DISSERTAÇÃO DE MESTRADO
CÁLCULO DE PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE
HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS QUASE
ZERO-DIMENSIONAIS (*Quantum Dots*)
APOIO FINANCEIRO-FAPESP

ELTON M. SILVA SANTOS

– 17 de julho de 2006 –

Agradecimentos

Meus agradecimentos a todos aqueles que de alguma forma contribuíram para o meu conhecimento e que tornou possível a minha caminhada até esse ponto.

Gostaria de agradecer à Rosária de Fátima Burgos que sempre torceu pelo meu sucesso e que sempre esteve ao meu lado me apoiando de forma decisiva nos momentos alegres e tristes.

Gostaria de agradecer meu irmão, Elvis Cleber da Silva Santos pelo apoio sempre que necessário.

Gostaria de agradecer meus pais, Idalina e Simeão por ter ajudado-me a conquistar grande parte das coisas que hoje possuo e pela formação de caráter que me possibilitaram.

Gostaria de agradecer de forma especial ao professor Guilherme Matos Sipahi pela orientação, pelos conselhos e estímulos nas horas difíceis e por tudo que ensinou-me compartilhando parte do seu conhecimento comigo, deixando aqui registrado que foi um prazer e uma honra ter trabalhado com ele durante esses anos de formação de minha vida.

Gostaria de agradecer a alguns professores que contribuíram de forma decisiva para a minha formação e pelas discussões dentro e fora da sala de aula sobre Física, são eles: Klaus Capelle, José Carlos Egues de Menezes, Attilho Cucchieri, Teresa Mendes e Silvestre Ragusa.

Gostaria de agradecer aos companheiros do laboratório: Ailton, Ivan, Rodrigo, Felipe, Keila, Suelene, Marcel, pela amizade e pela assistência sempre que preciso, o que foi de extrema importância.

Gostaria de agradecer à Fundação de amparo à pesquisa do estado de São Paulo(Fapesp) pelo apoio financeiro concedido a essa pesquisa, sem o qual a mesma não seria possível.

Resumo

Neste trabalho utilizamos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ na aproximação de função envelope, que é uma ferramenta muito útil para a solução de problemas relacionados a heteroestruturas em geral. Apresentamos a análise de heteroestruturas semicondutoras com confinamento espacial nas três direções (*Quantum Dots*), utilizando o Hamiltoniano de Kane (8x8) em sua forma generalizada para descrever os estados dos elétrons na banda de condução e na banda de valência. Fazendo uso dessa ferramenta foram realizadas simulações de estruturas de banda em sistemas quase zero-dimensionais de InAs em matrizes de GaAs, em vários formatos e dimensões e sob diferentes estados de tensionamento. Um estudo sistemático de como as propriedades geométricas e as dimensões de um dado sistema podem influenciar os seus estados eletrônicos foi também realizado e puderam ser confirmadas a presença de estados localizados e a sensibilidade do comportamento dos estados eletrônicos a estas propriedades. Pudemos observar um deslocamento para o vermelho no espectro de fotoluminescência com o aumento das dimensões dos sistemas estudados. Foram ainda realizados cálculos de *Quantum Dots* de InN em matriz de GaN, que permitem explorar outras regiões do espectro eletromagnético e estudamos o comportamento dos mesmos sob estados de tensionamentos diferentes. Com base nos autoestados do sistema foram calculados espectros de fotoluminescência para as heteroestruturas aqui estudadas, permitindo uma comparação direta com resultados experimentais. Como pode-se verificar que o *strain* exerce importância primordial na determinação dos estados eletrônicos dos sistemas estudados e na presença do *strain* hidrostático observa-se mudanças apreciáveis na resposta óptica do material, onde vê-se um deslocamento para o azul.

Abstract

In this work, we use the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method in the approximation of the envelope function, that is a very useful tool, to the solution of heterostructure related problems. We present a semiconductor heterostructure analysis with confinement on the three directions (Quantum Dots), using the Kane Hamiltonian (8x8) on its generalized form to describe electron eigenstates on the conduction and valence bands. Using this tool, we have made band structure simulations in quasi zero-dimensional systems of InAs in GaAs matrices, in diverse shapes and dimensions and on different tension states. A systematic study of how the geometrical properties and dimensions of a given system could influence the electronic states was also done. There can be confirmed the presence of localized states and the sensitivity of the electronic states to these properties. We could observe a deviation to the red on the photoluminescence spectrum with the increase of the system dimensions. There were also made calculations on InN dots in a GaN matrix, which allow to explore other electromagnetic spectral regions and we have studied their behavior under different tension states. From the system eigenvalues, we calculated the photoluminescence spectra from the heterostructures studied here, allowing a direct comparison with experimental results. It can be verified that the strain is extremely important on the determination of the electronic states of the studied systems and in the presence of an hydrostatic strain we could observe important modifications on the optical response of the material, where there is a deviation to the blue.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1	Sobre o trabalho	1
2	Aproximação de Massa Efetiva Multibanda	5
1	Massa efetiva	6
2	Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	9
2.1	Hamiltoniano (8x8) sem acoplamento Spin-Órbita	13
2.2	Correções Relativísticas	16
2.3	Hamiltoniano de Kane (8x8)	20
2.4	Hamiltoniano de Luttinger-Kohn (6x6)	22
2.5	Hamiltoniano de Luttinger-Kohn na aproximação para grandes valores de Δ : Hamiltoniano (4x4) e Hamiltoniano (2x2)	23
2.6	Hamiltoniano (2x2) para a banda de condução	23
2.7	Correções da mudança de parâmetro de rede de um “bulk” (Hamiltoniano de strain)	24
3	Modelo de Ponto Quântico	27
1	Função Envelope	27
2	Termo de Energia Cinética	31
3	Programa Computacional	33

4	Fotoluminescência	36
5	RESULTADOS	39
1	‘Quantum Dots’ de InAs em Matriz de GaAs	39
2	‘Quantum Dot’ cúbico de InAs/GaAs	40
3	‘Quantum Dots’ Auto organizados de InAs/GaAs	42
4	‘Quantum-Dots’ auto-organizados de InGaN/GaN	48
6	Conclusões	51
1	Trabalho Realizado	51
2	Novas Perspectivas a serem exploradas	52
A	Hamiltoniano 8x8 sem acoplamento spin-órbita	54
B	Hamiltoniano 8x8 com acoplamento spin-órbita	56

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1 Sobre o trabalho

Tem sido freqüentemente reportado na literatura uma grande quantidade de trabalhos relacionados à nanotecnologia em semicondutores que, possivelmente, num futuro próximo poderão ser aplicados ao desenvolvimento de novos dispositivos [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7]. Chamando a atenção o fato de que para tais sistemas estamos cada vez mais próximos da escala atômica, onde os efeitos quânticos não podem ser mais desprezados [8] e devem ser considerados em toda a sua generalidade.

Esse problema não é de forma alguma trivial, pois é na verdade um problema de muitas partículas, levando a um custo computacional no que se refere a tempo e capacidade de processamento de hardware inviável para serem tratados pelos métodos de primeiros princípios (*ab initio*), havendo assim a necessidade de fazer uso dos métodos empíricos como $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [1, 2, 3, 6, 9] e semi-empíricos aliados à teoria de muitos corpos, sendo estas alternativas mais corriqueiras para esses sistemas, ditos mesoscópicos.

Mesmo fazendo uso das ferramentas empíricas, muitas vezes o grau de complexidade necessário à obtenção da solução de tais sistemas é muito superior àquilo que conseguimos tratar de maneira eficiente. Uma vez que tais sistemas nem sempre apresentam simetria suficiente que, explorada, possa minimizar o trabalho computacional. Este fato leva freqüentemente à busca de soluções numéricas computacionais, fazendo o uso inteligente da capacidade de hardware dentro de algumas aproximações, que acredita-se possam reproduzir as propriedades reais do sistema em estudo. Existe uma grande quantidade de trabalhos pertinentes na literatura atual [4, 5, 10, 11], que mostram que este é um tema recorrente e importante.

Tais sistemas são extremamente atraentes do ponto de vista dos dispositivos óptico-eletrônicos uma

vez que estes apresentam um alto grau de eficiência [7] devido aos efeitos de forte localização com dimensionalidade restringida de elétrons e buracos, aumentando a superposição da função de onda e elevando a probabilidade de uma possível recombinação desses portadores. Do ponto de vista da spintrônica podemos ainda contar com as possibilidades de utilização de tais sistemas para criação de processos coerentes visando sua utilização em computação quântica.

Desde a proposta de Esaki e Tsu [12] para a construção de heteroestruturas onde as dimensões envolvidas são da ordem do comprimento de onda de de Broglie, levando ao aparecimento de efeitos de origem quântica, várias técnicas de crescimento foram desenvolvidas com a finalidade de gerar estruturas em que se possam estudar esses efeitos.

Logo após a criação de heteroestruturas bidimensionais percebeu-se a possibilidade de construção de átomos artificiais (*Quantum Dots*), produzidos pelo confinamento eletrônico nas três direções espaciais, onde poderia ser observada a criação de estados de energia discretos [13]. As primeiras tentativas de se produzirem estruturas com confinamento nas três direções espaciais, foram feitas por litografia utilizando o processo de *etching* partindo de uma estrutura com confinamento bidimensional, sendo as dimensões dessas estruturas limitadas pela técnica de litografia, da ordem de 500 Å ou maiores. Não foi possível observar efeitos de confinamento à temperatura ambiente, uma vez que tais efeitos eram mascarados pela energia térmica. A solução desses problemas abriria a possibilidade de criação de dispositivos zero-dimensionais operando à temperatura ambiente, o que se tornou possível com o surgimento dos *Quantum Dots* auto-organizados gerados pelo campo de *strain* devido ao descasamento dos parâmetros de rede de materiais diferentes.

Nos últimos anos tem existido a preocupação, e uma corrida contra o tempo por parte dos experimentais, para determinar o formato dos *Quantum Dots* crescidos sob condições físicas bem determinadas [14, 15, 16, 17, 18], sendo atualmente utilizadas várias técnicas espectroscópicas durante o processo de crescimento de *Quantum Dots* auto-organizados.

Essas técnicas espectroscópicas têm atingido um enorme grau de refinamento e são aprimoradas cada vez mais, sendo complementares entre si para a determinação das características geométricas dos *Quantum Dots*.

Pode ser verificada uma grande quantidade de artigos referentes às características geométricas dos

Quantum Dots de $In_{(x)}Ga_{(1-x)}As$ em matrizes de GaAs crescidos sobre condições físicas bem determinadas [14], apesar de um certo grau de discordância quanto a simetria real dos mesmos tudo indica, que eles devam ter um formato piramidal com as facetas laterais orientadas em várias direções como $\{1, 0, 1\}$, $\{1, 0, 5\}$, $\{1, 1, 3\}$, $\{1, 1, 4\}$ e $\{1, 3, 6\}$ e diferentes tamanhos.

Tem sido feito grande esforço teórico para fazer o modelamento destes *Quantum Dots* auto-organizados baseados nos dados experimentais [6], mostrando que este é um problema complexo, uma vez que vários efeitos concorrem para a determinação de sua estrutura eletrônica [4, 5, 19, 20].

Em uma tentativa de simplificar o problema dos *Quantum Dots*, muitos autores têm modelado o problema da banda de condução sem levar em conta os efeitos de bandas mais remotas [5, 20]. Resultados desastrosos foram obtidos no que tange à determinação dos estados eletrônicos nesses casos, uma vez que existe um forte acoplamento entre a banda de condução e a banda de valência, levando à necessidade de se tratar o problema em um modelo com no mínimo oito bandas, incluindo os seis estados do topo da banda de valência e os dois estados do fundo da banda de condução.

A aplicação de *Quantum Dots* na construção de *Single Electron Transistors* (SETs) tem sido recomendada, para a manufatura de dispositivos de altíssima sensibilidade eletrônica, onde será de extrema importância determinar o efeito do acoplamento lateral e a influência destes na constituição do dispositivo [13]. Torna-se, então, mais do que justificável o estudo teórico de tais entidades vista a real possibilidade da utilização destes conceitos para sua implementação.

Este tem sido o objeto de anseio de vários grupos de pesquisa no mundo todo, que têm feito um alto esforço para o modelamento teórico desses sistemas de alta complexidade, onde vários efeitos concorrem ao mesmo tempo para determinar o comportamento do sistema como um todo.

Em nosso trabalho foi feito a extensão do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ originalmente implementado para descrever a estrutura de banda de materiais do tipo *bulk*, e posteriormente estendido para o cálculo de estruturas bidimensionais, onde a descrição pode ser feita em termos da direção de crescimento, para o problema dos *Quantum Dots* auto organizados que é tridimensional e apresenta-se em várias simetrias contidas na literatura e para vários materiais como mostrado na tabela (1.1).

Resolveremos o problema de um elétron na aproximação de função envelope, sem levar em consideração os efeitos de muitos corpos referentes à interação elétron-elétron em um modelo de oito bandas

QDs/Matriz	Formato.	Tamanho.	Arestas.	Referencia.
In(x)Ga(1-x)As/GaAs	Piramidal C4v	base 10-20 nm	1,0,1	[14]
InAs/GaAs	Piramidal	base 10-20 nm	1,0,5	[15]
InAs/GaAs	Piramidal	base 10-20 nm	1,1,3	[16]
InAs/GaAs	Piramidal	base 10-20 nm	1,1,4	[17]
InAs/GaAs	Piramidal C2v	base 10-20 nm	1,3,6	[18]
GaN/AlN	Piramidal C4v	base 10-20 nm	1,0,1	[14]
Si/Ge	Piramidal C2v	base 10-20 nm	1,3,6	[18]
InAs/InP	Piramidal	base 10-20 nm	-	[10]

Tabela 1.1: Formatos e tamanhos de *Quantum Dots* expressos na literatura

[5]. Consideraremos somente o potencial confinante de acordo com os perfis de *Quantum Dots* fornecidos a partir de dados espectroscópicos experimentais, obtidos com técnicas como Microscopia de Força Atômica (AFM), Microscopia de Transmissão Eletrônica (TEM) e *Reflection High Energy Electron Diffraction* (RHEED), entre outras técnicas [14, 15, 16, 17, 18], que tem sido de extrema importância para o mapeamento teórico dos *Quantum Dots* [6].

