítulo IV. Nas figuras (9a) e (9b) são apresentadas as curvas $E \times B$ para o nível de Landau $N=2$ para as bandas de condução e valência respectivamente. As linhas sólidas, em ambas as figuras, foram calculadas com N_1 , R e q diferentes de zero e as linhas tracejadas foram obtidas com N_1 , R e q iguais a zero. Para a liga $Ga_{1-x}Al_xAs$ esses parâmetros tem a seguinte dependência com a concentração de Alumínio:

$$N_1 = 2.30 - 1.26 x$$

$$R = 1.72 - 1.60 x$$

$$q = 0.04 - 0.01 x$$

Figura 9. Nível de Landau $N=2$

Compara-se as energias do nível de Landau $N=2$ em função do campo magnético para N_1, k e q iguais a zero (linhas tracejadas) e para N_1, k e q diferentes de zero (linhas sólidas) para um poço de 100 Å de $\text{GaAs} - \text{Al}_{0.3}\text{As}$, onde
a. banda de condução
b. banda de valência

Na banda de condução os níveis de energia são praticamente lineares com o campo, o que não acontece para a banda de valência. Nesta, os níveis de energia são funções bastante complicadas do campo, o que mais uma vez mostra a grande não-parabolicidade da banda de valência. Em ambas as figuras, figuras (9a) e (9b), o efeito dos parâmetros N_1 , $\bar{R}$ e q é diminuir o splitting entre os níveis com spin para cima e com spin para baixo.

Nas figuras (10a) e (10b) são mostradas as curvas de $E \times B$ para (figura (10a)) os 2 estados mais baixos da sub-banda de condução para os níveis de Landau $N=0$, $N=1$ e $N=2$. Na figura (10b) tem-se os dois primeiros estados da sub-banda de valência para os níveis de Landau $N=-1$, $N=0$, $N=1$ e $N=2$. Nota-se, na banda de valência, uma fraca dependência com o campo magnético dos níveis de Landau $N=-1$ e $N=0$, e uma dependência mais complexa com o campo para os níveis com N mais altos. Cabe ressaltar que o nível de Landau $N=-1$ é um estado puramente heavy-hole.

Como pode-se notar, o efeito do acoplamento entre as bandas de condução e valência é de fundamental importância, pois altera toda a estrutura de sub-bandas do sistema, principalmente próximo dos máximos das bandas, ou seja, $k=0$. Portanto não deve-se desprezá-lo quando deseja-se estudar propriedades que dependam de detalhes da relação de dispersão.

Figura 10. Energia versus campo magnético para um poço quântico de 100 Å de GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As

- Níveis de Landau para os dois estados mais baixos da banda de condução, onde: linhas sólidas (N=2), linhas tracejadas (N=1) e linhas pontilhadas (N=0).
- Níveis de Landau para os dois primeiros estados da banda de valência, onde: linhas sólidas (N=2), linhas tracejadas (N=1), linhas pontilhadas (N=0) e linhas tracejadas-pontilhadas (N=-1).

VII. SEMICONDUTORES SEMIMAGNÉTICOS

VII.1 - Introdução - Propriedades de Bulk

As propriedades magnéticas de um novo grupo de materiais semicondutores - semicondutores semimagnéticos [62-64] ou semicondutores magnéticos diluídos [65] - tem sido intensivamente estudadas desde 1977 quando Komarov et al. [66] relataram pela primeira vez um grande aumento dos efeitos magnéto-óticos em Cd(Mn)Te. Semicondutores Semimagnéticos são de fato soluções sólidas do tipo $A_{1-x}M_xB$, as quais são formadas pela substituição do componente A em um composto semicondutor comum AB por um componente magnético M com estrutura eletrônica 3d ou 4f. Se o composto MB é um semicondutor magnético, então, as soluções sólidas $A_{1-x}M_xB$ preenchem continuamente "o gap" entre os semicondutores normais não magnéticos e os semicondutores magnéticos. Neste caso $A_{1-x}M_xB$ é o "elo de ligação" entre AB e MB e a terminologia 'semicondutores semimagnéticos' adequadamente reflete esta situação. Diluindo-se compostos magnéticos MB com íons não magnéticos A pode-se referir aos compostos $A_{1-x}M_xB$ como 'semicondutores magnéticos diluídos'.

