



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS - GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**TUNELAMENTO RESSONANTE DE BURACOS EM  
HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS DE  
DUPLA BARREIRA SUBMETIDAS A PRESSÕES**

SALOMÉ FONTÃO CUNHA

Dissertação submetida ao programa de pós-graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas como parte dos requisitos para obtenção do título de mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt

Manaus-Amazonas  
2005



**UFAM**  
**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONASS**  
**INSITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**  
**(PPGFIS-UFAM)**

**TUNELAMENTO RESSONANTE DE BURACOS EM  
HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS DE  
DUPLA BARREIRA SUBMETIDAS A PRESSÕES**

SALOMÉ FONTÃO CUNHA

**Orientador:** Prof. Dr. Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt

**MANAUS - AM**  
**2005**

**Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da CNPQ.**

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de deixar meus sinceros agradecimentos a todos que de alguma forma contribuíram para o êxito deste trabalho, e em especial:

- a Deus, pela luz, pela força, coragem e perseverança ao longo de todo este período;
- a meu orientador, Dr. Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt, pela atenção concedida, pela orientação e pela oportunidade de desenvolvimento desta dissertação de mestrado;
- aos professores da Pós-Graduação da UFAM pelo valioso conhecimento que me forneceram e em especial aos professores José Ricardo, Abraham Cohen, Fernando Aguiar e José Wilson;
- a meus pais e familiares, pelo apoio em todos os sentidos ... este trabalho é dedicado a vocês!
- a meus amigos, Dilma, Ellen, Enoque, Fernando, Márcio, Rosana, Peta, Vasti, Yamilles e Wanna, por todo incentivo e companheirismo;
- a meu “irmão” Deivis, responsável direto pelas mudanças ocorridas em minha vida nos últimos anos, através da qual foi possível a realização deste trabalho

## RESUMO

Estudamos o transporte de buracos em dupla barreira ressonante submetida a *stress* uniaxial, usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de *Luttinger-Kohn-Pikus*. A transmissividade é calculada para  $k = 0$  e  $k \neq 0$  para o sistema GaAs /AlAs para os esforços de compressão ( $T < 0$ ) e tração ( $T > 0$ ). Para  $k = 0$ , os buracos leves e pesados são desacoplados e observa-se um deslocamento rígido nas curvas de transmissividades e inversão do estado fundamental,  $HH1 \rightarrow LH1$  para o esforço de tração. No caso  $k \neq 0$ , além da mistura das bandas que aumenta a probabilidade de transmissão, o *stress* muda o caráter das partícula  $HH \leftrightarrow LH$ , a separação relativa entre os estados HH e LH no poço quântico, e indiretamente, influência na mistura dos estados de valência, aumentando ou diminuindo as transmissividades dos buracos dependendo do tipo de esforço aplicado.

# Índice

<b>I</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
1.1	Tunelamento Ressonante . . . . .	8
1.2	Motivações e Formalismo . . . . .	11
1.3	Oranização da Tese . . . . .	13
<b>II</b>	<b>Modelo Teórico</b>	<b>16</b>
2.1	A aproximação de Massa Efetiva . . . . .	17
2.2	Hamiltoniano de <i>Luttinger</i> na Representação $k \cdot p$ . . . . .	22
2.3	Hamiltoniano de Bir-Pikus . . . . .	28
<b>III</b>	<b>Técnica da Matriz de Espalhamento para o Cálculo da Transmissividade</b>	<b>32</b>
3.1	Solução da Equação de Massa Efetiva . . . . .	33
3.2	Natureza das soluções de $k_z$ . . . . .	35
3.2.1	Compressão . . . . .	35
3.2.2	Tração . . . . .	37
3.3	Formalismo da Matriz de Espalhamento . . . . .	40
3.4	Transmissividade . . . . .	45
<b>IV</b>	<b>Resultados da Transmissividade</b>	<b>47</b>
4.1	Transmissividade para $k_\rho = 0$ . . . . .	50
4.1.1	Sem <i>Stress</i> . . . . .	50

