UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

**“Estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras
na presença de campos elétricos e magnéticos”**

Márcio Adriano Rodrigues Souza

*Tese apresentada ao Instituto de Física de
São Carlos, Universidade de São Paulo, para
obtenção do Título de Doutor em Ciências:
Física Básica*

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta* ^{ok}

SÃO CARLOS

1999

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA
1999

Souza, Márcio A. R.

Estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras na presença de campos elétricos e magnéticos/Márcio A. R. Souza – São Carlos, 1999.

121 p.

Tese (Doutorado)–Instituto de Física de São Carlos, 1999.

Orientador: Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta

1. Semicondutores. 2. Estrutura eletrônica. I. Título.

IFSC**UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO****Instituto de Física de São Carlos**

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 273-9333

Fax (016) 272-2218

**MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE MÁRCIO
ADRIANO RODRIGUES SOUZA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE
SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 17 DE AGOSTO DE 1999.**

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta/USF

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes/IFSC-USP

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani/USF

Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz/UNICAMP

Prof. Dr. José Roberto Leite/IF-USP

*Aos meus pais,
S. Celso[†] e Everalda*

Agradecimentos

- Ao Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta pela sugestão do tema, orientação, discussões no decorrer deste trabalho e também pela dedicação, apoio e amizade.
- Ao Prof. Dr. Gilmar E. Marques pelas proveitosas discussões e sugestões.
- Ao amigos Salviano A. Leão e J. E. Manzoli pelas sugestões que muito contribuíram para a realização desse trabalho.
- Aos amigos Jesiel, Ricardo, João Vitor, Roberto, Serginho, Ruberley e Paulinho pela amizade e apoio em todos os momentos.
- A todos os colegas do IFSC-USP pela amizade e agradável convivência, em especial, ao Mauro (Chris), Reginaldo, Marletta, Daniela (Marcos e Bruno), Virgílio, Washington...
- Aos colegas do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, em particular, ao Prof. Dr. Antonio Newton Borges e ao Prof. Dr. Francisco Ap. P. Osório.
- Às bibliotecárias do IFSC e secretárias da CPG, em especial, à Neusa, Célia, Ana, Mara, Cíbele, Wladerez e Cristina.
- Ao meu irmão Celso, minha cunhada Rosany e meu sobrinho Bruno.
- Às amigas Ilana, Eliete, Vanessa e Heloisa.
- Em especial à Luciana pelo desvelo, apoio e amizade.

Este trabalho foi parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Conteúdo

Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	v
Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 Conceitos Básicos e Modelo Teórico	8
2.1 Propriedades Cristalinas	8
2.2 Estrutura Eletrônica	10
2.2.1 O Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	12
2.2.2 Aproximação de Kane	14
2.2.3 Funções de Base e Obtenção do Hamiltoniano	16
2.2.4 Constantes e Parâmetros	18
2.3 Equação da Massa Efetiva	21
2.4 Estados Eletrônicos em Heteroestruturas	24
3 Método Numérico	29
3.1 O Método da Potência Inversa	29
4 Tunelamento Ressonante em Poços Quânticos Duplos de GaAs/GaAlAs	34
4.1 Considerações Iniciais	35
4.2 Hamiltoniano	36
4.3 Resultados	38

4.4	Considerações Finais	49
5	Semicondutores Magnéticos Diluídos	52
5.1	Estrutura Cristalina e Eletrônica	52
5.2	Propriedades Magnéticas	54
5.2.1	Descrição Teórica dos Estados Eletrônicos	55
5.2.2	A Interação de Troca e o Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$	57
5.3	Heteroestruturas e Efeitos de Tensão	59
6	Estrutura Eletrônica em Poços Quânticos de CdTe/CdMnTe	63
6.1	Tunelamento Ressonante em Poços Quânticos Duplos	64
6.1.1	Considerações Iniciais	64
6.1.2	Hamiltoniano	66
6.1.3	Resultados	69
6.1.4	Considerações Finais	80
6.2	Anisotropia do Efeito Zeeman em Poços Quânticos	81
6.2.1	Considerações Iniciais	82
6.2.2	Hamiltoniano	83
6.2.3	Resultados	85
6.2.4	Considerações Finais	94
7	Conclusões	97
	Apêndices	101
A	Parâmetros: $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ e $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$	101
B	Funções de Wannier	103
C	O Método das Diferenças Finitas	105
D	Teoria de Perturbação: Efeito dos Campos Elétrico e Magnético	107
E	O Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e as Autofunções do Oscilador Harmônico	110
	Referências Bibliográficas	112

Lista de Figuras

2.1	(a) Arranjo espacial dos átomos em uma estrutura blenda de zinco; (b) Primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica de face centrada.	9
2.2	(a) Estrutura de banda do GaAs calculada pelo método pseudopotencial [42]; (b) Estrutura de banda em torno do ponto Γ para um semiconductor com gap direto.	11
3.1	Discretização uniforme do eixo z	30
4.1	Energia potencial e autofunções para os primeiros estados ligados em um poço quântico duplo assimétrico de GaAs/Ga _{0,65} Al _{0,35} As.	39
4.2	Relações de dispersão das bandas de condução e valência ao longo da direção $k_{\perp}$ ($k_B = 0$) para um campo elétrico igual a zero.	41
4.3	Campo elétrico versus campo magnético ressonante.	42
4.4	Comparação entre a curva que nos fornece a condição de tunelamento ressonante entre $ell_N \rightarrow ell_W$ e a relação de dispersão do estado fundamental para um poço quântico simples de 100 Å.	45
4.5	Comparação entre as curvas de tunelamento para buracos e as relações de dispersão para os três primeiros estados de um poço quântico simples de 100 Å.	46
4.6	Variação da massa efetiva com o campo magnético para o estado ell_W	48
5.1	Rotação do sistema de coordenadas no plano $x\hat{o}y$	58
6.1	Poço quântico duplo assimétrico de CdTe/Cd _{1-x} Mn _x Te, crescido sobre um substrato de InSb.	70
6.2	Efeito Zeeman dos níveis de energia e valores esperados das posições dos portadores em função do campo magnético aplicado; o campo elétrico é igual a zero.	72

6.3	<i>Energias das transições excitônicas com polarizações circulares σ^+ e σ^- entre os estados de elétrons e buracos pesados.</i>	74
6.4	<i>Representação esquemática do levantamento das degenerescências de spin das bandas de condução e valência na presença de um campo magnético externo e as transições permitidas na configuração Faraday.</i>	75
6.5	<i>Campo magnético ressonante para os estados de elétrons e buracos pesados em função do campo elétrico aplicado.</i>	77
6.6	<i>Efeito Zeeman e posição média dos portadores em função do campo magnético para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm.</i>	78
6.7	<i>Autofunções para elétrons e buracos pesados para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm e campos magnéticos ressonantes.</i>	79
6.8	<i>Energias das transições excitônicas com polarizações circulares σ^+ e σ^- entre os estados $el1_W \rightarrow hh1_W$ e $el1_N \rightarrow hh1_N$ para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm.</i>	80
6.9	<i>Poço quântico usado para investigar a anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado.</i>	86
6.10	<i>Efeito Zeeman dos níveis de energia para um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento e no plano perpendicular.</i>	87
6.11	<i>Comparação entre as energias de transição dos estados de elétrons e buracos pesados obtidas a partir do resultado mostrado em 6.10 com aqueles obtidos experimentalmente por Jackson et al. [33].</i>	88
6.12	<i>Efeito Zeeman sobre os primeiros estados de buraco leve e buraco pesado para $\phi = 30^\circ$ e $\phi = 60^\circ$.</i>	89
6.13	<i>Efeito Zeeman em um poço quântico de CdTe/Cd_{0.9}Mn_{0.1}Te com 100 Å de largura.</i>	90
6.14	<i>Energias de transição em função da intensidade do campo magnético e da orientação desse campo em relação ao eixo z para um poço quântico de CdTe/Cd_{0.9}Mn_{0.1}Te com 100 Å de largura.</i>	91
6.15	<i>Efeito Zeeman para o poço quântico com 72 Å de largura. Para um campo magnético aplicado ao longo da direção z ou da direção y.</i>	92
6.16	<i>Energias de transição para um poço quântico de CdTe/Cd_{0.925}Mn_{0.075}Te com 72 Å de largura. O campo magnético foi aplicado ao longo da direção z ou da direção y.</i>	93

Lista de Tabelas

2.1	<i>Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ obtido a partir do trabalho de Weiler et al. [52]. . . .</i>	20
A.1	<i>Parâmetros para o $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$</i>	101
A.2	<i>Parâmetros para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$</i>	102

Resumo

Calculamos a estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras III-V e II-VI na aproximação da função envelope, usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, na presença de campos elétricos e magnéticos externos. Para isso desenvolvemos um método numérico baseado na técnica das diferenças finitas e no método da potência inversa para resolvermos a equação de massa efetiva. As principais características desse método são a estabilidade, a rápida convergência e a possibilidade de calcular os estados ligados de poços quânticos com formas arbitrárias na presença de campos elétricos e magnéticos. Investigamos inicialmente o tunelamento ressonante de portadores em um poço quântico duplo assimétrico de GaAs/GaAlAs na presença de um campo elétrico aplicado na direção de crescimento e de um campo magnético aplicado no plano perpendicular. Mostramos como as relações de dispersão de um poço quântico simples podem ser obtidas experimentalmente da curva do campo elétrico *versus* campo magnético ressonante e como, para determinadas intensidades desses campos, podemos colocar os estados eletrônicos e de buracos em ressonância simultaneamente, isto é, mostramos a possibilidade de termos o tunelamento ressonante de éxcitons. Investigamos também o tunelamento ressonante de portadores em um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe na presença de um campo elétrico e de um campo magnético aplicados na direção de crescimento. Mostramos então como podemos obter o tunelamento ressonante de elétrons, buracos e também de éxcitons. Outro problema estudado foi a anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado em um poço quântico simples de CdTe/CdMnTe. Calculamos os níveis de energia e as transições eletrônicas desse sistema em função da intensidade e da direção do campo magnético. Em todos os casos fazemos uma comparação dos nossos resultados com dados experimentais apresentados na literatura.

Abstract

The electronic structure of III-V and II-VI semiconductor heterostructures has been calculated in the envelope function approximation using the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method in the presence of external electric and magnetic fields. A numerical method based on the technique of the finite differences and in the inverse power method has been developed to solve the effective-mass equation. The main features of this method are stability, fast convergence and ability to calculate bound states of quantum wells with arbitrary shapes including electric and magnetic fields. We investigate the resonant tunneling of carriers in an GaAs/GaAlAs asymmetric double quantum well in the presence of an electric field applied in the growth direction and a magnetic field applied in the perpendicular plane. We show how the dispersion relation of a quantum well can be experimentally determined from the electric *versus* resonant magnetic fields curves. For certain intensities of these fields, we can make both electrons and holes resonate simultaneously, which leads to resonant tunneling of excitons. The resonant tunneling of carriers has also been investigated in a CdTe/CdMnTe asymmetric double quantum well in the presence of an electric field and a magnetic field applied both in the growth direction. For this system we show that how we can obtain resonant tunneling of electrons, holes and excitons. Finally, we have studied the anisotropy of the Zeeman effect as a function of the direction of the magnetic field for a CdTe/CdMnTe quantum well. We calculated the energy levels and the electronic transitions of this system as a function of the intensity and the direction of the magnetic field. In all the cases we compare our results with available experimental data.

Capítulo 1

Introdução

Tem sido crescente o interesse nas propriedades opto-eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras com dimensionalidade reduzida. Dispositivos semicondutores com princípio de funcionamento baseado nessas propriedades, tais como, fotodetectores, moduladores, diodos emissores de luz e lasers, possuem as mais diversas aplicações [1,2]. Para compreendermos as propriedades ópticas dos materiais semicondutores e as características operacionais desses dispositivos, de tal forma que possamos desenvolver novos dispositivos, temos que compreender seus aspectos fundamentais. Para isso devemos investigar a estrutura eletrônica desses sistemas. Esses dispositivos se tornaram realidade a partir do desenvolvimento das chamadas técnicas de crescimento epitaxiais, o que possibilitou construir uma grande variedade de estruturas com dimensões comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie dos elétrons, revelando assim a natureza quântica presente nesses sistemas.

Essas técnicas se baseiam na deposição de materiais semicondutores sobre um outro cristal similar chamado *substrato*. Forma-se assim, ao longo da direção de crescimento, uma estrutura de múltiplas camadas conhecida como heteroestrutura semicondutora. Existem várias formas de epitaxia, as mais comuns sendo a Deposição por Vapor Químico Organo-Metálico (*Metal-Organic Chemical Vapour Deposition-MOCVD*) e a Epitaxia por Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy-MBE*) [2].

Além do interesse tecnológico, estas estruturas nos possibilitam investigar as propriedades físicas em sistemas com dimensões reduzidas. Com a utilização de materiais semicondutores possuindo diferentes faixas proibidas de energia (*gaps*) é possível construir seqüências de barreiras e poços de potenciais com interfaces praticamente abruptas, resultando em uma forma de potencial que pode ser descrito por uma sucessão de barreiras e poços quadrados. Por outro lado, a variação gradativa da concentração dos materiais ou a dopagem destas estruturas de forma controlada nos possibilita obter os mais variados perfis de potencial na direção de crescimento.

As heteroestruturas semicondutoras dos compostos III-V são usadas em vários dispositivos eletrônicos, com destaque para o GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs que é o sistema mais conhecido. O parâmetro de rede desses dois materiais são aproximadamente iguais ($\Delta a/a \approx 0,06\%$ para a interface GaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As) o que permite a obtenção de interfaces praticamente livres de tensões, sem rugosidades e abruptas. Tais heteroestruturas são assim protótipos ideais para se estudar fenômenos associados a portadores confinados no poço de GaAs inserido entre duas barreiras de Ga_{1-x}Al_xAs.

Recentemente, heteroestruturas formadas por semicondutores do grupo II-VI têm sido bastante investigadas. Esses materiais apresentam gaps de energia que cobrem um intervalo extenso do espectro eletromagnético: do azul (o gap para o ZnS é de aproximadamente 3,8 eV) até o infravermelho distante (o HgTe é um semimetal). Dessa forma, as aplicações tecnológicas dos materiais II-VI são numerosas. Como exemplo podemos citar os compostos a base de mercúrio que são utilizados como detectores infravermelho e os compostos com gaps largos, por exemplo as heteroestruturas ZnSe/ZnCdSe ou ZnSe/ZnSSe, que são usados para a construção de lasers semicondutores de cor azul [3].

No domínio da pesquisa fundamental os compostos II-VI abriram um novo campo de pesquisa, principalmente devido às suas propriedades magnéticas quando im-

purezas magnéticas, tais como Mn^{+2} e Fe^{+2} , são adicionadas aos compostos binários. Esses compostos são conhecidos como *semicondutores magnéticos diluídos* ou *semicondutores semimagnéticos*. Dentre os semicondutores magnéticos diluídos, os mais estudados são aqueles a base de manganês, isto é, aqueles da forma $\text{A}_{1-x}^{\text{II}}\text{Mn}_x\text{B}^{\text{VI}}$, onde uma fração dos átomos do grupo II é substituída, aleatoriamente, por átomos de Mn. Como exemplo podemos citar o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ e o $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$. A principal característica desses materiais é que, na presença de um campo magnético externo, a interação de troca entre os íons magnéticos localizados e os portadores das bandas de condução e valência produz um efeito Zeeman extremamente grande quando comparado com os semicondutores convencionais [4, 5].

Outra característica dos semicondutores magnéticos diluídos é que eles apresentam uma forte dependência do parâmetro de rede com a concentração do íon magnético. Dessa forma, uma propriedade inerente das heteroestruturas construídas a partir desses materiais é que elas contém camadas tensionadas. Estas modificam as discontinuidades das bandas nas interfaces e levantam a degenerescência dos estados de buraco leve e pesado no ponto Γ .

Inicialmente proposto por Esaki e Tsu [6–8] e posteriormente observado por Dingle *et al.* [9], os efeitos de acoplamento em heteroestruturas semicondutoras atraíram muita atenção devido à possibilidade de aplicação em dispositivos de alta velocidade. Nestes dispositivos o processo de tunelamento possui tempo característico da ordem de picosegundos ou menos. Posteriormente, uma grande variedade de estruturas envolvendo efeitos de tunelamento ressonante foram produzidas, encontrando as mais variadas aplicações. Como exemplo podemos citar os diodos e transistores de tunelamento ressonante e as chaves lógicas de alta velocidade [10, 11].

O tunelamento de portadores através de uma barreira de potencial em heteroestruturas semicondutoras é ainda uma área de ativas pesquisas. Uma das mais

interessantes, e também mais simples, heteroestruturas semicondutoras que permite estudar o tunelamento ressonante de portadores é o poço quântico duplo assimétrico. Nesse sistema, que consiste de dois poços quânticos separados por uma fina barreira, o acoplamento entre os estados de cada poço é uma função extremamente sensível da barreira interna. Além disso, esse acoplamento pode também ser modificado através de campos elétricos e magnéticos aplicados à heteroestrutura.

Recentemente, vários trabalhos teóricos e experimentais envolvendo processos de tunelamento no sistema poço duplo assimétrico têm sido publicados. Sistemas não dopados são estudados experimentalmente criando-se portadores por excitações ópticas. Nestes pode-se investigar a separação dos níveis de energia na condição de ressonância [12], oscilações eletrônicas entre os poços [13] e o período dessas oscilações [14, 15]. Dentre as técnicas usadas para se estudar a transferência de portadores entre poços quânticos podemos citar a fotoluminescência, a fotoluminescência resolvida no tempo e as espectroscopias *four-wave-mixing* e *pump-and-probe* [13, 16–19].

Uma das questões básicas que se tem tentado responder é: os portadores (elétrons ou buracos) tunelam independentemente ou é o par elétron-buraco correlacionado pela interação coulombiana (éxciton) que tunela? Vários resultados experimentais em heteroestruturas III-V foram interpretados como o tunelamento de portadores livres, com os níveis de energia sendo colocados em ressonância aplicando-se um campo elétrico ao longo da direção de crescimento [20, 21]. Posteriormente, foi verificado que a descrição correta seria uma transferência de um éxciton direto para um éxciton indireto: neste mecanismo o elétron se transfere de um estado ligado chamado de éxciton direto (elétrons e buracos localizados em um mesmo poço) para um estado ligado com um éxciton indireto (elétrons e buracos localizados em poços diferentes), com o buraco participando apenas como um espectador [18, 22–25]. Portanto, embora os efeitos excitônicos devam ser considerados, a transferência simultânea de elétrons e buracos

não é o mecanismo dominante.

Nas heteroestruturas II-VI as energias de ligação excitônicas são maiores que nas heteroestruturas III-V, logo, os efeitos excitônicos terão maior influência sobre o tunelamento dos portadores. Resultados experimentais em poços quânticos duplos assimétricos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, com um dos poços possuindo uma pequena concentração de Mn, apresentam evidências de tunelamento de éxcitons. Neste caso a ressonância é induzida por um campo magnético através do efeito Zeeman gigante presente nessas heteroestruturas. Foi observado que esse tunelamento pode ocorrer de duas formas: (i) entre um estado excitônico 1s localizado em um poço e um estado excitônico 2s localizado no poço adjacente ou (ii) diretamente para um estado 1s do poço adjacente com a emissão de um fônon longitudinal óptico [26–30]. Posteriormente, Hieke *et al.* [31] verificaram que o tunelamento não ressonante de portadores ou éxcitons pode ocorrer mesmo quando esses mecanismos não estão presentes. Neste caso o tunelamento ocorre assistido por fônons acústicos ou espalhamento por impurezas.

Desses resultados vemos que o tunelamento ressonante de éxcitons, isto é, o tunelamento ressonante de elétrons e buracos ocorrendo simultaneamente, não foi ainda investigado. O problema é que, em um poço quântico duplo assimétrico, quando tentamos colocar em ressonância os dois primeiros estados eletrônicos, cada um localizado em um poço, aplicando um campo elétrico ao longo da direção de crescimento, necessariamente estaremos afastando os dois primeiros estados de buraco pesado dessa condição e vice-versa. Dessa forma, aplicando-se apenas um campo elétrico à heteroestrutura não poderemos colocar os primeiros estados de elétrons e buracos em ressonância simultaneamente. Entretanto, mostraremos que se aplicarmos os campos elétrico e magnético ao mesmo tempo poderemos alcançar a condição de ressonância simultânea.

No capítulo 2, apresentamos as propriedades gerais da física dos materiais

semicondutores e uma breve revisão dos aspectos principais do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e da aproximação da função envelope [38, 39].

No capítulo 3 *desenvolvemos* um método numérico baseado na técnica das diferenças finitas e no método da potência inversa para calcular a estrutura eletrônica desses sistemas usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Esse nos permite calcular os estados confinados em heteroestruturas semicondutoras na presença de campos elétricos e magnéticos externos usando a equação de massa efetiva. As principais características desse método é que ele tem se mostrado muito estável e de convergência bastante rápida. Além disso, ele permite estudar poços quânticos com perfis de potencial de formas arbitrárias.

No capítulo 4 apresentamos os primeiros resultados, onde investigamos os efeitos de um campo elétrico, aplicado na direção de crescimento, e de um campo magnético, aplicado no plano perpendicular, sobre o tunelamento ressonante de elétrons e buracos em um poço quântico duplo assimétrico de GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As. Calculamos a estrutura eletrônica para várias intensidades de campos aplicados. A partir desta encontramos os campos necessários para alcançarmos a condição de ressonância dos estados localizados em cada poço. Veremos como as curvas de campo elétrico *versus* campo magnético, na condição de ressonância, podem mapear a relação de dispersão dos estados ligados de um poço quântico. Além disso, para determinadas intensidades dos campos aplicados, teremos os estados de elétrons e buracos em ressonância, simultaneamente.

No capítulo 5 apresentamos os conceitos básicos dos semicondutores magnéticos diluídos e os efeitos de tensão devido às diferenças nos parâmetros de rede de cada camada que constituem a heteroestrutura.

No capítulo 6 investigamos dois problemas relacionados com os semicondutores magnéticos diluídos. Primeiramente estudamos o tunelamento ressonante de portadores em um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe. Neste caso os

campos elétricos e magnéticos foram aplicados ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura. Como a barreira interna é composta por um semicondutor magnético diluído, sua altura pode ser ajustada externamente aplicando-se um campo magnético. Veremos que esse efeito nos fornece um novo meio de investigar o tunelamento de portadores através de uma barreira de potencial. Investigamos o tunelamento ressonante de elétrons ou buracos e, em seguida, mostramos como colocar em ressonância, simultaneamente, os estados de elétrons e buracos aplicando-se tanto um campo elétrico como um campo magnético ao longo da direção de crescimento.

Outro problema investigado no capítulo 6 é o da anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado. Vários trabalhos têm estudado o efeito Zeeman em heteroestruturas com um campo magnético aplicado ou na direção de crescimento ou no plano perpendicular, e os resultados obtidos mostram uma forte anisotropia no efeito Zeeman com a direção do campo magnético [32–36]. Entretanto, apenas recentemente foi publicado um trabalho [37] onde a anisotropia foi calculada para ângulos intermediários. Calculamos a estrutura eletrônica e as transições interbanda para poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe em função da intensidade e da direção do campo magnético. Consideramos o caso em que a direção do campo varia desde a direção de crescimento até o plano perpendicular a essa direção. Comparamos nossos resultados com dados experimentais recentes obtidos para um campo aplicado ao longo da direção de crescimento ou no plano perpendicular. Discutimos também o efeito do campo magnético no hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ sobre os estados eletrônicos.

No capítulo 7 apresentamos nossas conclusões, discutindo de forma geral os resultados obtidos.

Capítulo 2

Conceitos Básicos e Modelo Teórico

Para compreendermos as propriedades ópticas de heteroestruturas semicondutoras, resultante das transições eletrônicas na presença de uma excitação, temos que conhecer sua estrutura eletrônica. Para isso devemos conhecer a estrutura cristalina e a estrutura de bandas dos materiais que compõem a heteroestrutura. Assim, neste capítulo discutiremos suas propriedades cristalinas, estrutura de bandas e como calcular a estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras na presença de campos elétricos e magnéticos externos.

2.1 Propriedades Cristalinas

Para diversos materiais semicondutores, tais como, GaAs ou CdTe, muitos fenômenos interessantes ocorrem próximos aos extremos das bandas. Para o composto GaAs, os átomos de gálio (Ga) e de arsênio (As) formam uma estrutura blenda de zinco. Esta consiste de duas redes cúbicas de face centrada deslocadas uma da outra por um quarto de uma das diagonais principais do cubo. A rede de Bravais associada à rede blenda de zinco é uma rede fcc, logo, sua rede recíproca é uma rede bcc, com a primeira zona de Brillouin sendo um octaedro truncado. Vários pontos ou linhas de alta simetria desta primeira zona de Brillouin recebem notações específicas, por exemplo, Γ , X ou L (figura 2.1).

Figura 2.1: (a) Arranjo espacial dos átomos em uma estrutura blenda de zinco; (b) Primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica de face centrada (octaedro truncado). São mostrados também alguns pontos e linhas de alta simetria.

O átomo de Ga tem um número atômico igual a 31, com a configuração eletrônica $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^1$, isto é, três elétrons de valência ($[\text{Ar}]$ denota a configuração do argônio). O átomo de As possui número atômico 33 com a configuração eletrônica $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^3$, isto é, cinco elétrons de valência. Logo, existem oito elétrons de valência por célula unitária que contribuem para as ligações químicas. Esses oito elétrons se hibridizam para formar ligações tetraédricas entre um dos átomos (por exemplo o Ga) e seus quatro primeiros vizinhos (As). Podemos dizer que os orbitais de qualquer átomo (tipo s ou tipo p) se hibridizam com um orbital de um átomo vizinho produzindo dois níveis, um ligante e outro antiligante. Como existe um grande número de células unitárias os níveis ligantes e antiligantes se alargam em bandas. Os níveis ligantes s são profundos e sempre ocupados por dois elétrons. Os seis elétrons restantes por célula unitária preenchem completamente os três orbitais ligantes p . As bandas que se originam dos orbitais antiligantes são todas vazias, sendo a mais baixa delas (uma banda s) a banda de condução do material.

Nesses materiais o topo da banda de valência ocorre no centro da zona de

Brillouin (ponto Γ). Devido à presença do acoplamento spin-órbita as três bandas de valência (que se originam dos orbitais p ligantes), inicialmente degeneradas, têm sua degenerescência levantada. Surge assim um quadrupeto (simetria Γ_8) com $J = 3/2$ e um dupeto (simetria Γ_7) com $J = 1/2$, onde J é o *momentum* angular total. O extremo da banda de condução se encontra ou no ponto Γ ou próximo do ponto L ou X . Neste trabalho, como estamos interessados nas propriedades ópticas dos materiais semicondutores, consideraremos apenas aqueles com gap direto, isto é, aqueles em que o extremo da banda de condução ocorre no ponto Γ .

É possível formar compostos ternários ou quartenários a partir dos compostos binários III-V ou II-VI. Do ponto de vista da estrutura eletrônica estas ligas não são cristalinas, pois a energia potencial produzida pela distribuição aleatória dos átomos nos sítios da rede não possui simetria de translação. Entretanto, podemos usar a *aproximação de cristal virtual* para descrever seus estados eletrônicos. Neste modelo o potencial real é trocado por um potencial médio. Por exemplo, para um composto $AB_{1-x}C_x$, os átomos A se localizam sobre os sítios de uma das redes fcc enquanto os átomos B e C ocupam aleatoriamente os sítios da segunda rede fcc. Na aproximação de cristal virtual o potencial aleatório criado pelos átomos B (V_B) e C (V_C) é trocado por um potencial periódico médio tal que $\langle V \rangle = V_A + xV_C + (1-x)V_B$. Usando esse procedimento a invariância de translação é restabelecida, o que nos permite falar em ondas de Bloch, massas efetivas, etc.