Na ausência de campo magnético externo ($B=0$) semicondutores

semimagnéticos típicos como $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, etc., comportam-se de maneira similar ao $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Ambos os compostos ternários, $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ e $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, tem estrutura de bandas de condução e valência a qual depende da substituição de Hg por Mn ou Cd: mudando-se a composição x, pode-se modificar a estrutura de bandas, ou seja, as massas efetivas de elétrons e buracos, gap de energia, etc.

A diferença qualitativa entre $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ e $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ é revelada quando um campo magnético externo é aplicado ($B \neq 0$). Neste caso a presença dos íons magnéticos, através da interação de troca γ entre os momentos magnéticos localizados e os elétrons de Bloch, essencialmente afeta o comportamento dos portadores livres. Como uma primeira aproximação, a mudança de comportamento da banda de elétrons pode ser descrita através da introdução de uma média de spin $\langle S_z \rangle$ proporcional à magnetização do bulk.

Em contraste com os semicondutores magnéticos, onde o sistema de íons magnéticos que interagem fortemente está em um estado magnético que não reage (ou reage muito fracamente) ao campo magnético externo, os íons magnéticos nos semicondutores semimagnéticos respondem ao campo magnético aplicado e, ao mesmo tempo, sua concentração em semicondutores semimagnéticos é quase a mesma que em semicondutores magnéticos. Nesta situação o componente M caracterizado pela polarização de spin $\langle S_z \rangle$ desempenha, em um cristal semiconductor semimagnético, o papel de

um "amplificador" do campo magnético externo, onde o fator de amplificação, fator giromagnético, é da ordem de 300 [67]. Este fenômeno torna possível observar, em semicondutores semimagnéticos em campos externos moderados, efeitos magneto-óticos extremamente grandes. Splitting Zeeman gigante da banda excitônica [66,68-71], grande rotação de Faraday [66,70,72], shift de Stokes gigante da combinação spin-flip da luz espalhada [73-76], e outros efeitos anômalos, tal como a dependência não usual da energia de ativação do aceitador com o campo magnético em semicondutores semimagnéticos de gap estreito $\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ [77-80] e aumento do fator giromagnético por duas ordens de magnitude ($g \sim 300$) [67,79,81,82].

A média de spin com a temperatura e o campo magnético, $\langle S_z \rangle = f(\mu_B B / k_B T)$, torna possível observar, em um semicondutor semimagnético, efeitos onde a variação de temperatura atua de maneira similar a uma mudança de B : ambos, diminuição de temperatura e aumento no campo magnético resultam em um aumento da polarização de spin $\langle S_z \rangle$. Esta é a razão para a existência de dependência exótica com a temperatura da amplitude de oscilação quântica (Shubnikov-de Haas) em semicondutores semimagnéticos [81,83-85]. Por exemplo, uma variação da temperatura em um semicondutor semimagnético induz "damping" do primeiro harmônico medido em um campo magnético fixo B_0 .

As anomalias mencionadas acima são observadas indistintamente em semicondutores semimagnéticos. Esta

circunstância, indubitavelmente, justifica a definição dos semicondutores semimagnéticos como um novo grupo de compostos semicondutores.

VII.2 - Poços Quânticos de CdTe - Cd(Mn)Te

Recentemente hetero-estruturas de compostos II - VI tais como CdTe - $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ e $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ - $\text{Cd}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ tem sido crescidas por MBE [86,87] e estudadas por várias técnicas [88-94].

Nestas hetero-estruturas as propriedades de bulk citadas acima são mantidas e pode-se também manipular algumas propriedades físicas através de uma variação na concentração x do íon Mn. Três importantes parâmetros da hetero-estrutura dependem desta concentração. O primeiro parâmetro é a descontinuidade das bandas, a qual, adotou-se aqui, aumentar linearmente com x . Como uma consequência, camadas de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ de espessura L_0 são apropriadas para se usar como barreiras para poços quânticos de CdTe de espessura L_z . Isto é mostrado esquematicamente na figura (11), onde a estrutura eletrônica de um poço quântico de CdTe - $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ é ilustrada. Na figura, E_0 é o gap da barreira de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, E_z é o gap do bulk de CdTe. Todas as energias são

Figura 11. Hetero-estrutura de CdTe - Cd_{1-x}Mn_xTe.

Diagrama das bandas de energia para uma hetero-estrutura de CdTe - Cd_{1-x}Mn_xTe.

medidas em relação ao topo da banda de valência do CdTe. Sabe-se, de resultados experimentais, que a descontinuidade das bandas é muito pequena, mas seu valor ainda não está bem estabelecido.