4.1.2	Compressão . . . . .	52
4.1.3	Tração . . . . .	54
4.2	Transmissividade para $k_\rho \neq 0$ . . . . .	58
4.2.1	Sem stress . . . . .	58
4.2.2	Compressão . . . . .	60
4.2.3	Tração . . . . .	64
<b>V Conclusões</b>		<b>70</b>

# Lista de Figuras

1.1	Tunelamento ressonante de elétrons em dupla barreira ressonante. . . . .	10
1.2	Efeito do <i>stress</i> uniaxial na estrutura de bandas do GaAs para os esforços de tração, compressão e sem <i>stress</i> . . . . .	12
2.1	Estruturas de bandas dos compostos III-V próximos ao ponto $\Gamma$ . O gap fundamental é denotado por $E_G$ e a energia spin-órbita $\Delta$ . . . . .	26
3.1	Estrutura de banda dos buracos leves (LH) e pesados (HH) para o <i>bulk</i> de GaAs, ilustrando a quebra de degenerescência em $k_\rho = 0$ , devido ao <i>stress</i> , nos casos: (a) compressão, (b) sem <i>stress</i> e (c) tração. . . . .	34
3.2	Representação da parte real (b) e imaginária (a) da solução de $k_z$ , com $T = -3 \text{ kbar}$ (compressão) e $k_\rho = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , dos buracos leves (linha pontilhada) e pesados (linha contínua) para o <i>bulk</i> do GaAs. As energias críticas $E_{C_1}, E_{C_2}, E_{C_3}, E_{C_4}, E_{C_T}$ dividem o espectro de energia em cinco regiões (i), (ii), (iii), (iv) e (v) cuja natureza está de acordo com a Tab. (3.1). . . . .	39
3.3	(a) Dispersão dos buracos leves e (b) Velocidade de grupo dos buracos leves em função de $k_z$ para $k_\rho = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . Entre os pontos A e B a velocidade de grupo $V_{gl} < 0$ para $k_z < 0$ . . . . .	40
3.4	Estrutura dupla de barreiras mostrando os coeficientes das ondas incidentes e das ondas, refletidas ou espalhadas, em cada região. . . . .	41

4.1	Representação esquemática do perfil de potencial de uma heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs com dimensões $(L_{B1}, L_P, L_{B2})$ , submetida a <i>stress</i> uniaxial $T$ na direção (001). A descontinuidade da banda de valência nas interfaces vale $\Delta E_V = 550 \text{ meV}$ . . . . .	49
4.2	Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) através da heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs, (30,50,30) com $k_\rho = 0$ e $T = 0$ (sem <i>stress</i> ). . . . .	51
4.3	Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) para o sistema de dupla barreira (30,60,30) de GaAs/AlAs para $T = 0$ (sem <i>stress</i> ) com $k_\rho = 0$ . . . . .	52
4.4	Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) para o sistema de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs para $T = -3 \text{ kbar}$ com $k_\rho = 0$ . . . . .	53
4.5	Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) para o sistema de dupla barreira (30,60,30) de GaAs/AlAs para $T = -3 \text{ kbar}$ e $k_\rho = 0$ . . . . .	54
4.6	Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e dos buracos leve (acima), através de uma heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs, (30,60,30) com $k_\rho = 0$ , para um esforço de tração $T = 3 \text{ kbar}$ (curva preta) e $T = 0$ , sem <i>stress</i> (curva verde). . . . .	55
4.7	Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e dos buracos leve (acima), através de uma heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs, (30,60,30) com $k_\rho = 0$ , para um esforço de tração $T = 8 \text{ kbar}$ . . . . .	56
4.8	Transmissividade dos buracos (a) pesados e (b) leves, através de heteroestrutura de barreiras assimétricas de GaAs/AlAs (10,50,30) (curva verde) e simétrica (30,50,30) (curva preta) com $k_\rho = 0$ e $T = 2$ . . . . .	57