Em seguida utilizaremos os resultados para determinar os observáveis físicos, como as densidades eletrônicas dos portadores de carga e as autoenergias dos estados localizados nos *Quantum Dots*. Com base nas funções de onda dos estados ligados e no nível de Fermi, calcularemos ainda o perfil de fotoluminescência para tamanhos variados, levando em consideração somente os efeitos do potencial confinante.

Quantum Dots baseados em Nitretos semicondutores na fase cúbica, [21], têm sido de grande interesse teórico devido à região do espectro eletromagnético em que estes podem emitir, podendo ser usados na construção de dispositivos ópticos eletrônicos para leitura de CDs de alta densidade. Estudos experimentais do formato dessas estruturas têm mostrado que sob determinadas condições de crescimento apresentam-se na forma piramidal de base quadrada, com simetria C4v.

Com exceção de pontos quânticos de InAs em matrizes de GaAs, pouco se sabe a respeito de outros *Quantum Dots*, que permitiriam explorar outras regiões do espectro, existindo poucas referências a respeito de outros materiais, sendo tema atual de pesquisa qualquer simulação a respeito de *Quantum Dots* auto-organizados em outros sistemas que não o InAs/GaAs [10, 22].

Uma vez sabendo que *Quantum Dots* auto-organizados pertencentes a uma mesma camada não interagem efetivamente ou são fracamente correlacionados, calculando as propriedades de *Single Quantum Dot*, poderemos então fazer inferências com relação a um ensemble de *Quantum Dots* pertencentes a uma mesma camada, permitindo prever fotoluminescência.

Capítulo 2

Aproximação de Massa Efetiva Multibanda

Numa tentativa de descrever os estados eletrônicos em *Quantum Dots* de qualquer simetria, percebe-se que o problema é demasiado complicado para ser resolvido exatamente, por ser um problema de muitos corpos e que requer um tratamento quântico. Devido à complexidade de se tratar um sistema como um sólido, somos levados a fazer aproximações na tentativa de simplificar aquilo que é complexo por natureza.

Numa tentativa de contornar o problema, técnicas foram desenvolvidas, às vezes durante décadas, que permitem reproduzir a partir da teoria resultados que estão de acordo com os resultados experimentais dentro do limite de validade das aproximações feitas e que requerem solução computacional. Estes métodos pertencem a duas classes distintas, os métodos *ab initio* que são baseados puramente nas constantes fundamentais da natureza e os chamados métodos empíricos dentre os quais se encontram a teoria de massa efetiva. O fato é que os métodos *ab initio* são extremamente custosos no que se refere a capacidade computacional e sendo as constantes fundamentais uma questão puramente filosófica, uma vez que estão sujeitas à mudanças a medida que o nosso conhecimento da natureza avança, uma teoria de massa efetiva surge como uma alternativa viável frente a uma teoria baseada apenas nas constantes fundamentais da natureza.

Aqui no nosso trabalho faremos uso, então, de uma teoria efetiva, onde as constantes fundamentais serão substituídas por parâmetros obtidos experimentalmente ou ainda através de métodos *ab initio*, com a finalidade de descrever o comportamento dos elétrons em estruturas de baixa dimensionalidade.

1 Massa efetiva

Depois de uma primeira aproximação em que separamos a parte vibracional do Hamiltoniano total da parte eletrônica, podemos escolher uma base conveniente para tratar o problema eletrônico independentemente das vibrações do cristal, lembrando que ainda temos um problema demasiado complicado que é um problema de muitos corpos, desta forma fazendo uso da aproximação de partícula independente, derivaremos uma expressão de massa efetiva, que inclua as correções relativísticas de segunda ordem. Escrevendo o Hamiltoniano eletrônico como [1],

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{P} . \quad (2.1)$$

A equação de Schrödinger para descrever o estado de um elétron no cristal pode, então, ser escrita como,

$$\left\{ \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{P} \right\} \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) , \quad (2.2)$$

onde o potencial cristalino $V(\vec{r})$ é periódico, com o mesmo período da rede cristalina, e inclui outras interações, como a interação elétron-elétron, via um campo médio, obtido através de métodos *ab initio* autoconsistentes. O último termo do Hamiltoniano leva ainda em conta a interação spin-órbita, sendo $\vec{\sigma}$ um vetor cujos três componentes são as matrizes de Pauli [1, 9, 23].

Esta aproximação não deve dar bons resultados para magnitudes físicas que dependam fortemente dos detalhes do potencial cristalino, mas deve fornecer bons resultados para magnitudes que dependam mais das propriedades de simetria, tais como os autovalores de energia. Sendo o potencial cristalino periódico, podemos descrevê-lo como.

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) ,$$

onde $\vec{r}$ é um vetor que representa qualquer ponto do cristal e $\vec{R}$ é um vetor da rede de Bravais.

Isto significa que pode-se buscar como solução do Hamiltoniano as funções de Bloch,

$$\Psi_{n\vec{K}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) U_n(\vec{r}, \vec{K}) , \quad (2.3)$$

onde a função $U_n(\vec{r}, \vec{K})$ é invariante por translação da rede, n é o índice da banda e $\vec{K}$ é o momento cristalino restrito à primeira zona de Brillouin.

Substituindo a eq.(2.3) na equação de Schrödinger eq.(2.2) e deixando o operador Hamiltoniano agir sobre os estados de Bloch, obtemos,

$$\left\{ \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{P} + \left[\frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} + \frac{\hbar \vec{K}}{2m} \cdot \vec{\pi} \right] \right\} U_n(\vec{r}, \vec{K}) = E_n U_n(\vec{r}, \vec{K}) , \quad (2.4)$$

onde podemos definir por conveniência os seguintes operadores,

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{P} , \quad (2.5)$$

$$W(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} + \frac{\hbar \vec{K}}{2m} \cdot \vec{\pi} , \quad (2.6)$$

$$\vec{\pi} = \left\{ \vec{P} + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{P} \right\} , \quad (2.7)$$

e assim, podemos reescrever a equação para os $U_n(\vec{r}, \vec{K})$, como,

$$\left\{ H + W(\vec{K}) \right\} U_n(\vec{r}, \vec{K}) = E_n U_n(\vec{r}, \vec{K}) . \quad (2.8)$$

Notamos que H é o termo correspondente ao Hamiltoniano da equação de Schrödinger, eq.(2.2), cujas autofunções denotamos por $\Psi_{n0}(\vec{r})$, o equivalente a $U_n(\vec{r}, 0)$. Desta forma, podemos escrever a seguinte equação de autovalores:

$$H U_n(\vec{r}, 0) = E_n(0) U_n(\vec{r}, 0).$$

É claro que o operador $W(\vec{K})$ se anula para $(\vec{K} = 0)$. No entanto, nos demais pontos da rede $W(\vec{K})$ é diferente de zero. Podemos então supor uma solução para o Hamiltoniano da eq.(2.8) em torno do ponto zero como,

$$U_n(\vec{r}, \vec{K}) = \sum_m C_m(\vec{K}, n) U_m(\vec{r}, 0) . \quad (2.9)$$

Introduzindo a solução acima na eq.(2.8) e multiplicando por $U_m(\vec{r}, \vec{K})$ e integrando em todo o volume da célula unitária obtém-se:

$$\sum_m \left\{ \left(E_n(0) - E_n(\vec{K}) + \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar \vec{K}}{2m} \cdot \vec{\pi}_{nm} \right\} C_m(\vec{K}, n) = 0 , \quad (2.10)$$

sendo,

$$\vec{\pi}_{nm} = \int_{\Omega} d^3r U_n(\vec{r}, 0) \vec{\pi} U_m(\vec{r}, 0) . \quad (2.11)$$

Supondo que as bandas são não-degeneradas no ponto Γ e tomando valores pequenos de $\vec{K}$ temos que:

$$C_n(\vec{K}, n) \cong 1 , \quad (2.12)$$

$$C_m(\vec{K}, n) = \left(\frac{\hbar}{m} \right) \frac{\vec{K} \cdot \vec{\pi}_{nm}}{[E_n(0) - E_m(0)]}, (n \neq m) .$$

Utilizando a equação eq.(2.10) podemos então obter correções de segunda ordem para a relação de dispersão. Desta forma podemos escrever uma relação de dispersão parabólica em torno do centro da zona de Brillouin como:

$$E_n(K) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_m \frac{|\vec{\pi}_{nm} \cdot \vec{K}|^2}{E_n(0) - E_m(0)} . \quad (2.13)$$

Isto se vê mais claramente se escrevermos a equação anterior em termos de um tensor de massa efetiva [1],

$$E_n(\vec{K}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} K_i \left[\frac{1}{\mu_n^{ij}} \right] K_j , \quad (2.14)$$

onde o tensor de massa efetiva é definido como,

$$\left\{ \frac{1}{\mu_n^{ij}} \right\} = \left(\frac{1}{m_e} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{\pi_{nm}^i \pi_{mn}^j}{E_n(0) - E_m(0)} . \quad (2.15)$$

2 Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Uma descrição de um material do tipo *bulk* pode ser feita utilizando os vários métodos desenvolvidos para tratar os problemas de muitos corpos, os quais fornecem uma descrição satisfatória destes sistemas uma vez que podem se utilizar das simetrias envolvidas para simplificar drasticamente os cálculos. Esses métodos, entretanto, não fornecem uma forma explícita para atacar problemas comuns em física de semicondutores e que envolvem a quebra de periodicidade do cristal em uma escala de tamanho de centenas de Å (mesoscópicos), com por exemplo heterojunções.

Como estamos interessados em quantidades de uso comum em física de semicondutores como a massa efetiva, não necessitamos do conhecimento da relação de dispersão sobre toda a zona de Brillouin, sendo apenas necessário o conhecimento da estrutura de banda para pequenos valores de $\vec{K}$ perto dos extremos da banda.

Neste sentido, o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ é baseado em uma formulação completamente geral e fornece a descrição da estrutura de banda em torno de qualquer ponto no espaço recíproco. Em nosso caso corresponde a uma expansão do Hamiltoniano em segunda ordem em $(\vec{K} - \vec{K}_0)$, onde $\vec{K}_0$ é o ponto em torno do qual a descrição da estrutura de banda é feita. Este método é muitas vezes, a única alternativa viável para tratar problemas em física de semicondutores envolvendo quebras de simetrias em escalas mesoscópicas, como é o caso da maioria dos dispositivos eletrônicos de grande interesse tecnológico. Por este motivo, o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ tem tido o grande mérito de fornecer uma forma simples e analítica de formular um sistema semiconductor, capturando a física essencial do problema. O principal problema associado a este método é que ele é dependente de parâmetros empíricos a serem determinados, que aparecem em situações complexas como é o caso de um sistema tensionado.

Em um semiconductor típico os elétrons próximos ao núcleo estão fortemente localizados, formando assim uma camada fechada sentindo as mudanças produzidas pelos átomos da vizinhança como sendo quase uniformes, mantendo desta forma inalterados seus orbitais monoelétrônicos. Como é de nosso interesse a estrutura eletrônica do cristal, estando interessados nas propriedades coletivas do sistema e sabendo que os elétrons internos serão fracamente influenciados pelo estado ligado do cristal, podemos supor que grande parte das propriedades coletivas de interesse estão relacionadas com os elétrons em orbitais mais externos. Isso sugere fortemente uma divisão de nosso sistema em dois subsistemas que

separam os elétrons que são mais fortemente influenciados pelo estado ligado do cristal e os que são fracamente influenciados.

Seguindo esta intuição, ao considerarmos que a estrutura interna não sofre mudanças apreciáveis, fazemos a separação do problema considerando o núcleo mais os elétrons internos como um dos subsistemas, costumeiramente chamado de caroço atômico, que é considerado congelado frente ao outro subsistema, formado pelos elétrons de valência, que é fortemente influenciado pelo estado ligado do cristal, sendo responsável por grande parte das propriedades coletivas do mesmo.

elemento	Z	$e_{\text{caroço}}$	$e_{\text{valência}}$
B	5	$1s^2$	$2s^2 2p$
C	6	$1s^2$	$2s^2 2p^2$
N	7	$1s^2$	$2s^2 2p^3$
Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6$	$3s^2 3p$
Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^2$
P	15	$1s^2 2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^3$
Ga	31	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$	$4s^2 4p$
Ge	32	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$	$4s^2 4p^2$
As	33	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$	$4s^2 4p^3$

Tabela 2.1: Grupo de elementos a partir dos quais cristais semicondutores podem ser formados

Como podemos notar na tabela (2.1) acima, os orbitais monoelétrônicos que formam os estados de valência dos átomos isolados de grande parte dos elementos semicondutores são orbitais do tipo S e P .

Ao supor então que, com um conjunto de base reduzida, o método $\vec{K} \cdot \vec{P}$ fornece informações detalhadas da estrutura de bandas de um cristal na vizinhança de um ponto arbitrário $\vec{K}_0$ e que elétrons e buracos livres estão confinados na vizinhança deste ponto de alta simetria, nada é mais intuitivo do que escolher como nosso conjunto de base, a partir do qual as funções de Bloch podem ser expandidas, os estados orbitais S e P .