2.2 Estrutura Eletrônica

Para um potencial periódico a estrutura de bandas e as funções de onda são obtidas a partir do hamiltoniano que satisfaz as simetrias do cristal. Na teoria de banda a rede é suposta perfeita, com os átomos permanecendo fixos em seus sítios. Existem vários métodos para se calcular a estrutura de banda e as autofunções, como, por

exemplo, o método das ligações fortes, pseudopotencial, ondas planas ortogonalizadas, funções de Green e o método celular [40, 41]. Além da complexidade inerente a cada um deles, os altos custos de computação limitam a utilização desses métodos. Como exemplo mostramos na figura 2.2a a estrutura de banda do GaAs calculada pelo método pseudopotencial [42]. Entretanto, nosso interesse aqui é calcular a estrutura eletrônica em torno dos extremos das bandas de semicondutores com gap direto, com o vetor de onda $\vec{k}$ sendo menor que $1/10$ da zona de Brillouin (figura 2.2b). Para este propósito o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, introduzido por Bardeen [43] e Seitz [44], se mostra extremamente útil. Neste trabalho usaremos o modelo de Kane [45, 46], que considera a interação spin-órbita e o acoplamento entre as bandas de condução e valência (buraco pesado, buraco leve e split-off).

Figura 2.2: (a) Estrutura de banda do GaAs calculada pelo método pseudopotencial [42]; (b) Estrutura de banda em torno do ponto Γ para um semiconductor de gap direto mostrando as bandas de condução, buraco leve, buraco pesado e split-off.

2.2.1 O Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Para um elétron em um potencial cristalino $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$, onde $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, com $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ sendo os vetores da rede e n_1, n_2, n_3 números inteiros, as autofunções eletrônicas satisfazem a equação de Schrödinger

$$H\psi(\vec{r}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \cdot \vec{p} \right] \psi(\vec{r}) = \epsilon\psi(\vec{r}), \quad (2.1)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre. O terceiro termo no hamiltoniano é devido ao acoplamento spin-órbita, onde $\vec{\sigma}$ é a matriz de Pauli. Este hamiltoniano é invariante sob translações por vetores da rede de Bravais. Logo, se $\psi(\vec{r})$ for solução da equação (2.1), $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ também será. Assim, $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ difere de $\psi(\vec{r})$ no máximo por uma constante com módulo unitário; caso contrário, a autofunção poderá crescer para o infinito se repetirmos a translação indefinidamente. Assim, a solução geral (normalizada) da equação anterior é dada por

$$\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.2)$$

onde $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\nu\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ é uma função periódica. $N = \Omega/\Omega_0$ é o número de células unitárias do cristal, sendo Ω o volume do cristal e Ω_0 o volume de uma célula unitária. Esse é o teorema de Bloch e as autofunções $\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ são chamadas de funções de Bloch. A energia é dada por $\epsilon = \epsilon_{\nu}(\vec{k})$, onde ν se refere à banda e $\vec{k}$ é o vetor de onda do elétron. Da equação (2.2) vemos que as funções $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ estão normalizadas no volume de uma célula unitária.

Quando $\vec{k}$ é real as soluções (2.2) são ondas planas moduladas com a periodicidade da rede. Soluções com $\vec{k}$ imaginário devem ser descartadas, uma vez que estas autofunções não serão bem comportadas. Desta forma, existem alguns intervalos de energia que correspondem a valores reais de $\vec{k}$ e outros para os quais $\vec{k}$ é imaginário. Os intervalos onde existem soluções aceitáveis são conhecidas como bandas de energia

permitidas, e as regiões entre elas são chamadas bandas de energia proibidas ou lacunas (gaps) de energia.

Outra consequência importante dessas equações é que estas são as mesmas em qualquer célula unitária de uma rede periódica, logo, o pacote de onda que descreve o movimento eletrônico em um estado permitido não é atenuado quando o elétron se move através do cristal. Só ocorrerá espalhamento se a periodicidade do cristal for quebrada; isto ocorre devido a vibrações térmicas da rede, impurezas, imperfeições e tamanho finito da amostra.

As imperfeições são fontes não só de espalhamento, mas também de estados localizados de energia. Enquanto os únicos estados de uma rede periódica perfeita são aqueles descritos pelas funções (2.2) que formam as *bandas permitidas*, os estados introduzidos por impurezas podem ter energias dentro das *bandas proibidas*.

Substituindo as funções de Bloch (2.2) na equação (2.1) obtemos que a parte periódica das funções de Bloch $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ são soluções das equações,

$$H(\vec{k}) u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \left[H_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.3)$$

onde,

$$H_0 = H(k=0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \cdot \vec{p}. \quad (2.4)$$

A equação (2.3) é uma equação de autovalores para $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ no volume de uma célula unitária do cristal; nesta equação desprezamos um termo proporcional a $\vec{k}$ que tem sua origem na interação spin-órbita [46]. Uma vez que o vetor de onda $\vec{k}$ aparece nesta equação apenas como um parâmetro, temos que para cada valor desse parâmetro as funções $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ formam um conjunto completo [47]. Portanto, se a energia e os elementos de matriz para o *momentum* são conhecidos para todas as bandas para um dado valor de $\vec{k}$, poderemos determinar as energias para todos os outros valores de $\vec{k}$. Assim, as limitações do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ são determinadas pela quantidade de parâmetros

que podem ser obtidos empiricamente.

Na prática, muitos parâmetros são envolvidos quando tentamos usar o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para calcular a estrutura de banda através de toda a zona de Brillouin. Entretanto, esse método se mostra extremamente útil para se calcular a estrutura eletrônica na vizinhança de um dado ponto $\vec{k}$ da zona de Brillouin, onde aqueles parâmetros são conhecidos.

2.2.2 Aproximação de Kane

A localização dos portadores (elétrons e buracos) nas proximidades dos extremos das bandas torna esta região muito importante para o estudo das propriedades eletrônicas e ópticas nos materiais semicondutores. Este fato nos permite também fazer simplificações no cálculo da estrutura eletrônica. Nesta seção vamos discutir a aproximação de Kane [45, 46], que tem por objetivo obter uma forma simples de se calcular a estrutura eletrônica na vizinhança de um dado ponto $\vec{k}$. Nesta aproximação é levado em consideração a interação entre as bandas, os efeitos de não parabolicidade e efeitos de spin, que são essenciais para se obter as propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras. Vamos concentrar nossa atenção na região em torno do ponto Γ ($\vec{k} = 0$), onde ocorrem os extremos das bandas nos materiais de nosso interesse.

De um modo geral, o modelo de Kane deve ser usado sempre que estivermos estudando materiais com gaps de energia tais que a interação entre as bandas de condução (Γ_6), valência (Γ_8) e *split-off* (Γ_7) não puderem ser desprezadas, resultando assim em um hamiltoniano 8×8 . Existem outras aproximações; se a banda de condução puder ser desprezada o hamiltoniano resultante será 6×6 (modelo de Luttinger-Kohn [47]) e quando pudermos desprezar tanto a banda de condução como a banda *split-off*, resultará em um hamiltoniano 4×4 (modelo de Luttinger [48]).

Por outro lado, como nosso interesse nesse trabalho é estudar as propriedades

eletrônicas e ópticas entre os elétrons na banda de condução e os buracos leves e pesados na banda de valência, torna-se interessante tratarmos as três bandas (cada uma duplamente degenerada em spin) dentro do modelo de Kane. Assim, os elementos de matriz das transições ópticas podem ser obtidos com os estados tendo sido calculados todos dentro da mesma aproximação. Dessa forma, nesse trabalho usaremos a aproximação de Kane, mas não incluiremos a banda split-off, resultando, portanto, em um hamiltoniano 6×6 (limite $\Delta \rightarrow \infty$). Além disso, considerando apenas o hamiltoniano 6×6 , teremos uma economia significativa de memória e de tempo de computação.

Suponhamos que para $\vec{k} = 0$ as soluções da equação (2.3) sejam conhecidas, isto é,

$$H_0 u_{\nu 0}(\vec{r}) = \epsilon_{\nu}(0) u_{\nu 0}(\vec{r}).$$

Assim, as funções $u_{\nu \vec{k}}(\vec{r})$ para um dado $\vec{k}$ podem ser escritas em termos das funções $u_{\nu 0}(\vec{r})$ em $\vec{k} = 0$,

$$u_{\nu \vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\mu} c_{\nu \mu}(\vec{k}) u_{\mu 0}(\vec{r}) \quad (2.5)$$

Substituindo a equação anterior na equação (2.3), multiplicando por $u_{\mu 0}^*(\vec{r})$ e integrando sobre uma célula unitária obtemos a equação matricial de autovalores

$$\sum_{\mu} \left[H_{\nu \mu} - \epsilon_{\nu}(\vec{k}) \delta_{\nu \mu} \right] c_{\nu \mu} = 0, \quad (2.6)$$

onde,

$$H_{\nu \mu} = H_{\nu \mu}(\vec{k}) = \left[\epsilon_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu \mu} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{\nu \mu}^{\alpha} \quad (2.7)$$

e

$$p_{\nu \mu}^{\alpha} = \int_{\Omega_0} u_{\nu 0}^*(\vec{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) u_{\mu 0}(\vec{r}) d\vec{r},$$

com $\alpha = 1, 2, 3$. Embora a equação (2.6) seja correta para qualquer valor de $\vec{k}$, ela é mais útil quando $\vec{k}$ está próximo de zero. Neste caso a parte não diagonal do hamiltoniano,

$$\frac{\hbar}{m_0} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{\nu \mu}^{\alpha},$$

pode ser tratada como uma perturbação.

Na aproximação de Kane o hamiltoniano (2.7) é tratado perturbativamente através da teoria de perturbação de Löwdin [49]. Ao contrário da teoria de perturbação ordinária, que diagonaliza o hamiltoniano $H(\vec{k})$ por um processo iterativo, o método de Löwdin separa todos os seus estados em dois conjuntos $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$. Dentro do conjunto $\mathcal{A}$ os estados podem interagir fortemente entre si, mas interagem fracamente com os estados de $\mathcal{B}$. As interações entre os conjuntos $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ são então removidas iterativamente como na teoria de perturbação ordinária, sem tentar remover elementos de matriz conectando estados em $\mathcal{A}$. Em seguida o hamiltoniano *renormalizado* H' deve ser diagonalizado exatamente. Até segunda ordem de perturbação temos:

$$H'_{\nu\mu} = H_{\nu\mu} + \sum_{\gamma}^{\mathcal{B}} \frac{H_{\nu\gamma}H_{\gamma\mu}}{H_{\nu\nu} - H_{\gamma\gamma}}, \quad (2.8)$$

onde os índices ν, μ pertencem ao conjunto $\mathcal{A}$ e γ ao conjunto $\mathcal{B}$. Para o conjunto $\mathcal{A}$ são escolhidos os estados de condução e valência (elétron, buraco pesado, buraco leve e split-off, todas duplamente degeneradas), figura 2.2b, colocando todas as outras bandas no conjunto $\mathcal{B}$.

2.2.3 Funções de Base e Obtenção do Hamiltoniano

Tendo selecionado as bandas de condução e valência para o conjunto $\mathcal{A}$ e as outras bandas para o conjunto $\mathcal{B}$, a equação (2.5) pode ser escrita como

$$u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\mu}^{\mathcal{A}} c_{\nu\mu}(\vec{k}) u_{\mu 0}(\vec{r}) + \sum_{\gamma}^{\mathcal{B}} c_{\nu\gamma}(\vec{k}) u_{\gamma 0}(\vec{r}).$$

Análises detalhadas das simetrias nessas estruturas [50,51] mostraram que, na ausência do acoplamento spin-órbita, a parte periódica da função de Bloch para a banda de condução, no ponto Γ , é uma função com simetria esférica (*tipo-s*). Esta função possui propriedades de simetria de um orbital com momento angular $L = 0$. Por outro lado, no topo da banda de valência a parte periódica das três funções de Bloch se transformam

como um orbital com momento angular $L = 1$ (*tipo-p*). Essas funções são usualmente representadas por (incluindo o *spin* do elétron) $|S \uparrow\rangle$, $|X \uparrow\rangle$, $|Y \uparrow\rangle$, $|Z \uparrow\rangle$, $|S \downarrow\rangle$, $|X \downarrow\rangle$, $|Y \downarrow\rangle$ e $|Z \downarrow\rangle$.

Quando incluímos a interação spin-órbita é conveniente usarmos outras funções de base, de tal forma que a interação spin-órbita seja diagonal nessa nova base. Logo, precisamos conhecer os estados para o momento angular total $|J, m_J\rangle$. Para isso aplicamos a técnica de Clebsch-Gordon para a adição de momentos angulares, resultando:

$$\begin{aligned}
 |e \uparrow\rangle &= \left|\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right\rangle = |S \uparrow\rangle \\
 |h \uparrow\rangle &= \left|\frac{3}{2}; \frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}|(X + iY) \uparrow\rangle \\
 |l \downarrow\rangle &= \left|\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}[|(X - iY) \uparrow\rangle + 2|Z \downarrow\rangle] \\
 |so \downarrow\rangle &= \left|\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}[|(X - iY) \uparrow\rangle - |Z \downarrow\rangle] \\
 |e \downarrow\rangle &= \left|\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\right\rangle = -|S \downarrow\rangle \\
 |h \downarrow\rangle &= \left|\frac{3}{2}; -\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}|(X - iY) \downarrow\rangle \\
 |l \uparrow\rangle &= \left|\frac{3}{2}; \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{6}}[|(X + iY) \downarrow\rangle - 2|Z \uparrow\rangle] \\
 |so \uparrow\rangle &= \left|\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{3}}[|(X + iY) \downarrow\rangle + |Z \uparrow\rangle]
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Dessa forma, usando o método de Löwdin, em vez da equação (2.6), a equação de autovalores que temos que resolver é:

$$\sum_{\mu}^A \left[H'_{\nu\mu} - \epsilon_{\nu}(\vec{k}) \delta_{\nu\mu} \right] c_{\nu\mu} = 0,$$

onde, da equação (2.8), obtemos,

$$H'_{\nu\mu} = \left[\epsilon_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\mu} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{\nu\mu}^{\alpha} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma} \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_{\alpha} k_{\beta} p_{\nu\gamma}^{\alpha} p_{\gamma\mu}^{\beta}}{\epsilon_{\nu}(0) - \epsilon_{\gamma}(0)}. \tag{2.10}$$

O uso de considerações de simetria é de grande importância no método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, uma vez que isso permite reduzir o número de constantes a serem determinadas. Usando

apenas uma análise de teoria de grupo para encontrar todos os elementos de matriz permitidos, Weiler *et al.* [52, 53] encontraram três novos parâmetros além daqueles obtidos por Kane. Esses novos parâmetros surgem quando incluímos o acoplamento spin-órbita nas bandas do conjunto $\mathcal{B}$. No modelo de Kane, esse efeito entra apenas na parte não renormalizada do hamiltoniano. Vamos desprezar os efeitos da falta de simetria de inversão da estrutura blenda de zinco, aproximação quase-germânio, fazendo os parâmetros correspondentes iguais a zero. O hamiltoniano 6×6 resultante (limite $\Delta \rightarrow \infty$) é mostrado na tabela 2.1, onde usamos as seguintes definições:

$$\begin{cases} k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, & k^\pm = k_x \pm i k_y, \\ F_3^1 = 2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2, & F_3^2 = \sqrt{3} (k_x^2 - k_y^2), \\ F_4^\pm = \{k_z, k^\pm\} = (k_z k^\pm + k^\pm k_z), & F_4^z = \{k_x, k_y\}, \\ H_z = i [k_x, k_y], & H^\pm = \pm [k^\pm, k_z]. \end{cases} \quad (2.11)$$

Em nosso hamiltoniano estamos considerando a referência de energia no topo da banda de valência, onde $E_g = \epsilon_c(0) - \epsilon_v(0)$ é o gap de energia do semiconductor.

2.2.4 Constantes e Parâmetros

Como vimos, o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ é um método semi-empírico, isto é, ele possui diversos parâmetros que devem ser obtidos a partir das propriedades de cada material semiconductor, tais como, massas efetivas, gaps de energia e fatores giromagnéticos. As relações entre esses parâmetros, que são todos reais e independentes, com as propriedades dos materiais são obtidas a partir de soluções particulares do hamiltoniano mostrado na tabela 2.1 [53–56]. As relações entre cada parâmetro e as propriedades dos materiais são listadas a seguir:

- Como vimos na seção anterior o gap de energia é dado por $E_g = \epsilon_c(0) - \epsilon_v(0)$;
- P nos fornece o acoplamento entre as bandas de condução e valência, sendo

1458-133 SERVIÇO DE BIBLIOTECA

definido como [46],

$$P = \frac{-i\hbar}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = \frac{-i\hbar}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle = \frac{-i\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle. \quad (2.12)$$

Entretanto, é mais comum encontrarmos na literatura o parâmetro $E_P = \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2}$, que possui unidade de energia

- O parâmetro F é obtido a partir da massa efetiva eletrônica (m_{el}^*). Os parâmetros γ_i são obtidos a partir das massas efetivas do buraco leve (m_{lh}^*) e do buraco pesado (m_{hh}^*) ao longo da direção [100] e do buraco pesado ($m_{hh}^{*[111]}$) ao longo da direção [111]:

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_{el}^*} - 1 - \frac{2E_P}{3E_g} \right) \\ \gamma_1 &= \gamma_1^L - \frac{E_P}{3E_g} \quad ; \quad \gamma_1^L = \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_{lh}^*} + \frac{m_0}{m_{hh}^*} \right) \\ \gamma_2 &= \gamma_2^L - \frac{E_P}{6E_g} \quad ; \quad \gamma_2^L = \frac{1}{4} \left(\frac{m_0}{m_{lh}^*} - \frac{m_0}{m_{hh}^*} \right) \\ \gamma_3 &= \gamma_3^L - \frac{E_P}{6E_g} \quad ; \quad \gamma_3^L = \frac{1}{4} \left(\frac{m_0}{m_{lh}^*} + \frac{m_0}{m_{hh}^*} - \frac{m_0}{m_{hh}^{*[111]}} \right) \end{aligned}$$

- N_1 é obtido do fator giromagnético da banda de condução g_c (Γ_6):

$$N_1 = \frac{1}{4} \left(g_c - 2 + \frac{2E_P}{3E_g} \right).$$

- O parâmetro $\kappa^L = \kappa + E_P/6E_g$, introduzido inicialmente por Luttinger [48], corresponde ao fator giromagnético da banda de valência (Γ_8) e o parâmetro q tem sua origem no acoplamento spin-órbita das bandas de mais altas energias [53].

Todos os parâmetros usados nesse trabalho estão listados no apêndice A.

Tabela 2.1: Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ obtido a partir do trabalho de Weiler *et al.* [52]. A ordem dos elementos de matriz corresponde àquela das funções de base mostrada na equação (2.9). Efeitos devido à quebra da simetria de inversão da estrutura blenda de zinco foram desprezados (aproximação quase-germânio).

E_g $+ \frac{\hbar^2}{m_0} (F + \frac{1}{2}) k^2$ $+ \frac{\hbar^2}{m_0} (N_1 + \frac{1}{2}) H_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}} P k^+$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} P k^-$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (N_1 + \frac{1}{2}) H^-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z$
$\frac{1}{\sqrt{2}} P k^-$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_1}{2} k^2 - \frac{\gamma_2}{2} F_3^1)$ $-\frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{9}{4} q) H_z$	$\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 - i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z)$	0	$-\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m_0} q H^+$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [\gamma_3 F_4^- + (\kappa + \frac{7}{4} q) H^-]$
$-\frac{1}{\sqrt{6}} P k^+$	$\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 + i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z)$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_1}{2} k^2 + \frac{\gamma_2}{2} F_3^1)$ $+ \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{1}{4} q) H_z$	$\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [\gamma_3 F_4^- + (\kappa + \frac{7}{4} q) H^-]$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{5}{2} q) H^+$
$-\frac{\hbar^2}{m_0} (N_1 + \frac{1}{2}) H^+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z$	E_g $+ \frac{\hbar^2}{m_0} (F + \frac{1}{2}) k^2$ $-\frac{\hbar^2}{m_0} (N_1 + \frac{1}{2}) H_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}} P k^-$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} P k^+$
0	$-\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m_0} q H^-$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [\gamma_3 F_4^+ + (\kappa + \frac{7}{4} q) H^+]$	$\frac{1}{\sqrt{2}} P k^+$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_1}{2} k^2 - \frac{\gamma_2}{2} F_3^1)$ $+ \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{9}{4} q) H_z$	$\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 + i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z)$
$-\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [\gamma_3 F_4^+ + (\kappa + \frac{7}{4} q) H^+]$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{5}{2} q) H^-$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} P k^-$	$\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 - i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z)$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_1}{2} k^2 + \frac{\gamma_2}{2} F_3^1)$ $-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{1}{4} q) H_z$

2.3 Equação da Massa Efetiva

A equação da massa efetiva, ou aproximação da função envelope, tem sido o método mais utilizado para se calcular as propriedades eletrônicas em heteroestruturas semicondutoras. Inicialmente desenvolvido para sistemas cristalinos infinitos perturbados [47], tais como impurezas isoladas em semicondutores, sua aplicação foi posteriormente estendida para heteroestruturas [38]. Dentro desse formalismo o efeito do potencial periódico do cristal é trocado por um tensor massa efetiva, cujos elementos são determinados pela estrutura de banda não perturbada. Discutiremos inicialmente os conceitos básicos desse método para o caso de cristais infinitos perturbados. Em seguida descreveremos como esses resultados podem ser aplicados para o cálculo dos estados eletrônicos de heteroestruturas semicondutoras.

Consideremos um cristal infinito onde as extremidades das bandas ocorrem no ponto $\vec{k} = 0$. Seja H o hamiltoniano de um elétron nesse cristal, equação (2.1), e $U(\vec{r})$ um potencial perturbativo adicional. Por simplicidade de exposição usaremos como base as funções de Wannier [57–59]. Essas funções possuem como características principais o fato de serem localizadas e ortogonais sobre diferentes sítios da rede cristalina (apêndice B). Assim, as funções de onda de Bloch desse cristal são soluções da equação de Schrödinger

$$H\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\nu}(\vec{k})\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.13)$$

com $\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ dada pela equação (2.2). Para encontrarmos as autofunções do hamiltoniano perturbado temos que resolver a equação

$$(H + U)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.14)$$

Vamos considerar que o potencial perturbativo $U(\vec{r})$ varie lentamente com a posição,

de tal forma que os elementos de matriz deste operador satisfaçam a relação

$$U_{\nu\mu}^{ij} = \int_{\Omega} a_{\nu}^* (\vec{r} - \vec{R}_i) U(\vec{r}) a_{\mu} (\vec{r} - \vec{R}_j) d\vec{r} \approx U(\vec{R}_i) \delta_{\nu\mu} \delta_{ij}. \quad (2.15)$$

Portanto, o potencial perturbativo $U(\vec{r})$ deve ser aproximadamente constante onde o produto $a_{\nu}^*(\vec{r} - \vec{R}_i) a_{\mu}(\vec{r} - \vec{R}_j)$ for apreciável. Nesta equação $a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ são as funções de Wannier localizadas em torno dos sítios $\vec{R}_i$ para uma dada banda ν .

Expandindo nessa base as funções de onda $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ do Hamiltoniano perturbado encontramos,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,\mu} F_{\mu\vec{k}}(\vec{R}_i) a_{\mu}(\vec{r} - \vec{R}_i). \quad (2.16)$$

Substituindo este resultado na equação de Schrödinger (2.14) e projetando nas funções de Wannier $a_{\nu}^*(\vec{r} - \vec{R}_j)$, obtemos,

$$\sum_{j,\mu} H_{\nu\mu}^{ij} F_{\mu\vec{k}}(\vec{R}_j) + U(\vec{R}_i) F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i) = E F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i). \quad (2.17)$$

Exceto pela aproximação (2.15) a equação (2.17) é exata, representando um sistema de equações acopladas que determinam as quantidades desconhecidas $F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i)$. Como estamos considerando que o potencial perturbativo deve variar suavemente com a posição não há motivo para se esperar que as constantes $F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i)$ mudem abruptamente de uma célula unitária para outra, logo, podemos admitir que essas quantidades sejam obtidas a partir de uma função contínua $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ fazendo-se $\vec{r} = \vec{R}_i$. Desta forma podemos determinar $F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_j)$ a partir de $F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i)$ usando o operador translação, isto é,

$$F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_j) = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i), \quad (2.18)$$

onde devemos fazer a substituição formal $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}$. Devido à simetria de translação de H temos ainda que

$$H_{\nu\mu}^{ij} = \int_{\Omega} a_{\nu}^* (\vec{r} - \vec{R}_i) H a_{\mu} (\vec{r} - \vec{R}_j) d\vec{r} = H_{\nu\mu}(\vec{R}_i - \vec{R}_j). \quad (2.19)$$

Substituindo as equações (2.18) e (2.19) na equação (2.17) obtemos

$$\sum_{\mu} \left[\sum_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} H_{\nu\mu}(\vec{R}_j) \right] F_{\mu\vec{k}}(\vec{R}_i) + U(\vec{R}_i) F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i) = E F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i). \quad (2.20)$$

Escrevendo as funções de Bloch para uma dada banda ν , equação (2.2), em termos das funções de Wannier (ver Apêndice B) temos,

$$\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (2.21)$$

logo,

$$H_{\nu\mu}(\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}) = \int_{\Omega} \psi_{\nu\vec{k}}^*(\vec{r}) H \psi_{\mu\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} H_{\nu\mu}(\vec{R}_j).$$

Substituindo esse resultado na equação (2.20) obtemos,

$$\sum_{\mu} \left[H_{\nu\mu}(\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}) + U(\vec{r}) \delta_{\nu\mu} \right] F_{\mu\vec{k}}(\vec{r}) = E F_{\nu\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.22)$$

que é a *equação da massa efetiva*.

Da equação (2.22) vemos que a escolha de um modelo adequado para descrever as propriedades do cristal perfeito é fundamental para a obtenção de bons resultados. Para este fim adotaremos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (6×6), conforme descrito na seção anterior.

Caso um campo magnético $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ seja aplicado ao sistema, a função $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ será obtida a partir da equação (2.22) fazendo a substituição $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla} + \frac{e}{\hbar} \vec{A}$, com e sendo o módulo da carga do elétron e $\vec{A}$ o potencial vetorial magnético. Por outro lado, se um campo elétrico $\vec{F}$ for aplicado ao sistema devemos somar na diagonal do hamiltoniano o termo $e\vec{F} \cdot \vec{r}$ [47, 60].

Vamos agora obter uma relação entre a função de onda do sistema perturbado e a função de Bloch no extremo da banda $\psi_{\nu\vec{k}=0}(\vec{r})$. Invertendo a equação (2.21) obtemos $a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ escrita em termos das funções de Bloch,

$$a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.23)$$

Substituindo a equação (2.23) na função de onda do Hamiltoniano perturbado, equação (2.16), obtemos,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\nu, i, \vec{k}'} F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i) e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{R}_i} \psi_{\nu\vec{k}'}(\vec{r}).$$

Usando as funções de Bloch podemos escrever a equação anterior na forma,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\nu, \vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{R}_i} F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i) \right] u_{\nu\vec{k}'}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\nu, \vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}') u_{\nu\vec{k}'}(\vec{r}), \quad (2.24)$$

onde $G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}')$ é definida como sendo a transformada de Fourier de $F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i)$,

$$\begin{cases} G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{R}_i} F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i); \\ F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}_i} G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}'). \end{cases}$$

Como vimos anteriormente, as constantes $F_{\nu\vec{k}}(\vec{R}_i)$ não variam de forma apreciável sobre distâncias da ordem de $\vec{R}_i$, podendo ser obtidas a partir de uma função contínua $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$.

Dessa forma, $G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}')$ pode ser escrita como

$$G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}') \approx \sqrt{N} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} F_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Portanto, $G_{\nu\vec{k}}(\vec{k})$ é uma função localizada em torno de $\vec{k} = 0$, de tal forma que podemos trocar $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ por $u_{\nu 0}(\vec{r})$ na equação (2.24), resultando,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} u_{\nu 0}(\vec{r}) \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} G_{\nu\vec{k}}(\vec{k}') = \sum_{\nu} u_{\nu 0}(\vec{r}) F_{\nu\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.25)$$

A função $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$, conhecida como função envelope, age como uma função que modula $u_{\nu 0}(\vec{r})$, já que esta pode variar rapidamente com $\vec{r}$ em uma célula unitária.