4.9	Transmissividade dos buracos pesados e leves, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $T = 0$ . (a) e (b) para o Hamiltoniano <i>upper</i> ; (c) e (d) para o Hamiltoniano <i>lower</i> .	59
4.10	Transmissividade dos buracos pesados e leves, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $T = -3 \text{ kbar}$ . (a) e (b) para o Hamiltoniano <i>upper</i> ; (c) e (d) para o Hamiltoniano <i>lower</i> .	61
4.11	Transmissividade dos buracos pesados (HH out) através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs para $T = -3 \text{ kbar}$ nos casos $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ (acima) e $k_\rho = 0$ (abaixo).	62
4.12	Transmissividade dos buracos pesados e leves para o Hamiltoniano <i>upper</i> , através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , para $T = 0$ ( <i>sem stress</i> ) e $T = -6 \text{ kbar}$ , (a) HH in $\rightarrow$ HH out, (b) HH in $\rightarrow$ LH out ; (c) LH in $\rightarrow$ HH out e (d) LH in $\rightarrow$ LH out.	63
4.13	Transmissividade dos buracos pesados e leves, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $T = 3 \text{ kbar}$ . (a) e (b) para o Hamiltoniano <i>upper</i> ; (c) e (d) para o Hamiltoniano <i>lower</i> .	65
4.14	HH in $\rightarrow$ HH out , através da heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $T = 3 \text{ kbar}$ . Note que devido ao <i>mixing</i> , transmissividade é maior para o esforço de tração.	66
4.15	LH in $\rightarrow$ LH out , através da heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $T = 3 \text{ kbar}$ . Note que a transmissividade é menor para o esforço de tração.	67

4.16 Transmissividade de buracos através de heteroestrutura de dupla barreira simétrica (30,50,30) de GaAs/AlAs para  $k_{\rho} = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 3$ , sujeito a um campo elétrico de intensidade  $F = 100 \text{ kV/cm}$ , mostrando apenas os picos ressonantes HH2 e HH3, para os quais os efeitos do campo se torna melhor visualizados. . . . . 68

# Lista de Tabelas

3.1	Natureza das soluções de $k_z$ para o esforço de compressão. . . . .	36
3.2	Natureza das soluções de $k_z$ para o esforço de tração com $k_\rho < K_T$ . . . .	38
3.3	Natureza das soluções de $k_z$ para o esforço de tração com $k_\rho > K_T$ . . . .	38
4.1	Parâmetros de massa efetiva e potenciais de deformação. . . . .	50

# Capítulo I

## Introdução

Desde a pioneira proposta de *Esaki* e *Tsu* sobre as heteroestruturas semicondutoras, o tunelamento de elétrons [1] e buracos [2] em dupla barreira ressonante tem sido objeto de considerável investigação tanto teórica como experimental devido ao grande potencial de aplicação tecnológica na forma de detectores, modulares, lasers etc. Nesta dissertação de mestrado investigamos o tunelamento ressonante de buracos em heteroestruturas de dupla barreira de GaAs/AlAs submetidas a tensão externas (*stress*).

### 1.1 Tunelamento Ressonante

O Tunelamento de partículas através das barreiras de potencial representa um dos problemas clássicos da mecânica quântica, conhecido como *efeito túnel*, cuja ocorrência é uma manifestação do comportamento ondulatório da matéria, não tendo, por isso, análogos clássicos. O conceito quântico de tunelamento foi primeiro aplicado por *Gamov* (1928) para explicar o decaimento- $\alpha$  de núcleos pesados, por *Oppenheimer*, para a ionização dos átomos de hidrogênio. Na Física do Estado Sólido, este efeito foi introduzido inicialmente por *Fowler* e *Nordheim* [3] para emissão eletrônica por metais e por *Zener* [4] em 1934 para estudar o movimento de elétrons através de bandas de energia proibidas. Em 1958, *Leo Esaki* incorporou este efeito ao funcionamento do diodo túnel, dando iní-