O segundo parâmetro que varia com x é a diferença entre as constantes de rede [95] dos dois tipos de camadas. Esta variação ocasiona o aparecimento de tensões na camada de CdTe, o que pode mudar as características da hetero-estrutura. O terceiro parâmetro importante que muda com x é a fase magnética da liga. Cristais de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ com $x > 0.17$ sofrem uma transição de fase paramagnética para spin-glass à baixas temperaturas [96]. Para $x < 0.17$ a liga permanece paramagnética para todas as temperaturas. Assim, em hetero-estruturas com barreiras de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ com $x > 0.17$, pode-se ter uma mudança de fase magnética da barreira, simplesmente variando-se a temperatura.

Novamente, do ponto de vista do cálculo da estrutura eletrônica, a maior dificuldade para se tratar este sistema, é a obtenção dos parâmetros a serem utilizados no modelo. A dificuldade encontrada aqui, é maior do que a encontrada no sistema GaAs - Ga(Al)As, pois a liga ternária $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ não é tão conhecida como $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Assim sendo, alguns parâmetros utilizados para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, são parâmetros do CdTe, ou seja, não variam com a concentração x (Tabela III). Desde que a concentração de Mn não seja muito grande isto é plenamente justificável e não deve introduzir erros significativos. Para a descontinuidade das bandas, a única informação que se tem é de

TABELA III

Parâmetros para $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$

PARAMETROS	DEPENDÊNCIA	UNID ($\bar{A} = 100 \text{ \AA}$)
$\hat{V}_1(x)$	$5.29 + 29.15 x$	meV . $\bar{A}^2$
$\hat{V}_2(x)$	$1.89 + 6.74 x$	meV . $\bar{A}^2$
$\hat{V}_3(x)$	$2.46 + 1.04 x$	meV . $\bar{A}^2$
$P(x)$	88.81	meV . $\bar{A}$
$E_g(x)$	$1595.0 + 1592.0 x$	meV
$E_v(x)$	$- 318.0 x$	meV
$F(x)$	0.41	meV . $\bar{A}^2$
$N_1(x)$	1.37	meV . $\bar{A}^2$
$R(x)$	1.27	meV . $\bar{A}^2$
$q(x)$	0.05	meV . $\bar{A}^2$

que esta deve ser pequena para a banda de valência, sendo que ainda não se tem seu valor obtido experimentalmente. Com isso, para efeito de cálculo, adotou-se a relação 80 % / 20 % da diferença dos gaps para as descontinuidades das bandas de condução e valência, respectivamente e variação linear com a concentração x .

Para os cálculos utilizou-se um poço de 50 Å de CdTe com barreiras de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ com $x=0.06$.

Nas figuras (12a) e (12b) é mostrada a relação de dispersão para as bandas de condução e valência, respectivamente. Obteve-se um comportamento que, de forma geral, assemelha-se ao obtido para o sistema GaAs - $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. A ocorrência de mini-gaps na banda de condução para valores de k - paralelo menores do que os encontrados para o GaAs - $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, deve-se principalmente ao fato de que o poço aqui utilizado é menor e isto faz com que os níveis ligados se aproximem mais do contínuo aumentando a interação entre eles. Nota-se também, uma diminuição da não-parabolicidade da banda de valência, o que deve-se, em parte, ao menor tamanho do poço, mas também ao fato de que este sistema possui um gap maior, o que diminui a interação entre as bandas de condução e valência.

Figura 12. Estrutura de bandas para um poço quântico de 50 Å de CdTe - Cd_{0.94}Mn_{0.06}Te.

a. banda de condução
b. banda de valência

VII. 3 - Poço Quântico de CdTe - $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ na Presença de um Campo Magnético Externo

Os íons Mn no semiconductor $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ estão distribuídos aleatoriamente na sub-rede fcc do elemento Cd e a camada 3d⁵ semi-preenchida é altamente localizada em cada sítio. Os cinco elétrons formam um momento magnético localizado que interage com os elétrons das bandas. Esta interação pode ser descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{\text{ex}} = \sum_{\vec{R}_i} J(\vec{r} - \vec{R}_i) \hat{S}_i \cdot \hat{G} \quad (1)$$

onde $\hat{S}_i$ e $\hat{G}$ são os operadores de spin do i-ésimo íon Mn e da banda de elétrons respectivamente, J é a constante de interação de troca e os vetores $\vec{r}$ e $\vec{R}_i$ definem as coordenadas dos elétrons das bandas e dos íons Mn respectivamente. A soma em (1) é feita sobre os íons Mn apenas.