2.4 Estados Eletrônicos em Heteroestruturas

Vamos verificar agora como a equação da massa efetiva, obtida na seção anterior para um cristal infinito perturbado, pode ser usada para calcular os autoestados

em heteroestruturas semicondutoras. Dentro desta descrição da função envelope cada camada da heteroestrutura comporta-se como um cristal macroscópico e o problema é encontrar as condições de contorno que as autofunções devem satisfazer nas interfaces [38].

Essas heteroestruturas são, em geral, obtidas por técnicas de crescimento epitaxiais, tais como *molecular beam epitaxy* (MBE) e *metal-organic chemical vapour deposition* (MOCVD), que permitem obter interfaces de alta qualidade entre cada material na escala de uma camada atômica ($\sim 2,8 \text{ \AA}$ para o GaAs) [61]. Vamos considerar a direção de crescimento da heteroestrutura como sendo ao longo do eixo z , com o sistema possuindo invariância de translação no plano $x\hat{o}y$.

Seja uma heteroestrutura composta por dois materiais semicondutores **A** e **B** com a interface em $z = z_i$. Como, em geral, os dois materiais possuem gaps de energia diferentes, isto é, $E_g^A \neq E_g^B$, os extremos das bandas vão apresentar descontinuidades nas interfaces,

$$\Delta E_g = E_g^{(B)} - E_g^{(A)} = \delta E_c + \delta E_v,$$

onde δE_c (δE_v) nos fornece a descontinuidade da banda de condução (valência) no ponto Γ .

Logo, portadores caminhando ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura experimentam uma mudança súbita em sua energia potencial nas interfaces. Assim, as descontinuidades das bandas de energia em heteroestruturas com interface abrupta produzem potenciais tipo degrau. Entretanto, outras formas de interface são possíveis variando-se de forma controlada a composição dos materiais, o que nos permite obter estruturas com poços quânticos de formas arbitrárias, tais como, potenciais triangulares e parabólicos. Devemos lembrar ainda que esse potencial criado pela interface entre os dois materiais semicondutores não mistura as autofunções, devendo

portanto entrar apenas na diagonal do nosso hamiltoniano.

Portanto, para encontrarmos os autoestados em uma heteroestrutura temos que resolver a equação da massa efetiva (2.22) dentro de cada material, isto é,

$$\sum_{\mu} \left[H_{\nu\mu}^{\alpha} \left(\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla} \right) - \delta_{\nu\mu} \delta E_v \right] F_{\mu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = E_{\nu\vec{k}} F_{\nu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}), \quad (2.26)$$

com $\alpha = A$ ou B para $\vec{r}$ pertencente à camada A ou B , respectivamente (nesta equação fizemos $U(\vec{r}) = 0$). Além disso, as autofunções em cada região terão a forma (2.25), isto é,

$$\Psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{\nu} u_{\nu 0}^{\alpha}(\vec{r}) F_{\nu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}). \quad (2.27)$$

Para determinarmos as auto-energias e autofunções temos ainda que especificar as condições de contorno que as funções envelope devem satisfazer nas interfaces. Para isso, vamos partir do fato de que a autofunção total $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ deve ser contínua em todo o sistema. Esta condição, porém, não é suficiente para relacionar diretamente as funções envelope, como pode ser visto da equação (2.27). Para isto é necessário conhecermos também as funções de Bloch em cada material, o que extrapola o domínio da aproximação da massa efetiva.

Para contornar essa dificuldade vamos considerar que a parte periódica das funções de Bloch dos materiais que compõem a heteroestrutura são as mesmas, isto é,

$$u_{\nu 0}^A(\vec{r}) = u_{\nu 0}^B(\vec{r}) = u_{\nu 0}(\vec{r}), \quad (2.28)$$

o que restringe a aplicação do método a heteroestruturas formadas por materiais semicondutores com a mesma estrutura cristalina [38, 39, 62]¹. Dessa condição vemos que o parâmetro P , equação (2.12), deve ter o mesmo valor em toda a heteroestrutura.

¹A hipótese de que as funções $u_{\nu 0}(\vec{r})$ sejam iguais em todo o sistema não é exata. Vários trabalhos têm sido publicados com formulações alternativas para a obtenção da equação de massa efetiva para heteroestruturas, de tal forma que as condições de contorno surjam naturalmente [63–67]. Entretanto, os resultados obtidos até o momento mostram que a descrição usual não produz nenhuma diferença significativa para sistemas onde a descontinuidade das bandas na interface é pequena quando comparada com o gap de energia [68, 69].

Usando a ortogonalidade das funções de Bloch, a continuidade de $\Psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r})$ na interface e a condição (2.28), obtemos a relação

$$F_{\nu\vec{k}}^A(\vec{\rho}, z_i) = F_{\nu\vec{k}}^B(\vec{\rho}, z_i) \quad (2.29)$$

que representa a continuidade das funções envelope através da interface, sendo $\vec{\rho} = (x, y)$ a componente bidimensional do vetor $\vec{r}$ no plano $x\hat{o}y$. Além da condição (2.29), que estabelece a continuidade das funções envelope na interface, podemos obter também as condições de contorno sobre as derivadas dessas funções integrando a equação da massa efetiva (2.26) através de uma pequena região em torno da interface [39, 56, 70]. Esta condição assegura que a densidade de corrente será conservada. Essas condições de contorno não serão usadas explicitamente, já que a equação da massa efetiva será resolvida numericamente. Neste caso, essas condições de contorno são automaticamente satisfeitas, já que elas são obtidas da própria equação da massa efetiva ².

Uma vez admitida a invariância de translação do sistema no plano $x\hat{o}y$, podemos reescrever as funções envelope em cada região na forma

$$F_{\nu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \exp\left(i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho}\right) F_{\nu\vec{k}_{\parallel}}^{\alpha}(z). \quad (2.30)$$

Nesta equação $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ e a parte dependente de z da função envelope em cada camada é obtida a partir da solução da equação

$$\sum_{\mu} \left[H_{\nu\mu}^{\alpha}(k_z \rightarrow -i\partial/\partial z) - \delta_{\nu\mu} \delta E_v \right] F_{\mu n\vec{k}_{\parallel}}^{\alpha}(z) = E_{\nu n\vec{k}_{\parallel}} F_{\nu n\vec{k}_{\parallel}}^{\alpha}(z), \quad (2.31)$$

onde, $H_{\nu\mu}^{\alpha}$ é o hamiltoniano mostrado na tabela 2.1 e $E_{\nu n\vec{k}_{\parallel}}$ é a energia da n -ésima sub-banda. Escrevendo a equação (2.31) na forma matricial temos

$$[\mathbf{H}^{\alpha}(k_z \rightarrow -i\partial/\partial z) - \mathbf{I} \delta E_v] \mathbf{F}_{n\vec{k}_{\parallel}}^{\alpha}(z) = E_{n\vec{k}_{\parallel}} \mathbf{F}_{n\vec{k}_{\parallel}}^{\alpha}(z), \quad (2.32)$$

²O que devemos fazer é simetrizar todos os produtos de k_z com os parâmetros que possuam dependência espacial. Isto assegura que, além da corrente ser conservada através de cada interface, o operador matricial diferencial resultante será hermitiano [71, 72]. Entretanto, a forma de se fazer essa simetrização não é única [60].

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade com a mesma dimensão de $\mathbf{H}^\alpha$ e $\mathbf{F}_{n\vec{k}_\parallel}^\alpha(z)$ um vetor coluna com elementos $F_{\nu n\vec{k}_\parallel}^\alpha$ (na equação (2.32) omitimos o índice ν na auto-energia). No próximo capítulo discutiremos o método numérico usado para resolvermos a equação (2.32).

Capítulo 3

Método Numérico

Discutiremos agora o método numérico usado para resolvermos a equação de massa efetiva (2.32). Como vimos, dentro de cada material os estados são descritos pelo hamiltoniano matricial multi-banda $\mathbf{H}^\alpha$ obtido pelo método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (tabela 2.1). Como a direção de crescimento foi escolhida ao longo do eixo z , nosso hamiltoniano passa a depender explicitamente dessa direção, de tal forma que omitiremos o índice α . Além disso, devemos lembrar que todos os parâmetros em $\mathbf{H}$ devem ser simetrizados com o operador diferencial $-i\partial/\partial z$.

3.1 O Método da Potência Inversa

Para implementarmos o método numérico nosso hamiltoniano simetrizado é escrito na forma

$$\mathbf{H}(k_z \rightarrow -i\partial/\partial z) = \mathbf{D}_0 + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{D}_1, \frac{\partial}{\partial z} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{D}_2 \frac{\partial}{\partial z}, \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{D}_i$ é a matriz dos coeficientes de $(\partial/\partial z)^i$ obtidos a partir de $\mathbf{H}$ e $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$ é o anticomutador entre as quantidades $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$. Usando o método das diferenças finitas (apêndice C) transformamos o operador diferencial matricial (3.1) em um sistema de equações algébricas sobre uma rede discreta uniforme com N pontos. Logo, a equação

(2.32) toma a forma

$$\mathbf{M}_{i-1}\mathbf{F}_{i-1} + \mathbf{M}_i\mathbf{F}_i + \mathbf{M}_{i+1}\mathbf{F}_{i+1} = E\mathbf{F}_i, \quad (3.2)$$

onde,

$$\mathbf{M}_{i\pm 1} = \frac{\mathbf{D}_2^{i\pm 1/2}}{\delta^2} - \frac{\mathbf{D}_1^i + \mathbf{D}_1^{i\pm 1}}{4\delta} \quad ; \quad \mathbf{M}_i = \mathbf{D}_0^i - \frac{\mathbf{D}_2^{i-1/2} + \mathbf{D}_2^{i+1/2}}{\delta^2}. \quad (3.3)$$

Nesta Equação $\delta = z_{i+1} - z_i$ é o intervalo de discretização do eixo z , i representa o índice espacial (figura 3.1) e $\mathbf{D}_j^{i\pm 1/2} = (\mathbf{D}_j^i + \mathbf{D}_j^{i\pm 1})/2$; os índices n e $\vec{k}_{\parallel}$ foram omitidos.

Figura 3.1: Discretização uniforme do eixo z . O intervalo de discretização é constante e igual a $\delta = z_{i+1} - z_i$, com i representando o índice espacial.

As equações (3.2) podem também ser escritas na forma matricial $\bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{F}} = E\bar{\mathbf{F}}$, resultando em uma equação de autovalores matricial algébrica.

Para obtermos as soluções dessa equação usaremos o *método da potência inversa* [73, 74]. Para isso, vamos considerar que a matriz $\bar{\mathbf{H}}$ possui autovetores $\bar{\mathbf{F}}_1, \bar{\mathbf{F}}_2, \dots, \bar{\mathbf{F}}_n$ e correspondentes autovalores $E_1, E_2, \dots, E_n$. Assim, uma função inicial $\bar{\mathbf{F}}^{(0)}$ pôde ser expandida como uma combinação linear destes autovetores:

$$\bar{\mathbf{F}}^{(0)} = a_1\bar{\mathbf{F}}_1 + a_2\bar{\mathbf{F}}_2 + \dots + a_n\bar{\mathbf{F}}_n. \quad (3.4)$$

Aplicando o operador $(\bar{\mathbf{H}} - \lambda\mathbf{I})^{-m}$ em $\bar{\mathbf{F}}^{(0)}$ obtemos

$$(\bar{\mathbf{H}} - \lambda\mathbf{I})^{-m}\bar{\mathbf{F}}^{(0)} = \frac{a_1\bar{\mathbf{F}}_1}{(E_1 - \lambda)^m} + \frac{a_2\bar{\mathbf{F}}_2}{(E_2 - \lambda)^m} + \dots + \frac{a_n\bar{\mathbf{F}}_n}{(E_n - \lambda)^m}, \quad (3.5)$$

onde λ é um parâmetro ajustável chamado *shift*, $\mathbf{I}$ é a matriz identidade e m um número inteiro. Se λ for escolhido de modo que ele seja uma boa aproximação para E_i , teremos $|E_i - \lambda| < |E_j - \lambda|$ para todos os j diferentes de i . Deste modo, para um número m

suficientemente grande, o resultado da operação (3.5) será um múltiplo de $\bar{\mathbf{F}}_i$, isto é, terá uma componente dominante nesta direção (desde que $a_i \neq 0$). Além disso, quanto mais próximo de E_i for λ , menor será m para obtermos $\bar{\mathbf{F}}_i$ dentro de uma determinada precisão. Deve ser observado também que não existe nada de especial em relação ao autovalor E_i , isto é, λ pode ser escolhido de tal forma que tenha um valor que seja próximo de qualquer um dos autovalores de $\bar{\mathbf{H}}$. A equação (3.5) pode então ser escrita aproximadamente como

$$(\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I})^{-m} \bar{\mathbf{F}}^{(0)} \approx \frac{a_i \bar{\mathbf{F}}_i}{(E_i - \lambda)^m}, \quad (3.6)$$

de onde o autovetor $\bar{\mathbf{F}}_i$ e o autovalor E_i podem ser obtidos. Da mesma forma, todos os outros autovalores e autovetores de $\bar{\mathbf{H}}$ podem ser obtidos variando de forma conveniente o valor de λ . Por exemplo, em uma heteroestrutura todas as funções envelope e autoenergias dos estados ligados podem ser obtidas variando λ para valores de energias desde o fundo até o topo do poço de potencial. Para obtermos os autovalores correspondentes aos estados degenerados usamos a técnica de ortonormalização de Gram-Schmidt.

Numericamente, este método é facilmente implementado para funcionar de modo iterativo, com m sendo o número de iterações. Além disso, para aumentarmos a velocidade da convergência, cada nova iteração é iniciada com um novo shift $\lambda = E_i^{(m-1)}$ e com uma nova função $\bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$. Para terminarmos o processo iterativo devemos adotar um critério de convergência. Nesse trabalho o critério é que a diferença entre os autovalores E_i entre duas iterações consecutivas deve ser menor do que 10^{-8} meV, isto é, $|E_i^{(m)} - E_i^{(m-1)}| < 10^{-8}$ meV. Consideramos esta precisão para assegurar a convergência dos autoestados e autofunções. Este procedimento pode ser resumido como segue:

- (i) Escolhemos $\lambda = E_i^{(0)}$;
- (ii) $\bar{\mathbf{f}}^{(m)} = (\bar{\mathbf{H}} - E_i^{(m-1)} \mathbf{I})^{-1} \bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$;

- (iii) $\bar{\mathbf{F}}^{(m)} = \bar{\mathbf{f}}^{(m)} / \langle \bar{\mathbf{f}}^{(m)} | \bar{\mathbf{f}}^{(m)} \rangle;$
- (iv) $E_i^{(m)} = \langle \bar{\mathbf{F}}^{(m)} | \bar{\mathbf{H}} | \bar{\mathbf{F}}^{(m)} \rangle;$
- (v) Se $|E_i^{(m)} - E_i^{(m-1)}| > 10^{-8}$ meV voltar ao passo (ii) com $m = m + 1$;
- (vi) Ir para o passo (i) para calcular o próximo autovetor e autovalor.

Quanto à função inicial $\bar{\mathbf{F}}^{(0)}$, a única restrição é que ela deve possuir todos os coeficientes a_i diferentes de zero. No entanto, para aumentarmos a velocidade de convergência, nós escolhemos não apenas uma única função inicial $\bar{\mathbf{F}}^{(0)}$, mas sim, uma função para cada estado. Esta escolha é feita de tal forma que cada uma dessas funções possua características da autofunção de cada estado, como, por exemplo, o número de zeros. Dessa forma, escolhemos como funções iniciais os autoestados do oscilador harmônico, uma vez que elas possuem as características desejadas e, além disso, podem ser facilmente implementadas numericamente.

Para resolvermos a equação $\bar{\mathbf{f}}^{(m)} = (\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I})^{-1} \bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$ no passo (ii) devemos reescrevê-la na forma $(\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I}) \bar{\mathbf{f}}^{(m)} = \bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$, resultando em um sistema de equações lineares algébricas. A solução desse sistema é obtida usando-se técnicas para resolver sistemas lineares com matrizes esparsas¹, uma vez que o operador matricial $(\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I})$ possui um grande número de zeros. Isto pode ser verificado a partir das equações (3.2), de onde vemos que o operador $(\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I})$ é tridiagonal por matrizes, isto é, é uma matriz tridiagonal com cada um de seus elementos sendo matrizes com dimensões iguais à dimensão do nosso hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Isto é representado na equação (3.7), onde as matrizes $\mathbf{M}_i$ são mostradas na equação (3.3).

¹Esta matriz possui dimensão $dN \times dN$, com $d = 6$ sendo a dimensão do hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (se não considerarmos a banda split-off, conforme tabela 2.1). Devido ao grande número de zeros, nós reescrevemos esta matriz como $2(2d - 1) + 1 = 23$ vetores, cada um com dimensão $6N$, resultando uma economia significativa de memória (N é da ordem de 1000), o que torna o método viável.

$$\begin{bmatrix}
 \mathbf{M}_1 - \lambda \mathbf{I} & \mathbf{M}_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 - \lambda \mathbf{I} & \mathbf{M}_3 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \mathbf{M}_2 & \mathbf{M}_3 - \lambda \mathbf{I} & \mathbf{M}_3 & 0 & 0 \\
 & \vdots & & \ddots & \vdots & \\
 0 & 0 & 0 & \mathbf{M}_{N-2} & \mathbf{M}_{N-1} - \lambda \mathbf{I} & \mathbf{M}_N \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{M}_{N-1} & \mathbf{M}_N - \lambda \mathbf{I}
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \mathbf{f}_1^{(m)} \\
 \mathbf{f}_2^{(m)} \\
 \mathbf{f}_3^{(m)} \\
 \vdots \\
 \mathbf{f}_{N-1}^{(m)} \\
 \mathbf{f}_N^{(m)}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \mathbf{F}_1^{(m-1)} \\
 \mathbf{F}_2^{(m-1)} \\
 \mathbf{F}_3^{(m-1)} \\
 \vdots \\
 \mathbf{F}_{N-1}^{(m-1)} \\
 \mathbf{F}_N^{(m-1)}
 \end{bmatrix}
 \quad (3.7)$$

Dessa forma, obtemos um método numérico para resolvermos a equação de massa efetiva unidimensional usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Este método será usado nos capítulos seguintes para descrever o comportamento de elétrons e buracos em heteroestruturas semicondutoras na presença de campos elétricos e magnéticos externos. Como principais características ele tem se mostrado muito estável e de convergência bastante rápida. Além disso, ele permite estudar poços quânticos com formas arbitrárias.

Devemos observar ainda que na equação (3.2), quando estamos com $i = 1$ ou $i = N$, ficamos com as funções $\mathbf{F}_0$ e $\mathbf{F}_{N+1}$ indefinidas. Estas são determinadas a partir das condições de contorno do problema que estamos interessados em resolver. Como desejamos obter apenas os estados ligados em poços quânticos faremos $\mathbf{F}_0 = \mathbf{F}_{N+1} = 0$. Isto equivale a incluir barreiras infinitas nos extremos do sistema. Entretanto, estas barreiras devem ser colocadas suficientemente distantes da região dos poços, de forma que elas não venham a influenciar nos resultados da estrutura eletrônica. Outro parâmetro que temos que escolher, de forma a não influenciar nossos resultados, é o valor do intervalo de discretização δ . Verificamos que para $\delta = 1,0 \text{ \AA}$ obtemos uma concordância de centésimos de meV nos níveis de energia quando comparamos com os resultados obtidos a partir da solução da equação transcendental para o poço quântico simples finito.

Capítulo 4

Tunelamento Ressonante em Poços Quânticos Duplos de GaAs/GaAlAs

Uma das mais interessantes, e também mais simples, heteroestruturas semicondutoras que permite estudar o tunelamento ressonante de portadores é o poço quântico duplo. Nesse sistema, que consiste de dois poços quânticos separados por uma fina barreira, o acoplamento entre os estados de cada poço é uma função extremamente sensível da barreira; quanto mais baixa ou mais fina a barreira maior será o acoplamento entre os poços. Além disso, esse acoplamento pode também ser modificado através de campos elétricos e magnéticos aplicados à heteroestrutura.

Investigaremos aqui os efeitos de um campo elétrico, aplicado na direção de crescimento, e de um campo magnético, aplicado no plano perpendicular, sobre o tunelamento ressonante de elétrons e buracos criados por excitação óptica. O sistema estudado consiste de um poço quântico duplo assimétrico de GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As. Vamos calcular a estrutura eletrônica para várias intensidades de campos aplicados, de onde encontraremos os campos necessários para colocar em ressonância os estados localizados em cada poço. Em seguida veremos como as curvas de campo elétrico *versus* campo magnético, na condição de ressonância, podem mapear a relação de dispersão dos estados ligados de um poço quântico.

4.1 Considerações Iniciais

O estudo do tunelamento de portadores em heteroestruturas tem sido bastante investigado devido à possibilidade de aplicações em dispositivos de alta velocidade [10]. Além disso, o tunelamento tem sido usado para investigar alguns aspectos fundamentais da teoria quântica, tais como, a emissão de radiação com frequências da ordem de THz produzida pela oscilação dos portadores entre estados ressonantes em poços quânticos duplos [13, 16] e a dinâmica caótica de elétrons em sistemas de dupla barreira na presença de um campo magnético inclinado [75, 76]. Experimentalmente, a transferência de portadores entre poços quânticos têm sido estudada por diversas técnicas, tais como, fotoluminescência, fotoluminescência resolvida no tempo e espectroscopias *four-wave-mixing* e *pump-and-probe* [13, 16–19]. Dentre essas devemos destacar as técnicas resolvidas no tempo, que tem permitido estudar diretamente a dinâmica do tunelamento.

De um modo geral, o estudo do tunelamento em heteroestruturas semicondutoras tem sido feito aplicando-se ao sistema campos elétricos e magnéticos. O campo elétrico, aplicado na direção de crescimento, é usado para variar a posição dos níveis de energia dos estados confinados, sem mudar o *momentum* dos portadores no plano. Por outro lado, um campo magnético modifica a dinâmica do tunelamento dependendo da sua orientação. Para um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento o tunelamento ocorre entre os níveis de Landau, enquanto que, para um campo magnético no plano, as ressonâncias são deslocadas no espaço $\vec{k}$ devido à conservação do momentum canônico no plano, permitindo aos portadores tunelarem, de forma ressonante, com vetores de onda no plano diferentes de zero.

4.2 Hamiltoniano

Vamos inicialmente escrever o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$, mostrado na tabela 2.1, para o caso particular de um campo elétrico aplicado ao longo da direção de crescimento, $\vec{F} = F\hat{z}$, e de um campo magnético $\vec{B}$ aplicado no plano $x\hat{o}y$. No capítulo 2 vimos que, para um campo magnético $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ aplicado ao sistema, a função envelope $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ é obtida a partir da equação de massa efetiva (2.22) fazendo-se a substituição $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla} + e\vec{A}/\hbar$, com $\vec{A}$ sendo o potencial vetor. Por outro lado, para um campo elétrico aplicado ao longo do eixo z , devemos somar à diagonal do hamiltoniano o termo eFz .

Seja um campo magnético $\vec{B} = (B_x, B_y, 0) = B(-\sin\theta, \cos\theta, 0)$ aplicado no plano $x\hat{o}y$, com sua direção sendo definida pelo ângulo polar θ (para $\theta = 0$ o campo magnético estará ao longo do eixo y). Desta forma, um potencial vetor possível é $\vec{A} = Bz(\cos\theta, \sin\theta, 0)$. Para incluímos esse campo magnético em nosso hamiltoniano, vamos definir um novo sistema de coordenadas (x', y', z') . Este novo sistema é obtido girando-se o sistema de coordenadas original (x, y, z) pelo ângulo θ em torno do eixo z ($z = z'$), isto é,

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

Neste novo sistema de coordenadas o potencial vetorial magnético terá a forma $\vec{A} = (Bz, 0, 0)$. Logo, a substituição $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla} + e\vec{A}/\hbar$ será igual a,

$$k'_x \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{z}{\lambda_c^2} \quad ; \quad k'_y \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial y'} \quad ; \quad k'_z = k_z \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.2)$$

Na equação anterior, $\lambda_c = \sqrt{\hbar/eB}$, é o raio da menor órbita ciclotrônica ou comprimento magnético. Dessa forma, mesmo com um campo magnético aplicado no plano $x\hat{o}y$, o sistema mantém a simetria de translação neste plano, de tal forma que a função

envelope (2.30) terá a forma

$$F_{\nu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i k'_x x' + i k'_y y') F_{\nu k'_x}^{\alpha}(z), \quad (4.3)$$

onde S é a área da heteroestrutura no plano $x\hat{o}y$. Das equações (4.2) e (4.3) obtemos

$$k'_x \rightarrow k_{\perp} + \frac{z}{\lambda_c^2}; \quad k'_y \rightarrow k_B, \quad (4.4)$$

onde $k_{\perp}$ e k_B são bons números quânticos.

Usando novamente a equação (4.1) podemos escrever o hamiltoniano 2.1 em termos de (k'_x, k'_y, k'_z) , resultando em

$$\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}} = \begin{bmatrix} D_c & A/\sqrt{2} & -A^*/\sqrt{6} & B_1^* & 0 & -G \\ A^*/\sqrt{2} & D_+ & C & 0 & B_2^* & S_+^* \\ -A/\sqrt{6} & C^* & D_- & G & S_-^* & B_3^* \\ B_1 & 0 & G & D_c & A^*/\sqrt{2} & -A/\sqrt{6} \\ 0 & B_2 & S_- & A/\sqrt{2} & D_+ & C^* \\ -G & S_+ & B_3 & -A^*/\sqrt{6} & C & D_- \end{bmatrix} \begin{matrix} |e \uparrow\rangle \\ |h \uparrow\rangle \\ |l \downarrow\rangle \\ |e \downarrow\rangle \\ |h \downarrow\rangle \\ |l \uparrow\rangle \end{matrix} \quad (4.5)$$

onde,

$$\begin{aligned} D_c &= Eg + \frac{\hbar^2}{2m_0} (2F + 1) \left[k_z^2 + \left(k_{\perp} + \frac{z}{\lambda_c^2} \right)^2 + k_B^2 \right] \\ D_{\pm} &= -\frac{\hbar^2}{m_0} \left\{ \frac{\gamma_1 \mp 2\gamma_2}{2} k_z^2 + \frac{\gamma_1 \pm \gamma_2}{2} \left[\left(k_{\perp} + \frac{z}{\lambda_c^2} \right)^2 + k_B^2 \right] \right\} \\ A &= Pe^{i\theta} \left(k_{\perp} + ik_B + \frac{z}{\lambda_c^2} \right) \\ C &= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hbar^2}{m_0} \left\{ (\gamma_2 \cos(2\theta) - i\gamma_3 \sin(2\theta)) \left[\left(k_{\perp} + \frac{z}{\lambda_c^2} \right)^2 - k_B^2 \right] - \right. \\ &\quad \left. 2(\gamma_2 \sin(2\theta) + i\gamma_3 \cos(2\theta)) \left(k_{\perp} + \frac{z}{\lambda_c^2} \right) k_B \right\} \\ B_1 &= -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(N_1 + \frac{1}{2} \right) \frac{ie^{i\theta}}{\lambda_c^2} \\ B_2 &= \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m_0} q \frac{ie^{-i\theta}}{\lambda_c^2} \\ B_3 &= \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\kappa + \frac{5}{2} q \right) \frac{ie^{-i\theta}}{\lambda_c^2} \\ G &= \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z \end{aligned}$$

$$S_{\pm} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} e^{i\theta} \left\{ 2\gamma_3 \left(k_{\perp} + ik_B + \frac{z}{\lambda_c^2} \right) k_z - \frac{i}{\lambda_c^2} \left[\gamma_3 \pm \left(\kappa + \frac{7}{2}q \right) \right] \right\}.$$

Tendo obtido o hamiltoniano, vamos agora calcular as funções envelope (4.3) a partir da solução numérica da equação de massa efetiva (2.32). Para isso, usaremos o método numérico descrito no capítulo 3.