cio a era dos dispositivos quânticos, fato que lhe rendeu o prêmio Nobel de Física de 1973. Em um trabalho não aceito para publicação de 1971, *Esaki* e *Tsu* mostraram que o fenômeno de tunelamento dos elétrons poderia ser muito melhor explorado se houvesse a possibilidade de construir junções perfeitas entre dois materiais semicondutores diferentes (heterojunções). Graças ao grande desenvolvimento alcançado, pelas técnicas de crescimento epitaxial nas últimas três décadas, notadamente, o MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) e o MOCVD (*Metal Metalorganic Chemical Vapour Deposition*), foi possível construir essas heteroestruturas em uma escala de engenharia atômica ( $10^{-9}$  m a  $10^{-10}$  m), dando origem ao que chamamos de materiais nanoestruturados utilizados em larga escala na moderna. nanoeletrônica. Isto possibilitou a construção de uma grande variedade de estruturas com dimensionalidade reduzida, produzidas artificialmente como, *poços quânticos, super-redes, dupla barreira, etc.*

A partir de então, as heteroestruturas têm despertando grande interesse, tanto na ciência quanto na tecnologia, devido às inúmeras propriedades e fenômenos observados em baixas e altas temperaturas, e ao grande potencial de aplicação tecnológica. Um desses fenômenos é o tunelamento ressonante em *dupla barreira*, que aparece como picos de valores unitários na curva de transmissividade, quando as energias  $E$  da partícula incidente se igualam àquelas dos estados *quase-ligados*,  $E_n$ , da região do poço.

O tunelamento ressonante de elétrons em dupla barreira, foi teoricamente investigado por *Esaki* e *Tsu* [5], e realizado experimentalmente nos laboratórios da IBM por *Esaki*, *Tsu* e *Chang* [6], utilizando uma dupla barreira do tipo GaAs/GaAlAs como ilustrado na parte (a) Fig. (1.1). A corrente flui através da heteroestrutura entre os dois eletrodos e a ressonância ocorre quando a energia de Fermi ( $E_F$ ) na região do emissor se alinha com um nível ressonante dentro do poço quântico.

A condutância diferencial negativa presente na curva de saída ( $\mathbf{I} \times \mathbf{V}$ ) [veja a parte (b) da Fig. (1.1)] pode ser explicada, através da conservação do momento do elétron no plano das camadas. A conservação de energia implica também na conservação de momento paralelo às camadas para que haja o alinhamento do nível do poço com o nível