Com base nos orbitais monoelétrônicos dos elétrons de valência e considerando a existência do spin, podemos escolher um conjunto de base reduzida, representado pelos spinores de duas componentes, para a partir destes, descrever o estado do elétron e representar a parte periódica das funções de Bloch nos pontos de alta simetria da rede de Bravais em termos destes estados.

$$|\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} |S\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

$$|\varphi_5\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |S\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

$$|\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} |X\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

$$|\varphi_6\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |X\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$$|\varphi_3\rangle = \begin{pmatrix} |Y\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

$$|\varphi_7\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |Y\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$|\varphi_4\rangle = \begin{pmatrix} |Z\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

$$|\varphi_8\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |Z\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Partindo agora da equação de Schrödinger independente do tempo e usando as propriedades relacionadas às simetrias de translação, vamos deduzir o Hamiltoniano de uma partícula para o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$,

$$H|\Psi_{n,\vec{K}}\rangle = E(\vec{K})|\Psi_{n,\vec{K}}\rangle, \quad (2.24)$$

onde n é o índice de banda, e $\vec{K}$ é um vetor de onda dentro da primeira zona de Brillouin. O fato do potencial $V(\vec{r})$ ser periódico sobre translações de vetores $\vec{R}$ da rede de Bravais, implica que o nosso Hamiltoniano comuta com o operador de translação dado pela periodicidade da rede, logo as autofunções dos operadores de translação são também autofunções do nosso Hamiltoniano, como resultado temos que as autofunções de Bloch diagonalizam o Hamiltoniano.

$$\left\{ \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} |\Psi_{n,\vec{K}}\rangle = \left\{ \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) |\Psi_{n,\vec{K}_0}\rangle = E(\vec{K}) |\Psi_{n,\vec{K}}\rangle. \quad (2.25)$$

Desta forma, deixando o operador Hamiltoniano atuar nas autofunções de Bloch obtemos uma equação para os $|\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle$, que são funções periódicas com o mesmo período da rede de Bravais. Obtendo:

$$\left[\left\{ \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} + \frac{\hbar}{m} \vec{K} \cdot \vec{P} \right] |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle = \bar{E}(\vec{K}) |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle, \quad (2.26)$$

onde,

$$\bar{E}(\vec{K}) = E(\vec{K}_0) + \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2). \quad (2.27)$$

Então, multiplicando o lado esquerdo da equação eq.(2.26) por $\langle \cup_{n',\vec{K}'_0} |$, obtemos a seguinte equação,

$$\langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | \left[\left\{ \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} + \frac{\hbar}{m} \vec{K} \cdot \vec{P} \right] |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle = \langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | \bar{E}(\vec{K}) |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle, \quad (2.28)$$

lembrando que,

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (2.29)$$

e reescrevendo a equação anterior, obtém-se,

$$\langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | H |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle + \langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | \frac{\hbar}{m} \vec{K} \cdot \vec{P} |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle = \bar{E}(\vec{K}) \delta_{n,n'} \delta_{\vec{K}_0,\vec{K}'_0}, \quad (2.30)$$

$$\langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | H |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle = \bar{E}(\vec{K}) \delta_{n,n'} \delta_{\vec{K}_0,\vec{K}'_0} - \langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | \frac{\hbar}{m} \vec{K} \cdot \vec{P} |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle, \quad (2.31)$$

$$H' = \frac{\hbar}{m} \vec{K} \cdot \vec{P}, \quad (2.32)$$

$$\langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | H |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle = \bar{E}(\vec{K}) \delta_{n,n'} \delta_{\vec{K}_0,\vec{K}'_0} - \langle \cup_{n',\vec{K}'_0} | H' |\cup_{n,\vec{K}_0}\rangle. \quad (2.33)$$

onde H' pode agora ser tratado como uma perturbação, sendo nossa tarefa agora determinar como H' atua na base escolhida.

2.1 Hamiltoniano (8x8) sem acoplamento Spin-Órbita

Como a perturbação H' é linear em $\vec{K}$ é de se supor que o método deve fornecer bons resultados para pequenos valores em torno de um ponto $\vec{K}_0$ escolhido. Entretanto vamos ressaltar que o método é exato, bastando que utilizemos uma base infinita em termos da qual serão expandidas as funções de Bloch, o que possibilitará um tratamento exato da perturbação sendo a dimensão do nosso Hamiltoniano matricial proporcional ao número de funções de base escolhida.

Utilizando-se de argumentos de simetria para os orbitais pode ser verificado que os elementos de matriz envolvendo $\vec{P}$ fornecem contribuições como a apresentada abaixo, onde os efeitos da simetria da rede de Bravais ficam expressos em termos de constantes de acoplamento.

Como vamos escrever a parte periódica das funções de Bloch em termos de nossa base reduzida, temos necessariamente que saber como nosso operador $\vec{P}$ atua nos elementos de base escolhidos, pois este conhecimento será necessário para determinar nosso termo de perturbação da eq.(2.33). Desta forma temos:

$$\vec{K} \cdot \langle S | i \nabla | X \rangle = Q_1 K_x . \quad (2.34)$$

onde Q_1 faz parte de um conjunto de parâmetros, Q_i , que serão utilizados posteriormente, associados à constante de acoplamento entre orbitais do tipo P e S .

Por simetria de inversão espacial da rede temos que $\langle S | i \nabla | X \rangle$ e $\langle X | i \nabla | S \rangle$, devem estar associados a uma mesma constante de acoplamento. Utilizando esse mesmo argumento para os outros orbitais, chegamos então aos resultados abaixo, já com um número de constantes reduzidas através do uso da simetria de inversão espacial da rede de Bravais.

$$\vec{K} \cdot \langle X | i \nabla | S \rangle = Q_1 K_x , \quad (2.35)$$

$$\vec{K} \cdot \langle S | i \nabla | Y \rangle = Q_2 K_y , \quad (2.36)$$

$$\vec{K} \cdot \langle Y | i \nabla | S \rangle = Q_2 K_y , \quad (2.37)$$

$$\vec{K} \cdot \langle S | i \nabla | Z \rangle = Q_3 K_z , \quad (2.38)$$

$$\vec{K} \cdot \langle Z | i \nabla | S \rangle = Q_3 K_z , \quad (2.39)$$

$$\vec{K} \cdot \langle X | i \nabla | Y \rangle = A_1 K_x K_y , \quad (2.40)$$

onde A_1 faz parte de um o conjunto de parâmetros A_i , associados à constante de acoplamento entre orbitais do tipo P_i e P_j .

$$\vec{K} \cdot \langle Y | i \nabla | X \rangle = A_1 K_y K_x , \quad (2.41)$$

$$\vec{K} \cdot \langle X | i \nabla | Z \rangle = A_2 K_x K_z , \quad (2.42)$$

$$\vec{K} \cdot \langle Z | i \nabla | X \rangle = A_2 K_z K_x , \quad (2.43)$$

$$\vec{K} \cdot \langle Y | i \nabla | Z \rangle = A_3 K_y K_z , \quad (2.44)$$

$$\vec{K} \cdot \langle Z | i \nabla | Y \rangle = A_3 K_z K_y , \quad (2.45)$$

Calculando agora o auto-acoplamento dos orbitais temos:

$$\vec{K} \cdot \langle X | i \nabla | X \rangle = B_1 K_x^2 , \quad (2.46)$$

onde B_1 faz parte de um o conjunto de parâmetros B_i , associados aos auto acoplamento entre orbitais.

$$\vec{K} \cdot \langle Y | i \nabla | Y \rangle = B_2 K_y^2 , \quad (2.47)$$

$$\vec{K} \cdot \langle Z | i \nabla | Z \rangle = B_3 K_z^2, \quad (2.48)$$

Vemos que o acoplamento de $\langle S | i \nabla | S \rangle$, por ser não direcional, tendo uma simetria esférica, deve então ser expresso como:

$$\vec{K} \cdot \langle S | i \nabla | S \rangle = B_4 (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2), \quad (2.49)$$

onde temos uma contribuição completamente parabólica.

Sabendo agora como o operador atua nos elementos da base primitivas, podemos calcular os elementos de matriz nesta base convenientemente escolhida, composta de estados S_s e P_s sem interação spin-órbita.

$$H_{ij} = \langle i | H | j \rangle = \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle. \quad (2.50)$$

Fazendo então os cálculos dos elementos de matriz nesta base, chegamos então aos elementos de matriz que podem ser verificados no apêndice-A. Obtendo assim um Hamiltoniano com o seguinte perfil,

$$H_{\vec{K} \cdot \vec{P}} = \begin{pmatrix} \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} & \hat{X} \end{pmatrix},$$

onde os elementos de matriz denotados por $\hat{X}$ têm contribuições diferentes de zero para o Hamiltoniano nesse conjunto de base específico.

Podemos ver que neste caso os estados de *spin up* são bloco diagonais com os estados de *spin down*, se levarmos em consideração a existência de um campo magnético essa simetria poderá eventualmente ser quebrada e os estados de *spin up* e *spin down* se misturarem.

Como resultado da diagonalização do Hamiltoniano anterior obtemos a estrutura de banda representada diagramaticamente na Fig.(2.1).

Figura 2.1: Representação esquemática da estrutura de banda para um Hamiltoniano geral sem acoplamento *Spin-órbita* para um cristal *Zinc Blend*.

2.2 Correções Relativísticas

Levaremos agora em consideração o acoplamento *spin órbita*, o qual pode ser descrito da seguinte forma:’

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V) \cdot \vec{P} , \quad (2.51)$$

Verificando como a interação spin-órbita atua nos elementos de matriz da base primitiva, sem levar em consideração a existência das matrizes de Pauli e dos estados de spin, chegamos ao seguinte resultado.

$$\langle S | H_{so} | S \rangle = 0 , \quad (2.52)$$

$$\langle X | H_{so} | X \rangle = 0 , \quad (2.53)$$

$$\langle Y | H_{so} | Y \rangle = 0 , \quad (2.54)$$

$$\langle Z | H_{so} | Z \rangle = 0 , \quad (2.55)$$

$$\langle S | H_{so} | X \rangle = \Delta , \quad (2.56)$$

Verificamos na expressão acima uma contribuição diferente de zero, que chamaremos de Δ , que será então, a responsável por uma quebra de simetria e por consequência uma quebra de degenerescência no ponto de alta simetria da zona de Brillouin.

$$\langle S | H_{so} | Y \rangle = \Delta , \quad (2.57)$$

$$\langle S | H_{so} | Z \rangle = \Delta , \quad (2.58)$$

$$\langle X | H_{so} | Y \rangle = \Delta , \quad (2.59)$$

$$\langle Y | H_{so} | X \rangle = \Delta , \quad (2.60)$$

$$\langle Y | H_{so} | Z \rangle = \Delta , \quad (2.61)$$

$$\langle Z | H_{so} | Y \rangle = \Delta . \quad (2.62)$$

Agora com o conhecimento de como a interação *spin-órbita* atua nos elementos de matriz da base primitiva podemos então calcular a interação spin-órbita, levando em consideração os estados de spin e as matrizes de Pauli. Chegamos à seguinte expressão para o Hamiltoniano spin-órbita, expresso em função dos elementos da base primitiva:

$$H_{so} = \frac{\Delta}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Buscando uma transformação canônica na qual a interação spin-órbita pode ser expressa de maneira diagonal chegamos à seguinte transformação unitária:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{-i}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-2i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & \frac{-i}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (2.64)$$

Usando essa transformação no Hamiltoniano spin-órbita original, podemos expressar o Hamiltoniano spin-órbita de uma forma diagonal.

$$H'_{so} = U^\dagger H_{so} U. \quad (2.65)$$

$$H'_{so} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2\Delta}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{2\Delta}{3} \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Aplicando a transformação unitária sobre o conjunto de bases primitivas a partir da qual o Hamiltoniano original foi escrito, obtem-se os autos estados do Hamiltoniano original expressos a seguir.

$$|\Phi_1\rangle = |e_{1,0}\rangle = |S+\rangle, \quad (2.67)$$

$$|\Phi_2\rangle = |e_{2,0}\rangle = |S-\rangle, \quad (2.68)$$

$$|\Phi_3\rangle = \cup_{h1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |X+\rangle + i|Y+\rangle \} , \quad (2.69)$$

$$|\Phi_4\rangle = \cup_{h2,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ i|X-\rangle + |Y-\rangle \} , \quad (2.70)$$

$$|\Phi_5\rangle = \cup_{\ell1,0} = -\sqrt{\frac{2}{3}} \{ i|Z+\rangle \} + \frac{1}{\sqrt{6}} \{ i|X-\rangle - |Y-\rangle \} , \quad (2.71)$$

$$|\Phi_6\rangle = \cup_{\ell2,0} = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ |X+\rangle - i|Y+\rangle \} + \sqrt{\frac{2}{3}} \{ |Z-\rangle \} , \quad (2.72)$$

$$|\Phi_7\rangle = \cup_{S1,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ |Z+\rangle \} + \frac{1}{\sqrt{3}} \{ |X-\rangle + i|Y-\rangle \} , \quad (2.73)$$

$$|\Phi_8\rangle = \cup_{S2,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ -i|X+\rangle - i|Y+\rangle \} + \frac{i}{\sqrt{3}} \{ i|Z-\rangle \} . \quad (2.74)$$

Escolhendo esta nova base como apropriada para calcular os elementos de matriz do nosso Hamiltoniano, obtém-se os elementos de matriz do Hamiltoniano expresso no apêndice-B.

$$H_{\vec{K} \cdot \vec{\pi}} = H_{\vec{K} \cdot \vec{P}} + H_{so} - \frac{\Delta}{3} . \quad (2.75)$$

$$\left[\begin{array}{ll} |\Phi_1\rangle \Rightarrow & E_1(k=0) = H_{k \cdot \pi}(1) = E_g \\ |\Phi_2\rangle \Rightarrow & E_2(k=0) = H_{k \cdot \pi}(2) = E_g \\ |\Phi_3\rangle \Rightarrow & E_3(k=0) = H_{k \cdot \pi}(3) = 0 \\ |\Phi_4\rangle \Rightarrow & E_4(k=0) = H_{k \cdot \pi}(4) = 0 \\ |\Phi_5\rangle \Rightarrow & E_5(k=0) = H_{k \cdot \pi}(5) = 0 \\ |\Phi_6\rangle \Rightarrow & E_6(k=0) = H_{k \cdot \pi}(6) = 0 \\ |\Phi_7\rangle \Rightarrow & E_7(k=0) = H_{k \cdot \pi}(7) = -\Delta \\ |\Phi_8\rangle \Rightarrow & E_8(k=0) = H_{k \cdot \pi}(8) = -\Delta \end{array} \right] .$$

$$H_{ij} = \langle i | H | j \rangle = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle . \quad (2.76)$$

Como resultado da diagonalização do Hamiltoniano anterior obtemos a estrutura de banda representada diagramaticamente na Fig. (2.2), que difere da Fig. (2.1) por uma quebra de degenerescência da banda de valência causada pelo acoplamento spin-órbita.

Figura 2.2: Representação esquemática da estrutura de banda para um Hamiltoniano geral com acoplamento *Spin-órbita* para um cristal *Zinc Blend*.