4.3 Resultados

O sistema estudado consiste de um poço quântico de 100 Å e outro de 50 Å separados por uma barreira de 60 Å. Todos os parâmetros usados são listados no apêndice A. O campo elétrico é aplicado na direção z e o campo magnético ao longo da direção y ($\theta = 0$). Como veremos, os efeitos de acoplamento entre as bandas e também os efeitos dos spins dos portadores são essenciais para determinarmos de forma correta as condições de tunelamento. A figura 4.1 mostra a energia potencial e as autofunções para os primeiros estados ligados. Este resultado é para campos elétrico e magnético nulos e $k_{\perp} = k_B = 0$. A notação usada aqui segue a seguinte regra: o primeiro estado eletrônico, que está localizado no poço mais largo, é denotado por (el1_W). O próximo estado está localizado no poço mais estreito, sendo denotado por (el1_N), e assim por diante. Para buracos pesados e buracos leves usaremos hh (*heavy-hole*) e lh (*light-hole*), respectivamente.

Como citado anteriormente, o campo elétrico é usado para modificar a energia dos estados confinados nos poços adjacentes, sem alterar os vetores de onda no plano. Portanto, se o sistema for colocado em ressonância por um campo elétrico, será possível aos portadores tunelarem, de um poço para outro, com um *momentum* qualquer no plano. Por outro lado, um campo magnético aplicado na direção do eixo y desloca as relações de dispersão dos estados localizados em um poço, contra aquelas dos estados localizados no outro poço, ao longo de $k_{\perp}$. Da equação (4.4), ou diretamente do

Figura 4.1: Energia potencial e autofunções para os primeiros estados ligados em um poço quântico duplo assimétrico com poços de 100 Å e 50 Å separados por uma barreira de 60 Å. Este resultado é para campos elétrico e magnético nulos e $k_{\perp} = k_B = 0$. $el1_w$ indica o primeiro estado eletrônico localizado no poço mais largo. O próximo estado para elétrons está localizado no poço mais estreito, sendo denotado por $el1_N$. Os outros estados seguem a mesma regra.

hamiltoniano (4.5), vemos que o *momentum* $k_{\perp}$ é modificado pelo campo magnético para $k_{\perp} + z/\lambda_c^2$.

A interseção, na direção de $k_{\perp}$, de uma sub-banda localizada no poço mais estreito com um estado localizado no poço mais largo, satisfará, portanto, a condição de conservação de energia e *momentum*, abrindo um canal para a transferência ressonante dos portadores entre os poços para um determinado $k_{\perp}$. Por outro lado, após a excitação óptica, os elétrons (buracos) relaxam rapidamente (~ 10 ps) para o fundo (topo) das sub-bandas e a transferência ressonante será maximizada se o campo magnético aplicado for tal que as ressonâncias ocorram entre o extremo de uma sub-banda e um

estado qualquer de uma sub-banda do outro poço. Criando-se opticamente os portadores no poço estreito, estes podem ser injetados ressonantemente no poço mais largo e com um *momentum* no plano diferente de zero. Dessa forma, veremos que a aplicação de campos elétricos na direção de crescimento e de campos magnéticos no plano nos permitirá mapear as relações de dispersão do poço mais largo, onde os extremos das bandas de mais baixa energia do poço mais estreito são usados como “estados de prova”.

As curvas de dispersão, ao longo da direção de $k_{\perp}$ ($k_B = 0$), para campo elétrico nulo, são mostradas na figura 4.2. As linhas sólidas e tracejadas são devido ao levantamento das degenerescências de spin. Nos dois gráficos à esquerda o campo magnético é igual a zero e nos dois gráficos à direita seu valor é de 4,3 T. Para este campo vemos que ocorre uma ressonância entre o estado de mais alta energia localizado no poço de 50 Å com um estado da sub-banda de buraco leve localizado no outro poço (chamaremos esse campo magnético particular de *campo magnético ressonante*, B_R). Devido ao acoplamento entre os poços, podemos observar que as curvas não se cruzam (*anticrossing*), produzindo um pequeno gap na relação de dispersão. Quanto maior for o acoplamento entre os poços, maior será o gap entre os estados na condição de ressonância.

Aplicando um campo elétrico ao sistema podemos alterar a separação entre os níveis de energia dos estados localizados nos poços adjacentes. Para os elétrons, que possuem curvas de dispersão aproximadamente parabólicas, um decréscimo na separação desses níveis implica em um deslocamento da ressonância para campos magnéticos mais baixos. Para buracos, entretanto, este comportamento nem sempre é observado, já que a forma das curvas de dispersão não são tão simples. Na figura 4.3 mostramos as curvas de ressonância (campo elétrico *versus* campo magnético ressonante) para elétrons (linhas tracejadas) e buracos (linhas sólidas). Para campos magnéticos

Figura 4.2: Relações de dispersão das bandas de condução e valência ao longo da direção $k_{\perp}$ ($k_B = 0$) para um campo elétrico igual a zero. Nos gráficos à esquerda o campo magnético é igual a zero. Para um campo magnético igual a 4,3 T, gráficos à direita, vemos que ocorre uma ressonância entre o estado de buraco pesado de mais alta energia, localizado no poço de 50 Å, e um estado da sub-banda de buraco leve localizado no outro poço, maximizando a possibilidade de tunelamento. As linhas tracejadas são devido ao levantamento das degenerescências de spin.

suficientemente intensos, as curvas de ressonância para os buracos se separam em quatro ramos devido à quebra da degenerescência de spin, correspondendo, cada um, a quatro campos magnéticos ressonantes para um dado campo elétrico aplicado. Como podemos observar da figura 4.3, a quebra da degenerescência de spin para os elétrons é desprezível.

Figura 4.3: Campo elétrico versus campo magnético ressonante. O eixo à direita mostra a separação dos níveis de energia eletrônicos, ΔE , no fundo de cada sub-banda, entre o estado fundamental localizado no poço quântico de 100 Å e o primeiro estado excitado localizado no poço de 50 Å. $hh1_N \rightarrow hh1_W$ indica que o tunelamento dos portadores está ocorrendo dos estados $hh1_N$, localizados no fundo da respectiva sub-banda, para um estado da sub-banda $hh1_W$. Os pontos abertos são resultados experimentais obtidos por fotoluminescência resolvida no tempo [19].

Na figura 4.3 mostramos ainda os resultados experimentais obtidos por Heberle *et al.* [19] (pontos abertos) usando fotoluminescência resolvida no tempo. ΔE , no eixo à direita, nos fornece a separação entre o fundo das sub-bandas para os dois primeiros

estados eletrônicos, cada um localizado em um poço. O experimento consistiu em medir o tempo de decaimento da luminescência dos portadores criados opticamente no poço quântico de 50 Å como uma função de um campo elétrico aplicado ao longo da direção de crescimento e de um campo magnético aplicado no plano perpendicular. Assim, se não existe nenhum outro canal de relaxação mais rápido, os portadores no poço quântico de 50 Å se recombinam radiativamente. Entretanto, vimos que um campo magnético aplicado no plano perpendicular à direção de crescimento cria condições para o tunelamento ressonante dos portadores para o outro poço. Dessa forma, os portadores podem tunelar para o poço mais largo, relaxar para o fundo da respectiva sub-banda e recombinar emitindo fótons com energias mais baixas. Este processo torna-se visível experimentalmente como uma grande redução no tempo de decaimento da luminescência do poço quântico estreito.

Vemos da figura 4.3 que nosso resultado, para o tunelamento de elétrons, está em excelente acordo com o resultado experimental. Outro ponto interessante em relação à figura 4.3 é que, para campos magnéticos iguais a 14 T, 15,5 T e 16 T, não podemos excluir a possibilidade de que os buracos estejam contribuindo para o decréscimo nos tempos de decaimento da luminescência. Além disso, os cruzamentos entre as curvas para o tunelamento de elétrons e para o tunelamento de buracos significam que esses portadores foram colocados em ressonância simultaneamente.

Para uma melhor compreensão dos nossos resultados vamos fazer uma análise do sistema usando teoria de perturbação de primeira ordem na aproximação de bandas parabólicas. Seja $H = H_0 + H'$, onde H_0 é o nosso hamiltoniano para $F = B = 0$ ($H_0 F_n^0 = E_n^0 F_n^0$) e H' a contribuição devido aos campos F e B . Podemos verificar que (apêndice D)

$$E_n = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} \left(1 + \frac{\langle z_n \rangle}{k_{\perp} \lambda_c^2} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\langle z_n^2 \rangle - \langle z_n \rangle^2}{\lambda_c^4} \right) + eF \langle z_n \rangle, \quad (4.6)$$

onde $\langle z_n \rangle = \langle F_n^0 | z | F_n^0 \rangle$ é o valor esperado da posição dos portadores no estado n . Vemos desse resultado que o principal efeito do campo magnético é deslocar as sub-bandas de $k_\perp$ para $k_\perp + \langle z_n \rangle / \lambda_c^2$, uma vez que a contribuição do *shift* diamagnético (quarto termo) é pequena para as larguras dos poços que estamos estudando (para um campo magnético de 20 T o *shift* diamagnético é igual a 3,2 meV para o $el1_W$, 0,4 meV para o $hh1_W$, 0,8 meV para o $hh2_W$ e 2,5 meV para o $lh1_W$). Por outro lado, o efeito do campo elétrico é modificar os níveis de energia por $\Delta\varepsilon = eF\langle z_n \rangle$, sem modificar o *momentum* dos portadores.

Da equação (4.6) encontramos duas relações: uma entre a variação do *momentum* $\Delta k_\perp$ e o campo magnético ressonante B_R (ver figura 4.2), e outra entre as energias dos *estados de prova*, para elétrons e buracos, $E(F)$, e o campo elétrico aplicado F . A variação no *momentum* $\Delta k_\perp$, devido ao campo magnético aplicado na direção y , é dada por

$$\Delta k_\perp = \frac{\Delta s}{\lambda_c^2}, \quad (4.7)$$

onde $\Delta s \approx L_w/2 + L_n/2 + L_B$ é a distância média percorrida pelos portadores no tunelamento. Por outro lado, os níveis de energia dos estados de prova estão relacionados com o campo elétrico aplicado pela expressão

$$E(F) = E_{1N}^0 + e\Delta s F, \quad (4.8)$$

onde E_{1N}^0 é a energia do *estado de prova* com $F = 0$. Para o estado $el1_N$ temos $E_{1N}^0(el) = 1.596,97$ meV e, para o estado $hh1_N$, $E_{1N}^0(hh) = -19,53$ meV. Devemos observar ainda que as equações (4.7) e (4.8) continuam válidas mesmo quando nosso hamiltoniano não é diagonal, já que o efeito do campo magnético é trocar $k_\perp$ por $k_\perp + z/\lambda_c^2$ em todo o hamiltoniano e os termos envolvendo o campo elétrico só aparecem na diagonal.

Nas figuras 4.4 e 4.5 fazemos uma comparação entre as curvas de ressonância,

figura 4.3, e as relações de dispersão para elétrons e buracos em um poço quântico simples de 100 Å sem campos elétricos e magnéticos aplicados. Para fazermos esta comparação usamos a equação (4.7) para escrevermos o campo magnético ressonante em termos de $k_{\perp}$ (eixo horizontal superior) e a equação (4.8) para relacionarmos as energias dos portadores com o campo elétrico aplicado (eixo da direita).

Na figura 4.4 mostramos o campo elétrico *versus* campo magnético ressonante (linha contínua) para o tunelamento de elétrons entre o primeiro estado excitado, localizado no poço de 50 Å, e o estado fundamental, localizado no poço de 100 Å. Vemos que

Figura 4.4: Comparação entre a curva que nos fornece a condição de tunelamento ressonante entre $el1_N \rightarrow el1_W$ (linha contínua) e a relação de dispersão do estado fundamental para um poço quântico simples de 100 Å (linha tracejada). A curva pontilhada foi obtida por teoria de perturbação levando-se em conta a variação da massa efetiva eletrônica com o campo magnético, equação (4.11).

esta curva possui a mesma forma da relação de dispersão para os elétrons em um poço quântico simples de 100 Å (linha tracejada). A diferença entre as duas curvas é devido ao próprio campo magnético usado para alcançar a condição de ressonância. Como veremos posteriormente, o campo magnético aumenta a massa efetiva dos elétrons [77]; a linha pontilhada foi obtida considerando-se essa variação da massa efetiva com o campo magnético, equação (4.11).

Figura 4.5: Comparação entre as curvas de tunelamento para buracos (linha contínua) e as relações de dispersão para os três primeiros estados de um poço quântico simples de 100 Å (linha tracejada). Observamos que ocorre o levantamento das degenerescências de spin para campos magnéticos $B \gtrsim 6$ T, correspondendo a um comprimento magnético de $\lambda_c \lesssim 100$ Å, que é comparável à largura do poço quântico mais largo.

As curvas de ressonância para o tunelamento dos buracos são mostradas na figura 4.5. Neste caso, os campos foram obtidos de tal forma que as ressonâncias ocorram entre o estado fundamental de buraco pesado, localizado no poço quântico de 50 Å, e os três estados de mais baixa energia localizados no poço de 100 Å (linha contínua). As curvas tracejadas mostram as relações de dispersão da banda de valência para um poço quântico simples de 100 Å.

Podemos observar que, exceto pela quebra das degenerescências de spin, as curvas de ressonância mapeiam as curvas de dispersão dos buracos. É interessante notar que este levantamento das degenerescências de spin ocorre quando o comprimento magnético torna-se comparável à largura do poço quântico mais largo, $\lambda_c \lesssim 100$ Å, correspondendo a campos magnéticos $B \gtrsim 6$ T. Neste caso, vemos que o aumento na massa efetiva, devido ao campo magnético aplicado, têm um efeito desprezível. Portanto, a diferença entre as relações de dispersão e as curvas de ressonância é devido ao próprio campo magnético usado para se alcançar as ressonâncias.

Vamos agora verificar se o uso da teoria de perturbação de primeira ordem é justificável para as intensidades de campos usadas aqui. Calculando a correção de segunda ordem devido à presença do campo elétrico temos, para o estado $el1_W$,

$$\Delta E(F) = \sum_{i \neq 1} \frac{(eF)^2}{E_1^0 - E_i^0} |\langle F_1^0 | z | F_i^0 \rangle|^2 \approx -1,1 \text{ meV},$$

onde consideramos $F = 40$ kV/cm, $E_1^0 = 1550,2$ meV e $E_2^0 = 1596,9$ meV. A soma foi feita sobre todos os estados ligados. A correção de segunda ordem para o estado $el1_W$, devido à presença do campo magnético, é

$$\Delta E(B) = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \sum_{i \neq 1} \frac{(2k_{\perp}^2/\lambda_c^4) |\langle F_1^0 | z | F_i^0 \rangle|^2 + (1/\lambda_c^8) |\langle F_1^0 | z^2 | F_i^0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_i^0} \approx -8,5 \text{ meV} \quad (4.9a)$$

onde consideramos $B = 20$ T. Logo, $\lambda_c = 57,4$ Å e $k_{\perp} = 0,041$ Å⁻¹. Os elementos de matriz $\langle F_1^0 | z | F_i^0 \rangle$ e $\langle F_i^0 | z^2 | F_1^0 \rangle$ foram todos calculados numericamente.

Este valor está muito próximo da diferença observada na figura 4.4 entre a curva de ressonância e a relação de dispersão calculada para um poço simples com campo magnético nulo. Vemos portanto que, para os elétrons, o efeito do campo magnético sobre a massa efetiva, que é um efeito de segunda ordem em teoria de perturbação, não é desprezível. A partir da equação (4.9a) obtemos que a correção na massa devido à presença do campo magnético é

$$m_B^* = \frac{m^*}{1 - 2 \frac{(eB)^2}{m^*} \sum_{i \neq 1} \frac{|\langle F_i^0 | z | F_1^0 \rangle|^2}{E_i^0 - E_1^0}}. \quad (4.10)$$

Essa variação da massa efetiva é mostrada na figura 4.6. A equação (4.7) relaciona o

Figura 4.6: Variação da massa efetiva com o campo magnético para o estado ell_w . Usando a relação entre o campo magnético ressonante e o momentum $k_{\perp}$, equação (4.7), comparamos m_B^* , equação (4.10), com as massas efetivas de um poço quântico de $100 \text{ \AA}$ para $B = 0$ e 20 T . Vemos que a variação da massa efetiva com o campo magnético concorda com o resultado fornecido pela teoria de perturbação, justificando a diferença encontrada na figura 4.4 entre a curva de ressonância e a relação de dispersão.

campo magnético ressonante com o *momentum* $k_{\perp}$, de tal forma que podemos comparar o gráfico de m_B^* , obtido da equação (4.10), com as massas efetivas calculadas numericamente para um poço quântico simples de 100 Å para $B = 0$ T e $B = 20$ T.

Vemos desse gráfico que a variação da massa efetiva do poço quântico com o campo magnético concorda com o resultado fornecido pela teoria de perturbação, justificando a diferença encontrada na figura 4.4 entre a curva de ressonância e a relação de dispersão.

Sabendo como é a variação da massa efetiva com o campo magnético, podemos calcular a relação de dispersão por teoria de perturbação e comparar com o resultado mostrado na figura 4.4. Fazendo isso obtemos

$$E(k_{\perp}) = E_1^0 + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_B^*} = E_0 + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} \left[1 - 2 \frac{(eB_R)^2}{m^*} \sum_{i \neq 1} \frac{|\langle F_i^0 | z | F_1^0 \rangle|^2}{E_i^0 - E_1^0} \right]. \quad (4.11)$$

Na figura 4.4 este resultado é mostrado como uma curva pontilhada.

Para os estados de buraco leve e buraco pesado nossos resultados mostram que o levantamento das degenerescências de spin e os efeitos de acoplamento das bandas (*band mixing*) são mais importantes que as correções de segunda ordem. Para esses estados as correções de segunda ordem, devido à presença de um campo elétrico igual a 20 kV/cm, são iguais a 0,9 meV para $hh1_W$, -0,3 meV para o $hh2_W$ e 0,4 meV para o $lh1_W$. Já as correções nas energias devido à presença de um campo magnético igual a 20 T são de 0,9 meV para $hh1_W$ e -0,3 meV para o $hh2_W$. Para o $lh1_W$ a correção é de 0,4 meV para um campo magnético igual a 10 T.

4.4 Considerações Finais

Encontramos as intensidades dos campos elétricos (aplicados ao longo da direção de crescimento) e magnéticos (aplicados no plano perpendicular) necessárias para colocarmos em ressonância os estados de elétrons e buracos em um poço quântico duplo

de GaAs/GaAlAs. Nossos resultados para elétrons apresentam um excelente acordo com os resultados experimentais apresentados na literatura [19].

Em seguida mostramos que, a partir desses resultados, as relações de dispersão para elétrons e buracos podem ser mapeadas experimentalmente. Vimos que na presença do campo magnético o tunelamento dos portadores ocorre para *momenta* no plano diferentes de zero. Dessa forma, o uso do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, que leva em consideração os efeitos de não parabolicidade e os acoplamentos entre as bandas, é de fundamental importância para a descrição correta do tunelamento.

Por outro lado, o campo magnético usado para se alcançar a condição de ressonância modifica a forma da relação de dispersão. Para os estados da banda de valência vimos que o principal efeito do campo magnético é levantar as degenerescências de spin, sem modificar significativamente a forma das curvas de dispersão. Isto ocorre quando o campo magnético for tal que o comprimento magnético λ_c for comparável à largura do poço. Para os estados eletrônicos a modificação na forma da relação de dispersão se dá devido ao aumento na massa efetiva com o campo magnético, com o levantamento das degenerescências de spin sendo desprezíveis.

Outro resultado interessante que obtemos da figura 4.3 é que as curvas de ressonância para elétrons e buracos se cruzam. Isto significa que, para esses campos, os elétrons e os buracos estão em ressonância simultaneamente, o que provavelmente nos possibilitaria observar o tunelamento ressonante de éxcitons. Essa ressonância simultânea não pode ser alcançada aplicando-se apenas o campo elétrico. O mesmo ocorre quando apenas o campo magnético é aplicado, a não ser que o poço quântico duplo tenha uma forma específica.

Ainda em relação à figura 4.3 vimos que para campos magnéticos iguais a iguais a 14 T, 15,5 T e 16 T não podemos excluir a possibilidade de que os buracos estejam contribuindo para o decréscimo dos tempos de decaimento da luminescência

obtidos experimentalmente. Entretanto, o tempo de tunelamento estimado para os buracos nesta estrutura é da ordem de nanosegundos, que é maior que o tempo de recombinação (~ 300 ps), fazendo com que esse processo seja pouco provável.

O tempo de tunelamento dos portadores é extremamente sensível à espessura da barreira interna. Dessa forma, podemos diminuir a espessura da barreira para que o tempo de tunelamento dos buracos seja menor que o tempo de recombinação. A espessura máxima da barreira foi então determinada a partir da diferença de energia entre os estados ressonantes, $\Delta\varepsilon$, obtida do cálculo da estrutura eletrônica, para várias espessuras de barreiras internas. Conhecendo $\Delta\varepsilon$ calculamos o tempo de tunelamento dos buracos usando a expressão $\tau = \pi\hbar/\Delta\varepsilon$ [78], encontrando então que a barreira interna deve ter uma espessura menor que 50 Å para que o tempo de tunelamento dos buracos seja menor que 300 ps.

Capítulo 5

Semicondutores Magnéticos Diluídos

Outros materiais semicondutores que têm despertado bastante interesse nos últimos anos, devido às propriedades magnéticas que eles apresentam, são os semicondutores magnéticos diluídos ou semicondutores semimagnéticos. Os compostos mais estudados são obtidos adicionando-se manganês aos compostos semicondutores do tipo II-VI. Neste capítulo faremos uma breve discussão dos aspectos básicos da incorporação de átomos de Mn nesses compostos¹, considerando também os efeitos de tensão (*strain*). No próximo capítulo estudaremos os efeitos dos campos elétricos e magnéticos aplicados a heteroestruturas formadas por esses materiais.

5.1 Estrutura Cristalina e Eletrônica

Semicondutores magnéticos diluídos são ligas semicondutoras em que parte de seus sítios é ocupada por íons magnéticos de metais de transição ou terras raras. Os mais estudados são aqueles da forma $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$, onde uma fração dos átomos do grupo II é substituída, aleatoriamente, por átomos de Mn. A principal característica desses materiais é que, na presença de um campo magnético externo, a interação de troca (exchange) entre os íons magnéticos localizados e os portadores da banda, produz

¹Para uma discussão mais completa ver as referências [79, 80].

um efeito Zeeman extremamente grande quando comparado com os semicondutores convencionais.

As ligas ternárias da forma $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ se cristalizam ou na estrutura blenda de zinco ou na estrutura wurtzita, dependendo dos elementos que compõem a liga e da fração molar de Mn [80,81]. Por exemplo, o $Cd_{1-x}Mn_xTe$ forma uma liga ternária com estrutura blenda de zinco para x até 0,77². Apesar das diferenças de simetria das duas estruturas, elas são formadas por ligações tetraédricas (sp^3) envolvendo os dois elétrons de valência s dos elementos do grupo II com os seis elétrons de valência p dos elementos do grupo VI. O Mn é um metal de transição com dois elétrons de valência no orbital $4s$. Ele difere dos elementos do grupo II pelo fato de sua camada $3d$ ser semi-preenchida (sua configuração eletrônica é $[Ar]3d^54s^2$). Dessa forma, ele pode contribuir com seus elétrons $4s^2$ para a hibridização sp^3 , podendo substituir os elementos do grupo II nas estruturas tetraédricas $A^{II}B^{VI}$. O custo para se adicionar mais um elétron à camada d do átomo de Mn é, devido à interação coulombiana, de 6 a 7 eV [83]. Desse ponto de vista os átomos de Mn lembram os átomos do grupo II, que possuem as camadas internas completamente preenchidas. Por exemplo, a configuração eletrônica do Cd é $[Kr]4d^{10}5s^2$.

A estrutura de banda das ligas $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ é qualitativamente igual àquela dos compostos $A^{II}B^{VI}$ que possuem a mesma estrutura cristalina. Em particular, elas possuem gaps diretos com os extremos das bandas ocorrendo no ponto Γ . Quantitativamente, a estrutura de banda do $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ se transforma de uma maneira suave do composto $A^{II}B^{VI}$ para o composto tetraédrico MnB^{VI} . Essa evolução não é estritamente linear, no entanto, a variação linear é uma excelente aproximação para uma descrição quantitativa da dependência dos parâmetros da maioria dos compostos com a concentração de Mn. Como uma exceção dessa regra podemos citar o gap de energia do

²Sob certas condições é possível crescer a liga MnTe na estrutura blenda de zinco [82].

$\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$, que apresenta um arco (*bowing*) para pequenos valores de concentração x [84].

Na ausência de um campo magnético externo, a principal diferença entre os sistemas ternários II-VI, sem a presença de íons magnéticos, como, por exemplo, o $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, e os compostos $\text{A}_{1-x}^{\text{II}}\text{Mn}_x\text{B}^{\text{VI}}$, é que estes possuem a camada $3d$ semi-preenchida. Como consequência, podem ocorrer transições eletrônicas dentro da camada $3d$, envolvendo a troca de spin dos elétrons. Essas transições, que ocorrem com energias de aproximadamente 2,2 eV [85], dominam as propriedades ópticas desses compostos para concentrações de Mn suficientemente altas ($x > 0,1$), sendo também responsáveis por sua cor vermelha.

5.2 Propriedades Magnéticas

As peculiaridades dos semicondutores magnéticos diluídos têm sua origem na camada incompleta d dos elementos de transição. Os elétrons nessa camada estão fortemente ligados aos íons de Mn, produzindo momentos magnéticos localizados que são responsáveis pelas propriedades magnéticas desses compostos.

A principal característica dos semicondutores magnéticos diluídos é que, na presença de um campo magnético externo, suas propriedades eletrônicas são fortemente influenciadas pela interação de troca entre os elétrons d e os portadores livres das bandas, criados, por exemplo, por excitações ópticas. Isto ocorre porque, além da quantização de Landau, o campo magnético orienta os momentos magnéticos localizados, criando uma componente diferente de zero para a componente dos spins de Mn ao longo da direção do campo. Veremos a seguir como os efeitos dessa interação de troca sobre os estados eletrônicos podem ser analisados dentro da estrutura do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

5.2.1 Descrição Teórica dos Estados Eletrônicos

Nos semicondutores magnéticos diluídos podemos distinguir dois conjuntos de estados eletrônicos:

- Estados localizados em torno dos íons de Mn com origem nos orbitais semi-preenchidos $4d^5$, produzindo momentos magnéticos localizados. A partir das regras de Hund obtemos que o estado fundamental possui momento magnético $L = 0$ e spin total $S = 5/2$.
- Estados estendidos, produzindo as bandas de energia, que se originam das camadas mais externas dos átomos que compõem o cristal. Por exemplo, para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ temos: $5s^2$ (Cd), $4s^2$ (Mn) e $5p^4$ (Te).

Como uma fração dos átomos de Cd é substituída aleatoriamente por átomos de Mn, os estados eletrônicos nesses compostos podem também ser obtidos dentro da aproximação de cristal virtual (ver seção 2.1). Dessa forma, a periodicidade da rede é restabelecida, e os estados eletrônicos podem ser descritos em termos de estados de Bloch. Na prática, a aproximação de cristal virtual consiste em descrever a estrutura eletrônica de ligas ternárias em termos do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, desenvolvido para cristais puros, com os parâmetros do composto passando a depender da composição.