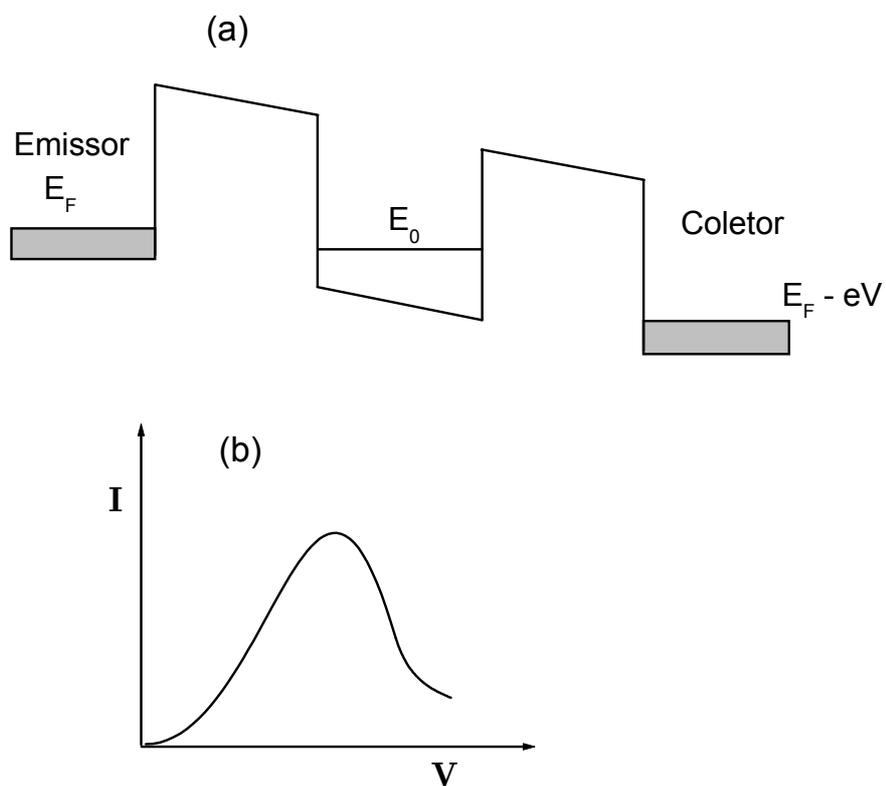


Figura 1.1: Tunelamento ressonante de elétrons em dupla barreira ressonante. A parte (a) mostra um esquemático de um sistema de dupla barreira submetido a uma diferença de potencial  $V$  entre o emissor e o coletor. A parte (b) mostra a forma qualitativa da corrente de tunelamento em dispositivos de dupla barreira.

de Fermi  $E_F$  do emissor. Assim, quando o nível ressonante desalinha-se do nível de Fermi, a conservação do momento deixa de existir, produzindo uma queda brusca da corrente, que é refletida na curva  $(\mathbf{I} \times \mathbf{V})$  como uma condutância diferencial negativa.

A investigação experimental do tunelamento ressonante de buracos em heteroestruturas semicondutoras foi feita pela primeira vez por *Mendez et al* [2], cujos resultados experimentais revelaram um forte acoplamento entre as bandas de buracos leves e pesados. Apesar de ser menos investigado do que o tunelamento de elétrons, o tunelamento de buracos é um importante mecanismo de transporte, uma vez que, devido à forte mistura dos estados de valência (buracos leves e pesados) temos dois canais de tunelamento, LH out (buraco leve) e HH out (buraco pesado), o que o torna um mecanismo de transporte de bastante interesse, tanto teórico como experimental.

## 1.2 Motivações e Formalismo

Nosso objetivo nessa dissertação de mestrado, é estudar a transmissividade de buracos em heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira submetida a pressões externas (*stress*), usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de *Luttinger-Kohn*. A escolha desse tema deveu-se a dois motivos: (1) A importância do *stress*; o *stress* como uma perturbação externa, desempenha um papel importante na investigação das propriedades óticas e de transporte em heteroestruturas semicondutoras e oferece a possibilidade de projetar dispositivos opto-eletrônicos e de alta velocidade [7] com a peromace desejável. A aplicação de um *stress uniaxial*, tem uma profunda influência na estruturas de bandas dos materiais semicondutores, modificando *gaps*, massas efetivas, reduzindo a simetrias e consequentemente quebrando a degenerescência dos estados de buraco pesado (HH) e buraco leve (LH), como visto na Fig. (1.2). Assim o *stress* torna-se uma ferramenta importante para monitorar os estados eletrônicos dos cristais semicondutores tanto de *gap* direto como indireto; (2) O método analítico para o cálculo da transmissividade em dupla barreira, permite um

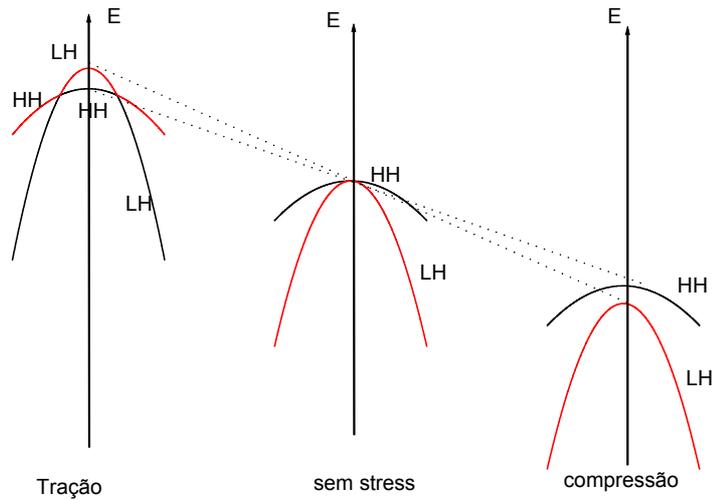


Figura 1.2: Efeito do *stress* uniaxial na estrutura de bandas do GaAs para os esforços de tração, compressão e sem *stress*.

bom entendimento de várias técnicas, como aproximação de massa efetiva, matriz de transferência, matriz de espalhamento, método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , que podem ser usadas futuramente em outros problemas; (3) Embora exista um numeroso estudo sobre os efeitos do *stress* na estrutura das bandas de valência e, no tunelamento de elétrons, pouca investigação tem sido feita no efeito do *stress* [8] sobre a dinâmica de buracos.