A banda de elétrons, representada pelas funções de onda de Bloch, interage simultaneamente com um grande número de íons Mn. Então, o operador de spin $\hat{S}_i$ pode ser substituído pela sua média térmica $\langle S_i \rangle$ na aproximação de campo médio. Por esse mesmo motivo, pode-se usar a aproximação VCA (Virtual Crystal

Approximation) para escrever $\mathcal{F}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ como $x \mathcal{F}(\vec{r} - \vec{R})$, onde x é a concentração dos íons Mn e R é um vetor da rede. Assim, para um campo magnético na direção z tem-se:

$$H_{ex} = x G_z \langle S_z \rangle \sum_{\vec{R}} \mathcal{F}(\vec{r} - \vec{R}) \quad (2)$$

onde a soma agora é feita sobre todos os sítios da rede de Bravais.

A média térmica do operador de spin, $\langle S_z \rangle$, para pequenas concentrações de Mn, pode ser descrita por uma função de Brillouin $B_S(y)$ modificada

$$\langle S_z \rangle = S_0(x) B_S \left\{ \frac{S g \mu_B B}{k_B [T - T_0(x)]} \right\} \quad (3)$$

onde $S_0(x)$ é o spin de saturação devido a formação de clusters; S e g são o spin e o fator g do íon magnético respectivamente; μ_B é o magneton de Bohr; k_B é a constante de Boltzmann e B o campo magnético; T é a temperatura da amostra e $T_0(x)$ é uma temperatura efetiva ajustável para cada liga.

A principal vantagem da forma H_{ex} dada em (2) sobre a dada em (1) é a sua periodicidade, a qual possibilita escrever a

interação de troca na mesma base em que foi escrito o Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (seção V.2).

Com isso obtém-se Hex (a qual será utilizada como a energia potencial na eq. (9) (seção V.3) da forma:

$$\begin{bmatrix} Q/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -T/6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & T/6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -T/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Q/2 \end{bmatrix}$$

(4)

onde

$$Q = x N_0 \alpha \langle S_z \rangle$$

$$T = x N_0 \beta \langle S_z \rangle$$

e

$$\alpha = \langle s | g | s \rangle$$

$$\beta = \langle x | g | x \rangle$$

são os elementos de matriz da interação de troca para a banda de condução e valência respectivamente. N_0 é o número de células por centímetro cúbico.

Para o sistema aqui estudado, poço de CdTe de 50 Å com barreiras de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ com $x=0.06$, os valores dos parâmetros determinados experimentalmente são os seguintes [69]:

$$\begin{aligned} N_0 \alpha &= 220.0 \text{ meV} \\ N_0 \beta &= -880.0 \text{ meV} \\ T &= 1.8 \text{ K} \\ T_0 &= 2.25 \text{ K} \\ S_0 &= 1.4 \end{aligned} \tag{5}$$

Nas figuras (13a) e (13b) faz-se uma comparação entre as

Figura 13. Efeito do potencial magnético de troca sobre os níveis de Landau

Mostra-se o efeito do termo de interação de troca sobre os nível de Landau $N=2$ para um poço quântico de 50 Å de $\text{CdTe} - \text{Cd}_{0.94}\text{Mn}_{0.06}\text{Te}$. Para o potencial magnético de troca diferente de zero tem-se as linhas sólidas, enquanto que para este igual a zero tem-se as linhas tracejadas em

a. banda de condução
b. banda de valência

curvas $E \times B$ obtidas para o nível de Landau $N=2$, com o termo do potencial magnético de troca (linhas sólidas) e sem o termo do potencial magnético de troca (linhas tracejadas). Pode-se notar que os níveis da banda de condução são praticamente lineares como função do campo e que o efeito das barreiras magnéticas é muito pequeno sobre estes níveis. Isto deve-se ao fato de que o poço na banda de condução é profundo, fazendo que a função de onda dos elétrons penetre pouco nas barreiras. Para a banda de valência, a dependência dos níveis com o campo já é bem mais complexa, principalmente quando o potencial magnético das barreiras é levado em conta. O efeito das barreiras é mais pronunciado para a banda de valência, porque a função de onda dos buracos penetra muito mais nesta, do que a função de onda dos elétrons, devido à pequena descontinuidade e ao grande valor da integral de troca β . Deve-se também a isto, o efeito da magnetização ser mais acentuado nos níveis superiores do que nos níveis inferiores.