Ajustando as constantes de acoplamento para o caso específico de uma determinada simetria da rede de Bravais, no caso cúbica, chegamos então ao Hamiltoniano de Kane (8x8) que descreverá os seis estados de mais alta energia da banda de valência e os estados de mais baixa energia da banda condução, levando em consideração efeitos relativísticos de segunda ordem.

2.3 Hamiltoniano de Kane (8x8)

Calculando os elementos de matrizes em termos dos estados de Bloch em uma representação onde o potencial de interação spin-órbita é diagonal em torno dos extremos, para a simetria cúbica, como na Fig. (2.3), obtemos oito bandas (duas de condução do tipo s e seis de valência p) [1, 9, 23, 24]. O termo de energia cinética do Hamiltoniano é descrito pela matriz de Kane:

Figura 2.3: Célula Unitária.

$$\begin{pmatrix} E_g + AK^2 & 0 & iP_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & i\sqrt{\frac{1}{3}}P_- & 0 & i\sqrt{\frac{1}{3}}P_z & \sqrt{\frac{2}{3}}P_- \\ 0 & E_g + AK^2 & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}}P_z & -P_- & i\sqrt{\frac{2}{3}}P_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_z \\ -iP_- & 0 & Q & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_- & S^* & T & 0 & R & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}P_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}}P_z & R^* & 0 & T & -S & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) \\ 0 & -P_+ & 0 & R^* & -S^* & Q & -i\sqrt{2}R^* & \frac{-i}{\sqrt{2}}S^* \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}P_z & -i\sqrt{\frac{2}{3}}P_- & -i\sqrt{2}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S & i\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}(Q-T) - \Delta & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_z & i\sqrt{2}R^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(Q-T) - \Delta \end{pmatrix}. \quad (2.77)$$

Onde,

$$E_g = E_c - E_v - \frac{\Delta}{3}, \quad (2.78)$$

$$P_+ = P(K_x + iK_y), \quad (2.79)$$

$$P_- = P(K_x - iK_y), \quad (2.80)$$

$$P_z = PK_z , \quad (2.81)$$

onde P é um parâmetro que diz respeito ao acoplamento entre as bandas [25, 26] e,

$$Q = -(\gamma_1 + \gamma_2)(K_x^2 + K_y^2) + (2\gamma_2 - \gamma_1)K_z^2 , \quad (2.82)$$

$$T = -(\gamma_1 - \gamma_2)(K_x^2 + K_y^2) - (2\gamma_2 + \gamma_1)K_z^2 , \quad (2.83)$$

$$S = i2\sqrt{3}\gamma_3(K_x - iK_y)K_z , \quad (2.84)$$

$$R = -\sqrt{3} \{ \gamma_2(K_x^2 - K_y^2) - 2i\gamma_3 K_x K_y \} , \quad (2.85)$$

com os γ_i sendo conhecidos como parâmetros de Kane.

2.4 Hamiltoniano de Luttinger-Kohn (6x6)

Podemos fazer o cálculo dos elementos de matrizes, em termos dos estados de Bloch em uma representação onde o potencial de interação spin-órbita é bloco diagonal em torno dos extremos, para a simetria cúbica, e desta forma obtemos seis bandas levando em consideração o spin (seis bandas de valência referentes aos orbitais p) [1, 9, 23].

$$\begin{pmatrix} Q & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\ S^* & T & 0 & R & \frac{-i}{\sqrt{2}}(Q - T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & T & -S & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{-i}{\sqrt{2}}(Q - T) \\ 0 & R^* & -S^* & Q & -i\sqrt{2}R^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q - T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S & i\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - T) - \Delta & 0 \\ i\sqrt{2}R^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q - T) & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - T) - \Delta \end{pmatrix} . \quad (2.86)$$

Onde,

$$Q = -(\gamma_1 + \gamma_2)(K_x^2 + K_y^2) + (2\gamma_2 - \gamma_1)K_z^2 , \quad (2.87)$$

$$T = -(\gamma_1 - \gamma_2)(K_x^2 + K_y^2) - (2\gamma_2 + \gamma_1)K_z^2, \quad (2.88)$$

$$S = i2\sqrt{3}\gamma_3(K_x - iK_y)K_z, \quad (2.89)$$

$$R = -\sqrt{3}\{\gamma_2(K_x^2 - K_y^2) - 2i\gamma_3K_xK_y\}, \quad (2.90)$$

sendo os γ_i parâmetros de Luttinger e estão relacionados com o tensor de massa efetiva para os materiais que apresentam a simetria cúbica [25, 26] e sendo importante salientar que os parâmetros utilizados nessa aproximação de Luttinger diferem dos anteriores de Kane.

2.5 Hamiltoniano de Luttinger-Kohn na aproximação para grandes valores de Δ : Hamiltoniano (4x4) e Hamiltoniano (2x2)

Podemos ainda para grandes valores de Δ reescrever a matriz anterior em dois termos bloco diagonais, onde a matriz (4 x 4) refere-se aos estado de buracos leves e pesados, e a matriz (2x2) representa os buracos de split-off. Essa aproximação é válida porque, à medida que o valor de Δ aumenta, a interação entre a banda de buracos leves e pesados e a banda de buracos split-off, separadas por um valor Δ diminui, podendo ser em uma aproximação, tratadas independentemente [9].

$$\begin{pmatrix} Q & S & R & 0 \\ S^* & T & 0 & R \\ R^* & 0 & T & -S \\ 0 & R^* & -S^* & Q \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - T) - \Delta & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - T) - \Delta \end{pmatrix}. \quad (2.92)$$

2.6 Hamiltoniano (2x2) para a banda de condução

Como no caso do Hamiltoniano de Luttinger Kohn (6x6), que permite tratar os estados da banda de valência separados da banda de condução, podemos utilizar um Hamiltoniano (2x2) quando há o interesse em conhecer apenas os estados da banda de condução.

$$H_{11} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = E_g - \frac{\hbar^2}{2m}(1 + 2B_4)(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2), \quad (2.93)$$

$$H_{12} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{e2,0} \rangle = 0 , \quad (2.94)$$

$$H_{21} = \langle \cup_{e2,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = 0 , \quad (2.95)$$

$$H_{22} = \langle \cup_{e2,0} | H | \cup_{e2,0} \rangle = E_g - \frac{\hbar^2}{2m}(1 + 2B_4)(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) . \quad (2.96)$$

Podemos então, desta forma, escrever o nosso Hamiltoniano matricial como:

$$H_{cc} = \begin{pmatrix} E_g - A(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) & 0 \\ 0 & E_g - A(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) \end{pmatrix} \quad (2.97)$$

Como foi dito anteriormente isso não pode ser feito no caso dos *Quantum Dots*, uma vez que o potencial de *strain* tem um papel fundamental [4, 5, 19, 20] e causa um forte acoplamento entre os estados da banda de valência e de condução, não sendo uma boa alternativa utilizar os Hamiltoniano de Luttinger-Kohn que tratam somente dos estados da banda de valência para resolver problemas dos *Quantum Dots*.

2.7 Correções da mudança de parâmetro de rede de um “bulk” (Hamiltoniano de strain)

Devido ao descasamento dos parâmetros de rede dos dois materiais que compõem a heteroestrutura no momento do crescimento, ocorre a formação dos *Quantum Dots* auto-organizados dirigido pelo campo de *Strain*, que por sua vez será tanto maior quanto maior for o descasamento dos parâmetros. Desta forma o *Quantum Dot* auto-organizado é por natureza um sistema tensionado. O *strain* terá um forte papel na determinação dos estados eletrônicos e por isso deve ser considerado para o cálculo da estrutura eletrônica do mesmo.

O *strain* será responsável por um forte acoplamento entre os estados da banda de condução com a banda de valência, e tem sido usado freqüentemente na literatura para cálculos de estrutura eletrônica de *Quantum Dots*. [6].

Utilizando um modelo de mecânica dos meios contínuos, a energia total do campo de strain pode ser dada por [5],

$$U_{CM} = \sum_{ijkl} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} , \quad (2.98)$$

onde e_{ij} é o tensor de *strain* dado por,

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} , \quad (2.99)$$

no qual u_{ij} é o deslocamento do campo vetor e C_{ijkl} são os parâmetros dos materiais para um cristal com a simetria cúbica, fornecidos em termos dos coeficientes c_{11} , c_{12} , c_{44} .

Utilizando a mesma base dos termos de enertia cinética, a matriz de *strain* pode ser escrita da seguinte forma:

$$H_S = \begin{pmatrix} a_c e & 0 & -v^* & 0 & \sqrt{3}v & \sqrt{2}u & u & -\sqrt{2}u^* \\ 0 & a_c e & \sqrt{2}u & \sqrt{3}v^* & 0 & v & -\sqrt{2}v & -u \\ -v & \sqrt{2}u & -p+q & -s^* & r & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}s & -\sqrt{2}q \\ 0 & \sqrt{3}v & -s & -p-q & 0 & r & -\sqrt{2}r & \frac{1}{\sqrt{2}}s \\ -\sqrt{3}v^* & 0 & r^* & 0 & -p-q & s^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r^* \\ \sqrt{2}u & v^* & 0 & r^* & s & -p+q & \sqrt{2}q & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* \\ u & -\sqrt{2}v^* & \sqrt{\frac{3}{2}}s^* & -\sqrt{2}r^* & \frac{1}{\sqrt{2}}s & \sqrt{2}q & -a_v e & 0 \\ -\sqrt{2}u & -u & \sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s^* & \sqrt{2}r & \sqrt{\frac{3}{2}}s & 0 & -a_v e \end{pmatrix} , \quad (2.100)$$

onde,

$$p = a_v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) , \quad (2.101)$$

$$q = b \left[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy}) \right] , \quad (2.102)$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{2}b(e_{xx} - e_{yy}) - i d e_{xy} , \quad (2.103)$$

$$s = -d(e_{xz} - i e_{yz}) , \quad (2.104)$$

$$u = \frac{-i}{\sqrt{3}}Q_0 \sum_j e_{zj} \partial_j , \quad (2.105)$$

$$v = \frac{-i}{\sqrt{6}} Q_0 \sum_j (e_{xj} - ie_{yj}) \partial_j . \quad (2.106)$$

Sendo, b e d os parâmetros de deformação do potencial, a_v o potencial hidrostático de deformação da banda de valência e a_c o potencial hidrostático de deformação da banda de condução. Em adição à dependência explícita do *strain* em H_S , existe um pequeno efeito piezoelétrico. Sendo esta polarização induzida por *strain* no material responsável por gerar um potencial eletrostático que quebra a simetria C_{4v} para uma simetria C_{2v} .

Uma vez tendo a matriz de *strain* e a matriz de energia cinética podemos então resolver o nosso problema a partir do novo Hamiltoniano total.

$$H_T = H_{\vec{K} \cdot \vec{\pi}} + H_S . \quad (2.107)$$

Em uma primeira aproximação vamos fazer uso de um *strain* hidrostático, essa deve ser uma boa aproximação para *Quantum Dots* com dimensões reduzidas na direção de crescimento, pois nesse assumiremos que o parâmetro de rede do *Quantum Dot* deverá se ajustar ao parâmetro do material que compõe a barreira.

Capítulo 3

Modelo de Ponto Quântico

1 Função Envelope

No capítulo anterior, nós determinamos o Hamiltoniano de uma partícula que descreve o sistema de um elétron em material do tipo *bulk* com simetria translacional por vetores da rede de Bravais perfeita. Isso, no entanto, não é suficiente para entender as propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras onde a simetria da rede de Bravais é quebrada.

Este seria um problema formidável se não fosse a tremenda aproximação e simplificação feita anteriormente ao transformarmos um problema de muitos corpos onde existe um incrível número de interações em um problema de partícula independente com Hamiltoniano de Kane (8x8), no qual descrevemos os estados do sistema através de um elétron individual sujeito a um conjunto de interações tratadas em uma aproximação de campo médio. As informações são embutidas em parâmetros efetivos com a finalidade de descrever as propriedades dos portadores no meio permitindo o cálculo das propriedades macroscópicas. A posteriori, pode-se fazer uma segunda aproximação ao associar a densidade de probabilidade com a densidade de elétrons quando o número de elétrons for grande. Não é o caso dos sistemas aqui estudados.

Vamos então descrever o comportamento de um elétron efetivo sujeito a uma energia potencial $U(r)$, que descreverá o potencial da heteroestrutura. Esse é um problema computacionalmente custoso por causa da complexidade de sua descrição espacial do Quantum Dot.

A energia potencial sentida por um elétron de valência pode ser dividida em duas partes, uma parte macroscópica e uma parte microscópica. O potencial macroscópico $U(r)$ deriva da quebra de simetria da rede de Bravais e será o que costumeiramente chamamos de potencial da heteroestrutura. Já o campo elétrico microscópico sentido por um elétron deriva do potencial periódico dos íons e dos outros elétrons

de valência.

Desta forma, se deixarmos de levar em consideração qualquer quebra de simetria gerada por um potencial adicional, considerando somente o potencial da rede cristalina periódica $U_L(\vec{r})$, a solução pode ser dada em termos das funções de onda de Bloch, que representam o estado de um elétron em uma banda ν e com vetor de onda $\vec{k}$,

$$\Psi_0(\vec{r}) = u_{\nu,k}(\vec{r}) \exp i \left(\vec{k} \cdot \vec{r} \right). \quad (3.1)$$

Onde $u_{\nu,k}(\vec{r})$ é uma função periódica com o mesmo período do potencial periódico da rede de Bravais $U_L(\vec{r})$, que descreve o estado do elétron em uma banda ν e com vetor de onda $\vec{k}$. E associado a esses estados temos $E_\nu(k)$ que é a relação de dispersão de um elétron no sólido e que determina os estados possíveis a serem ocupados.