Em geral a técnica mais utilizada para o cálculo das transmissividades em sistemas de dupla barreira é a matriz de transferência, entretanto a mesma apresenta instabilidade numérica quando as dimensões da região barreira são grandes (em geral para comprimentos da barreira  $L_b \gg 10 \text{ \AA}$ ). A origem dessa instabilidade é bem conhecida [9, 10], sendo devida ao crescimento exponencial dos estados na barreira, cujas amplitudes variam rapidamente nas regiões de transmissão ressonante. A técnica da matriz de transferência trata o crescimento e decaimento dos estados identicamente, resultando na perda do decaimento exponencial da função de onda durante a computação, como resultado da presença da função de onda exponencialmente crescente. Vários esquemas vem sendo

propostos [9, 10] para a solução deste problema. Entretanto, eles são simplesmente truncamento de esquemas de diferentes grau de complexidade. Em vista dessas dificuldades que o método da matriz de transferência apresenta, optamos pela técnica da matriz de espalhamento [11], que é de fácil adaptação ao esquema de massa efetiva para a inclusão de campos elétricos, e pressões externas (*stress*).

A base do método da matriz espalhamento é resolver a equação de massa efetiva em cada camada da heteroestrutura para uma energia e momento paralelo fixados, e então formar um completo autoestado em todo o sistema usando as condições de contorno nas interfaces. Na prática isto é feito usando matrizes de propagação descrevendo a mudança de fase através das camadas e matrizes de espalhamento nas interfaces.

### 1.3 Oranização da Tese

Neste trabalho investigamos o tunelamento de buracos em heteroestruturas de dupla barreira com camadas submetidas tensões externas, usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  de *Luttinger-Kohn*. Escolhemos esse modelo por ser de fácil adaptação ao esquema de massa efetiva e incorpora de forma natural a mistura (*mixing*) de bandas e efeitos de campos externos como o *stress* e campo elétrico. Dessa forma reservamos o capítulo 2 para uma breve revisão dos aspectos principais do formalismo  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  e da aproximação de massa efetiva. Nesse mesmo capítulo, incluímos o *stress* como um potencial perturbativo, que não depende de  $k$ , chamado de Hamiltoniano de *Bir-Pikus* [4]. O Hamiltoniano total que é a soma do Hamiltoniano de *Luttinger*, mais *Bir-Pikus* é bloco-diagonalizado em duas matrizes ( $2 \times 2$ ), *upper* e *lower* usando a aproximação axial.

Escolhido o modelo para descrever o movimento dos buracos leves e pesados na banda de valência, no capítulo 3, apresentamos o formalismo da matriz de espalhamento para o cálculo da transmissividade em heteroestruturas de dupla barreira submetidas a tensões externas.

No capítulo 4, apresentamos e discutimos os resultados numéricos da transmissividade em heteroestruturas semicondutoras do tipo  $I$  (elétrons e buracos confinados na mesma região) para sistema de dupla barreira de GaAs/AlAs submetidos a *stress* uniaxial na direção de crescimento (001). Os resultados são analisados para  $k_\rho = 0$  e  $k \neq 0$  e mostram que o *stress* muda a separação relativa entre os estados HH e LH no poço quântico, e indiretamente, influencia na mistura dos estados de valência aumentando ou diminuindo as transmissividades dos buracos, dependendo do tipo de *stress* aplicado.