Nas figuras (14a) e (14b) são apresentadas as curvas de $E \times B$ para os dois primeiros estados das bandas de condução e valência respectivamente, para os níveis de Landau $N=0$, $N=1$ e $N=2$. Nota-se, além da complexa dependência com B dos níveis, o efeito de splitting de spin em cada sub-banda e o comportamento altamente anômalo do fator giromagnético efetivo. Estas características desempenham um papel significativo nas propriedades magneto-ópticas das hetero-estruturas dos semicondutores semimagnéticos.

Figura 14. Energia versus campo magnético para um poço quântico de CdTe - $\text{Cd}_{0.94}\text{Mn}_{0.06}\text{Te}$ de 50 Å.

Mostra-se os níveis de Landau $N=0$ (linhas pontilhadas), $N=1$ (linhas tracejadas) e $N=2$ (linhas sólidas) para
 a. banda de condução
 b. banda de valência

VIII. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Os resultados apresentados neste trabalho mostram que, apesar de se estar tratando sistemas onde a energia de gap é considerada grande, ainda assim, a interação entre as bandas de condução e valência desempenha um papel importante. Nota-se a ocorrência de uma alteração significativa nos níveis da banda de valência quando esta interação é levada em conta, além de se obter uma variação da quasi-parabolicidade da banda de condução, espelhada pela variação da massa efetiva em função da concentração dos materiais e da largura do poço (figura (15)).

Como dito na Introdução (capítulo I) , uma comparação quantitativa dos resultados aqui obtidos com os resultados experimentais encontrados na literatura é bastante difícil. Porém, isso não impede que uma comparação qualitativa seja feita. Na figura (16a) é apresentada a energia de transição como função do campo magnético para o sistema GaAs - Ga(Al)As. Como pode-se notar, os resultados obtidos para campos magnéticos maiores do que 4 T são comparáveis qualitativamente com os resultados experimentais apresentados na figura (16b). O comportamento dos níveis de menor energia do resultado experimental não é obtido porque estes níveis são devidos a excitons, o que não é levado em conta no modelo. Nas figuras (17a) e (17b) o mesmo tipo de

Figura 15. Massa efetiva de elétrons

Massa efetiva de elétrons no plano x-y em função da largura do poço de GaAs - $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ calculada da curvatura do estado fundamental da banda de condução. Note, que obtem-se os valores esperados de bulk nos limites $L \rightarrow \infty$ (GaAs) e $L \rightarrow 0$ (Ga(Al)As).

FIG. 2. Energy of the maxima in the excitation spectra as a function of magnetic field for (a) σ^+ and (b) σ^- polarization of the exciting light. The open circles correspond to strong and the full circles to weak transitions. The drawn lines are a guide to the eye.

Figura 16. Energia de transição em função do campo magnético para um poço quântico de GaAs - Ga(Al)As.

- Resultados obtidos utilizando-se o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ com um Hamiltoniano (6x6)
- Resultados experimentais de Maan et al. [97]

FIG. 3. Exciton peak energies versus applied magnetic field for sample 1 ($T=1.8$ K; $E_L=2.539$ eV). Dashed curves are shown for clarity.

FIG. 6. Exciton peak energies as a function of applied magnetic field for sample 2 at $T=1.8$ K ($E_L=2.539$ eV). Dashed curves are shown for clarity.

Figura 17. Energia de transição em função do campo magnético para um poço quântico de CdTe - Cd(Mn)Te.

- Resultados obtidos utilizando-se o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ com um Hamiltoniano (6x6)
- Resultados experimentais de Warnock et al. [94]

comparação é feito para o sistema $\text{CdTe} - \text{Cd(Mn)Te}$. Note novamente a boa concordância qualitativa dos resultados obtidos (figura (17a)) com os resultados experimentais (figura (17b)).

Várias são as perspectivas de futuros trabalhos, dentre os quais pode-se citar:

1. Aplicar o modelo a sistemas de gap estreito, tanto para semicondutores normais como para semicondutores semimagnéticos, pois nestes sistemas a interação entre as bandas de condução e valência é fundamental.