Partindo da relação de dispersão $E_\nu(k)$, que pode ser obtida através de cálculos *ab initio* ou experimentalmente, podemos descrever uma equação de massa efetiva na qual o potencial periódico $U_L(\vec{r})$ não aparece explicitamente. Podemos, então, descrever um elétron em uma banda ν , sujeito a um potencial adicional $U(r)$, através de uma nova equação de massa efetiva,

$$E\Psi(r) = E_\nu(-i\nabla)\Psi(r) + U(r)\Psi(r), \quad (3.2)$$

onde $\Psi(r)$ é agora a função envelope do elétron sujeito ao potencial da heteroestrutura. Vamos tomar o caso em que temos uma banda completamente parabólica, podendo então ser descrita como,

$$E_\nu(k) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m_\nu^*} \left(\vec{K}_x^2 + \vec{K}_y^2 + \vec{K}_z^2 \right), \quad (3.3)$$

onde m_ν^* é a massa efetiva do elétron nessa banda. Conhecendo $E_\nu(k)$, faz-se uso dessa característica e a equação de massa efetiva pode ser escrita como:

$$E\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m_\nu^*} \nabla^2 \Psi(r) + U(r)\Psi(r). \quad (3.4)$$

Como bem sabemos a relação de dispersão para um elétron em um dado material será mais complicada do que caso especificado anteriormente em que tínhamos uma banda completamente parabólica. Se

levássemos em conta o conhecimento completo de $E_\nu(K)$ o problema seria de difícil solução mas, veremos que isto não será absolutamente necessário, uma vez que a descrição do elétron pode ser feita em torno de um determinado ponto K_0 , fazendo-se a expansão em série de Taylor em torno deste ponto K_0 . Quando levada essa expansão até segunda ordem, temos uma aproximação igual à de uma banda parabólica, o que na grande maioria dos casos é mais do que suficiente, uma vez os elétrons que determinam as propriedades de transporte e propriedades ópticas encontram-se em torno de um ponto de alta simetria do cristal. Desta forma, fazendo a expansão em torno desse ponto, no nosso caso o ponto Γ , conseguimos capturar a física do problema em questão.

Fazendo o uso da equação de massa efetiva podemos resolver uma série de problemas relacionados a heteroestruturas, criadas a partir de materiais distintos com o potencial $U(r)$. Esta aproximação é extremamente útil para a descrição de dispositivos, implicando em economia de tempo e de capacidade de processamento.

Vamos agora analisar sob quais condições podemos efetivamente utilizar esta aproximação de função envelope $\Psi(r)$. Partindo da equação de Schrödinger para o elétron sujeito a um potencial periódico, mais um potencial adicional, temos a seguinte equação,

$$E\Psi_0(r) = H\Psi_0(r) + U(r)\Psi_0(r), \quad (3.5)$$

onde H é a soma da energia cinética do elétron com o potencial periódico da rede,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U_L(r). \quad (3.6)$$

Partindo do fato que conhecemos a solução para o elétron sem a presença do potencial adicional podemos escrever,

$$H\psi_{\nu,k}(\vec{r}) = E_\nu(k)\psi_{\nu,k}(\vec{r}), \quad (3.7)$$

onde $\psi_{\nu,k}(\vec{r})$ são os autoestados dos elétrons no cristal e $E_\nu(k)$ representa a relação de dispersão dos elétrons no meio.

Utilizando a definição das funções de Bloch para $\psi_{\nu,\kappa}(\vec{r})$ encontramos:

$$\psi_{\nu,\kappa}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r}) U_{\nu,\kappa}(\vec{r}) \quad (3.8)$$

Escrevendo $\psi_{\nu,\kappa}(\vec{r})$ na notação de Dirac temos:

$$|\nu, \kappa\rangle = \psi_{\nu,\kappa}(\vec{r}) \quad (3.9)$$

Fazendo a expansão de $\Psi_0(r)$ em termos de um conjunto completo de funções de base de Bloch $|\nu, \kappa\rangle$ obtemos,

$$\Psi_0(r) = \sum_{\nu,\kappa} a_{\nu,\kappa} |\nu, \kappa\rangle, \quad (3.10)$$

onde $a_{\nu,\kappa}$ são os coeficientes da expansão temos a seguinte equação para os coeficientes da expansão,

$$E a_{\nu,\kappa} = \sum_{\nu',\kappa'} \langle \nu', \kappa' | H + U | \nu, \kappa \rangle a_{\nu',\kappa'}, \quad (3.11)$$

lembrando que são autoestados de H ,

$$\langle \nu', \kappa' | H | \nu, \kappa \rangle = E_{\nu'}(k') \delta_{\nu',\nu} \delta_{\kappa',\kappa}, \quad (3.12)$$

temos,

$$E a_{\nu,\kappa} = E_{\nu}(k) a_{\nu,\kappa} + \sum_{\nu',\kappa'} U_{\nu',\kappa',\nu,\kappa} a_{\nu',\kappa'}. \quad (3.13)$$

Para entendermos a aproximação feita na equação de massa efetiva podemos achar uma relação entre a função envelope que temos como resultado da equação de massa efetiva e a real função do elétron. Para isto vamos expandir a função envelope em um conjunto completo de ondas planas,

$$\Psi(r) = \sum_K b_K |K\rangle, \quad (3.14)$$

onde b_K são os coeficientes da expansão. Partindo agora da equação de massa efetiva temos,

$$E b_K = \sum_K \langle K' | E_{\nu}(k) + U | K \rangle b_{K'} \quad (3.15)$$

$$E_\nu(-i\nabla)[K'] = E_\nu(K')[K'] \quad (3.16)$$

$$Eb_K = E_\nu(K)b_K + \sum_K U_{K',K}b_{K'}, \quad (3.17)$$

e vemos que a equação de massa efetiva só reproduzirá o resultado da equação original do elétron caso o potencial adicional $U(r)$ cause um acoplamento entre as bandas que possa ser tratado como perturbação.

$$\langle \nu', k' | U | \nu, k \rangle = \delta_{\nu', \nu} \langle k' | U | k \rangle. \quad (3.18)$$

Neste caso temos que,

$$\Psi_0(r) = u_{\nu,k}(\vec{r})\Psi(r). \quad (3.19)$$

2 Termo de Energia Cinética

Para um material do tipo *bulk* o termo de energia cinética, representado pelo Hamiltoniano de Kane (8x8), é bloco diagonal quando projetamos os mesmo em uma base de ondas planas para a realização dos cálculos no espaço recíproco. Quando trabalhamos com uma heteroestrutura o termo de energia cinética deve ser descrito ponto a ponto do material em função dos parâmetros efetivos daquele ponto em questão, fornecidos pelas condições de contorno ditadas pelas propriedades geométricas da configuração dos materiais que compõem a superrede.

Desta forma cada termo da matriz de Kane (8x8) no espaço direto deve ser agora descrito em termos de parâmetros efetivos que dependam da posição em cada ponto da rede (x, y, z) . Expressando o Hamiltoniano de Kane no formato correspondente para realização de cálculos de heteroestruturas temos portanto agora os operadores Q, T, S, R descritos da seguinte forma,

$$Q = \frac{1}{2m_0} \{ [\gamma_1(x, y, z) + \gamma_2(x, y, z)](p_x p_x + p_y p_y) + [\gamma_1(x, y, z) - 2\gamma_2(x, y, z)]p_z p_z \}, \quad (3.20)$$

$$T = \frac{1}{2m_0} \{ [\gamma_1(x, y, z) - \gamma_2(x, y, z)](p_x p_x + p_y p_y) + [\gamma_1(x, y, z) + 2\gamma_2(x, y, z)]p_z p_z \}, \quad (3.21)$$

$$S = \frac{\hbar}{2m_0} 2i\sqrt{3}(p_x + ip_y)\gamma_3(x, y, z)p_z, \quad (3.22)$$

$$R = -\frac{1}{2m_0}\sqrt{3}\{\gamma_2(x, y, z)[(p_x p_x - p_y p_y) - 2i\gamma_3(x, y, z)p_x p_y]\}, \quad (3.23)$$

onde, $\gamma_1(x, y, z)$, $\gamma_2(x, y, z)$, $\gamma_3(x, y, z)$ são os parâmetros de Kane localmente para cada ponto x, y, z da heteroestrutura.

Temos a necessidade em algum momento do cálculo, de fazer a discretização do material em uma matriz de pontos de forma que cada ponto assuma valores distintos dependendo exclusivamente das propriedades do material que compõe aquela região da heteroestrutura. Vamos então partir de um parâmetro de massa efetiva genérico $f(x, y, z)$ que descreva cada ponto de uma heteroestrutura com um período d .

$$f(x, y, z) = \{f_{i,j,k}\} \quad (3.24)$$

Sendo os operadores de momento expressos da forma abaixo, queremos então saber qual o formato do Hamiltoniano de Kane.

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.25)$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (3.26)$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.27)$$

Verificando o termo de energia cinética do Hamiltoniano encontramos termos da forma $f(x, y, z)p_i p_j$, que podemos simetrizar do seguinte modo,

$$f(x, y, z)p_i p_j \rightarrow \frac{1}{2} [p_i^+ f(x, y, z)p_j + p_j^+ f(x, y, z)p_i]. \quad (3.28)$$

Esse termo será usado para calcular a projeção do termo Hamiltoniano de energia cinética em uma base de ondas planas:

$$\langle \vec{K} | H_0 | \vec{K}' \rangle. \quad (3.29)$$

Partindo dos operadores simetrizados temos:

$$\langle \vec{K} | f(x, y, z) | \vec{K}' \rangle = \frac{1}{d^3} \int_0^d \int_0^d \int_0^d \exp -i(\vec{K} \cdot \vec{r}) f(x, y, z) \exp i(\vec{K}' \cdot \vec{r}) d^3 r \quad (3.30)$$

$$\langle \vec{K} | \frac{1}{2} [p_i^+ f(x, y, z) p_j + p_j^+ f(x, y, z) p_i] | \vec{K}' \rangle = \quad (3.31)$$

$$= \frac{1}{d^3} \int_0^d \int_0^d \int_0^d \exp -i(\vec{K} \cdot \vec{r}) \frac{1}{2} [p_i^+ f(x, y, z) p_j + p_j^+ f(x, y, z) p_i] \exp i(\vec{K}' \cdot \vec{r}) d^3 r$$

$$\langle \vec{K} | \frac{1}{2} [p_i^+ f(x, y, z) p_j] | \vec{K}' \rangle = \frac{F(\vec{K}, \vec{K}')}{d^3} \int_0^d \int_0^d \int_0^d \exp -i(\vec{K} \cdot \vec{r}) f(x, y, z) \exp i(\vec{K}' \cdot \vec{r}) d^3 r, \quad (3.32)$$

onde,

$$F(\vec{K}, \vec{K}') = K_i \cdot K_j \quad (3.33)$$

Notamos portanto a presença de termos que dependem de $F(\vec{K}, \vec{K}')$, que expressa o fato de que agora nossa matriz de energia cinética não é mais bloco diagonal mas vai depender de $\vec{K}$ e $\vec{K}'$.

3 Programa Computacional

O método computacional com o qual este trabalho foi executado, foi desenvolvido ao longo dos últimos dez anos, pelo professor Guilherme Matos Sipahi e por colaboradores. Ele originalmente calculava a estrutura de bandas de poços δ -doping, passando posteriormente a operar sobre heteroestruturas. As modificações necessárias para o uso dos *Quantum Dots* foram executadas no decorrer desse projeto.

Vamos agora descrever os procedimentos utilizados na simulação e apresentar as etapas para obtenção dos resultados.

Inicialmente temos um arquivo de entrada onde estão contidos todos os parâmetros dos materiais envolvidos na simulação, assim bem como o perfil do potencial confinante e as propriedades geométricas do mesmo.

Em um programa inicial, temos subrotinas que desenhavam o *Quantum Dot* em função de seus parâmetros geométricos. Isso é realizado, discretizando o espaço $V(x,y,z)$ em uma matriz de alocação dinâmica, sendo que cada ponto do espaço recebe os dados de entrada dos parâmetros dos materiais, descrevendo dessa forma uma dada região dentro de uma matriz de outro material na qual encontra o *Quantum Dot*.

Como o Hamiltoniano nos modelos utilizados, é representado em termos dos vetores do espaço recíproco, expandem-se os potenciais em um conjunto de ondas planas (calculando a sua transformada de Fourier tridimensional utilizando as rotinas do pacote FFTW-Fastest Fourier Transform of the West), e dessa forma poderemos descrever nossas funções envelope como uma combinação linear dessas ondas planas, levando assim à construção de uma matriz Hermitiana que representa o problema em questão. Finalizado este programa reescreve-se o arquivo de entrada adicionando os coeficientes.

Com um conjunto pequeno de ondas planas conseguimos uma boa representação para um potencial suave e observou-se também que, com um conjunto razoável de ondas planas é suficiente para representar um potencial que não satisfaz a condição de derivadas contínuas em todos os pontos.

O programa de cálculo de estrutura eletrônica lê o arquivo de entrada modificado e escreve o Hamiltoniano total abaixo:

$$H_{total} = H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} + H_{strain} + V_{Het},$$

onde $H_{\vec{k} \cdot \vec{p}}$ é o termo de energia cinética, H_{strain} que realiza uma correção da estrutura eletrônica devido à mudança do parâmetro de rede quando temos a junção de dois materiais com parâmetros de rede diferentes e V_{Het} o potencial da heteroestrutura.

Uma vez tendo o Hamiltoniano em sua forma matricial, este é diagonalizado, e como resultado dessa diagonalização obtém-se a estrutura de banda e as funções envelopes. Para diagonalizar nosso Hamiltoniano utilizamos rotinas da biblioteca de álgebra linear LAPACK, essa por sua vez possui rotinas otimizada para diagonalização de matrizes Hermitianas.

A Fig.(3.1) apresenta o diagrama esquemático do método utilizado.

Figura 3.1: *Diagrama de etapas de execução do programa.*

Capítulo 4

Fotoluminescência

Na realização de um experimento de fotoluminescência faz-se a análise da resposta espectral de um determinado meio após ser excitado por uma radiação eletromagnética monocromática. A incidência da radiação provoca um estado de não equilíbrio de pares de elétrons e buracos dentro do sistema estudado. Numa tentativa de buscar o equilíbrio termodinâmico ocorre a recombinação dos pares de elétrons e buracos com emissão de radiação, que pode ocorrer de forma espontânea, gerada por perturbações das interação dos elétrons com fônons ou mesmo por flutuações quânticas do campo eletromagnético.