Na presença de um campo magnético, os estados eletrônicos em semicondutores magnéticos diluídos são obtidos adicionando-se a interação de troca H_{ex} ao hamiltoniano mostrado na tabela 2.1. Esta interação entre os elétrons 3d e os portadores das bandas é descrita, na vizinhança do ponto Γ , pelo hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{ex} = \sum_{\vec{R}_i} J(\vec{r} - \vec{R}_i) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma},$$

onde $\vec{S}_i$ é o operador de spin do íon magnético localizado no sítio $\vec{R}_i$ ($S_i = 5/2$), $\vec{\sigma}$ é o operador de spin dos portadores e $J(\vec{r} - \vec{R}_i)$ é a integral de troca. Como os portadores

possuem funções de onda espacialmente estendidas, eles interagem simultaneamente com um grande número de íons de Mn. Isto nos permite usar a aproximação de campo médio, isto é, os operadores de spin dos íons de Mn são trocados por sua média térmica $\langle \vec{S} \rangle$. Na ausência de um campo magnético externo $\langle \vec{S} \rangle = 0$. Quando um campo magnético $\vec{B}$ é aplicado ao semiconductor, a média térmica de $\vec{S}$ terá uma componente diferente de zero na direção do campo, $\langle \vec{S}_B \rangle$. Além disso, na aproximação de cristal virtual, a soma sobre os íons magnéticos é trocada pela soma sobre os sítios da sub-rede dos cátions multiplicada pela fração molar dos íons de Mn, logo,

$$H_{ex} = x \langle \vec{S}_B \rangle \cdot \vec{\sigma} \sum_{\vec{R}} J(\vec{r} - \vec{R}), \quad (5.1)$$

onde a soma em $\vec{R}$ é sobre os sítios da sub-rede dos cátions.

Não existe ainda uma compreensão geral das propriedades magnéticas dos semicondutores magnéticos diluídos. Sua descrição analítica é limitada a alguns casos limites, como, por exemplo, para baixas concentrações de Mn [80]. Nesse limite, onde os momentos magnéticos dos íons de Mn não interagem, a média térmica dos operadores de spin é dada por

$$\langle S_B \rangle = -\frac{5}{2} \mathcal{B}_{5/2} \left(\frac{\frac{5}{2} g_{Mn} \mu_B B}{k_B T} \right), \quad (5.2)$$

onde $g_{Mn} = 2$ é o fator giromagnético do Mn, μ_B o magneton de Bohr, k_B é a constante de Boltzman e $\mathcal{B}_{5/2}$ a função de Brillouin para um spin total $S = 5/2$,

$$\mathcal{B}_S(\eta) = \frac{2S+1}{2S} \cotg \left(\frac{2S+1}{2S} \eta \right) - \frac{1}{2S} \cotg \left(\frac{1}{2S} \eta \right).$$

Para valores arbitrários de x e T , Gaj *et al.* [86] propuseram uma formulação fenomenológica que é baseada no fato de que existe uma semelhança entre a magnetização observada experimentalmente e a função de Brillouin que descreve a magnetização no caso de momentos magnéticos não interagentes. Neste modelo, a componente da média térmica dos spins de Mn na direção do campo aplicado é descrita pela função

de Brillouin ajustando o valor de saturação e introduzindo uma temperatura efetiva,

$$S = 5/2 \rightarrow S_0 = S_0(x) \quad ; \quad T \rightarrow T_{ef} = T + T_0(x).$$

Dessa forma, a média térmica dos operadores de spin dos íons de Mn é dada por

$$\langle S_B \rangle = -S_0 \mathcal{B}_{5/2} \left(\frac{\frac{5}{2} g_{Mn} \mu_B B}{k_B T_{ef}} \right). \quad (5.3)$$

A utilidade da equação (5.3) encontra-se no fato de que os parâmetros S_0 e T_0 podem ser tabelados como uma função da fração molar de Mn para cada semicondutor magnético diluído [86]. Os valores de saturação S_0 são menores que 5/2 e diminuem com o aumento da concentração dos íons magnéticos, sugerindo que uma fração dos íons de Mn formam pares e/ou complexos com ordenamento antiferromagnético que reduz o momento magnético final. A introdução de um spin efetivo S_0 , que leva em consideração o acoplamento antiferromagnético entre os íons de Mn, pode também ser expresso de forma equivalente como uma concentração efetiva de íons de manganês que contribuem para o momento magnético total,

$$x_{ef} \frac{5}{2} = x S_0.$$

Os íons restantes se alinham na direção do campo magnético aplicado de acordo com a função de Brillouin com uma T_{ef} maior que a temperatura T , o que também reflete uma interação antiferromagnética entre os íons; T_0 é positivo e aumenta com a concentração. Resultados experimentais e teóricos evidenciam essas interações antiferromagnéticas entre os íons magnéticos [87–90].

5.2.2 A Interação de Troca e o Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$

A principal vantagem da equação (5.1) é que ela possui a periodicidade da rede. Isto nos permite escrever o hamiltoniano de troca usando as mesmas funções de base, equação (2.9), em que foi escrito o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$, tabela 2.1. Para

isso, vamos considerar o campo magnético aplicado em uma direção qualquer, isto é, $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$. Fazendo uma rotação do sistema de coordenadas no plano $x\hat{o}y$, como mostrado na figura 5.1, usando a transformação (4.1), teremos,

$$\vec{B} = B \cos \phi \hat{z} + B \sin \phi \hat{y}'.$$

Neste novo sistema de coordenadas o campo magnético possui apenas duas componentes, uma ao longo do eixo z e outra ao longo do eixo y' .

Figura 5.1: Rotação do sistema de coordenadas no plano $x\hat{o}y$, isto é, $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z)$. Neste novo sistema de coordenadas o campo magnético possui apenas duas componentes, uma ao longo do eixo z e outra ao longo do eixo y' .

Usando as funções de base mostradas na equação (2.9), o hamiltoniano de troca (5.1) toma a forma

$$\mathbf{H}_{ex} = \begin{bmatrix} 3A \cos \phi & 0 & 0 & -3A\xi^* & 0 & 0 \\ 0 & 3B \cos \phi & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}B\xi^* \\ 0 & 0 & -B \cos \phi & 0 & \sqrt{3}B\xi^* & 2B\xi \\ -3A\xi & 0 & 0 & -3A \cos \phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}B\xi & 0 & -3B \cos \phi & 0 \\ 0 & \sqrt{3}B\xi & 2B\xi^* & 0 & 0 & B \cos \phi \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

onde $\xi = e^{i(\theta+\pi/2)} \sin \phi$, com os ângulos θ e ϕ definidos na figura 5.1. Temos ainda que

$$A = -\frac{1}{6}N_0\alpha x \langle S_B \rangle \quad ; \quad B = -\frac{1}{6}N_0\beta x \langle S_B \rangle \quad (5.5)$$

onde $\alpha = \langle S | J(\vec{r}) | S \rangle$ e $\beta = \langle X | J(\vec{r}) | X \rangle = \langle Y | J(\vec{r}) | Y \rangle = \langle Z | J(\vec{r}) | Z \rangle$ são as integrais de troca [91] e N_0 é o número de células unitárias por unidade de volume.

Podemos verificar que este hamiltoniano torna-se diagonal no caso em que o campo magnético é aplicado ao longo da direção $\hat{z}$ [4], ou seja, somente os elementos da diagonal principal serão diferentes de zero. Para um campo magnético aplicado no plano $x\hat{o}y$, todos os elementos da diagonal principal serão iguais a zero, enquanto que os demais elementos serão não nulos [36]. Quando um campo magnético for aplicado em uma direção arbitrária todos os elementos do hamiltoniano (5.4) serão diferentes de zero.

5.3 Heteroestruturas e Efeitos de Tensão

Outra importante característica dos semicondutores magnéticos diluídos é a possibilidade de se crescer heteroestruturas de alta qualidade. Entretanto, esses materiais apresentam uma forte dependência do gap de energia e do parâmetro de rede com a concentração do íon magnético. Dessa forma, uma propriedade inerente dessas heteroestruturas é que elas contém camadas tensionadas, modificando as discontinuidades das bandas nas interfaces e levantando a degenerescência dos estados de buraco leve e pesado no ponto Γ . Por outro lado, quando o cristal sofre uma deformação uniforme ele mantém sua propriedade de ser periódico, de tal forma que o teorema de Bloch pode ainda ser aplicado.

Faremos aqui apenas uma breve descrição do modelo de Pikus-Bir [92] para o caso de cristais cúbicos com tensão homogênea biaxial. Esta descrição é válida para camadas semicondutoras tensionadas pseudomórficas crescidas ao longo da direção

(001), resultando em uma interface caracterizada por uma constante de rede no plano que permanece a mesma através da camada tensionada.

As tensões homogêneas podem ser divididas em duas contribuições: a *isotrópica* ou *hidrostática*, que produz uma mudança no volume sem alterar a simetria do cristal e a *anisotrópica* ou de *cisalhamento*, que reduz a simetria presente no cristal não tensionado. A dependência dos estados eletrônicos com a tensão é caracterizada pelos potenciais de deformação, isto é, pela variação de energia desses estados por unidade de deformação.

O vetor posição $\vec{r}$ para um dado átomo da rede não deformada está relacionado com o vetor posição $\vec{r}'$ para uma rede deformada pela relação,

$$x'_i = x_i + \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} x_j ; i = 1, 2, 3 \quad (5.6)$$

onde x'_i e x_i são as componentes dos vetores $\vec{r}'$ e $\vec{r}$, respectivamente, e $\varepsilon_{ij} = (x'_i - x_i)/x_j$ são as componentes do tensor das deformações. Da equação (5.6) pode ser verificado que o traço da matriz $\bar{\varepsilon}$ é igual à razão da variação do volume do cristal sob uma deformação uniforme por unidade de volume, isto é,

$$\frac{\delta V}{V} = Tr(\bar{\varepsilon}) = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}.$$

As componentes do tensor $\bar{\varepsilon}$ não são todas independentes e, para uma rede cúbica com constante de rede $a(x)$ crescida sobre uma camada com constante de rede a_0 (deformação biaxial), teremos

$$\varepsilon_{\parallel} \equiv \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a(x)}{a(x)} ; \quad \varepsilon_{\perp} \equiv \varepsilon_{zz} ; \quad \varepsilon_{ij} = 0, i \neq j.$$

O tensor das deformações $\bar{\varepsilon}$ está relacionado com o tensor das tensões $\bar{\tau}$ pela lei de

Hooke,

$$\begin{bmatrix} \tau_{xx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{zz} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

com C_{ij} sendo as componentes do tensor elástico. Da lei de Hooke vemos que, na ausência de uma tensão externa aplicada ao longo da direção z ($\tau_{zz} = 0$), teremos,

$$\varepsilon_{\perp} \equiv \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{\parallel}.$$

Das relações anteriores vemos que um cristal uniformemente deformado é ainda periódico, exceto que o potencial cristalino $V(\vec{r})$ deve ser trocado pelo novo potencial $V_{\varepsilon}(\vec{r}')$. Assim, a equação de Schrödinger no sistema de coordenadas do cristal deformado $\vec{r}'$ toma a forma (ver equação (2.3))

$$\left[H(\vec{k}) + H^{\varepsilon} \right] u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}(\vec{r}) = \left[H(\vec{k}) + \sum_{\alpha,\beta} \left(D^{\alpha\beta} - 2 \frac{\hbar}{m_0} k_{\alpha} p_{\beta} \right) \varepsilon_{\alpha\beta} \right] u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}(\vec{r}) = \epsilon u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}(\vec{r}),$$

onde $u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}(\vec{r}) = u_{\nu\vec{k}'}(\vec{r}')$ é a parte periódica da função de Bloch para o cristal deformado

e

$$D^{\alpha\beta} = -\frac{1}{m_0} p_{\alpha} p_{\beta} + \left. \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right|_{\varepsilon_{\alpha\beta} \rightarrow 0}.$$

Tratando H^{ε} em primeira ordem de teoria de perturbação pode-se mostrar que os únicos elementos diferentes de zero são

$$\begin{cases} H_{11}^{\varepsilon} = H_{44}^{\varepsilon} = H_{el}^{\varepsilon} = a_c Tr(\bar{\varepsilon}) \\ H_{22}^{\varepsilon} = H_{55}^{\varepsilon} = H_{hh}^{\varepsilon} = a_v Tr(\bar{\varepsilon}) + \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \\ H_{33}^{\varepsilon} = H_{66}^{\varepsilon} = H_{lh}^{\varepsilon} = a_v Tr(\bar{\varepsilon}) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \end{cases} \quad (5.7)$$

onde $a = a_c - a_v$ é o potencial de deformação hidrostático e b o potencial de deformação de cisalhamento.

Da equação (5.7) vemos que $\mathbf{H}^{\varepsilon}$ é diagonal, e seu efeito é modificar o gap de energia dos cristais tensionados e levantar a degenerescência entre o buraco leve e o

buraco pesado no ponto Γ , sem levantar as degenerescências de spin. Esse hamiltoniano deve então ser adicionado ao hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ mostrado na tabela 2.1. Reescrevendo a equação (5.7) em termos das componentes do tensor elástico C_{ij} teremos,

$$\begin{cases} H_{el}^\varepsilon = 2a_c \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} \\ H_{hh}^\varepsilon = 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} + \frac{b}{2} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} \\ H_{lh}^\varepsilon = 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} - \frac{b}{2} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} \end{cases} \quad (5.8)$$

Um conceito importante em heteroestruturas tensionadas é o da *espessura crítica* h_c . Ela aparece devido à competição entre a energia de deformação e a energia química. Para camadas com espessuras menores que h_c o estado de energia mínima é determinado pela deformação. Acima de h_c o estado de energia mínima é alcançado através da formação de deslocamentos. A espessura crítica depende da diferença nos parâmetros de rede de cada camada, das constantes elásticas dos materiais e das propriedades das deslocamentos que são formadas em um particular material. Uma expressão aproximada para h_c , obtida por considerações de minimização de energia, é $h_c \approx a(x)/2\varepsilon_{\parallel}$ [2]. Usando os parâmetros mostrados no apêndice A obtemos, para o $\text{Cd}_{0,85}\text{Mn}_{0,15}\text{Te}$ crescido sobre o CdTe , que $h_c \approx 950$ Å. Entretanto, devemos lembrar que o modelo de Pikus-Bir descrito aqui é válido para um cristal com simetria cúbica crescido ao longo da direção (001). Além disso, a deformação deve ser pequena, com $\varepsilon_{\parallel}$ menor que 2% [70], de maneira que o tamanho e a forma da célula unitária não mude significativamente. Neste caso $\varepsilon_{\parallel} \approx 0,3\%$.

No próximo capítulo veremos os efeitos do hamiltoniano de troca, equação (5.4), sobre os estados eletrônicos de heteroestruturas semicondutoras tensionadas de $\text{CdTe}/\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ na presença de campos elétricos e magnéticos.

Capítulo 6

Estrutura Eletrônica em Poços Quânticos de CdTe/CdMnTe

Nos últimos anos as heteroestruturas de semicondutores magnéticos diluídos têm sido bastante estudadas devido às suas propriedades magnéticas peculiares. Como vimos no capítulo anterior, essas propriedades magnéticas têm sua origem na interação de troca entre os íons magnéticos localizados e os portadores das bandas, resultando em um efeito Zeeman gigante. Além disso, a grande dependência do parâmetro de rede desses materiais com a concentração do íons magnéticos resulta em heteroestruturas com camadas tensionadas, dando origem a novas propriedades.

Como nos materiais III-V, as propriedades ópticas de interesse nos materiais II-VI ocorrem na vizinhança do ponto Γ . Assim, para que possamos compreender a maioria dos efeitos envolvendo a interação de troca é suficiente considerarmos apenas como esta interação altera o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução. Além disso, para semicondutores com gap largo, o efeito de um campo magnético aplicado ao sistema é muito maior sobre a interação de troca $sp - d$ do que sobre os níveis de Landau e/ou levantamento das degenerescências de spin dos níveis de Landau dadas pela teoria de banda sp ordinária. Isto ocorre porque, nesses materiais as massas efetivas são grandes e o fator giromagnético da banda é da ordem da unidade. Dessa forma, em uma primeira aproximação, os termos envolvendo a energia ciclotrônica

($\hbar\omega_c^* = \hbar eB/m^*$) e o levantamento das degenerescências de spin ($\pm \frac{1}{2}g\mu_B B$) podem ser desprezados [80, 93].

Vamos a seguir investigar as propriedades eletrônicas de elétrons e buracos criados por excitação óptica em duas heteroestruturas de CdTe/CdMnTe. Primeiro consideraremos um poço quântico duplo assimétrico, onde estudaremos o tunelamento ressonante de elétrons, buracos e éxcitons na presença de campos elétricos e magnéticos uniformes aplicados na direção de crescimento. Depois consideraremos um poço quântico simples, onde estudaremos a anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado.

6.1 Tunelamento Ressonante em Poços Quânticos Duplos

Vimos no capítulo 4 que o acoplamento entre os estados de um poço quântico duplo depende fortemente da largura e da altura da barreira interna. Além disso, esse acoplamento pode ser alterado aplicando-se campos elétricos e magnéticos à heteroestrutura. Como veremos posteriormente, se a barreira interna é composta de um semicondutor magnético diluído, sua altura poderá ser ajustada externamente devido à interação de troca $\mathbf{H}_{ex}$, equação (5.4), aplicando-se um campo magnético. Dessa forma, poços quânticos duplos com barreiras de semicondutores magnéticos diluídos nos fornece um novo meio de investigar o tunelamento de portadores através de uma barreira de potencial.

6.1.1 Considerações Iniciais

O tunelamento de portadores entre poços quânticos adjacentes através de uma barreira de potencial em heteroestruturas semicondutoras é uma área de ativas pesquisas [28, 78, 94]. Como mencionado na introdução, uma das questões básicas quan-

do se estuda o tunelamento ressonante é saber se são os elétrons ou buracos que tunelam independentemente ou se é o par elétron-buraco (éxciton) que participa do processo. Resultados experimentais em heteroestruturas III-V foram inicialmente interpretados como o tunelamento de portadores livres [20, 21]. Posteriormente, foi verificado que a descrição mais correta seria uma transferência de um éxciton direto (elétrons e buracos localizados em um mesmo poço) para um éxciton indireto (elétrons e buracos localizados em poços diferentes) [18, 22–25].

Por outro lado, em heteroestruturas II-VI o tunelamento dos portadores é mais influenciado pelos efeitos excitônicos, uma vez que as energias de ligação são maiores que em heteroestruturas III-V (para o CdTe a energia de ligação excitônica é $\varepsilon_b^{bulk} \approx 13,6$ meV e para o GaAs é $\varepsilon_b^{bulk} \approx 4,4$ meV). Resultados experimentais em poços quânticos duplos assimétricos de CdTe/CdMnTe, com um dos poços possuindo uma pequena concentração de Mn, têm apresentado evidências de tunelamento de éxcitons, isto é, do tunelamento, ao mesmo tempo, de um elétron e um buraco correlacionados pela interação coulombiana. Neste caso a ressonância é induzida por um campo magnético através do efeito Zeeman gigante presente nessas heteroestruturas. Foi observado que esse tunelamento pode ocorrer de duas formas: (i) entre um estado excitônico 1s localizado em um poço e um estado excitônico 2s localizado no poço adjacente ou (ii) diretamente de um estado 1s para outro 1s com a emissão de um fônon longitudinal óptico [26–30]. Posteriormente, Hieke *et al.* [31] verificaram que o tunelamento não ressonante de portadores ou éxcitons pode ocorrer mesmo quando esses mecanismos não estão presentes. Neste caso o tunelamento ocorre assistido por fônons acústicos ou espalhamento por impurezas.

Desses resultados vemos que o tunelamento ressonante de éxcitons, isto é, o tunelamento ressonante de elétrons e buracos ocorrendo simultaneamente, não foi ainda estudado. O problema é que, em um poço quântico duplo assimétrico, quando tentamos

colocar em ressonância os dois primeiros estados eletrônicos, cada um localizado em um poço, aplicando um campo elétrico na direção de crescimento, necessariamente estaremos afastando os dois primeiros estados de buraco pesado dessa condição e vice-versa. Dessa forma, aplicando-se um campo elétrico à heteroestrutura não poderemos colocar os primeiros estados de elétrons e buracos em ressonância simultaneamente.

Em um poço quântico duplo assimétrico, com um dos poços contendo uma pequena concentração de íons magnéticos, quando um campo magnético é aplicado na direção de crescimento o acoplamento entre os estados de cada poço é alterado. Isso ocorre devido às mudanças na altura da barreira interna e na diferença entre os níveis de energia dos estados envolvidos. Entretanto, o efeito Zeeman sobre os estados de buraco pesado é maior que para os elétrons (por um fator 4 no CdMnTe). Logo, a ressonância entre os estados de buraco pesado ocorrem para menores valores de campo magnético do que para os estados eletrônicos.

Dessa forma, aplicando um campo elétrico ou um campo magnético ao longo da direção de crescimento não conseguiremos colocar os estados de elétrons e de buracos pesados em ressonância, simultaneamente. Entretanto, sabemos que, quando aplicamos um campo elétrico podemos aproximar os estados eletrônicos da condição de ressonância e, neste caso, estaremos afastando os buracos dessa condição. Por outro lado, o efeito Zeeman sobre os estados de buraco é quatro vezes maior que para os elétrons. Logo, mostraremos que, se aplicarmos os campos elétrico e magnético ao mesmo tempo poderemos alcançar a condição de ressonância simultânea.

6.1.2 Hamiltoniano

Para calcularmos a estrutura eletrônica do sistema proposto, quando um campo magnético é aplicado ao longo da direção de crescimento, devemos resolver a equação

de massa efetiva (2.32) com o hamiltoniano $\mathbf{H}$ tendo a forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}} + \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}^\epsilon, \quad (6.1)$$

onde $\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}}$ é o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ obtido a partir da tabela 2.1, $\mathbf{H}_{ex}$ é o hamiltoniano de troca obtido a partir da equação (5.4) e $\mathbf{H}^\epsilon$ é a contribuição devido aos efeitos de tensão, sendo dado pela equação (5.8). Não incluiremos em nosso cálculo a interação coulombiana entre os pares elétron-buraco. Entretanto, usando valores conhecidos da literatura, vamos subtrair as energias de ligação excitônicas no cálculo das energias de transição.

Vamos inicialmente escrever o hamiltoniano $\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}}$ quando um campo magnético é aplicado ao longo da direção de crescimento. Usando o *gauge* de Landau (apêndice E) o sistema mantém a simetria de translação ao longo do eixo x , de forma que a função envelope (2.30) terá a forma

$$F_{\nu \vec{k}}^\alpha(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(i\kappa_x x) \phi_{n\kappa_x}(y) F_{\nu, m}^\alpha(z), \quad (6.2)$$

onde L_x é o comprimento da heteroestrutura na direção do eixo x e κ_x é um bom número quântico ($k_x \rightarrow \kappa_x - y/\lambda_c^2$). As autofunções $\phi_{n, \kappa_x}(y) = \phi_n(y - \lambda_c^2 \kappa_x)$ são obtidas a partir das autofunções do oscilador harmônico unidimensional (apêndice E).

Dessa forma, o hamiltoniano $\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}}$, tabela 2.1, torna-se

$$\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}} = \begin{bmatrix} D_c^+ & A & -A^*/\sqrt{3} & 0 & 0 & -G \\ A^* & D_h^+ & C & 0 & 0 & S_+^* \\ -A/\sqrt{3} & C^* & D_l^- & G & S_-^* & 0 \\ 0 & 0 & G & D_c^- & A^* & -A/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & S_- & A & D_h^- & C^* \\ -G & S_+ & 0 & -A^*/\sqrt{3} & C & D_l^+ \end{bmatrix} \begin{matrix} |e \uparrow\rangle \\ |h \uparrow\rangle \\ |l \downarrow\rangle \\ |e \downarrow\rangle \\ |h \downarrow\rangle \\ |l \uparrow\rangle \end{matrix} \quad (6.3)$$

onde,

$$D_c^\pm = Eg + \hbar\omega_c \left[(2F+1) \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \pm \left(N_1 + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{\hbar^2}{2m_0} (2F+1) k_z^2$$

$$\begin{aligned}
D_h^\pm &= -\hbar\omega_c \left[(\gamma_1 + \gamma_2) \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{3}{2} \left(\kappa + \frac{9}{4}q \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) k_z^2 \\
D_l^\pm &= -\hbar\omega_c \left[(\gamma_1 - \gamma_2) \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \left(\kappa + \frac{1}{4}q \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) k_z^2 \\
A &= \frac{P}{\lambda_c} a^\dagger \\
C &= \sqrt{\frac{3}{2}} \hbar\omega_c [(\gamma_2 + \gamma_3) aa + (\gamma_2 - \gamma_3) a^\dagger a^\dagger] \\
G &= \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z \\
S\pm &= \pm \sqrt{6} \lambda_c \hbar\omega_c a^\dagger \gamma_3 k_z
\end{aligned}$$

com $\omega_c = eB/m_0$ sendo a frequência ciclotrônica e a , $a^\dagger$ e $\hat{n}$ estão definidos no apêndice E.

Para encontrarmos um vetor coluna que seja um autovetor do hamiltoniano (6.3) temos que considerar a aproximação axial ou cilíndrica [95, 96], que consiste em trocar γ_2 e γ_3 no termo C por $\bar{\gamma} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$. Com esta aproximação a anisotropia no plano $x\hat{o}y$ é desprezada. A partir do hamiltoniano (6.3) obtemos, por inspeção, que a função envelope (6.2), quando escrita na forma

$$\mathbf{F}_{l,m,k_x}^\alpha(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(ik_x x) \begin{bmatrix} \phi_l(y - \lambda_c^2 k_x) F_m^1(z) \\ \phi_{l-1}(y - \lambda_c^2 k_x) F_m^2(z) \\ \phi_{l+1}(y - \lambda_c^2 k_x) F_m^3(z) \\ \phi_{l+1}(y - \lambda_c^2 k_x) F_m^4(z) \\ \phi_{l+2}(y - \lambda_c^2 k_x) F_m^5(z) \\ \phi_l(y - \lambda_c^2 k_x) F_m^6(z) \end{bmatrix}, \quad (6.4)$$

torna-se um autovetor de $\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}}$, onde $l = -2, -1, 0, 1, \dots$. As componentes $\phi_n(y - \lambda_c^2 k_x)$ com índices negativos devem ser tomadas como sendo zero.

Para um campo magnético aplicado na direção z , o hamiltoniano de troca $\mathbf{H}_{ex}$

é obtido da equação (5.4) fazendo-se o ângulo $\phi = 0$, o que resulta em

$$\mathbf{H}_{ex} = \begin{bmatrix} 3A & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3B & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -3B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B \end{bmatrix}, \quad (6.5)$$

com A e B definidos na equação (5.5). Portanto, $\mathbf{H}_{ex}$ torna-se diagonal, conseqüentemente, o seu efeito é de apenas renormalizar a descontinuidade das bandas nas interfaces, levantando também as degenerescências de spin.

Devemos salientar ainda que, como as contribuições para $\mathbf{H}$ devido à interação de troca e aos efeitos de tensão não dependem de $\vec{r}$ e $\vec{k}$, a forma da função envelope (6.4) não se modifica.

6.1.3 Resultados

A heteroestrutura que investigamos é mostrada na figura 6.1. Esta consiste de um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, crescido sobre um substrato de InSb ($a_0 = 6.4794 \text{ \AA}$), com as seguintes características: poço esquerdo de CdTe (não magnético) com 40 Å de largura, poço direito de Cd_{0.96}Mn_{0.04}Te (semimagnético) com 80 Å de largura e barreira interna de 60 Å. A concentração de Mn nas barreiras (interna e externas) é de 14%. Veremos posteriormente que a presença de uma pequena concentração de íons magnéticos em um dos poços é de *fundamental* importância para alcançarmos a condição de tunelamento ressonante, uma vez que os efeitos magnéticos, devido à interação de troca $sp-d$, são intensificados sobre os níveis de energia localizados nesse poço.

As linhas contínuas mostram o potencial para campo magnético nulo e as linhas tracejadas para um campo magnético igual a 10 T (o campo elétrico é igual a zero). Como o substrato é de InSb, tanto os poços como as barreiras tornam-se

Figura 6.1: Poço quântico duplo assimétrico de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, crescido sobre um substrato de InSb ($a_0 = 6.4794 \text{ Å}$); poço esquerdo de CdTe (não magnético) com 40 Å de largura, poço direito de Cd_{0.96}Mn_{0.04}Te (semimagnético) com 80 Å de largura e barreira interna de 60 Å. A concentração de Mn nas barreiras (interna e externas) é de 14%. As linhas contínuas mostram o potencial para campo magnético nulo e as linhas tracejadas para um campo magnético igual a 10 T.

tensionados, levantando as degenerescências entre as bandas de buraco leve e buraco pesado. As barreiras, como possuem um parâmetro de rede menor que o do substrato, sofrem uma deformação de distensão, enquanto os poços (com parâmetro de rede maior que o do substrato) sofrem uma deformação de compressão. Quando um campo magnético é aplicado na direção de crescimento, a altura das barreiras e o fundo do poço semimagnético se modificam de acordo com a equação (6.5). As degenerescências de spin são também levantadas. Dessa forma, o acoplamento entre os estados de cada poço é modificando, com o potencial de confinamento passando a depender do spin dos

portadores.