2. Tornar o cálculo auto-consistente, com o objetivo de estudar sistemas dopados.

3. Aplicar o modelo a sistemas uni-dimensionais (Quantum Well Wires), onde o confinamento em duas direções modifica drasticamente as propriedades do sistema. Atualmente estes sistemas tem atraído muita atenção.

4. Utilizar os resultados obtidos para calcular: absorção ótica, energia de ligação de excitons na presença ou não de campo magnético externo, polaron ligado ou não em sistemas semimagnéticos, etc.

Espera-se que os resultados apresentados aqui e os apresentados nas publicações provenientes deste trabalho, possam contribuir para um maior entendimento das hetero-estruturas, principalmente as constituídas de semicondutores semimagnéticos, e com isso aumentar, ainda mais, o interesse tecnológico destes sistemas.

IX. REFERÊNCIAS

- [1] - L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop., 14, 61 (1970)
- [2] - A. Y. Cho, Appl. Phys. Lett., 19, 467 (1971)
- [3] - H. M. Manasevit, Appl. Phys. Lett., 12, 156 (1968)
- [4] - W. T. Tsang, Appl. Phys. Lett., 45, 1234 (1984)
- [5] - L. L. Chang, L. Esaki, W. E. Howard, and R. Ludeke, J. Vac. Sci. Technol., 10, 11 (1973)
- [6] - L. Esaki and L. L. Chang, Phys. Rev. Lett., 33, 495 (1974)
- [7] - R. Dingle, Advances in Solid State Physics, Vol. XV, edited by H. J. Queisser (Braunschweig: Pergamon-Vieweg), 21
- [8] - R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett., 33, 665 (1978)
- [9] - K. von Klitzing, H. Obloh, G. Ebert, J. Knecht, and K. Ploog, Natn. Bur. Stand. Spec. Publ., 617, 382 (1981)
- [10] - D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B, 25, 1405 (1982)
- [11] - D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett., 48, 1559 (1982)
- [12] - G. Ebert, K. von Klitzing, C. Probst, and K. Ploog, Solid Sta. Comm., 44, 1559 (1982)
- [13] - L. A. Kolodziejski, T. Sakamoto, R. L. Gunshor, and S. Datta, Appl. Phys. Lett., 44, 799 (1984)

- [14] - T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fujii, and K. Nanbu, Jpn. J. Appl. Phys., 19, L225 (1980)
- [15] - W. T. Tsang, Appl. Phys. Lett., 39, 786 (1981)
- [16] - L. Esaki, L. L. Chang, W. E. Howard, and V. L. Rideout, Proc. 11th Int. Conf Phys. Semiconductors, Warsaw, Poland, 431 (1972)
- [17] - L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, Appl. Phys. Lett., 24, 593 (1974)
- [18] - S. R. White and L. J. Sham, Phys. Rev. Lett., 47, 879 (1981)
- [19] - G. Bastard, Phys. Rev. B, 24, 5693 (1981)
- [20] - G. Bastard, Phys. Rev. B, 25, 7584 (1982)
- [21] - M. Altarelli, Phys. Rev. B, 28, 842 (1983)
- [22] - J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev., 97, 869 (1955)
- [23] - J. M. Luttinger, Phys. Rev., 102, 1030 (1956)
- [24] - E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids, 1, 249, (1957)
- [25] - M. H. Weiler, Semiconductors and Semimetals, Vol. 1E, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic Press Inc., N. Y. 1981), 119
- [26] - J. C. Phillips, Phys. Rev., 112, 685 (1958)
- [27] - A. Messiah, Quantum Mechanics (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1966)
- [28] - G. Dresselhaus, Phys. Rev., 100, 580 (1955)
- [29] - P. O. Löwdin, J. Chem. Phys., 19, 1396 (1951)
- [30] - T. Ando, R. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys., 54,