Temos portanto três etapas bem distintas: os pares elétron-buraco são gerados, tirando o sistema do estado de equilíbrio; na tentativa de buscar o equilíbrio do sistema os portadores gerados termalizam buscando estados de menor energia dentro das bandas onde se encontram, por intermédio do campos de fônons; por fim os portadores se recombinam emitindo radiação na frequência associada aos estados eletrônicos dos elétrons e buracos dentro da amostra.

A partir dos autoestados calculados no Modelo de Kane (8x8) na aproximação de função envelope, apresentaremos um modelo para o cálculo da fotoluminescência que permitirá uma comparação direta com os resultados experimentais. Isso é possível por que, uma vez tendo os autoestados do sistema, e conhecemos a funções envelopes destes, podemos calcular a força de oscilador com as regras de seleção, ditadas agora pelas simetrias das funções envelopes. Ao fazer a distribuição dos elétrons sobre a estrutura de bandas, podemos definir o nível de Fermi e, a partir daí, calcular a ocupação eletrônica a uma dada temperatura. Com a ocupação, podemos determinar as probabilidades de recombinação eletrônica entre elétrons e buracos.

Para o cálculo de fotoluminescência utilizamos a seguinte expressão geral,

$$I(\omega) = \frac{2\hbar^2}{c} \frac{e^2}{m_0 c^2} \sum_{if} f_{if} N_i (1 - N_f) \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{if}}{(E_i - E_f - \hbar\omega)^2 + \gamma_{if}^2}, \quad (4.1)$$

onde N_i e N_f são as distribuições de elétrons e buracos em uma dada temperatura, o termo f_{if} representa a força de oscilador na aproximação de dipolo, que diz respeito a probabilidade de transição eletrônica de um estado inicial $|k_i\rangle$ para um estado final $|k_f\rangle$, com energias E_i e E_f sob a presença de um campo eletromagnético. A distribuição Lorentziana é utilizada por se tratar de um processo estimulado. O alargamento da distribuição é dado por γ_{if} , que está associado ao tempo médio de vida dos portadores fora do equilíbrio. Se considerarmos que este campo está polarizado na direção x podemos escrever a força de oscilador como,

$$f_{if} = \frac{2|\langle k_i | p_x | k_f \rangle|^2}{m_0 (E_i - E_f)}. \quad (4.2)$$

Dessa forma, definimos a probabilidade de um elétron que se encontra na banda de condução, associado a um dado autoestado $|n_e \sigma_e \vec{k}\rangle$ e seu respectivo autovalor recombinarem com os estados de buracos na banda de valência $|n_q \sigma_q \vec{k}\rangle$, onde $q = \{hh, lh, so\}$ representa respectivamente buracos pesados, leves e de *split-off*, $\vec{k}$ representa o vetor de onda associado ao momento do elétron em uma determinada banda, n diz respeito à banda em que se encontra o portador de carga e σ representa a polarização do *spin* dos portadores de carga dentro da respectiva banda.

Podemos rescrever a equação Eq.(4.1) da seguinte forma,

$$I(\omega) = \frac{2\hbar^2}{c} \frac{e^2}{m_0 c^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{ne} \sum_{nq} f_{ne,nq}(\vec{k}) N_{ne}(\vec{k}) (1 - N_{nq}(\vec{k})) F(\omega), \quad (4.3)$$

onde $F(\omega)$ é dado por,

$$F(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{ne(\vec{k})nq(\vec{k})}}{(E_{ne}(\vec{k}) - E_{nq}(\vec{k}) - \hbar\omega)^2 + \gamma_{ne(\vec{k})nq(\vec{k})}^2}, \quad (4.4)$$

e onde $f_{ne,nq}(\vec{k})$ é a força de oscilador que leva em conta a transição do portadores de carga da banda de condução para os estados vazios da banda de valência, podendo ser descrita da seguinte forma,

$$f_{ne,nq}(\vec{k}) = \frac{2}{m_0} \sum_{\sigma_e \sigma_q} \frac{2|\langle n_e \sigma_e \vec{k} | p_x | n_q \sigma_q \vec{k} \rangle|^2}{(E_{ne}(\vec{k}) - E_{nq}(\vec{k}))}. \quad (4.5)$$

Usando as simetrias dos estados em questão e lembrando que deve existir a conservação do momento do portador em uma transição óptica posto que o momento do fóton é desprezível. Podemos então desenvolver $f_{ne,nq}(\vec{k})$,

$$f_{ne,nq} = \frac{4}{m_0(E_{ne} - E_{nq})} \left\{ |\langle n_e \sigma_{up} | p_x | n_q \sigma_{up} \rangle|^2 + |\langle n_e \sigma_{down} | p_x | n_q \sigma_{down} \rangle|^2 \right\}. \quad (4.6)$$

A ocupação eletrônica e os estados das populações de elétrons e buracos são, em nosso modelo, determinados pelas distribuições de Fermi-Dirac dadas abaixo:

$$N_{ne(\vec{k})} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E_{ne}(\vec{k})}{k_B T}\right) + 1} \quad (4.7)$$

$$(1 - N_{nq(\vec{k})}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E_{nq}(\vec{k})}{k_B T}\right) + 1} \quad (4.8)$$

Temos assim um método para obter o espectro de fotoluminescência a partir dos estados dos elétrons e buracos calculados na aproximação de massa efetiva multibandas. O programa de cálculo da estrutura de bandas incorpora esse modelo, sendo o resultado dessa simulação uma das possíveis saídas do programa.

Capítulo 5

RESULTADOS

Neste capítulo apresentaremos resultados referentes à utilização do método desenvolvido, fazendo uso do modelo de Kane (8x8), para avaliar as propriedades dos estados ligados de portadores de carga (elétrons e buracos) em sistemas quase zero-dimensionais. Faremos ainda um estudo do perfil de fotoluminescência, que permite uma comparação direta com os dados experimentais, através da verificação de como esse perfil é alterado quando variamos as propriedades geométricas da região de confinamento. Apresentaremos também os resultados obtidos no estudo de *Quantum Dots* de InN em uma matriz de GaN, que permite ir além e explorar a fotoemissão em outras áreas do espectro eletromagnético, sendo de grande interesse para construção de dispositivos ópticos eletrônicos para a leitura de mídia de altas densidades.

1 ‘Quantum Dots’ de InAs em Matriz de GaAs

Com o passar dos anos e a implementações de técnicas de crescimento cada vez mais sofisticada, a obtenção de *Quantum Dots* de InAs em GaAs atingiu um alto índice de qualidade, gerando uma grande quantidade de resultados experimentais. Esta enorme quantidade de resultados serve como motivação para o cálculo da estrutura eletrônica destes sistemas [5, 14, 16, 17, 18]. Como ponto de partida, vamos iniciar nosso estudo com os *Quantum Dots* de InAs/GaAs, pois estes foram e continuam sendo muito estudados, servindo de referência e ponto de partida para o entendimento de sistemas compostos de outros materiais.

2 ‘Quantum Dot’ cúbico de InAs/GaAs

A tabela (5.1) apresenta os parâmetros utilizados nos cálculos das estruturas eletrônicas e dos espectros de luminescência de *Quantum Dots* de InAs/GaAs. Os parâmetros dos materiais aqui utilizados foram obtidos experimentalmente ou de cálculos de primeiros princípios [26]. As tabelas apresentam os parâmetros de massa efetiva para GaAs e InAs. Como efeito da diferença dos parâmetros podemos então determinar o potencial da heteroestrutura para cada um dos portadores de carga (elétrons, buracos leves, pesados e de *split-off*). A Fig. (5.1) mostra cortes, no plano perpendicular à direção de crescimento, dos potenciais sentidos pelos diferentes portadores de carga para um *Quantum Dot* cúbico de InAs de aresta 50 Å em uma matriz de GaAs. Os potenciais de buracos leves, pesados e de *split-off* apresentam a mesma profundidade, enquanto o potencial sentido pelos elétrons é mais profundo. Isto se deve ao fato de que o descasamento da banda de condução é maior que o da banda de valência. Neste e nos próximos cálculos, tomamos o valor 60% do valor da energia do *gap* para a banda de condução e 40% para a banda de valência. É ainda importante destacar nesta figura, a convenção de apresentação do potencial confinante para buracos, que tem sinal oposto ao potencial confinante para elétrons e também o deslocamento do topo da barreira para buracos de *split-off* do valor Δ_{so} .

Parâmetro	GaAs	InAs	Parâmetro	GaAs	InAs
γ_1 (Kane)	0.591	2.864	m_{hh}	0.340	0.350
γ_2 (Kane)	-1.135	-0.068	m_{lh}	0.094	0.026
γ_3 (Kane)	-0.2650	0.6320	m_{so}	0.172	0.146
A_{CONST}	-2.806	-4.676	m_e	0.067	0.026
P	-1.4550	-1.257	D_U	2.000	1.800
E_{gap}	1.5190	0.418	C_{11}	122.10	83.300
Δ_{so}	0.3410	0.390	C_{12}	56.600	45.300
a	5.653	6.058	A_G	-8.330	-6.080
C_{Diel}	12.56	12.56			

Tabela 5.1: Parâmetros de massa efetiva para GaAs e InAs. À exceção dos parâmetros de rede (em Å) e dos valores do gap, da energia de *split-off* e dos parâmetros de *strain* A_G , D_u (em eV) e as massa m em unidades de m_0 , todos os outros parâmetros são adimensionais. Parâmetros extraídos de Vurgaftman et al. [26].

Uma vez escrito o potencial da heteroestrutura, podemos determinar o Hamiltoniano total do sistema que é composto pelo potencial tridimensional do *Quantum Dot*, mais o termo de energia cinética que para os materiais na fase cúbica é descrito pelo Hamiltoniano de Kane. A Fig. (5.2) apresenta um corte, no plano k_x, k_y , das estruturas das bandas de condução e de valência, onde pode ser verificada a existência de estados confinados tanto de elétrons quanto de buracos.

Figura 5.1: Perfis de potencial para um *Quantum Dot* cúbico de InAs em uma matriz de GaAs com arestas 50 Å.

Observamos ainda, na Fig. (5.2), que à medida em que os estados se aproximam das bordas da região de confinamento, isto é tornam se menos localizados, a separação dos níveis de energia, tanto dos elétrons quanto dos buracos, diminui. Nesta energia, ou seja quando a energia cinética torna-se maior que a energia de confinamento dos portadores gerada pelo potencial da heteroestrutura, os estados se tornam estendidos e a banda tende para um contínuo de estados.

A espectroscopia de infravermelho, em que se mede a emissão de luz por uma amostra depois de excitá-la, é uma ferramenta muito importante para a determinação das propriedades ópticas e por ventura para a determinação do comportamento de dispositivos eletro-ópticos baseados em heteroestruturas semicondutoras. Para simular um espectro de emissão, consideramos que o sistema encontra-se em um regime

Figura 5.2: Corte das estruturas das bandas de condução e de valência no plano k_x, k_y , para um *Quantum Dot* cúbico de InAs em uma matriz de GaAs com aresta de 50 Å .

estacionário, onde todos os elétrons livres se encontram termalizados, e executamos o cálculo do espectro de fotoluminescência para *Quantum Dots* cúbicos de arestas 5, 20 e 50 Å. A Fig. (5.3) apresenta estes espectros de fotoluminescência. Pode-se notar na figura que, à medida em que as dimensões geométricas dos *Quantum Dots* diminuem observa-se um deslocamento para o azul, aproximando cada vez mais da energia do gap do material utilizado como barreira.

3 ‘Quantum Dots’ Auto organizados de InAs/GaAs

Foi observado por Stranski-Krastanow [27] que, durante os estágios iniciais da técnica de crescimento epitaxial era induzida a formação natural de ilhas tridimensionais, dirigidas por um campo de *strain* originado pelo descasamento dos parâmetros de rede dos dois materiais. Com dimensões típicas de 100 a 200 Å, estas ilhas são hoje chamadas de *Quantum Dots* auto-organizados (produzidos por crescimento de Stranski-Krastanow).

As ilhas de Stransky-Krastanow apresentam um formato piramidal, apresentando uma base quadrada ou retangular (aqui representados por bases quadradas de aresta a) com altura h . As pirâmides podem também apresentar-se no formato truncado, apresentando um parâmetro de corte c . Na Fig. (5.4) apre-

Figura 5.3: Espectro de fotoluminescência para *Quantum Dots* cúbicos de InAs em matriz de GaAs com arestas laterais de 5, 20 e 50 Å.

sentamos um corte na estrutura do potencial no plano $x - z$, para um *Quantum Dot* de base igual a 100Å e altura de 100Å com parâmetro de corte igual a 2Å.

Diagonalizando o Hamiltoniano obtém-se a estrutura de bandas Fig. (5.5) apresentada através de um corte, no plano k_x, k_y , das estruturas das bandas de condução e de valência para *Quantum Dots* com largura de base e altura de 100 Å e parâmetro de corte de 2 Å, onde pode também ser verificada a existência de estados confinados tanto de elétrons quanto de buracos.

A Fig. (5.6) apresenta os espectros de fotoluminescência, para *Quantum Dots* piramidais de largura de base e altura de 100 Å e parâmetro de corte de 4, 40 e 80 Å. Comparando os resultados desta figura com os da Fig. (5.3), o que significa que mantemos os mesmos materiais e variamos a geometria e as dimensões dos *Quantum Dots*, observamos variações nos espectros de fotoluminescência. Pode ainda ser verificado que, à medida em que aumentamos as dimensões espaciais dos *Quantum Dots*, existe um deslocamento do espectro para o vermelho, o que é aceitável uma vez quanto maior for a dimensão da região de confinamento, mais nos aproximamos do regime clássico, onde a região de confinamento terá o comportamento de um *bulk* sem efeitos de confinamento quântico apreciáveis. O mesmo deve ser observado para quaisquer geometrias de *Quantum Dots*. Nota-se no entanto, que este desvio para o vermelho com o aumento das dimensões da base é menor para os poços piramidais, o que decorre do

Figura 5.4: Perfis de potencial para um *Quantum Dot* piramidal de InAs em uma matriz de GaAs com um comprimento de base e altura de 100 Å e parâmetro de corte de 2 Å (na direção z).

limite imposto na dimensão do parâmetro de corte.