Campo Elétrico Nulo

Vamos inicialmente calcular a estrutura eletrônica na ausência de um campo elétrico externo. Como um dos poços tem uma pequena concentração de íons magnéticos, o efeito Zeeman sobre os estados localizados nesse poço será maior. Dessa forma, para determinados valores de campos magnéticos teremos uma maior interação entre os níveis de energia localizados nos poços adjacentes. Na figura 6.2 mostramos os estados de mais baixa energia localizados em cada poço e os valores esperados das posições desses portadores em função do campo magnético aplicado na direção de crescimento. Seguindo a notação introduzida na seção 4.3 esses estados são $el1_W$, $el1_N$, $hh1_W$ e $hh1_N$. As linhas contínuas correspondem a estados com spin para baixo e as linhas tracejadas a estados com spin para cima. As regiões pontilhadas no gráfico dos valores esperados correspondem às barreiras de potencial de nossa heteroestrutura.

Vemos que, para os estados com spin para baixo, ocorrem ressonâncias tanto para os buracos (1,33 T) como para os elétrons (3,85 T); chamaremos esses campos que produzem as ressonâncias entre os portadores de *campo magnético ressonante* (B_R). Essas ressonâncias ocorrem porque, para esses portadores, o campo magnético (i) diminui a altura da barreira e (ii) diminui a diferença de energia entre os estados envolvidos devido à presença de uma pequena concentração de Mn em um dos poços. Portanto, vemos que o efeito da interação de troca, na presença do campo magnético externo, é de aumentar o acoplamento entre os estados com spin para baixo.

Para os portadores com spin para cima os valores esperados das posições praticamente não são modificados pelo campo magnético, com os portadores permanecendo localizados nos respectivos poços quânticos. Neste caso, o campo magnético aumenta tanto a altura da barreira como a diferença entre os respectivos níveis de energia,

1750-115. SERVICIO DE BIBLIOTECA
ENCUADRADO

Figura 6.2: Efeito Zeeman dos níveis de energia e valores esperados das posições dos portadores em função do campo magnético aplicado; o campo elétrico é igual a zero. As linhas contínuas correspondem a estados com spin para baixo e as linhas tracejadas a estados com spin para cima. As regiões pontilhadas no gráfico dos valores esperados correspondem às barreiras de potencial de nossa heteroestrutura. Vemos que as ressonâncias entre os estados de elétrons e buracos com spin para baixo ocorrem para diferentes valores de campo magnético (1,33 T para os estados de buraco pesado e 3,85 T para os elétrons). Para os estados com spin para cima os portadores permanecem localizados nos respectivos poços.

diminuindo o acoplamento entre esses estados.

Devemos também salientar o fato do campo magnético ressonante ser menor para os estados de buracos do que para os estados eletrônicos. Isto acontece por dois motivos: em primeiro lugar, como a massa efetiva dos buracos é maior que para os elétrons, a diferença de energia entre os estados $hh1_W$ e $hh1_N$ é menor que aquela entre os estados $el1_W$ e $el1_N$. Em segundo lugar, o efeito Zeeman é quatro vezes maior sobre os estados de buracos. Veremos posteriormente que esse fato é de fundamental importância para alcançarmos a condição de tunelamento ressonante simultâneo entre elétrons e buracos.

A partir dos resultados mostrados na figura 6.2 calculamos as energias das transições excitônicas, com polarizações circulares σ^+ e σ^- , entre os estados de elétrons e buracos pesados, figura 6.3. Na polarização σ o campo elétrico da luz é perpendicular ao campo magnético externo, isto é, a luz se propaga ao longo do campo magnético aplicado (configuração Faraday). Uma representação esquemática das transições permitidas na configuração Faraday para um semiconductor magnético diluído com simetria cúbica é mostrada na figura 6.4.

Na figura 6.3 as linhas contínuas correspondem às transições diretas ($el1_W \rightarrow hh1_W$ e $el1_N \rightarrow hh1_N$) e os círculos são resultados experimentais obtidos por Pier *et al.* [29] a uma temperatura de 1,8 K; transições indiretas da forma $el1_W \rightarrow hh1_N$ e $el1_N \rightarrow hh1_W$ não foram observadas. Embora a energia de ligação excitônica dependa do campo magnético consideramo-la constante para obtermos esse ajuste entre nossos resultados e os valores experimentais. Utilizamos para as energias de ligação excitônicas os valores de 27,1 meV para o poço não magnético e 23,5 meV para o poço semimagnético. Esses valores concordam com os resultados obtidos por Hilton *et al.* [97] (teóricos) e por Kuhn *et al.* [98] (experimentais). Os valores de S_0 e T_0 usados foram, respectivamente, 0,73 e 3,9 K para as barreiras e 1,63 e 3,8 K para o poço semimagnético.

Figura 6.3: Energias das transições excitônicas com polarizações circulares σ^+ e σ^- entre os estados de elétrons e buracos pesados ($el1_W \rightarrow hh1_W$ e $el1_N \rightarrow hh1_N$). Os círculos correspondem aos resultados experimentais obtidos por Pier et al. [29] a uma temperatura de 1,8 K; consideramos que as energias excitônicas não variam com o campo magnético e possuem valores iguais a 27,1 meV para o poço não magnético e 23,5 meV para o poço semimagnético. Os valores de S_0 e T_0 usados foram, respectivamente, 0,73 e 3,9 K para as barreiras e 1,63 e 3,8 K para o poço semimagnético.

Figura 6.4: Representação esquemática do levantamento das degenerescências de spin das bandas de condução (Γ_6) e valência (Γ_8) em um semicondutor magnético diluído com simetria cúbica na presença de um campo magnético externo. As transições permitidas na configuração Faraday são representadas por setas.

Campo Elétrico Aplicado

Vamos agora calcular a estrutura eletrônica desse sistema com um campo elétrico aplicado ao longo da direção de crescimento. Nosso objetivo é alcançar a condição de tunelamento ressonante simultânea entre os elétrons e buracos, isto é, para uma mesma intensidade de campo magnético.

Como vimos anteriormente, a ressonância entre os estados de buracos ocorrem para um menor valor de campo magnético, pois a diferença de energia entre os estados $hh1_W$ e $hh1_N$ é menor que aquela entre os estados $el1_W$ e $el1_N$ e, além disso, o efeito Zeeman é quatro vezes maior sobre os estados de buracos. Sabemos também que se aplicarmos um campo elétrico ao sistema, no sentido negativo do eixo z (ver figura 6.1),

poderemos diminuir a diferença de energia entre os estados eletrônicos, aumentando, conseqüentemente, a diferença de energia entre os estados de buracos. Dessa forma, o efeito do campo elétrico será aumentar o valor do campo magnético ressonante entre os estados de buracos, diminuindo o valor desse campo para os estados eletrônicos.

Na figura 6.5 mostramos como varia o campo magnético ressonante para os elétrons e para os buracos em função do campo elétrico aplicado. Podemos observar que o efeito do campo elétrico sobre o campo magnético ressonante é bem maior sobre os estados eletrônicos, o que é uma consequência do fato do efeito Zeeman ser quatro vezes maior sobre os estados de buracos. Além disso, o ponto de cruzamento entre as duas curvas ($F = 1,35$ kV/cm e $B_R = 1,63$ T) nos fornece os campos elétrico e magnético com os quais os dois estados estarão em ressonância simultaneamente.

Para verificarmos que o ponto de cruzamento entre as duas curvas na figura 6.5 realmente corresponde à condição de ressonância simultânea mostramos, na figura 6.6, o efeito Zeeman sobre os níveis de energia e os valores esperados das posições dos portadores em função do campo magnético para um campo elétrico igual 1,35 kV/cm. As linhas contínuas e tracejadas têm o mesmo significado que na figura 6.2. Podemos ver que, neste caso, as ressonâncias entre os estados eletrônicos e de buracos com spin para baixo ocorrem para um mesmo valor de campo magnético ($B_R = 1,63$ T).

As densidades de probabilidade para os elétrons e buracos para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm e campos magnéticos iguais a zero e 1,63 T (campo magnético ressonante) são mostradas na figura 6.7. As linhas contínuas correspondem aos estados fundamentais (inicialmente localizados no poço não magnético) e as linhas tracejadas aos primeiros estados excitados (inicialmente localizados no poço semimagnético). Os gráficos à esquerda são para os elétrons e os gráficos à direita para os buracos.

Como já havíamos antecipado a partir do cálculo dos valores esperados das

Figura 6.5: Campo magnético ressonante para os estados de elétrons e buracos pesados em função do campo elétrico aplicado. O ponto de cruzamento entre as duas curvas ($F = 1,35 \text{ kV/cm}$ e $B_R = 1,63 \text{ T}$) nos fornece os campos elétrico e magnético com os quais os dois estados estarão em ressonância simultaneamente.

posições, vemos que os estados com spin para cima se localizam ainda mais em seus respectivos poços quânticos como resultado do aumento da altura da barreira interna e do aumento na separação dos níveis de energia. Por outro lado, os estados com spin para baixo tornam-se estendidos entre os dois poços. Isto é uma consequência da diminuição da altura da barreira interna e da aproximação entre os níveis de energia provocados pela presença tanto do campo elétrico como do campo magnético.

As energias das transições excitônicas para o campo elétrico igual a $1,35 \text{ kV/cm}$ são mostradas na figura 6.8. Novamente estamos mostrando apenas as transições entre os estados $el1_W \rightarrow hh1_W$ e $el1_N \rightarrow hh1_N$. Diferentemente do apresentado na figura 6.3, o *anticrossing* das energias de transição torna-se evidente no caso em que am-

Figura 6.6: *Efeito Zeeman e posição média dos portadores em função do campo magnético para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm. As linhas contínuas e tracejadas têm o mesmo significado que na figura 6.2. Neste caso vemos que as ressonâncias para os estados de elétron e buraco pesado ocorrem para um mesmo valor de campo magnético ($B_R = 1,63 \text{ T}$).*

Figura 6.7: Densidades de probabilidade para elétrons e buracos pesados para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm e campos magnéticos iguais a zero e 1,63 T (campo magnético ressonante). As linhas contínuas correspondem aos estados fundamentais (localizados no poço não magnético) e as linhas tracejadas aos primeiros estados excitados (localizados no poço magnético).

Figura 6.8: Energias das transições excitônicas com polarizações circulares σ^+ e σ^- entre os estados $el1_W \rightarrow hh1_W$ e $el1_N \rightarrow hh1_N$ para um campo elétrico igual a 1,35 kV/cm. As energias de ligação excitônicas foram consideradas constantes e iguais a 20 meV para as duas transições.

bos, elétrons e buracos, são colocados em ressonância simultaneamente. Na região em torno do campo magnético ressonante as energias excitônicas devem ser aproximadamente iguais para as duas transições. Na realidade, estas energias dependem do campo magnético aplicado, devendo apresentar um mínimo quando ocorre a ressonância simultânea, uma vez que, nesta condição, tanto os estados eletrônicos como os estados dos buracos estão estendidos sobre os dois poços. Tomamos nesse caso as energias de ligação iguais a 20 meV.

6.1.4 Considerações Finais

Calculamos a estrutura eletrônica de um poço quântico duplo assimétrico de

CdTe/CdMnTe com um campo magnético e um campo elétrico aplicados ao longo da direção de crescimento. Vimos que, para um campo elétrico nulo, os estados de elétrons e buracos pesados podem ser colocados em ressonância, mas não simultaneamente. Em seguida calculamos as energias das transições ópticas e mostramos que estas puderam ser ajustadas ao resultado experimental de Pier *et al.* [29] escolhendo, de forma conveniente, as energias excitônicas e os parâmetros S_0 e T_0 . Entretanto, todos os valores considerados estão de acordo com aqueles encontrados na literatura.

Em seguida calculamos a estrutura eletrônica tanto para um campo elétrico como para um campo magnético diferentes de zero. Mostramos que, neste caso, podemos alcançar a condição de tunelamento ressonante simultâneo entre os estados eletrônicos e os estados de buracos, isto é, mostramos a possibilidade de se obter o tunelamento ressonante de éxcitons em um poço quântico duplo de CdTe/CdMnTe com campos elétrico e magnético aplicados ao longo da direção de crescimento.

6.2 Anisotropia do Efeito Zeeman em Poços Quânticos

Outro problema que tem despertado interesse nos semicondutores magnéticos diluídos é o da anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado. Vários trabalhos tem estudado o efeito Zeeman em heteroestruturas com um campo magnético aplicado ou na direção de crescimento ou no plano perpendicular, e os resultados obtidos mostram uma forte anisotropia no efeito Zeeman com a direção do campo magnético [32–36].

Investigamos também essa anisotropia, com os efeitos da interação de troca sendo calculados em função da direção do campo magnético aplicado, equação (5.4). Os efeitos de tensão devido às diferenças nos parâmetros de rede em cada camada são também incluídos. Calculamos a estrutura eletrônica e as transições interbanda para

poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe em função da intensidade e da direção do campo magnético. Consideramos o caso em que a direção do campo varia desde a direção de crescimento até o plano perpendicular a ela. Nossos resultados são comparados com resultados experimentais recentes obtidos para um campo aplicado ao longo da direção de crescimento ou no plano perpendicular. Consideramos também o efeito da largura do poço, da concentração de Mn e o efeito dos níveis de Landau sobre os estados eletrônicos.

6.2.1 Considerações Iniciais

A anisotropia do efeito Zeeman em heteroestruturas tem sido bastante investigada para campos magnéticos aplicados nas direções de crescimento e no plano perpendicular. Entretanto, apenas recentemente foi publicado um trabalho para campos em direções intermediárias, onde é mostrado o resultado para $\phi = 45^\circ$ em um poço quântico de Cd_{0,955}Mn_{0,045}Te/Cd_{0,88}Mg_{0,12}Te [37]. Para esse sistema o poço é de CdMnTe (semimagnético), com as barreiras sendo de CdMgTe (não magnéticas). A conclusão desse trabalho é que a anisotropia ocorre de forma contínua quando passamos de $\phi = 0^\circ$ para $\phi = 90^\circ$. Além disso, o efeito do campo magnético foi considerado apenas no hamiltoniano de troca, tendo sido desprezados todos os outros efeitos de $\vec{B}$ sobre os estados do poço, tais como os níveis de Landau $(l + 1/2) \hbar\omega_c$. Esta hipótese, inicialmente proposta para semicondutores volumétricos (*bulk*) de gap largo [5], tem sido também usada em heteroestruturas. A justificativa dada é que o hamiltoniano de troca tem um efeito dominante sobre a estrutura eletrônica desse sistema. Faremos uma análise da validade dessa hipótese para poços quânticos.

A origem dessa anisotropia é que, para um campo magnético aplicado na direção de crescimento, coincidindo com o eixo de quantização, a interação de troca levanta a degenerescência de spin de forma simétrica entre os estados, sem introduzir

um acoplamento entre esses; neste caso o hamiltoniano de troca (5.4) é diagonal. Por outro lado, quando o campo é aplicado no plano a interação de troca deixa de ser diagonal, introduzindo um acoplamento extra entre os estados da banda de valência. Para ângulos intermediários ainda observamos uma anisotropia no efeito Zeeman devido à componente diferente de zero do campo magnético no plano de confinamento.

6.2.2 Hamiltoniano

Para calcularmos a estrutura eletrônica do sistema proposto, para um campo magnético aplicado em uma direção arbitrária, devemos resolver a equação de massa efetiva (2.32) com o hamiltoniano $\mathbf{H}$ tendo a forma (6.1). Como vimos anteriormente, quando um campo magnético é aplicado ao longo da direção de crescimento ou no plano perpendicular de uma dada heteroestrutura, suas autofunções são separáveis nas variáveis x, y e z (equações (4.3) e (6.2)). Entretanto, para um campo magnético aplicado em uma direção intermediária, isto é, com componentes ao longo da direção de crescimento e no plano perpendicular, nossa equação de autovalores não é mais separável, existindo um acoplamento da direção de crescimento com o plano perpendicular. Dessa forma, não é mais possível obter as autofunções do poço quântico como um produto das autofunções no plano e ao longo da direção de crescimento. A exceção a essa regra é o caso de um poço quântico com confinamento parabólico [99, 100]. Uma consequência desse acoplamento é que transições inicialmente proibidas, entre diferentes níveis de Landau $l_e \rightarrow l_h \neq l_e$, podem agora ser observadas [100, 101].

Uma descrição qualitativa dos estados eletrônicos pode ser dada da seguinte forma: para um campo magnético aplicado no plano $y\hat{o}z$ o potencial vetorial pode ser escrito como $\vec{A} = (zB_y - yB_z, 0, 0)$. Lembrando que a função envelope $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ é obtida a partir da equação de massa efetiva (2.22) fazendo-se a substituição $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla} + e\vec{A}/\hbar$, vemos que ainda existe simetria de translação ao longo da direção x , isto é, teremos que

os níveis de Landau permanecerão degenerados, com suas degenerescências sendo agora governadas pela componente do campo magnético ao longo da direção de crescimento. Neste caso os níveis de Landau não mais se cruzam, aparecendo *gaps* entre diferentes níveis [102, 103]. Isto pode ser verificado a partir da teoria de perturbação quando o termo de acoplamento for pequeno, isto é, quando a energia ciclotrônica correspondente à componente do campo magnético na direção de crescimento for pequena comparada separação intersubbanda dos níveis de energia [100]. Dessa forma, para descrevermos os estados eletrônicos em heteroestruturas na presença de um campo magnético inclinado usando o método descrito anteriormente devemos encontrar alguma aproximação que nos permita desacoplar o movimento dos portadores na direção de crescimento e no plano perpendicular.

Como estamos interessados na anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado temos ainda que incluir o hamiltoniano de troca $\mathbf{H}_{ex}$ dado pela equação (5.4). Inicialmente, seguindo os modelos adotados na literatura, vamos desprezar o efeito do campo magnético em nosso hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$, isto é, consideraremos o efeito do campo magnético apenas no hamiltoniano de troca. Dessa forma, o problema passa novamente a ser separável nas direções de crescimento e no plano. Posteriormente vamos calcular a estrutura eletrônica para o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ completo, com o campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento ou do plano, onde faremos uma comparação entre os dois resultados. Portanto, vamos calcular a estrutura eletrônica com o nosso hamiltoniano tendo a forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\vec{k} \cdot \vec{p}} + \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}^e,$$

onde $\mathbf{H}_{\vec{k} \cdot \vec{p}}$ é o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ obtido a partir da tabela 2.1 sem considerar o efeito do campo magnético, $\mathbf{H}_{ex}$ é o hamiltoniano de troca mostrado na equação (5.4) e $\mathbf{H}^e$ é a contribuição devido aos efeitos de tensão, equação(5.8).

6.2.3 Resultados

A anisotropia do efeito Zeeman foi estudada em dois poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, crescidos sobre um substrato de InSb, com larguras de 72 Å e 100 Å. No primeiro a concentração de Mn nas barreiras é de 7,5% e no segundo de 10,0%. Os parâmetros usados são listados no apêndice A. O campo magnético foi aplicado ao longo do plano $y\hat{o}z$ ($\theta = 0$ na figura 5.1); a pequena anisotropia no plano $x\hat{o}y$, que tem sua origem nas propriedades de simetria da estrutura cristalina, não foi considerada.

A figura 6.9 mostra o perfil de potencial para o poço de 72 Å sem campo magnético. Como o substrato é de InSb, tanto os poços como as barreiras tornam-se tensionadas, levantando as degenerescências entre as bandas de buraco leve (linha tracejada) e buraco pesado.

Quando um campo magnético é aplicado ao longo da direção de crescimento as alturas das barreiras se modificam de acordo com a equação (6.5). Neste caso o hamiltoniano de troca é diagonal e dependente do spin dos portadores, com a degenerescência de spin dos estados sendo levantada de forma simétrica sem acrescentar qualquer acoplamento entre os estados. Por outro lado, para um campo magnético aplicado no plano o hamiltoniano de troca deixa de ser diagonal, introduzindo acoplamentos extras entre os estados da banda de valência.

Na figura 6.10 mostramos o efeito Zeeman para o campo magnético aplicado na direção de crescimento ($B = B\hat{z}$) e no plano ($B = B\hat{y}$). As linhas tracejadas mostram a variação das alturas das barreiras de potencial em função do campo magnético aplicado para os estados de buracos leves e pesados com spin para baixo. Para os elétrons a anisotropia do efeito Zeeman é muito pequena e o levantamento da degenerescência ocorre de forma simétrica. Para os estados de buracos observamos uma

Figura 6.9: Poço quântico usado para investigar a anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado. Nesta figura mostramos um poço quântico de CdTe com 72 Å de largura e barreiras de $\text{Cd}_{0.925}\text{Mn}_{0.075}\text{Te}$. Consideramos o substrato como sendo de InSb, de tal forma que tanto as barreiras como o poço estão tensionados.

forte anisotropia com a direção do campo magnético aplicado. Esta é uma consequência dos acoplamentos entre os estados de buracos leves e pesados, originados pelo hamiltoniano de troca, quando um campo magnético é aplicado no plano. Como vimos anteriormente, equações (5.4) e (6.5), o hamiltoniano de troca é diagonal para um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento, e possui todos os elementos da diagonal principal iguais a zero quando o campo magnético está no plano. Outra consequência desses acoplamentos é que o levantamento das degenerescências não são mais simétricos para um campo magnético no plano, ao contrário do que ocorre quando o campo magnético é aplicado na direção de crescimento. Observamos também que o

efeito Zeeman é fortemente influenciado pela altura das barreiras, que é responsável por parte dessas assimetrias.

Figura 6.10: Efeito Zeeman dos níveis de energia para campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento ($\vec{B} = B\hat{z}$) e no plano perpendicular ($\vec{B} = B\hat{y}$). As linhas tracejadas mostram as alturas das barreiras de potencial para os estados de buracos leves e pesados com spin para baixo. Vemos que o efeito Zeeman para os estados de buracos apresenta uma grande anisotropia com a direção do campo magnético aplicado.

Na figura 6.11 fazemos uma comparação entre as energias de transição dos estados de elétrons e buracos pesados obtidas a partir do resultado mostrado em 6.10 com aqueles obtidos experimentalmente por Jackson *et al.* [33]. Para fazermos esta comparação ajustamos a energia de ligação excitônica para $B = 0$, mantendo-a fixa para todos os valores de campo magnético. A energia excitônica necessária para obtermos o ajuste entre nosso resultado e o resultado experimental foi de 23,8 meV.

Esse valor concorda com os resultados obtidos por Hilton *et al.* [97] (teórico) e por Kuhn *et al.* [98] (experimental). Como veremos posteriormente, o mesmo ajuste não foi conseguido para as transições entre os elétrons e os estados de buracos leves.

Figura 6.11: Comparação entre as energias de transição dos estados de elétrons e buracos pesados obtidas a partir do resultado mostrado em 6.10 com aquelas obtidas experimentalmente por Jackson *et al.* [33]. Consideramos a energia excitônica independente do campo magnético e igual a 23,8 meV.

Na figura 6.12 mostramos o efeito Zeeman sobre os primeiros estados de buraco leve e buraco pesado quando um campo magnético inclinado ($\phi = 30^\circ$ e $\phi = 60^\circ$) é

aplicado ao sistema. Os estados eletrônicos não se modificam quando mudamos a orientação do campo magnético de $\phi = 0$ para $\phi = 90^\circ$ (ver figura 6.10).

Figura 6.12: Efeito Zeeman sobre os primeiros estados de buraco leve e buraco pesado para $\phi = 30^\circ$ e $\phi = 60^\circ$. Vemos que o efeito Zeeman depende de forma complicada do campo magnético, ocorrendo anticrossing entre os estados quando a orientação do campo magnético varia desde $\phi = 0$ até $\phi = 90^\circ$.

Podemos observar desse resultado que, quando o campo magnético possui componentes tanto ao longo da direção de crescimento como no plano surgem acoplamentos entre os estados que são evidenciados pelo fato de não haver cruzamentos entre esses estados (*anticrossing*). Vimos que isto ocorre porque, para um campo magnético inclinado, o hamiltoniano de troca permanece com seus elementos diferentes de zero. Neste caso o efeito Zeeman depende de forma complicada do campo magnético.

Estudamos também os estados confinados de um poço quântico de 100 Å com uma concentração de Mn igual a 10%. Calculamos o efeito Zeeman em função da intensidade e da orientação do campo magnético aplicado; o resultado é mostrado na figura 6.13. Neste caso, devido a largura do poço e a concentração de Mn, vemos

Figura 6.13: *Efeito Zeeman em um poço quântico de CdTe/Cd_{0.9}Mn_{0.1}Te com 100 Å de largura para os elétrons, buracos pesados e buracos leves em função da intensidade do campo magnético aplicado e do ângulo ϕ que esse campo magnético faz com o eixo z. Neste caso os estados se modificam de forma suave quando a orientação do campo magnético passa de $\phi = 0$ para $\phi = 90^\circ$.*

que não ocorrem cruzamentos entre os estados para campos magnéticos de até 5 T. Os

estados se modificam de forma suave quando a orientação do campo magnético passa de $\phi = 0$ para $\phi = 90^\circ$.

A partir do resultado mostrado na figura 6.13 calculamos as energias de transição em função da intensidade do campo magnético e da orientação desse campo em relação ao eixo z . O resultado é mostrado na figura 6.14 em duas perspectivas diferentes. Para $\phi = 0$ e $\phi = 90^\circ$ vemos que a forma das energias de transição são análogas

Figura 6.14: Energias de transição em função da intensidade do campo magnético e da orientação desse campo em relação ao eixo z para o poço de CdTe/Cd_{0.9}Mn_{0.1}Te com 100 Å de largura. O resultado é mostrado em duas perspectivas diferentes.

àquelas obtidas para o poço de 72 Å.

Vamos agora verificar a validade das aproximações feitas no cálculo da estrutura eletrônica¹ com o campo magnético aplicado ao longo da direção z ou da direção y . Para isso calculamos novamente a estrutura eletrônica para o poço quântico com 72 Å de largura considerando o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ completo. O resultado é mostrado na figura 6.15. As linhas contínuas foram obtidas com o hamiltoniano $H_{\vec{k} \cdot \vec{p}}$ completo e as

Figura 6.15: Efeito Zeeman para o poço quântico com 72 Å de largura. Em (a) o campo magnético foi aplicado na direção z ($\vec{B} = B\hat{z}$) e em (b) na direção y ($\vec{B} = B\hat{y}$). As linhas contínuas (tracejadas) foram obtidas incluindo (desprezando) o efeito do campo magnético em nosso hamiltoniano $H_{\vec{k} \cdot \vec{p}}$. As linhas pontilhadas mostram as alturas das barreiras de potencial para os estados de buracos leves e buracos pesados com spin para baixo.

¹Como mencionamos anteriormente, estas aproximações são consideradas em todos os trabalhos que envolvem semicondutores magnéticos diluídos na presença de um campo magnético externo.

linhas tracejadas foram obtidas desprezando o efeito do campo magnético no hamiltoniano $H_{\vec{k},\vec{p}}$, isto é, o campo magnético foi considerando apenas o hamiltoniano de troca H_{ex} .