- [31] - C. C. Grimes, *Surf. Sci.*, 73, 379 (1978)
- [32] - F. I. B. Williams, *Surf. Sci.*, 113, 371 (1982)
- [33] - G. Gamov, *Z. Phys.*, 51, 204 (1928)
- [34] - R. W. Gurney and E. U. Condon, *Phys. Rev.*, 33, 127 (1929)
- [35] - H. Faxen and J. Holtsmark, *Z. Phys.*, 45, 307 (1927)
- [36] - Y. Takada, K. Arai, U. Uchimura, and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Japan*, 49, 1851 (1980)
- [37] - G. E. Marques and L. J. Sham, *Surf. Sci.*, 113, 131 (1982)
- [38] - F. J. Ohkawa and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Japan*, 37, 1325 (1974)
- [39] - T. Ando, *J. Phys. Soc. Japan*, 51, 3893 (1982)
- [40] - F. Stern and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B*, 39, 840 (1984)
- [41] - D. A. Broido and L. J. Sham, *Phys. Rev. B*, 31, 888 (1985)
- [42] - E. Bangert and G. Landwehr, *Superlattices and Microstructures*, 1, 363 (1985)
- [43] - S. S. Nedorezov, *Sov. Phys. Solid State*, 12, 1814 (1971)
- [44] - F. J. Ohkawa and Y. Uemura, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 57, 164 (1975)
- [45] - S. R. White, G. E. Marques, and L. J. Sham, *J. Vac. Sci. Technol.*, 21, 544 (1982)
- [46] - M. Altarelli, U. Ekenberg, and M. Fasolino, *Phys. Rev. B*, 32, 5138 (1985)
- [47] - Y. R. Lin-Liu and L. J. Sham, *Phys. Rev. B*, 32, 5561 (1985)

- [48] - M. Cardona, N. E. Christensen, and G. Fasol, Phys. Rev. Lett., 56, 2831 (1986)
- [49] - D. J. BenDaniel and C. B. Duke, Phys. Rev., 152, 683 (1966)
- [50] - P. Lawaetz, Phys. Rev. B, 4, 3460 (1971)
- [51] - H. C. Casey Jr., and M. B. Panish, Heterostructure Lasers, part A and B, edited by Y. H. Pao and P. Kelley (Academic Press Inc., N. Y. 1978)
- [52] - Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Vol. 17 of Landolt-Börnstein, edited by D. Madelung (Springer, Berlin, 1982)
- [53] - M. F. H. Schuurmans and G. W. 't Hooft, Phys. Rev. B, 31, 8041 (1985)
- [54] - H. Krömer, J. Vac. Sci. Technol. B, 2, 433 (1984)
- [55] - R. Dingle, in Festkörperprobleme, edited by H. J. Queisser (Vieweg, Braunschweig, 1975) Vol. 15, 21
- [56] - R. C. Miller, D. A. Kleinman, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B, 29, 7085 (1984)
- [57] - W. I. Wang, E. E. Mendez, and F. Stern, Appl. Phys. Lett., 45, 639 (1984)
- [58] - H. Okumura, S. Misawa, S. Yoshida, and S. Gonda, Appl. Phys. Lett., 46, 377 (1985)
- [59] - Y. Horikoshi, A. Fischer, and K. Ploog, Phys. Rev. B, 31, 7859 (1985)
- [60] - T. Ando, J. Phys. Soc. Japan, 54, 1528 (1985)

- [61] - G. Bastard and J. A. Brum, IEEE J. of Quantum Electronics, 22, 1625 (1986)
- [62] - R. R. Galazka, Physics of Semiconductors, edited by B. L. H. Wilson, Inst. Phys. Conf. Ser., 43, 133 (London: The Institute of Physics) (1978)
- [63] - J. A. Gaj, J. Phys. Soc. Japan, 49, Suppl. A, 797 (1980)
- [64] - R. R. Galazka, Lect. Notes Phys., 152, 294 (1982)
- [65] - J. K. Furdyna, J. Appl. Phys., 53, 7637 (1982)
- [66] - A. V. Komarov, S. M. Rjabchenko, O. V. Terletskii, I. I. Zheru, and R. D. Ivanchuk, Zh. éksp. teor. Fiz, 73, 608 (1977)
- [67] - D. Heiman, P. A. Wolff, and J. Warnock, Phys. Stat. Sol (b), 27, 4848 (1983)
- [68] - J. A. Gaj, J. Ginter, and R. R. Galazka, Phys. Stat. Sol (b), 89, 655 (1978)
- [69] - J. A. Gaj, R. Planel, and G. Fishman, Solid Sta. Comm, 28, 435 (1979)
- [70] - S. I. Gubarev, Zh. éksp. teor. Fiz, 80, 1174 (1981)
- [71] - A. Twardowski, Phys. Lett. A, 94, 103 (1983)
- [72] - P. Byszewski, M. Z. Cieplak, and M. Romanis, J. Phys. C, 12, L941, (1979)
- [73] - M. Nawrocki, R. Planel, G. Fishman, and R. R. Galazka, J. Phys. Soc. Japan, 49, Suppl. A, 823 (1980)
- [74] - D. L. Aloy, S. I. Gubarev, V. B. Timofeev, and B. N. Shepel, Pis'ma Zh. éksp. teor. Fiz., 34, 76 (1981)