Comparando o resultado de fotoluminescência para o *Quantum Dot* não tensionado da Fig. (5.7) com os resultados experimentais [20], vemos que este estão em desacordo com o mesmo, entretanto ao levar-se em consideração o *strain* hidrostático, temos uma concordância com um índice inferior a 5 % com o resultado experimental para o *Quantum Dot* em questão que possui uma altura de 2 Å [20]. No entanto em *Quantum Dots* maiores essa concordância deixa de existir e nestes casos existe a necessidade de um modelo mais realístico que leva em consideração o *strain* calculado ponto a ponto do *Quantum Dot*.

Na Fig. (5.7) é apresentado o espectro de fotoluminescência de um *Quantum Dot* de InAs em matriz de GaAs, em que se mantêm as mesmas características geométricas variando apenas as condições de

Figura 5.5: Corte da estrutura das bandas de condução e de valência no plano k_x, k_y para um *Quantum Dot* piramidal de InAs em matriz de GaAs com uma largura de base e altura de 100 Å e parâmetro de corte de 2 Å.

tensionamento. Podemos observar, comparando os resultados do *Quantum Dot* não tensionado que ocorre um deslocamento para o azul quando comparado ao tensionado levando em consideração a presença do *strain* hidrostático, isso porque a energia de recombinação do par eletrônico aumenta.

Com uma rápida observação na tabela que contém as características dos materiais que compõem a heteroestrutura em questão, verifica-se que o resultado apresentado na Fig. (5.7) é justificável já que o parâmetro de rede do GaAs *bulk* que representa a barreira, quando comparado com parâmetro de rede do InAs, responsável pela região de confinamento, indica que, gera um *strain* compressivo sobre o InAs e portanto deve causar um deslocamento para o azul.

A tabela (5.2) apresenta, para *Quantum Dots* piramidais, com altura da base de 10 Å e com diferentes dimensões da base quadrada, os autoestados de energia das primeiras bandas de condução em função das dimensões da base, calculados a partir do Hamiltoniano de Kane.

A Fig. (5.8 a) retirada do artigo de Pryor et al, indica o comportamento da energia de confinamento eletrônico em função dos parâmetros geométricos da base do *Quantum Dot* piramidal de InAs em matriz de GaAs. Podemos perceber que à medida que as dimensões da área da base aumentam, os estados se

Figura 5.6: Espectro de fotoluminescência para *Quantum Dots* piramidais de InAs em matriz de GaAs com um comprimento de base e altura de 100 Å e parâmetro de corte de 4, 40 e 80 Å .

tornam mais fortemente localizados criando estados mais profundos dentro da banda de condução.

Um comportamento semelhante pode ser observado em nossos resultados como podemos verificar na Fig. (5.8 b) onde são apresentados os resultados de um *Quantum Dot* piramidal cortado de InAs em matriz de GaAs não tensionado, com uma altura de 100 Å e corte em 10 Å, em função dos parâmetros geométricos da base. Analisando nosso resultados e comparando o mesmo com os resultados da Fig. (5.8 a), observamos que as energias dos elétrons diminuem, indicando efeitos localização mais forte para os elétrons à medida que aumentamos as dimensões geométricas da base. Pode ser observado também que as diferenças de energia entre o segundo e o terceiro estados, mais fortemente ligados para a banda de condução, têm

dimensões	BC 1	BC 2	BC 3	BC 4	BV 1	BV 2	BV 3	BV 4
60 Å	1090	1150	1152	1192	125	100	80	50
80 Å	1060	1125	1128	1169	160	146	137	100
100 Å	1020	1100	1101	1140	172	165	162	152
120 Å	975	1037	1040	1083	192	180	171	161
140 Å	925	985	987	1027	200	188	178	175
160 Å	910	972	974	1015	220	209	199	197
180 Å	880	941	943	984	230	220	210	211

Tabela 5.2: Energias (em meV) dos primeiros autoestados de condução e de valência dentro de *Quantum Dots* piramidais com diferentes larguras de base.

Figura 5.7: Espectro de fotoluminescência com strain e sem strain para um *Quantum Dot* piramidal de InAs em matriz de GaAs com um comprimento de base e altura de 100 Å e parâmetro de corte de 2 Å .

uma diferença mínima de energia, o que também é semelhante nos dois casos.

Fazendo o mesmo estudo para o comportamento da banda de valência, na Fig. (5.9 a) extraído do mesmo artigo Pryor et al, vê-se o comportamento das energias de estados ligados dos buracos de um *Quantum Dot* piramidal tensionado com altura da base de 2 Å para vários comprimentos de base. Podemos verificar que as energias aumentam à medida que ocorre um aumento do valor dos parâmetros geométricos da base da pirâmide, indicando uma localização mais forte dos buracos.

Figura 5.8: a) Energia dos estados ligados para a banda de condução em função dos parâmetros geométricos da base da pirâmide. As linhas contínuas indicam a energia para um *Quantum Dot* piramidal tensionado de 2 Å. Retirado da Ref. [5]. b) Cálculo executado para *Quantum Dots* piramidais cortados, com parâmetro de altura de 100 Å e de corte 10 Å.

Figura 5.9: a) Energia dos estados ligados para a banda de valência em função dos parâmetros geométricos da base da pirâmide. As linhas contínuas indicam a energia para um *Quantum Dot* piramidal tensionado de 2 Å. Retirado da Ref. [5]. b) Cálculo executado para *Quantum Dots* piramidais cortados, com parâmetro de altura de 100 Å e de corte 10 Å.

Fazendo então a comparação dos resultados calculados referentes a um *Quantum Dot* piramidal cortado de InAs em matriz de GaAs, não tensionado com uma altura de 100 Å e corte em 10 Å na Fig. (5.9 b), com os resultados da Fig. (5.9 a) observa-se o mesmo tipo de comportamento em que as energias dos estados confinados dos buracos vão aumentando, indicando uma localização mais forte dos estados de buracos.

4 ‘Quantum-Dots’ auto-organizados de InGaN/GaN

Parâmetro	GaN	InN	Parâmetro	GaN	InN
γ_1 (Kane)	0.018	-1.367	m_{hh}	0.860	0.840
γ_2 (Kane)	-0.517	-1.239	m_{lh}	0.210	0.160
γ_3 (Kane)	-0.271	-0.969	m_{so}	0.300	0.240
A_{CONST}	-1.019	-5.404	m_e	0.150	0.100
P	-1.367	-1.483	D_u	1.600	1.200
E_{gap}	3.299	1.940	C_{11}	293.0	187.00
Δ_{so}	0.017	0.003	C_{12}	159.0	125.0
C_{Diel}	12.56	12.560	A_G	-8500	-12.980
a	4.552	5.030			

Tabela 5.3: Parâmetros de massa efetiva para GaN e InN. À exceção dos parâmetros de rede (em Å) e dos valores do gap, da energia de *split-off* e dos parâmetros de *strain* A_G , D_u (em eV) e as massa m em unidades de m_0 , todos os outros parâmetros são adimensionais. Parâmetros extraídos do artigo de Vurgaftman et al. [26] e massas efetivas de Ramos et al. [25]

A tabela (5.3) apresenta os parâmetros utilizados nos cálculos das estruturas eletrônicas e dos espectros de luminescência de pontos quânticos de InGaN/GaN. Os parâmetros dos materiais aqui utilizados foram obtidos experimentalmente ou de cálculos de primeiros princípios [25, 26]. As tabelas apresentam os parâmetros de massa efetiva para GaN e InN e os parâmetros das ligas foram interpolados entre os valores, sendo levado em conta o *bowing* do gap.

Apresentamos na Fig. (5.10) um corte na estrutura de banda no plano k_x, k_y onde estão representadas

as autoenergias dos primeiros estados confinados de elétrons e buracos para um *Quantum Dot* piramidal não tensionado de InGaN em uma matriz de GaN.

Comparando os resultados da Fig. (5.10) com os resultados anteriores dos *Quantum Dots* de InAs em GaAs observamos que as densidades de estados localizados até um determinado nível de energia dependem basicamente dos fatores geométricos e da intensidade do potencial confinante.

Fazendo o cálculo do espectro de fotoluminescência para os dois *Quantum Dots* com as mesmas características geométricas, mas com condições de *strain* diferentes, obtemos os resultados da Fig. (5.11). Observa-se um deslocamento para o azul quando leva-se em consideração a condição de *strain*.

Figura 5.10: Corte da estrutura das bandas de condução e de valência no plano k_x, k_y para um *Quantum Dot* piramidal de InGaN em matriz de GaN com um comprimento de base de 100 Å e parâmetro de corte de 2 Å.

Verificando esse deslocamento para azul e analisando o parâmetro de rede o *Bulk* GaN ao comparar com o parâmetro de rede InGaN, podemos verificar que se trata de strain compressivo estando então em acordo com o resultado esperado.

Figura 5.11: Espectro de fotoluminescência para um *Quantum Dot* piramidal de InGaN em matriz de GaN com um comprimento de base de 100 Å e altura de 2 Å .

Capítulo 6

Conclusões

1 Trabalho Realizado

Nosso trabalho aqui utiliza uma teoria de massa efetiva multibanda no modelo Kane (8x8) para estudar estruturas de baixa dimensionalidade, levando em conta os efeitos do potencial de confinamento e solução na aproximação de função envelope, direcionado à obtenção de propriedades eletrônicas de pontos quânticos semicondutores.

Fazendo uma análise do método verificamos que os resultados obtidos foram satisfatórios para reproduzir os estados ligados dos *Quantum Dots* com pequenas discrepâncias quanto aos valores observados experimentalmente, que de forma alguma podem ser associado ao método, mas sim a uma série de efeitos que não foram levados em consideração, tais como o *strain*. Isso pode ser observado na Fig. (5.7), onde fazendo a comparação entre os resultados obtidos com os resultados de *strain* levando em consideração o *strain* hidrostático estão de acordo com os resultados experimentais.

No entanto fica claro que para casos mais críticos onde a altura da base onde houve a formação do *Quantum Dot* é grande, torna se necessário um modelo mais realístico onde o *strain* varia de ponto a ponto dentro do *Quantum Dot*.

Neste trabalho foram dados os passos iniciais para a implementação de modelos mais realísticos que levam em consideração outros termos com a finalidade de reproduzir os efeitos observados.

2 Novas Perspectivas a serem exploradas

O fato do campo de *strain* exercer o papel fundamental na determinação dos estados eletrônicos dos *Quantum Dots* auto-organizados leva à necessidade de considerar, não somente o campo de *strain*, mas também o forte acoplamento gerado entre os estados da banda de condução com as banda mais remota [5].

Este fato leva a uma série de perguntas fundamentais a respeito da natureza do tensor de *strain* em *Quantum Dots* e qual a sua influência no acoplamento da banda de condução com as bandas mais remotas.

Para responder a essas perguntas dois modelos teóricos têm sido propostos na literatura para o cálculo do campo de *strain*, o modelo do campo de força de valência (CFV), no qual examina-se a menor energia do campo de *strain* para uma dada configuração e alguns modelos baseados em mecânica dos meios contínuos (MC) no limite atômico [6].

O que a experiência tem demonstrado é, que o papel do campo de *strain*, é de extrema importância, não somente na influência dos estados eletrônicos presentes nos *Quantum Dots*, mas também por exercer um papel fundamental durante o crescimento e na determinação do formato, sendo o responsável pela auto-organização através da minimização da energia total do campo de *strain* localmente onde se formam as ilhas tridimensionais.

Alguns trabalhos afirmam que um segundo efeito causado pelo *strain* é a geração de um momento de dipolo elétrico dentro do *Quantum Dot* [6] e que este pode exercer papel fundamental na determinação da estrutura eletrônica. Como não consideramos a presença de tais dipolos elétricos em nosso trabalho, essa pode ser também uma direção a ser seguida.

Novos efeitos poderão ser também explorados, como o acoplamento entre camadas de pontos quânticos de formatos variados, uma vez que tais sistemas são extremamente sensíveis às condições de crescimento. Existem casos extremos onde o acoplamento entre camadas é forte e não pode ser desprezado levando a criação de níveis estendidos na direção de crescimento. Sendo esses efeitos de extrema importância, para o entendimento do confinamento eletrônico e a possível superposição das funções de onda no espaço real. Podendo ser responsáveis por características de dispositivos óptico-eletrônicos, baseado em transições interbandas.

Um estudo detalhado sobre o acoplamento lateral e a influência deste na densidade de estados do sistema é algo de extrema importância para o desenvolvimento de dispositivos óptico-eletrônicos e poderá vir a ser considerado em novos estudos.

A inclusão da interação elétron-elétron na aproximação de massa efetiva tornará o efeito mais realístico e poderão ser estudados também efeitos como o efeito de bloqueio coulombiano. Desta forma poderão ser identificados quais desses efeitos são mais importantes como (formato, tamanho) fornecido pelos trabalhos experimentais e quais desses efeitos podem ser desprezados, não exercendo função fundamental na constituição das propriedades quânticas deste dispositivo.