A partir dos resultados mostrados na figura 6.15 calculamos as energias de transição entre os elétrons e os buracos pesados e entre os elétrons e os buracos leves (figura 6.16). As linhas contínuas (tracejadas) foram obtidas incluindo (desprezando) o efeito do campo magnético em nosso hamiltoniano $H_{\vec{k},\vec{p}}$. As linhas pontilhadas mostram

Figura 6.16: Energias de transição para um poço quântico de CdTe/Cd_{0.925}Mn_{0.075}Te com 72 Å de largura. O campo magnético foi aplicado ao longo da direção z ($\vec{B} = B\hat{z}$) ou da direção y ($\vec{B} = B\hat{y}$). As linhas contínuas (tracejadas) foram obtidas incluindo (desprezando) o efeito do campo magnético em nosso hamiltoniano $H_{\vec{k},\vec{p}}$. As linhas pontilhadas mostram as alturas das barreiras de potencial para os estados de buracos leves e buracos pesados com spin para baixo. Os pontos correspondem aos resultados experimentais obtidos Jackson et al. [33].

as alturas das barreiras de potencial para os estados de buracos leves e buracos pesados com spin para baixo. Vemos desses resultados que, para um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento, mesmo para campos magnéticos pequenos, a influência dos níveis de Landau não pode ser desprezada.

Quando desprezamos esses termos os resultados obtidos se ajustam melhor aos valores experimentais para as transições entre os elétrons e os buracos pesados. Para o campo magnético no plano vemos que há um bom acordo entre os resultados calculados e os experimentais. Ao contrário, as transições entre os estados de elétrons e buracos leves não foram descritos de forma satisfatória em nenhum dos casos. Uma possível justificativa para essa discrepância pode ser a seguinte: como vimos na figura 6.10, o efeito Zeeman é muito sensível à altura da barreira. Dessa forma, as curvas das energias de transição são muito sensíveis à descontinuidade das bandas nas interfaces e aos parâmetros de tensão considerados no cálculo da estrutura eletrônica (devemos lembrar ainda que esses parâmetros não são bem conhecidos, existindo uma grande variação nos valores encontrados na literatura). Assim, variando esses parâmetros poderemos obter um melhor ajuste entre os resultados experimentais e teóricos.

6.2.4 Considerações Finais

Estudamos a anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado em poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe. Calculamos a estrutura eletrônica desse sistema em função da intensidade e da direção do campo magnético. Vimos que nossos resultados concordam com os resultados experimentais, para campos ao longo da direção de crescimento e no plano, quando desprezamos o efeito do campo magnético em nosso hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

Em seguida calculamos a estrutura eletrônica para campos magnéticos inclinados, de onde verificamos que ocorrem fortes acoplamentos entre os estados, acoplamen-

tos esses introduzidos pelo hamiltoniano de troca. Devemos salientar ainda que este acoplamento ocorre entre estados confinados com spin para cima² e estados contínuos com spin para baixo. Por outro lado, devemos ter cuidado ao analisar esses resultados, visto que os estados não confinados não foram obtidos de forma correta, já que nosso sistema possui um tamanho finito imposto pelo método numérico usado. Entretanto, a descrição qualitativa não perde sua validade.

Escolhendo os parâmetros de nossa heteroestrutura de forma conveniente encontramos um caso onde os estados se modificam de forma contínua quando variamos a direção do campo magnético desde $\phi = 0^0$ até $\phi = 90^0$. Neste caso pudemos calcular as energias de transição para todos os valores de ϕ entre 0 e 90^0 .

Por fim, fizemos uma comparação entre os resultados obtidos quando consideramos o efeito do campo magnético apenas no hamiltoniano de troca e quando consideramos o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ completo. Vimos que, para esse sistema, o efeito dos níveis de Landau não é desprezível como afirmam os autores que estudam poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe. Entretanto, conseguimos uma boa descrição dos resultados experimentais apenas quando não consideramos os efeitos do campo magnético em nosso hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Devemos lembrar que a hipótese de que os níveis de Landau podem ser desprezados é bem justificada para semicondutores magnéticos diluídos volumétricos (*bulk*) com gap largo. Para heteroestruturas de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, onde os estados são confinados nas camadas não magnéticas do CdTe esta justificativa deixa de ser válida.

Como exemplo consideremos os estados eletrônicos no poço quântico com 72 Å de largura. Para um campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento a variação na energia do estado fundamental do poço devido às contribuições de Landau

²Estes estados não estão, na realidade, em um estado puro de spin, mas sim em uma mistura de spin para cima e spin para baixo. Entretanto, usamos esta nomenclatura uma vez que este corresponderia a um estado com spin para cima caso o campo magnético estivesse ao longo do eixo z .

e de troca é aproximadamente igual a

$$\Delta E = \frac{1}{2} (\hbar\omega_c^* \pm g^* \mu_B B) \pm \Delta E_{ex}.$$

Para um campo magnético igual a 5 T obtemos $\frac{1}{2} (\hbar\omega_c^* \pm g_c^* \mu_B B) \approx 2,8 \mp 0,1$ meV. Entretanto, como podemos verificar da figura 6.10 (ou 6.15), esse valor é maior que a contribuição do hamiltoniano de troca $\Delta E_{ex} \approx 1$ meV. Para uma estrutura $\text{Cd}_{0.925}\text{Mn}_{0.075}\text{Te}$ volumétrica, a contribuição do hamiltoniano de troca seria $\frac{1}{2} N_0 \alpha x \langle S_z \rangle \approx 10$ meV.

Capítulo 7

Conclusões

Calculamos a estrutura eletrônica em heteroestruturas de GaAs/GaAlAs e CdTe/CdMnTe na presença de campos elétricos e magnéticos externos usando a equação de massa efetiva e o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de Kane. Para isso desenvolvemos um método numérico baseado na técnica das diferenças finitas e no método da potência inversa. As principais características desse método é que ele tem se mostrado muito estável e de convergência bastante rápida, além de nos permitir estudar poços quânticos com perfis de potencial com formas arbitrárias na presença de campos elétricos e magnéticos externos. O programa foi escrito em linguagem FORTRAN 77, sendo necessários de 8 a 12 MB de memória RAM para ser executado, dependendo do número de estados calculados, do tamanho do sistema e da presença ou não do campo magnético externo. Além disso, o custo computacional foi baixo, sendo que parte dos resultados apresentados foram obtidos em um microcomputador PC Pentium de 166 MHz com 32 MB de memória RAM.

Inicialmente investigamos o tunelamento ressonante de elétrons e buracos em um poço quântico duplo de GaAs/GaAlAs na presença de um campo elétrico aplicado ao longo da direção de crescimento e de um campo magnético aplicado no plano perpendicular. Nosso objetivo foi encontrar os campos necessários para alcançarmos a condição de ressonância entre os estados de elétrons e buracos inicialmente localizados

em cada poço. Os resultados obtidos mostraram um excelente acordo com os resultados experimentais apresentados na literatura. Em seguida mostramos como as relações de dispersão para os elétrons e para os buracos podem ser mapeadas experimentalmente, embora o campo magnético usado para se alcançar a condição de ressonância altere a relação de dispersão. Para os estados da banda de valência o principal efeito do campo magnético é levantar as degenerescências de spin. Isto ocorre quando o campo magnético é tal que o comprimento magnético λ_c é comparável à largura do poço. Para os estados eletrônicos a modificação na forma da relação de dispersão se dá devido ao aumento na massa efetiva com o campo magnético, com o levantamento das degenerescências de spin sendo desprezíveis. Além disso, o uso do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, que leva em consideração os efeitos de não parabolicidade e os acoplamentos entre as bandas, é de fundamental importância para descrevermos corretamente o tunelamento dos portadores, uma vez que, na presença do campo magnético, esse processo ocorre para *momenta* no plano diferentes de zero. Mostramos ainda que, para determinadas intensidades dos campos aplicados, os elétrons e os buracos podem ser colocados em ressonância simultaneamente, o que poderá permitir a observação do tunelamento ressonante de éxcitons em heteroestruturas III-V. Essa ressonância simultânea não pode ser alcançada aplicando-se apenas o campo elétrico ou o campo magnético.

Outro problema que investigamos foi o tunelamento ressonante de portadores em um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe na presença de campos elétricos e magnéticos aplicados ao longo da direção de crescimento. Vimos que, para um campo elétrico nulo, os estados de elétrons e buracos pesados não podem ser colocados em ressonância simultaneamente. Em seguida calculamos as energias das transições ópticas e mostramos que estas puderam ser ajustadas a resultados experimentais escolhendo, de forma conveniente, as energias de ligação excitônicas e os parâmetros S_0 e T_0 . Entretanto, devemos enfatizar que todos os valores considerados estão de acordo

com aqueles encontrados na literatura.

Em seguida calculamos a estrutura eletrônica tanto para um campo elétrico como para um campo magnético diferentes de zero. Mostramos que, neste caso, podemos alcançar a condição de tunelamento ressonante simultâneo entre os estados eletrônicos e os estados de buracos, isto é, mostramos a possibilidade de se obter o tunelamento ressonante de éxcitons em um poço quântico duplo de CdTe/CdMnTe com campos elétrico e magnético aplicados ao longo da direção de crescimento.

Investigamos também a anisotropia do efeito Zeeman com a direção do campo magnético aplicado em poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe. Calculamos a estrutura eletrônica desse sistema em função da intensidade e da direção do campo magnético. Os resultados obtidos mostraram um bom acordo com resultados experimentais para campos ao longo da direção de crescimento e no plano quando desprezamos o efeito do campo magnético no hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Para campos magnéticos com direções arbitrárias verificamos que o hamiltoniano de troca introduz fortes acoplamentos entre os estados confinados com spin para cima e estados contínuos com spin para baixo. Devido a esses fortes acoplamentos a estrutura eletrônica não se modifica de forma suave quando a direção do campo magnético varia desde a direção de crescimento até o plano perpendicular. Todavia, devemos ter cuidado ao analisar esses resultados, uma vez que os estados não confinados não foram obtidos de forma correta, já que nosso sistema possui um tamanho finito imposto pelo método numérico usado, o que não invalida uma descrição qualitativa. Escolhendo os parâmetros de nossa heteroestrutura de forma conveniente encontramos um caso onde os estados se modificam de forma contínua quando variamos a direção do campo magnético desde $\phi = 0^\circ$ até $\phi = 90^\circ$. Neste caso pudemos calcular as energias de transição para todos os valores de ϕ entre 0 e 90° .

Por fim investigamos o efeito do campo magnético no hamiltoniano completo,

ou seja, os termos devido à interação de troca mais o $\vec{k} \cdot \vec{p}$, no cálculo da estrutura eletrônica de poços quânticos de semicondutores magnéticos diluídos. Vimos que o efeito dos níveis de Landau não é desprezível como afirmam os autores que estudam essas heteroestruturas. Entretanto, conseguimos uma boa descrição dos resultados experimentais apenas quando não consideramos os níveis de Landau. Devemos lembrar que a hipótese de que os níveis de Landau podem ser desprezados é bem justificada para semicondutores magnéticos diluídos volumétricos. Neste caso o efeito do hamiltoniano de troca é dominante sobre a estrutura eletrônica. Entretanto, para heteroestruturas CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe, onde os estados são confinados nas camadas não magnéticas de CdTe, esta justificativa deixa de ser válida. Portanto, esse problema precisa ser melhor estudado para obtermos uma resposta definitiva de porque a inclusão dos efeitos do campo magnético no hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ nos fornece resultados que não concordam com os resultados experimentais. Devemos ressaltar que na área dos semicondutores magnéticos diluídos a física experimental está à frente da teoria. Até o momento os trabalhos teóricos tentam explicar os resultados experimentais a partir de modelos fenomenológicos. Dessa forma, torna-se necessária uma análise mais detalhada dos resultados experimentais, tanto nos sistemas volumétricos como nas heteroestruturas, para que possamos obter um modelo que descreva de forma satisfatória todos os sistemas.

Outro problema que deve ser abordado é aquele de um campo magnético inclinado com o efeito do campo magnético sendo incluído no hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Neste caso temos que encontrar uma aproximação para desacoplarmos a equação de massa efetiva nas direções de crescimento e no plano para podermos usar o método numérico desenvolvido nesse trabalho.

Apêndice A

Parâmetros: GaAlAs e CdMnTe

Tabela A.1: Parâmetros para o $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$

Parâmetro	Unidade	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	Referências
E_g	eV	$1,519 + 1,040x + 0,470x^2$	[104]
E_p	eV	22,85	[105]
$\delta E_c / \delta E_v$	%	62/38	[106]
γ_1	—	$1,84 - 0,90x$	Calculado
γ_2	—	$-0,41 - 0,17x$	Calculado
γ_3	—	$0,39 - 0,35x$	Calculado
F	—	$2,00 - 1,68x$	Calculado
N_1	—	$1,90 - 0,76$	Calculado
q	—	$0,04 - 0,01x$	[54]
$\square$	—	$-0,79 - 0,35x$	Calculado
a_0	Å	$5,6533 - 0,0078x$	[107]
C_{11}	(10^{10}Pa)	$11,88 + 0,14x$	[107]
C_{12}	(10^{10}Pa)	$5,38 + 0,32x$	[107]
a_c	eV	$-7,17 + 1,53x$	[108]
a_v	eV	$1,16 + 1,31x$	[108]
b	eV	$-1,7 + 0,2x$	[107]
Parâmetros Complementares			
Δ	eV	$0,343 - 0,064x$	[56]
g_c^*	—	$-0,44 + 3,50x - 1,54x^2$	[109]
$\square^L$	—	$1,72 - 1,6x$	[54]
γ_1^L	—	$6,85 - 3,40x$	[105]
γ_2^L	—	$2,10 - 1,42x$	[105]
γ_3^L	—	$2,90 - 1,61x$	[105]
m_e^*	m_0	$0,0665 + 0,0835x$	[56]
m_{lh}^*	m_0	$0,09 + 0,12x$	Calculado
m_{hh}^*	m_0	$0,38 + 0,10x$	Calculado
$m_{hh}^{*[111]}$	m_0	$0,95 + 0,20x$	Calculado
m_{so}^*	m_0	$0,173 + 0,141x$	[56]
C_{44}	(10^{10}Pa)	$5,94 - 0,05x$	[107]
d	eV	$-4,55 + 1,15x$	[107]
ϵ_r	—	$13,18 - 3,12x$	[107]

Tabela A.2: Parâmetros para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$

Parâmetro	Unidade	$\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$	Referências
E_g	eV	$1,606 + 1,592x$	[85]
E_p	eV	18,5	[110]
$\delta E_c/\delta E_v$	%	70/30	[111]
γ_1	–	$1,27 - 0,75x$	Calculado
γ_2	–	$-0,31 + 0,04x$	Calculado
γ_3	–	$-0,09 - 0,10x$	Calculado
F	–	$0,515 - 0,002x$	Calculado
N_1	–	$1,23 - 0,96x$	Calculado
q	–	0,05	[54]
$\square$	–	$-0,65 + 0,96x$	Calculado
a_0	Å	$6,487 - 0,148x$	[80]
C_{11}	(10^{10}Pa)	$5,36 - 0,71x$	[112]
C_{12}	(10^{10}Pa)	$3,70 - 0,46x$	[112]
a_c	eV	-3,96	[108]
a_v	eV	0,55	[108]
b	eV	-1,2	[108]
S_0	–	$0,5 + 2,0 \exp(-x/0,075)$	★
T_0	K	$62,0x - 390,0x^2 + 1200,0x^3$	★
$N_0\alpha$	eV	0,22	[86]
$N_0\beta$	eV	-0,88	[86]
Parâmetros Complementares			
Δ	eV	0,927	[110]
g_c^*	–	-0,74	[110]
$\square^L$	–	1,27	[54]
γ_1^L	–	$5,11 - 2,63x$	[105, 111–115] [§]
γ_2^L	–	$1,61 - 0,93x$	[105, 111–115] [§]
γ_3^L	–	$1,83 - 1,06x$	[105, 111–115] [§]
m_e^*	m_0	$0,103 + 0,067x$	[105, 111–115]
m_{lh}^*	m_0	$0,12 + 0,14x$	Calculado
m_{hh}^*	m_0	$0,53 + 0,41x$	Calculado
$m_{hh}^{*[111]}$	m_0	$0,69 + 0,41x$	Calculado
m_{so}^*	m_0	$0,28 - 0,13x$	[116]
C_{44}	(10^{10}Pa)	$1,99 - 0,33x$	[117]
d	eV	-2,8	[108]
ϵ_r	–	9,3	[118]

★ Ajuste feito a partir dos resultados experimentais [86], [111], [119] e [33].

§ Os parâmetros γ_i^L são médias dos valores encontrados na literatura.

Apêndice B

Funções de Wannier

A principal característica das funções de Wannier [57–59] é que elas são ortogonais sobre diferentes sítios da rede cristalina. Essas funções são construídas a partir de combinações lineares dos orbitais atômicos sobre diferentes sítios, de tal forma que as integrais de *overlap* sejam nulas. As funções de Wannier são obtidas a partir das funções de Bloch que descrevem o cristal perfeito $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Para uma dada banda ν vimos que

$$\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}), \quad (\text{B.1})$$

com $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ estando normalizada no volume de uma célula unitária. A função de Wannier associada com a j -ésima célula unitária e ν -ésima banda é definida como

$$a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_j) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R}_j)}, \quad (\text{B.2})$$

onde a soma é sobre todos os $\vec{k}$ na banda. Podemos verificar da equação anterior que, ao contrário das funções de Bloch, as funções de Wannier não dependem do vetor de onda $\vec{k}$. As funções $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ podem ser obtidas em termos das funções de Wannier como

$$u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R}_j)} a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_j). \quad (\text{B.3})$$

Substituindo então a equação (B.3) na função de Bloch (B.1) obtemos

$$\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j} a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_j), \quad (\text{B.4})$$

que é a função de Bloch escrita em termos das funções de Wannier. A ortogonalidade das funções de Wannier é facilmente obtida a partir da ortogonalidade das funções de Bloch,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} a_{\mu}^*(\vec{r} - \vec{R}_i) a_{\nu}(\vec{r} - \vec{R}_j) d\vec{r} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{R}_j - \vec{k}'\cdot\vec{R}_i)} \int_{\Omega} \psi_{\mu\vec{k}'}^*(\vec{r}) \psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{R}_j - \vec{k}'\cdot\vec{R}_i)} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\mu\nu} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \delta_{\mu\nu} = \delta_{ij} \delta_{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Apêndice C

O Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas [120] é usado na solução numérica de equações diferenciais em geral. A equação de massa efetiva, conforme descrevemos no capítulo 3, é um exemplo. A idéia central é transformar a equação diferencial em um sistema de equações lineares algébricas. Para isso, ao contrário das diferenciais infinitesimais, são usadas diferenças finitas como elementos de cálculo. Dessa forma, funções contínuas são tratadas como um conjunto discreto de valores, o que permite transformar derivadas em operações aritméticas.

Seja $f(z)$ uma função analítica. Expandindo $f(z)$, na vizinhança de um ponto z , em uma série de Taylor, obtemos,

$$f(z \pm \delta) = f(z) \pm \delta \frac{df(z)}{dz} + \frac{\delta^2}{2!} \frac{d^2 f(z)}{dz^2} \pm \frac{\delta^3}{3!} \frac{d^3 f(z)}{dz^3} + \dots \quad (\text{C.1})$$

Estas equações podem ser resolvidas para $df(z)/dz$ e $d^2 f(z)/dz^2$, resultando em

$$\begin{aligned} \frac{df(z)}{dz} &= \frac{f(z+\delta) - f(z-\delta)}{2\delta} + \mathcal{O}(\delta^2), \\ \frac{d^2 f(z)}{dz^2} &= \frac{f(z+\delta) - 2f(z) + f(z-\delta)}{\delta^2} + \mathcal{O}(\delta^3). \end{aligned}$$

Considerando que z varie de forma discreta sobre uma rede uniforme (ver figura 3.1) e usando a notação com índices,

$$z \rightarrow z_i \quad ; \quad z_{i+1} - z_i = \delta \quad ; \quad f(z) \rightarrow f_i \quad ; \quad f(z \pm \delta) \rightarrow f_{i \pm 1},$$

onde, z_i e f_i são variáveis discretas, teremos,

$$\frac{df(z)}{dz} \rightarrow \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\delta} + \mathcal{O}(\delta^2)$$

$$\frac{d^2f(z)}{dz^2} \rightarrow \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\delta^2} + \mathcal{O}(\delta^3)$$

Entretanto, como vimos na seção 2.4, devemos simetrizar todos os operadores diferenciais que aparecem em nosso hamiltoniano (tabela 2.1) com os parâmetros dependentes da posição. Dessa forma, teremos não derivadas da forma $d^2f(z)/dz^2$, mas sim

$$\frac{d}{dz}\alpha(z) \frac{d}{dz}f(z) \rightarrow \frac{\alpha_{i+1/2}f_{i+1} - (\alpha_{i+1/2} + \alpha_{i-1/2})f_i + \alpha_{i-1/2}f_{i-1}}{\delta^2} + \mathcal{O}(\delta^3),$$

onde $\alpha(z)$ é um parâmetro qualquer dependente da posição.

Apêndice D

Efeito dos Campos $\vec{F}$ e $\vec{B}$: Tratamento Perturbativo

Vamos considerar a aproximação de bandas parabólicas e independentes. Neste caso, a equação da massa efetiva para uma heteroestrutura crescida ao longo da direção z , sob a ação de um campo elétrico $\vec{F} = F\hat{z}$ e de um campo magnético $\vec{B} = B\hat{y}$, torna-se

$$\left[\frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\vec{\nabla} + eBz\hat{x} \right)^2 + eFz + \Delta V_C \right] F_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n F_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (\text{D.1})$$

Nesta equação m^* é a massa efetiva do portador, e sua carga elétrica e ΔV_C o potencial de confinamento (*poço quântico duplo*) ao longo da direção de crescimento. Com esses campos aplicados a função envelope (2.30) toma a forma

$$F_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ik_{\perp}x + ik_By) F_{nk_{\perp}}(z), \quad (\text{D.2})$$

onde S é a área da heteroestrutura no plano $x\hat{o}y$. Substituindo a equação (D.2) no hamiltoniano (D.1) obtemos, para a direção z ,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \Delta V_C + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{z - z_0}{\lambda_c^2} \right)^2 + eFz + \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m^*} \right] F_{nk_{\perp}}(z) = E_n F_{nk_{\perp}}(z), \quad (\text{D.3})$$

onde $z_0 = -\lambda_c^2 k_{\perp}$ e $\lambda_c = \sqrt{\hbar/eB}$.

Vamos investigar o efeito do campo elétrico aplicado ao longo da direção de crescimento e do campo magnético aplicado na direção y usando a teoria de pertur-

bação. Para isso o hamiltoniano (D.3) é escrito na forma $H = H_0 + H'$, onde

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m^*} + \Delta V_C$$

é o hamiltoniano para $F = B = 0$ ($H_0 F_n^0 = E_n^0(k_B) F_n^0$); a perturbação H' é devido aos campos $\vec{F}$ e $\vec{B}$. Em primeira ordem de teoria de perturbação obtemos

$$E_n = E_n^0 + \langle F_n^0 | H' | F_n^0 \rangle = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\langle z_n^2 \rangle - 2z_0 \langle z_n \rangle + z_0^2}{\lambda_c^4} \right) + eF \langle z_n \rangle,$$

onde $E_n^0 = E_n^0(k_B = 0)$ e $\langle z_n \rangle = \langle F_n^0 | z | F_n^0 \rangle$ é o valor esperado da posição dos portadores no estado n . Completando os quadrados a equação anterior toma a forma

$$E_n = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_\perp + \frac{\langle z_n \rangle}{\lambda_c^2} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\langle z_n^2 \rangle - \langle z_n \rangle^2}{\lambda_c^4} \right) + eF \langle z_n \rangle. \quad (D.4)$$

Desse resultado vemos que o principal efeito do campo magnético é deslocar as sub-bandas no espaço $\vec{k}$, na direção perpendicular a $\vec{B}$, isto é,

$$k_\perp \rightarrow k_\perp^B = k_\perp + \frac{\langle z_n \rangle}{\lambda_c^2}.$$

Como discutido na seção 4.3, a contribuição do *shift diamagnético* $\hbar^2(\langle z_n^2 \rangle - \langle z_n \rangle^2)/2m^* \lambda_c^4$ é pequena e não será considerada.

Assim, a variação do vetor de onda $k_\perp$ com o campo magnético, entre os estados n e m , localizados em diferentes poços, é

$$\Delta k_\perp = k_{\perp m}^B - k_{\perp n}^B = \frac{\langle z_m \rangle - \langle z_n \rangle}{\lambda_c^2} = \frac{\Delta s}{\lambda_c^2},$$

onde $\Delta s = \langle z_m \rangle - \langle z_n \rangle \approx L_W/2 + L_N/2 + L_B$.

Da equação (D.4) obtemos ainda que a diferença de energia entre esses estados, devido ao *campo elétrico*, é

$$\Delta E_F = E_m - E_n = e(\langle z_m \rangle - \langle z_n \rangle) F = e\Delta s F.$$

Dessa forma, a variação da energia dos *estados de prova* com o campo elétrico aplicado pode ser escrita como

$$E(F) = E_{1N}^0 + e\Delta sF,$$

onde E_{1N}^0 é a energia do estado de prova para $F = 0$.

Aplicando-se um campo magnético ao sistema a diferença de energia entre os estados n e m torna-se

$$E_m - E_n = \Delta E + \frac{\hbar^2}{2m^*\lambda_c^4} \left[\langle z_m \rangle^2 - \langle z_n \rangle^2 + 2k_\perp \lambda_c^2 (\langle z_m \rangle - \langle z_n \rangle) \right], \quad (D.5)$$

onde $\Delta E = E_m^0 - E_n^0$ é a diferença de energia entre os estados para um dado campo elétrico aplicado e para campo magnético nulo.

Na condição de ressonância, que corresponde ao cruzamento entre o fundo da sub-banda de mais alta energia m (*estado de prova*) e um estado qualquer de uma sub-banda de mais baixa energia n , teremos:

$$E_m - E_n = 0 \quad ; \quad k_{\perp m} = k_{res} = -\frac{\langle z_m \rangle}{\lambda_c^2}. \quad (D.6)$$

Substituindo os resultados (D.6) na equação (D.5) obtemos,

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta s^2}{\lambda_c^4} = \frac{e^2 \Delta s^2}{2m^*} B_{res}^2.$$

Esse resultado, válido quando pudermos considerar a aproximação de bandas parabólica, mostra que a forma da curva de $\Delta E \times B_{res}$ também será parabólica.