- [75] - D. L. Peterson, A. Petrou, M. Dutta, A. K. Ramdas, and E. Rodrigues, Solid Sta. Comm., 43, 667 (1982)
- [76] - D. L. Alov, S. I. Gubarev, and V. B. Timofeev, Zj. éksp. teor. Fiz., 84, 1806 (1983)
- [77] - C. Rigaux, G. Bastard, Y. Guldner, G. Rebmann, A. Mycielski, J. K. Furdyna, and D. P. Mullin, J. Phys. Soc. Japan, 49, Suppl. A, 811 (1980)
- [78] - A. Mycielski and J. Mycielski, J. Phys. Soc. Japan, 49, Suppl. A, 807 (1980)
- [79] - G. Bastard, C. Rigaux, Y. Guldner, A. Mycielski, J. K. Furdyna, and D. P. Mullin, Phys. Rev. B, 24, 1961 (1981)
- [80] - T. R. Gawron and J. Trylski, Lect. Notes Phys., 152, 312 (1982)
- [81] - M. Dobrowolska, W. Dobrowolski, R. R. Galazka, and A. Mycielski, Phys. Stat. Sol. (b), 105, 477 (1981)
- [82] - W. Dobrowolski, M. von Ortenberg, J. Thielman, and R. R. Galazka, Phys. Rev. Lett., 47, 541 (1981)
- [83] - P. Byszewski, K. Szlenk, J. Kossut, and R. R. Galazka, Phys. Stat. Sol. (b), 95, 359 (1979)
- [84] - M. Dobrowolska, W. Dobrowolski, R. R. Galazka, and J. Kossut, Solid Sta. Comm., 28, 25 (1979)
- [85] - J. J. Neve and F. A. P. Blom, Lect. Notes Phys., 152, 330 (1982)
- [86] - R. N. Bicknell, R. W. Yanka, N. C. Giles-Taylor, D. K. Blanks, E. L. Buckland, and J. F. Schetzina, Appl. Phys.

Lett., 45, 92 (1984)

- [87] - L. A. Kolodziejski, T. C. Bonsett, R. L. Gunshor, S. Datta, R. B. Bylsma, W. M. Becker, and N. Otsuka, Appl. Phys. Lett., 45, 440 (1984)
- [88] - S. Venugopalan, L. A. Kolodziejski, R. L. Gunshor, and A. K. Ramdas, Appl. Phys. Lett., 45, 975 (1984)
- [89] - R. N. Bicknell, N. C. Giles-Taylor, J. F. Schetzina, N. S. Anderson, and W. D. Laidig, Appl. Phys. Lett., 46, 238 (1985)
- [90] - X. C. Zhang, S. K. Chang, A. V. Nurmikko, L. A. Kolodziejski, R. L. Gunshor, and S. Datta, Phys. Rev. B, 31, 4056 (1985)
- [91] - A. Petrou, J. Warnock, R. N. Bicknell, N. C. Giles-Taylor, and J. F. Schetzina, Appl. Phys. Lett., 46, 692 (1985)
- [92] - R. N. Bicknell, N. C. Giles-Taylor, D. K. Blanks, R. W. Yanka, E. L. Buckland, and J. F. Schetzina, J. Vac. Sci. Technol., B3, 709 (1985)
- [93] - L. A. Kolodziejski, R. L. Gunshor, S. Datta, T. C. Bonsett, M. Yamanishi, R. Frohne, T. Sakamoto, R. B. Bylsma, W. M. Becker, and N. Otsuka, J. Vac. Sci. Technol., B3, 714 (1985)
- [94] - J. Warnock, A. Petrou, R. N. Bicknell, N. C. Giles-Taylor, D. K. Blanks, and J. F. Schetzina, Phys. Rev. B, 32, 8116 (1985)
- [95] - N. Bottka, J. Stankiewicz, and W. Giriat, J. Appl. Phys.,

52, 4189 (1981)

[96] - R. R. Galazka, S. Nagata, and P. H. Kecsom, Phys Rev. E,
22, 3344 (1980)

[97] - J. C. Maan, G. Belle, A. Fasolino, M. Altarelli, and
Ploog, Phys. Rev. B, 30, 2253 (1984)