Apêndice A

Hamiltoniano 8x8 sem acoplamento spin-órbita

Elementos de matriz

$$H_{12} = H_{21} = H_{56} = H_{65} = -\frac{\hbar^2}{m} Q_1 K_x , \quad (\text{A.1})$$

$$H_{13} = H_{31} = H_{57} = H_{75} = -\frac{\hbar^2}{m} Q_2 K_y , \quad (\text{A.2})$$

$$H_{14} = H_{41} = H_{58} = H_{85} = -\frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{A.3})$$

$$H_{23} = H_{32} = H_{67} = H_{76} = -\frac{\hbar^2}{m} A_1 K_y K_x , \quad (\text{A.4})$$

$$H_{24} = H_{42} = H_{68} = H_{86} = -\frac{\hbar^2}{m} A_2 K_x K_z , \quad (\text{A.5})$$

$$H_{34} = H_{43} = H_{87} = H_{78} = -\frac{\hbar^2}{m} A_3 K_y K_z , \quad (\text{A.6})$$

$$H_{11} = H_{55} = E_1(B_4, \vec{K}^2) = E_g - \frac{\hbar^2}{2m} (1 + 2B_4)(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) , \quad (\text{A.7})$$

$$H_{22} = H_{77} = E_2(B_1, \vec{K}^2) = -\frac{\hbar^2}{m} \{ (1 + 2B_1)K_x^2 + K_y^2 + K_z^2 \} , \quad (\text{A.8})$$

$$H_{33} = H_{77} = E_3(B_2, \vec{K}^2) = -\frac{\hbar^2}{m} \{K_x^2 + (1 + 2B_2) K_y^2 + K_z^2\} , \quad (\text{A.9})$$

$$H_{44} = H_{88} = E_4(B_3, \vec{K}^2) = -\frac{\hbar^2}{m} \{K_x^2 + K_y^2 + (1 + 2B_3) K_z^2\} . \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Hamiltoniano 8x8 com acoplamento spin-órbita

Elementos de matriz do Hamiltoniano (8x8) com Acoplamento spin-órbita

Primeira coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{11} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = E_g - \frac{\hbar^2}{2m} (1 + 2B_4) (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) , \quad (\text{B.1})$$

$$H_{12} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{e2,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.2})$$

$$H_{13} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{h1,0} \rangle = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m} (Q_1 K_x + i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.3})$$

$$H_{14} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{h2,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.4})$$

$$H_{15} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{l1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.5})$$

$$H_{16} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{l2,0} \rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x - i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.6})$$

$$H_{17} = \langle \cup_{e1,0} | H | \cup_{S1,0} \rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.7})$$

$$H_{18} = \langle \cup_{e1,0}] H [\cup_{S2,0} \rangle = i \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x - i Q_2 K_y) . \quad (\text{B.8})$$

Segunda coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{21} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{e1,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.9})$$

$$H_{22} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{e2,0} \rangle = E_g - \frac{\hbar^2}{2m} (1 + 2B_4) (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) , \quad (\text{B.10})$$

$$H_{23} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{h1,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.11})$$

$$H_{24} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{h2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x - i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.12})$$

$$H_{25} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{l1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x + i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.13})$$

$$H_{26} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{l2,0} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.14})$$

$$H_{27} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{S1,0} \rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x + i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.15})$$

$$H_{28} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{S2,0} \rangle = i \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z . \quad (\text{B.16})$$

Terceira coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{31} = \langle \cup_{h1,0}] H [\cup_{e1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{2m} (1 + 2B_1) (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) - i \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} A_1 K_y K_x , \quad (\text{B.17})$$

$$H_{32} = \langle \cup_{h1,0}] H [\cup_{e2,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.18})$$

$$H_{33} = \langle \cup_{h1,0} | H | \cup_{h1,0} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ (1 + B_1) K_x^2 + (1 + B_2) K_y^2 + K_z^2 \} , \quad (\text{B.19})$$

$$H_{34} = \langle \cup_{h1,0} | H | \cup_{h2,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.20})$$

$$H_{35} = \langle \cup_{h1,0} | H | \cup_{l1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.21})$$

$$H_{36} = \langle \cup_{h1,0} | H | \cup_{l2,0} \rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \{ (B_1 K_x^2 + B_2 K_y^2) - i A_1 K_y K_x \} , \quad (\text{B.22})$$

$$H_{37} = \langle \cup_{h1,0} | H | \cup_{S1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x - i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.23})$$

$$H_{38} = \langle \cup_{h1,0} | H | \cup_{S2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} \{ (B_1 K_x^2 + B_2 K_y^2) + 2i A_1 K_y K_x \} . \quad (\text{B.24})$$

Quarta coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{41} = \langle \cup_{h2,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.25})$$

$$H_{42} = \langle \cup_{h2,0} | H | \cup_{e2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x + i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.26})$$

$$H_{43} = \langle \cup_{h2,0} | H | \cup_{h1,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.27})$$

$$H_{44} = \langle \cup_{h2,0} | H | \cup_{h2,0} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ (1 + B_1) K_x^2 + (1 + B_2) K_y^2 + K_z^2 \} , \quad (\text{B.28})$$

$$H_{45} = \langle \cup_{h2,0} | H | \cup_{l1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \{ (B_1 K_x^2 - B_2 K_y^2) + 2i A_1 K_x K_y \} , \quad (\text{B.29})$$

$$H_{46} = \langle \cup_{h2,0}] H [\cup_{l2,0} \rangle = i \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x - i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.30})$$

$$H_{47} = \langle \cup_{e2,0}] H [\cup_{S1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} \{ (B_1 K_x^2 - B_2 K_y^2) + i A_1 K_x K_y \} , \quad (\text{B.31})$$

$$H_{48} = \langle \cup_{h2,0}] H [\cup_{S2,0} \rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z . \quad (\text{B.32})$$

Quinta coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{51} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{e1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.33})$$

$$H_{52} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{e2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x - i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.34})$$

$$H_{53} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{h1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.35})$$

$$H_{54} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{h2,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{12}} \frac{\hbar^2}{m} \{ (B_1 K_x^2 - B_2 K_y^2) - 2i A_1 K_x K_y \} , \quad (\text{B.36})$$

$$H_{55} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{l1,0} \rangle = -\frac{2}{3} \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(1 + \frac{B_1}{2} \right) K_x^2 + \left(1 + \frac{B_2}{2} \right) K_y^2 + (1 + B_3) K_z^2 \right\} , \quad (\text{B.37})$$

$$H_{56} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{l2,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.38})$$

$$H_{57} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{S1,0} \rangle = -i \frac{1}{3} \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} \{ K_x^2 + K_y^2 + (1 + 2B_3) K_z^2 \} , \quad (\text{B.39})$$

$$H_{58} = \langle \cup_{l1,0}] H [\cup_{S2,0} \rangle = -\frac{1 + \sqrt{12}}{\sqrt{18}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x - i A_3 K_y) K_z . \quad (\text{B.40})$$

Sexta coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{61} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x + i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.41})$$

$$H_{62} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{e2,0} \rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.42})$$

$$H_{63} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{h1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{12}} \frac{\hbar^2}{m} \{ (B_1 K_x^2 + B_2 K_y^2) + 2i A_1 K_x K_y \} , \quad (\text{B.43})$$

$$H_{64} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{h2,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (i A_2 K_x + A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.44})$$

$$H_{65} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{l1,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.45})$$

$$H_{66} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{l2,0} \rangle = -\frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \{ (3 + B_1) K_x^2 + (3 + B_2) K_y^2 + (3 + 2B_3) K_z^2 \} , \quad (\text{B.46})$$

$$H_{67} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{S1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.47})$$

$$H_{68} = \langle \cup_{l2,0} | H | \cup_{S2,0} \rangle = i \sqrt{\frac{2}{9}} \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \left(1 + \frac{B_1}{2} \right) K_x^2 + \left(1 + \frac{B_2}{2} \right) K_y^2 + (1 + B_3) K_z^2 \right\} . \quad (\text{B.48})$$

Sétima coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{71} = \langle \cup_{S1,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.49})$$

$$H_{72} = \langle \cup_{S1,0} | H | \cup_{e1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (Q_1 K_x - i Q_2 K_y) , \quad (\text{B.50})$$

$$H_{73} = \langle \cup_{S1,0}] H [\cup_{h1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.51})$$

$$H_{74} = \langle \cup_{S1,0}] H [\cup_{h2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} \{ (B_1 K_x^2 - B_2 K_y^2) - 2i A_1 K_x K_y \} , \quad (\text{B.52})$$

$$H_{75} = \langle \cup_{S1,0}] H [\cup_{l1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{18}} \frac{\hbar^2}{m} \{ B_1 K_x^2 + B_2 K_y^2 + 2B_3 K_z^2 \} , \quad (\text{B.53})$$

$$H_{76} = \langle \cup_{S1,0}] H [\cup_{l2,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x - i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.54})$$

$$H_{77} = \langle \cup_{S1,0}] H [\cup_{S1,0} \rangle = -\frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \{ (3 + 2B_1) K_x^2 + (3 + 2B_2) K_y^2 + (3 + 2B_3) K_z^2 \} , \quad (\text{B.55})$$

$$H_{78} = \langle \cup_{S1,0}] H [\cup_{S2,0} \rangle = 0 . \quad (\text{B.56})$$

Oitava coluna do Hamiltoniano (8x8)

$$H_{81} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{e1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} (i Q_1 K_x - Q_2 K_y) , \quad (\text{B.57})$$

$$H_{82} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{e2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m} Q_3 K_z , \quad (\text{B.58})$$

$$H_{83} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{h1,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} \{ (B_1 K_x^2 - B_2 K_y^2) + 2i A_1 K_x K_y \} , \quad (\text{B.59})$$

$$H_{84} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{h2,0} \rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{\hbar^2}{m} (-A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.60})$$

$$H_{85} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{l1,0} \rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{m} (A_2 K_x + i A_3 K_y) K_z , \quad (\text{B.61})$$

$$H_{86} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{l2,0} \rangle = -i \sqrt{\frac{1}{18}} \frac{\hbar^2}{m} \{ B_1 K_x^2 + B_2 K_y^2 - 2B_3 K_z^2 \} , \quad (\text{B.62})$$

$$H_{87} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{S1,0} \rangle = 0 , \quad (\text{B.63})$$

$$H_{88} = \langle \cup_{S2,0}] H [\cup_{S2,0} \rangle = -\frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \{ (3 + B_1) K_x^2 + (3 + B_2) K_y^2 + (3 + 2B_3) K_z^2 \} . \quad (\text{B.64})$$

Referências Bibliográficas

- [1] *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. Gerald Bastard, 1988.
- [2] *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. Hartmut Haug and Stephan W. Koch, 1994. terceira edição.
- [3] *Quantum Heterostructures*. Vladimir V. Mitin and Viatcheslav A. Kochelap and Michael A. Strosio, 1999.
- [4] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, “Inas/gaas pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure,” *Physical Review B*, vol. 52, p. 11969, October 1995.
- [5] C. Pryor, “Eight-band calculations of strained inas/gaas quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations,” *Physical Review B*, vol. 57, p. 7190, March 1998.
- [6] O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, “Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k.p theory,” *Physical Review B*, vol. 59, p. 5688, February 1999.
- [7] M. S. Skolnick and D. J. Mowbray, “Recent developments in the physics and applications of self assembled quantum dots,” *Physica E*, vol. 21, p. 155, 2004.
- [8] D. F. Holcomb, “Quantum electrical transport in samples of limited dimensions,” *Am. J. Phys.*, vol. 67, p. 274, April 1999.
- [9] *Teoria de Confinamento de Buracos em Heteroestruturas Semicondutoras do Tipo Delta-Doping*. Instituto de Física da Universidade de São Paulo: Guilherme Matos Sipahi, 1997. Tese.
- [10] M. Holm, M.-E. Pistol, and C. Pryor, “Calculations of the electronic structure of strained inas quantum dots in inp,” *Journals of Applied Physics*, vol. 92, p. 932, July 2002.

- [11] R. Ravishankar, P. Matagne, J. P. Leburton, R. M. Martin, and S. Tarucha, "Three-dimensional self-consistent simulations of symmetric and asymmetric laterally coupled vertical quantum dots," *Physical Review B*, vol. 69, p. 035326, 2004.
- [12] L. Esaki and R. Tsu *IBM Research Note, J. Res. Develop.*, vol. RC-2418, 14, no. 61, 1969, 1970.
- [13] *Contribuições ao Estudo das Propriedades de Nanoestruturas Semicondutoras: Pontos Quânticos Auto-organizados em Sistema de InAs/GaAs e Superredes de GaAs/AlAs*. Adenilson José Chiquito, 2001. Tese-Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos.
- [14] S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt, U. Gosele, J. Heydenrich, U. Richter, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. Jstinov, P. S. Kop, and Z. I. Alferov, "Structural characterization of (In,Ga)As quantum dots in a GaAs matrix," *Physical Review B*, vol. 51, p. 14776, May 1995.
- [15] G. S. Solomon, M. C. Larson, and J. J. S. Harris, "Electroluminescence in vertically aligned quantum dot multilayer light emitting diodes fabricated by growth induced islanding," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 69, p. 1897, setembro 1996.
- [16] Y. Nabetani, T. Ishikawa, S. Noda, and A. Sasaki, "Initial growth stage and optical properties of a three dimensional InAs structure on GaAs," *Journals of Applied Physics*, vol. 76, p. 347, julho 1994.
- [17] J. M. Moisson, F. Houzay, F. Barthe, L. Leprince, E. Andre, and O. Vatel, "Self organized growth of regular nanometer scale InAs dots on GaAs," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 64, p. 196, janeiro 1993.
- [18] H. Lee, R. Lowe-Webb, W. Yang, and P. C. Sercel, "Determination of the shape of self-organized InAs/GaAs quantum dots by reflection high energy electron diffraction," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 72, p. 812, janeiro 1997.
- [19] H. Jiang and J. Singh, "Strain distribution and electronic spectra of InAs/GaAs self-assembled dots," *Physical Review B*, vol. 56, p. 4696, August 1997.
- [20] H. Jiang and J. Singh, "Conduction band spectra in self-assembled InAs/AlAs dots: A comparison of effective mass and an eight-band approach," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, p. 3239, Dezembro 1997.
- [21] A. D. Andreev and E. P. O'Reilly, "Optical transitions and radiative lifetime in GaN/AlN self organized quantum dots," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 79, p. 521, julho 2001.

- [22] A. D. Andreev and E. P. O. Reilly, “Theory of the electronic structure of gan/aln hexagonal quantum dots,” *Physical Review B*, vol. 62, p. 15861, November 2000.
- [23] *Modular Séries on Solid State Devices (Quantun Phenomena): Volume VIII*. Supriyo Datta, 1989. editores: Robert F. Pierret and Gerold W. Neudeck.
- [24] T. B. Bahder, “Eight –band k.p model of strained zinc-blende crystals,” *Physical Review B*, vol. 41, p. 11992, julho 1990.
- [25] L. E. Ramos, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. L. Rosa, and J. R. Leite, “Structural, electronic, and effective-mass properties of silicon and zinc-blend group-iii nitride semiconductor compounds,” *Physical Review B*, vol. 63, p. 165210, april 2001.
- [26] Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. Ram-Mohan, “Band parameters for iii-v compound semiconductors and their alloys,” *Applied Physics Review*, vol. 89, p. 5815, February 2001.
- [27] *Nanoestructuras Semiconductoras (Fundamentos e aplicações*. J. Tutor-Sánchez and H. Rodríguez-Coppola and G. Armelles-Rig., 2003.