Apêndice E

O Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e as Autofunções do Oscilador Harmônico

Quando um campo magnético é aplicado ao longo da direção de crescimento o hamiltoniano $H_{\vec{k}, \vec{p}}$ pode ser obtido usando o *gauge* de Landau, isto é, escrevendo o potencial vetor na forma $\vec{A} = (-By, 0, 0)$. Dessa forma, a substituição $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla} + e\vec{A}/\hbar$ resulta em

$$k_x \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{y}{\lambda_c^2} \quad ; \quad k_y \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial y} \quad ; \quad k_z \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial z}. \quad (\text{E.1})$$

Com esse *gauge* o sistema mantém a simetria de translação ao longo do eixo x , logo, a função envelope (2.30) terá a forma

$$F_{\nu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(i\kappa_x x) F_{\nu\kappa_x}^{\alpha}(y, z), \quad (\text{E.2})$$

onde L_x é o comprimento da heteroestrutura na direção do eixo x e κ_x é um bom número quântico, isto é, $k_x \rightarrow \kappa_x - y/\lambda_c^2$. Podemos verificar também que a direção z não está acoplada com as direções x e y , de forma que a equação (E.2) pode ser reescrita como

$$F_{\nu\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(i\kappa_x x) \phi_{n\kappa_x}(y) F_{\nu,m}^{\alpha}(z).$$

Da equação (E.1) verificamos que

$$[k_x, k_z] = [k_y, k_z] = 0 \quad ; \quad [-\lambda_c k_x, \lambda_c k_y] = i.$$

A partir desses resultados faremos uma analogia com o problema do oscilador harmônico unidimensional para encontrarmos as autofunções $\phi_{n\kappa_x}(y)$ [121]. Para tal definimos os operadores de abaixamento (a) e levantamento (a^+) da seguinte forma:

$$a \equiv \frac{\lambda_c}{\sqrt{2}} (k_x - ik_y) \quad ; \quad a^+ \equiv \frac{\lambda_c}{\sqrt{2}} (k_x + ik_y). \quad (\text{E.3})$$

Estes operadores satisfazem às seguintes propriedades:

$$\begin{cases} [a, a] = 0 \quad ; \quad [a^+, a^+] = 0 \quad ; \quad [a, a^+] = 1 \\ \hat{n} |n\rangle = a^+ a |n\rangle = n |n\rangle \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad ; \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \\ a |0\rangle = 0 \quad ; \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle \end{cases}$$

Devemos lembrar que, para um oscilador harmônico unidimensional ao longo da direção y , com autofunções $\phi_n(y)$, a relação de comutação que nos permite definir os operadores de criação e destruição é $[y, p_y/\hbar] = i$. Logo, fazendo as substituições

$$y \rightarrow -\lambda_c k_x = \frac{y}{\lambda_c} - \lambda_c \kappa_x \quad ; \quad \frac{p_y}{\hbar} \rightarrow \lambda_c k_y = -i\lambda_c \frac{\partial}{\partial y}$$

podemos verificamos que as autofunções do operador $\hat{n} = a^+ a$ são dadas por

$$\langle y | n \rangle = \phi_{n, \kappa_x}(y) = \phi_n(y - \lambda_c^2 \kappa_x),$$

isto é, as autofunções $\phi_{n, \kappa_x}(y) = \phi_n(y - \lambda_c^2 \kappa_x)$ são obtidas a partir das autofunções do oscilador harmônico unidimensional $\phi_n(y)$ por uma translação de $\lambda_c^2 \kappa_x$,

$$\phi_{n, \kappa_x}(y) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\pi \lambda_c^2} \right)^{1/4} \left(\frac{1}{2 \lambda_c^2} \right)^{n/2} \left[(y - \lambda_c^2 \kappa_x) - \lambda_c^2 \frac{d}{dy} \right]^n \exp \left[-\frac{(y - \lambda_c^2 \kappa_x)^2}{2 \lambda_c^2} \right].$$

Finalmente, para encontrarmos a forma do hamiltoniano $\mathbf{H}_{\vec{k}, \vec{p}}$, tabela 2.1, quando um campo magnético é aplicado ao longo da direção de crescimento, devemos reescrever as equações (E.3) em termos de k_x e k_y e substituir nas definições (2.11). O resultado obtido é mostrado na equação (6.3).

Bibliografia

- [1] S. L. Chuang. Physics of Optoelectronic Devices. John Wiley & Sons, New York, 1995.
- [2] P. Bhattacharya. Semiconductor Optoelectronic Devices. Prentice Hall, New Jersey, 1994.
- [3] Scientific American, Vol. 275, N. 1, July 1996; Physics Today, Vol. 47, N. 6, June 1994; Physics Today, Vol. 49, N. 4, April 1996.
- [4] G. Bastard; C. Riaux; Y. Guldner; J. Mycielski; A. Mycielski. Effect of Exchange on Interband Magneto-Absorption in Zero-Gap $\text{Hg}_{1-k}\text{Mn}_k\text{Te}$ Mixed Crystals. J. Physique, **39**, 87–98, 1978.
- [5] J. A. Gaj; J. Ginter; R. R. Galazka. Exchange Interaction of Manganese $3d^5$ States with Band Electrons in $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Phys. Stat. Sol. (b), **89**, 655–662, 1978.
- [6] L. Esaki; R. Tsu. Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors. IBM J. Res. Develop., **14**, 61, 1970.
- [7] R. Tsu; L. Esaki. Tunneling in a Finite Superlattice. Appl. Phys. Lett., **22**, 562, 1973.
- [8] L. L. Chang; L. Esaki; R. Tsu. Resonant Tunneling in Semiconductor Double Barrier. Appl. Phys. Lett., **24**, 593, 1974.
- [9] R. Dingle; A. C. Gossard; W. Wiegmann. Direct Observation of Superlattice Formation in a Semiconductor Heterostructure. Phys. Rev. Lett., **34**, 1327, 1975.
- [10] F. Capasso. Physics of Quantum Electron Devices, volume 28 de *Springer Series in Electronics and Photonics*. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [11] P. F. Bagwell; T. P. E. Broekaert; T. P. Orlando; C. G. Fonstad. Resonant-Tunneling Diodes and Transistors With a One-, Two-, Three-Dimensional Electron Emitter. J. Appl. Phys., **68**, 4634, 1990.

- [12] H. Kawai; J. Kaneko; N. Watanabe. Doublet State of Resonantly Coupled Al-GaAs/GaAs Quantum Wells Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition. Phys. Rev. B, **58**, 1263, 1985.
- [13] K. Leo; J. Shah; E. O. Göbel; T. C. Damen; S. Schmitt-Rink; W. Schäfer; K. Köhler. Coherent Oscillations of a Wave Packet in a Semiconductor Double-Quantum-Well Structure. Phys. Rev. Lett., **66**(2), 201–204, 1991.
- [14] M. G. W. Alexander; M. Nido; W. W. Rühle; K. Köhler. Resonant-Tunneling Transfer Times Between Asymmetric GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As Double Quantum Wells. Phys. Rev. B, **41**, 12295–12298, 1990.
- [15] Ph. Roussignol; M. Gurioli; L. Carraresi; M. Colocci; A. Vinattieri; C. Deparis; J. Massies; G. Neu. Electron and Hole Tunneling Times in GaAs/AlGaAs Asymmetric Double Quantum Well Heterostructures. Superlatt. Microstruc., **9**, 151, 1991.
- [16] H. G. Roskos; M. C. Nuss; J. Shah; K. Leo; D. A. B. Miller; A. M. Fox; S. Schmitt-Rink; K. Köhler. Coherent Submillimeter-Wave Emission From Charge Oscillations in a Double-Well Potential. Phys. Rev. Lett., **68**, 2216–2219, 1992.
- [17] J. Kuhl; R. Strobel; R. Eccleston; K. Köhler. Tunnelling of Electrons and Holes in Asymmetric Double Quantum Well Structures. Semicond. Sci. Technol., **7**, B418–B420, 1992.
- [18] A. P. Heberle; W. W. Rühle; M. G. W. Alexander; K. Köhler. Resonances in tunnelling between quantum wells. Semicond. Sci. Technol., **7**, B421, 1992.
- [19] A. P. Heberle; M. Oestreich; S. Haacke; W. W. Rühle; J. C. Maan; K. Köhler. Direct Observation of Resonant-Tunneling Dynamics in High Magnetic Field. Phys. Rev. Lett., **72**, 1522–1525, 1994.
- [20] M. Nido; M. G. W. Alexander; W. W. Rühle; T. Schweizer; K. Köhler. Nonresonant Electron and Hole Tunneling Times in GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As Asymmetric Double Quantum Wells. Appl. Phys. Lett., **56**, 355–357, 1990.
- [21] D. Y. Oberli; J. Shah; T. C. Damen; J. M. Kuo; J. E. Henry; J. Lary; S. M. Goodnick. Optical Phonon-Assisted Tunneling in Double Quantum Well Structures. Appl. Phys. Lett., **56**, 1239–1241, 1990.
- [22] G. Bastard; C. Delalande; R. Ferreira; H. W. Liu. Assisted Relaxation and Vertical Transport of Electrons, Holes and Excitons in Semiconductor Heterostructures. J. Lumin., **44**, 247–263, 1989.

- [23] R. Ferreira; H. W. Liu; C. Delalande; J. F. Palmier; B. Etienne. Electron, Hole and Exciton Tunnelling in a Biased Quantum Well Structure. Surf. Sci., **229**, 192–194, 1990.
- [24] A. M. Fox; D. A. B. Miller; G. Livescu; J. E. Cunningham; J. E. Henry; W. Y. Jan. Excitons in Resonant Coupling of Quantum Wells. Phys. Rev. B, **42**, 1841–1844, 1990.
- [25] R. Ferreira; P. Rolland; Ph. Roussignol; C. Delalande; A. Vinattieri; L. Carraresi; M. Colocci; N. Roy; B. Sermage; J. F. Palmier; B. Etienne. Time-Resolved Exciton Transfer in GaAs/Al_xGa_{1-x}As Double-Quantum-Well Structures. Phys. Rev. B, **45**, 11782–11794, 1992.
- [26] I. Lawrence; G. Feuillet; H. Tuffigo; C. Bodin; J. Cibert; P. Peyla; A. Wasiela. Observation of Magnetically Tuned Interwell Coupling in CdTe/CdMnTe Asymmetric Double Quantum Wells. Superlatt. Microstruc., **12**, 119–122, 1992.
- [27] O. Goede; W. Heimbrodt; K. Hieke; H.-E. Gumlich; Th. Pier; B. Lunn; D. E. Ashenford; S. Jackson; J. E. Nicholls. Exciton Transfer in CdTe/(Cd,Mn)Te Double Quantum Well Structures. Superlatt. Microstruc., **12**, 363–366, 1992.
- [28] I. Lawrence; S. Haacke; H. Mariette; W. W. Rühle; H. Ulmer-Tuffigo; J. Cibert; G. Feuillet. Exciton Tunneling Revealed by Magnetically Tuned Interwell Coupling in Semiconductor Double Quantum Wells. Phys. Rev. Lett., **73**, 2131–2134, 1994.
- [29] Th. Pier; K. Hieke; B. Henninger; W. Heimbrodt; O. Goede; H.-E. Gumlich; J. E. Nicholls; M. O'Neill; S. J. Weston; B. Lunn. Magnetic Field Dependence of the Exciton Transfer in Semimagnetic Double Quantum Well Structures. J. Cryst. Growth, **138**, 889–894, 1994.
- [30] K. Hieke; W. Heimbrodt; I. Lawrence; W. W. Rühle; Th. Pier; H.-E. Gumlich; D. E. Ashenford; B. Lunn. Magnetic Field Dependent Exciton Transfer Times in Semimagnetic Double Quantum Well Structures. Solid State Commun., **93**, 257–260, 1995.
- [31] K. Hieke; W. Heimbrodt; Th. Pier; H.-E. Gumlich; W. W. Rühle; J. E. Nicholls; B. Lunn. Exciton Tunnelling and Resonances in Semimagnetic Double-Quantum-Well Structures. J. Crystal Growth, **159**, 1014–1017, 1996.
- [32] P. Peyla; A. Wasiela; Y. Merle D'Aubigné; D. E. Ashenford; B. Lunn. Anisotropy of the Zeeman Effect in CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe Multiple Quantum Wells. Phys. Rev. B, **47**, 3783–3789, 1993.

- [33] S. R. Jackson; J. E. Nicholls; W. E. Hagston; P. Harrison; T. Stirner; J. H. C. Hogg; B. Lunn; D. E. Ashenford. Magneto-Optical Study of Excitonic Binding Energies, Band Offsets, and the Role of Interface Potentials in CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe Multiple Quantum Wells. Phys. Rev. B, **50**, 5392–5403, 1994.
- [34] B. Kuhn-Heinrich; W. Ossau; E. Bagert; A. Waag; G. Landwehr. Zeeman Pattern of Semimagnetic (CdMn)Te/(CdMg)Te Quantum Wells in Inplane Magnetic Fields. Solid State Commun., **91**, 413–418, 1994.
- [35] W. Y. Yu; A. Twardowski; L. P. Fu; A. Petrou; B. T. Jonker. Magnetoanisotropy in Zn_{1-x}Mn_xSe Strained Epilayers. Phys. Rev. B, **51**, 9722–9727, 1995.
- [36] T. Stirner; S. Ahmed; W. E. Hagston. Anisotropic Magnetic Field Effects in Diluted Magnetic Semiconductor Quantum Wells. J. Cryst. Growth, **159**, 1027–1031, 1996.
- [37] D. Suisky; W. Heimbrodt; B. Lunn; J. E. Nicholls; D. E. Ashenford. Anisotropy Zeeman Splitting in Semimagnetic Quantum-Well Structures. Phys. Rev. B, **58**, 3969–3976, 1998.
- [38] S. R. White; L. J. Sham. Electronic Properties of Flat-Band Semiconductors Heterostructures. Phys. Rev. Lett, **47**, 879–882, 1981.
- [39] G. Bastard. Superlattice Band Structure in the Envelope-Function Approximation. Phys. Rev. B, **24**, 5693–5697, 1981.
- [40] N. W. Ashcroft; N. D. Mermin. Solid States Physics. Saunders College, New York, 1976.
- [41] F. Bassani. Methods of Band Calculations Applicable to III-V Compounds. R. K. Williardson e A. C. Beer, editores, Physics of III-V Compounds, volume 1 de *Semiconductors and Semimetals*, páginas 21–74, New York, 1966. Academic Press.
- [42] B. K. Ridley. Quantum Processes in Semiconductors. Clarendon Press, Oxford, 1982.
- [43] J. Bardeen. An Improved Calculation of the Energies of Metallic *Li* and *Na*. J. Phys. Chem. Solids, **6**, 367–371, 1938.
- [44] F. Seitz. The Modern Theory of Solids, capítulo 10, página 352. McGraw Hill, New York, 1940.

- [45] E. O. Kane. Energy Band Structure in p-Type Germanium and Silicon. J. Phys. Chem. Solids, **1**, 82–99, 1956.
- [46] E. O. Kane. The $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Method. R. K Williardson e A. C. Beer, editores, Physics of III-V Compounds, volume 1 de *Semiconductors and Semimetals*, páginas 75–100, New York, 1966. Academic Press.
- [47] J. M. Luttinger; W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. Phys. Rev., **97**, 869–883, 1955.
- [48] J. M. Luttinger. Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory. Phys. Rev., **102**, 1030–1041, 1956.
- [49] P. Löwdin. A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory. J. Phys. Chem. Solids, **19**, 1396–1401, 1951.
- [50] G. Dresselhaus; A. F. Kip; C. Kittel. Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals. Phys. Rev., **98**, 368–384, 1955.
- [51] R. H. Parmenter. Symmetry Properties of the Energy Bands of the Zinc Blende Structure. Phys. Rev., **100**, 573–579, 1955.
- [52] M. H. Weiler; R. L. Aggarwal; B. Lax. Warping- and Inversion-Asymmetry-Induced Cyclotron-Harmonic Transitions in InSb. Phys. Rev. B, **17**, 3269–3283, 1978.
- [53] M. H. Weiler. Magneto-optical Properties of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Alloys. A. C. Beer R. K Williardson, editores, Defects - (HgCd)Se - (HgCd)Te, volume 16 de *Semiconductors and Semimetals*, páginas 119–191, New York, 1981. Academic Press.
- [54] P. Lawaetz. Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors. Phys. Rev. B, **4**, 3460–3467, 1971.
- [55] A. M. Cohen; G. E. Marques. Electronic Structure of Zinc-Blend-Structure Semiconductor Heterostructures. Phys. Rev. B, **41**, 10608–10621, 1990.
- [56] R. Eppenga; M. F. H. Schuurmans; S. Colak. New $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Theory for GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs-Type Quantum Wells. Phys. Rev. B, **36**, 1554–1564, 1987.
- [57] G. H. Wannier. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. Phys. Rev., **52**, 191–197, 1937.
- [58] R. A. Smith. Wave Mechanics of Crystalline Solids, capítulo 11, página 173. Chapman & Hall LTD, London, 1963.

- [59] J. M. Ziman. Principles of the Theory of Solids, capítulo 6, página 172. Cambridge University Press, Cambridge, 1972.
- [60] E. L. Ivchenko; G. E. Pikus. Superlattices and Others Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena, volume 110 de *Springer Series in Solid-State Sciences*, capítulo 3, página 39. Springer-Verlag, Berlin, 1973.
- [61] J. F. Walker. Semiconductor Growth Techniques. J. R. Leite; A. Fazzio; A. S. Chaves, editores, Proceedings of the 5th Brazilian School on Semiconductor Physics, página 22, Singapore, 1992. World Scientific.
- [62] S. R. White; G. E. Marques; L. J. Sham. Effective-Mass Theory for Electrons in Heterostructures. J. Vac. Sci. Technol., **21**, 544–547, 1982.
- [63] M. G. Burt. The Justification for Applying the Effective-Mass Approximation to Microstructures. J. Phys.: Condens. Matter, **4**, 6651–6690, 1992.
- [64] G. T. Einevoll; L. J. Sham. Boundary Conditions for Envelope Functions at Interfaces Between Dissimilar Materials. Phys. Rev. B, **49**, 10533–10543, 1994.
- [65] B. A. Foreman. Envelope-Function Formalism for Electrons in Abrupt Heterostructures with Material-Dependent Basis Functions. Phys. Rev. B, **54**, 1909–1921, 1996.
- [66] W. Trzeciakowski. Effective-Mass Approximation in Semiconductor Heterostructures: One-Dimensional Analysis. Phys. Rev. B, **38**, 12493–12507, 1988.
- [67] M. V. Kisin; B. L. Gelmont; S. Luryi. Boundary-Condition Problem in the Kane Model. Phys. Rev. B, **58**, 4605–4616, 1998.
- [68] M. F. H. Schuurmans; G. W. 't Hooft. Simple Calculations of Confinement States in a Quantum Well. Phys. Rev. B, **31**, 8041–8048, 1985.
- [69] A. T. Meney; B. Gonul; E. P. O'Reilly. Evaluation of Various Approximations Used in the Envelope-Function Method. Phys. Rev. B, **50**, 10893–10904, 1994.
- [70] G. Bastard. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures, capítulo 3, página 63. Les Editions de Physique, Les Ulis, France, 1988.
- [71] M. Altarelli. Electronic Structure and Semiconductor-Semimetal Transition in InAs-GaSb Superlattices. Phys. Rev. B, **28**, 842–845, 1983.
- [72] D. J. BenDaniel; C. B. Duke. Space-Charge Effects on Electron Tunneling. Phys. Rev., **152**, 1966, 1966.

- [73] D. S. Watkins. Fundamentals of Matrix Computations. Wiley, Singapore, 1991.
- [74] C. Juang; K. J. Kuhn; R. B. Darling. Stark Shift and Field-Induced Tunneling in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Quantum-Well Structures. Phys. Rev. B, **41**, 12047–12053, 1990.
- [75] T. M. Fromhold; L. Eaves; F. W. Sheard; M. L. Leadbeater; T. J. Foster; P. C. Main. Magnetotunneling Spectroscopy of a Quantum Well in the Regime of Classical Chaos. Phys. Rev. Lett., **72**, 2608–2611, 1994.
- [76] G. Müller; G. S. Boebinger; H. Mathur; L. N. Pfeiffer; K. W. West. Precursors and Transition to Chaos in a Quantum Well in a Tilted Magnetic Field. Phys. Rev. Lett., **75**, 2875–2878, 1995.
- [77] F. Stern. Transverse Hall Effect in the Electric Quantum Limit. Phys. Rev. Lett., **21**, 1687–1690, 1968.
- [78] S. Luryi. Possibility of a Direct Observation of the Time Evolution in Heterostructure Barrier Tunneling. Solid State Commun., **65**, 787–789, 1988.
- [79] J. K. Furdyna; J. Kossut. Diluted Magnetic Semiconductors, volume 25 de *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, New York, 1988.
- [80] J. K. Furdyna. Diluted Magnetic Semiconductors. J. Appl. Phys., **64**, R29–R64, 1988.
- [81] W. Girit; J. K. Furdyna. Crystal Structure, Composition, and Materials Preparation of Diluted Magnetic Semiconductors. R. K. Willardson; A. C. Beer, editores, Diluted Magnetic Semiconductors, volume 25 de *Semiconductors and Semimetals*, página 1, New York, 1988. Academic Press.
- [82] R. L. Gunshor; A. V. Nurmikko; L. A. Kolodziejski; M. Kobayashi; N. Otsuka. Wide-Gap II-VI Heterostructures. J. Cryst. Growth, **101**, 14–22, 1990.
- [83] K. C. Hass; H. Ehrenreich. Electronic and Magnetic Properties of II-VI Diluted Magnetic Semiconductors. J. Cryst. Growth, **86**, 8–13, 1988.
- [84] R. B. Bylsma; W. M. Becker; J. Kossut; U. Debska; D. Yoder-Short. Dependence of Energy Gap on x and T in $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$: The Role of Exchange Interaction. Phys. Rev. B, **33**, 8207–8215, 1986.
- [85] Y. R. Lee; A. K. Ramdas. A Piezomodulation Study of the Absorption Edge and Mn^{++} Internal Transition in $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$: A Prototype of Diluted Magnetic Semiconductors. Solid State Commun., **51**, 861–863, 1984.

- [86] J. A. Gaj; R. Planel; G. Fishman. Relation of Magneto-Optical Properties of Free Excitons to Spin Alignment of Mn^{2+} Ions in $Cd_{1-x}Mn_xTe$. Solid State Commun., **29**, 435–438, 1979.
- [87] S. B. Oseroff. Magnetic Susceptibility and EPR Measurements in Concentrated Spin-Glasses: $Cd_{1-x}Mn_xTe$ e $Cd_{1-x}Mn_xSe$. Phys. Rev. B, **25**, 6584–6594, 1982.
- [88] G. Dolling; T. M. Holden; V. S. Sears; J. K. Furdyna; W. Girit. Neutron Diffraction Studies of Diluted Magnetic Semiconductors. J. Appl. Phys., **53**, 7644–7648, 1982.
- [89] B. E. Larson; K. C. Hass; H. Ehrenreich; A. E. Carlsson. Exchange Mechanisms in Diluted Magnetic Semiconductors. Solid State Commun., **56**, 347–350, 1985.
- [90] B. E. Larson; K. C. Hass; H. Ehrenreich; A. E. Carlsson. Theory of Exchange Interactions and Chemical Trends in Diluted Magnetic Semiconductors. Phys. Rev. B, **37**, 4137–4154, 1988.
- [91] J. Kossut. Band Structure and Quantum Transport Phenomena in Narrow-Gap Diluted Magnetic Semiconductors. J. K. Furdyna; J. Kossut, editores, Diluted Magnetic Semiconductors, volume 25 de *Semiconductors and Semimetals*, páginas 183–227, New York, 1988. Academic Press.
- [92] G. L. Bir; G. E. Pikus. Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors. Wiley, New York, 1974.
- [93] J. A. Gaj. Magneto-optical Properties of Large-Gap Diluted Magnetic Semiconductors. R. K. Willardson; A. C. Beer, editores, Diluted Magnetic Semiconductors, volume 25 de *Semiconductors and Semimetals*, páginas 275–309, New York, 1988. Academic Press.
- [94] F. Capasso; K. Mohammed; A. Y. Cho. Resonant Tunneling Through Double Barriers, Perpendicular Quantum Transport Phenomena in Superlattices, and their Device Applications. IEEE J. Quantum Electron., **22**, 1853–1869, 1986.
- [95] N. O. Lipari; M. Altarelli. Theory of Indirect Excitons in Semiconductors. Phys. Rev. B, **15**, 4883–4897, 1977.
- [96] U. Ekenberg; M. Altarelli. Subbands and Landau Levels in the Two-Dimensional Hole Gas at the $GaAs-Al_xGa_{1-x}As$ Interface. Phys. Rev. B, **32**, 3712–3722, 1985.
- [97] C. P. Hilton; W. E. Hagston; J. E. Nicholls. Variational Methods for Calculating Exciton Binding Energies in Quantum Well Structures. J. Phys. A: Math. Gen., **25**, 2395–2401, 1992.

- [98] B. Kuhn; W. Ossau; A. Waag; R. N. Bicknell-Tassius; G. Landwehr. Excited Exciton States in CdTe/(CdMn)Te Quantum Wells. J. Cryst. Growth, **117**, 871–876, 1992.
- [99] R. Merlin. Subband-Landau-Level Coupling in Tilted Magnetic Fields: Exact Results for Parabolic Wells. Solid State Commun., **64**, 99–101, 1987.
- [100] J. C. Mann. Magneto-Optical Properties of Semiconductor Heterostructures. P. Butcher; N. H. March; M. P. Tosi, editores, Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures, páginas 333–374, New York, 1993. Plenum Press.
- [101] S. K. Lyo. Effect of Electron-Hole Separation on the Landau-Level Photoluminescence in Layered Structures in a Tilted Magnetic Field: Magneto-Stark Effect. Phys. Rev. B, **58**, R10187–R10190, 1998.
- [102] A. D. Wieck; J. C. Maan; U. Merkt; J. P. Kotthaus; K. Ploog; G. Weimann. Intersubband Energies in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs Heterojunctions. Phys. Rev. B, **35**, 4145–4148, 1987.
- [103] A. D. Wieck; K. Bollweg; U. Merkt; G. Weimann; W. Schlapp. Combined Intersubband-Cyclotron Resonances in a GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs Heterojunction. Phys. Rev. B, **38**, 10158–10161, 1988.
- [104] A. Onton. Festkörperprobleme XIII. H. S. Queisser, editor, Advances in Solid State Physics, página 59, Braunschweig, 1973. Vieweg.
- [105] Semiconductors. O. Madelung; M. Schultz; H. Weiss, editores, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology: Group III, volume 17a e 17b de *Landolt-Börnstein*, Berlin, 1982. Springer.
- [106] H. Kroemer. Band Offsets at Heterointerfaces: Theoretical Bases, and Review, of Recent Experimental Work. Surf. Sci., **174**, 299–306, 1986.
- [107] S. Adachi. GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material Parameters for Use in Research and Device Applications. J. Appl. Phys., **58**, R1–R29, 1984.
- [108] C. G. Van de Walle. Band Lineups and Deformation Potentials in the Model-Solid Theory. Phys. Rev. B, **39**, 1871–1883, 1989.
- [109] C. Weisbuch; C. Hermann. Optical Detection of Conduction-Electron Spin Resonance in GaAs, Ga_{1-x}In_xAs and Ga_{1-x}Al_xAs. Phys. Rev. B, **15**, 816–822, 1977.
- [110] C. Hermann; C. Weisbuch. $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Perturbation Theory in III-V Compounds and Alloys: A Reexamination. Phys. Rev. B, **15**, 823–833, 1977.

- [111] B. Kuhn-Heinrich; W. Ossau; T. Litz; A. Waag; G. Landwehr. Determination of the Band Offset in Semimagnetic CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe Quantum Wells: A Comparison of Two Methods. J. Appl. Phys., **75**, 8046–8052, 1994.
- [112] S. K. Chang; A. V. Nurmikko; J. W. Wu; L. A. Kolodziejski; R. L. Gunshor. Band Offsets and Excitons in CdTe/(Cd,Mn)Te Quantum Wells. Phys. Rev. B, **37**, 1191–1198, 1988.
- [113] T. Lebihen; E. Deleporte; C. Delalande. Band Offset Determination of the CdTe/(Cd,Mn)Te Interface. Phys. Rev. B, **55**, 1724–1729, 1997.
- [114] Le Si Dang; G. Neu; R. Romestain. Optical Detection of Cyclotron Resonance of Electron and Holes in CdTe. Solid State Commun., **44**, 1187–1190, 1982.
- [115] F. Long; P. Harrison; W. E. Hagston. Empirical Pseudopotential Calculations of Cd_{1-x}Mn_xTe. J. Appl. Phys., **79**, 6939–6942, 1996.
- [116] D. Heiman; P. Becla; R. Kershaw; D. Ridgley; K. Dwight; A. Wold; R. R. Galazka. Field-Induced Exchange Effects in (Cd,Mn)Te and (Cd,Mn)Se from Photoluminescence Measurements. Phys. Rev. B, **34**, 3961–3969, 1986.
- [117] P. Maheswaranathan; R. J. Sladek; U. Debska. Elastic Constants and their Pressure Dependences in Cd_{1-x}Mn_xTe with $0 \leq x \leq 0.52$ and in Cd_{0.52}Zn_{0.48}Te. Phys. Rev. B, **31**, 5212–5216, 1985.
- [118] M. Said; M. A. Kanehisa. Excited Acceptor States in II-VI and III-V Semiconductors. Phys. Stat. Sol. (b), **157**, 311–321, 1990.
- [119] D. L. Peterson; D. U. Bartholomew; U. Debska; A. K. Ramdas; S. Rodriguez. Spin-Flip Raman Scattering in n-Type Diluted Magnetic Semiconductors. Phys. Rev. B, **32**, 323–340, 1985.
- [120] R. W. Hornbeck. Numerical Methods. Quantum Publishers, New York, 1975.
- [121] R. P. Feynman. Statistical Mechanics: A Set of Lectures. W. A. Benjamin, Massachusetts, 1972.