# Referências

- [1] L. Esaki, R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61–65 (1970).
- [2] E. E. Mendez, W. I. Wang, B. Ricco, L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **47**, 415 (1985).
- [3] H. Fowler, L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. London **A119**, 173–181 (1928).
- [4] C. Zener, Proc. Roy. Soc. London **A145**, 523 (1934).
- [5] R. Tsu, Leo Esaki, App. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [6] L. L. Chang, Leo Esaki, R. Tsu, App. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [7] G. C. Osbourn, Phys Rew B . **27**, 5126 (1983).
- [8] M. U. Erdogan and K. W. Kim, Superlattices and Microstructures, **17**, 3 (1996).
- [9] S. Brand, D. T. Hughes, Semicond. Sci. Technol. **2**, 607 (1987).
- [10] C. Mailhoit, D. L. Smith, Phys. Rev. B **33**, 8360 (1986).
- [11] M. Cahay, M. McLennan, S. Datta. Phys. Rev. B **17**, 10125 (1988).
- [12] G. E. Pikus and G. L. Bir, Sov. Phys-Solid State, 1, 1502 (1959).

# Capítulo II

## Modelo Teórico

Desde a pioneira proposta de *Esaki e Tsu* [1] das heteroestruturas semicondutoras, tornou-se crescente o estudo tanto teórico como experimental das propriedades ópticas e de transportes dos compostos semicondutores III - V. Dispositivos semicondutores com o princípio de funcionamento baseado nessas propriedades, tais como, moduladores, fotodetectores e *laser*, possuem as mais diversas aplicações. Para compreendermos as propriedades de transporte em heteroestruturas semicondutoras submetidas a campos elétricos, magnéticos, *strain*, *stress* etc., é essencial conhecermos sua estrutura eletrônica. Vários métodos tem sido utilizados no cálculo da estrutura eletrônica, como a aproximação *Tight-binding*, *Pseudopotenciais*, *Densidade funcional*, etc [2]. Além da complexidade inerente de cada um deles, os altos custos computacionais limitam a utilização dos mesmos a um grupo reduzido de locais com uma boa infraestrutura computacional.

Em vista dessas dificuldades, nessa dissertação optamos pelo modelo de *Luttinger* [3], baseado no método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  para descrever as propriedades de transporte de buracos em heteroestruturas semicondutoras submetidas a tensões externas (*stress*). Este método é de fácil adaptação ao esquema de massa efetiva e incorpora facilmente perturbações externas como campo elétrico, magnético, *stress* etc. Dessa forma reservamos este capítulo para uma rápida descrição do formalismo de massa efetiva e do modelo de *Luttinger*, levando em conta o efeito do *stress*, chamado Hamiltoniano de *Bir-Pikus* [4].

## 2.1 A aproximação de Massa Efetiva

A aproximação de massa efetiva consiste em transformar um problema, inicialmente complicado, do movimento de um portador num cristal sujeito a um potencial externo adicional, num problema mais simples, correspondente ao movimento do portador no espaço livre com o mesmo potencial externo, onde todos os efeitos da estrutura cristalina (potencial interno) estão embutidos em um tensor denominado de massa efetiva, cujos elementos são determinados pelos parâmetros que descrevem essa aproximação.

Considere um cristal infinito com uma banda isolada, com um extremo num ponto  $\mathbf{k}_0 = 0$ . A equação de *Schrödinger* independente do tempo que descreve o movimento dos elétrons nessa banda é dada por:

$$H_0\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde  $H_0$  Hamiltoniano do sistema não perturbado e  $\varepsilon(\mathbf{k})$  é a energia do elétron em cada estado rotulado pelo índice  $\mathbf{k}$ .

As soluções da Eq. (2.1) são as funções de *Bloch*:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

onde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  é a parte periódica da função de *Bloch*.

A função de *Bloch*  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  pode ainda ser escrita como combinação linear das funções de *Wannier*  $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  associadas a cada um dos  $N$  sítios  $\mathbf{R}_j$  da rede de *Bravais* e que satisfazem a relação de ortogonalidade [5]:

$$\int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (2.3)$$

Desta forma obtem-se

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.4)$$

Da Eq. (2.4), observa-se que a função de *Wannier* é a transformada de *Fourier* inversa da função de *Bloch* e, portanto, invertendo a Eq. (2.4) obtem-se

$$a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Vamos agora adicionar, ao potencial cristalino, uma perturbação descrita por um potencial adicional  $V(\mathbf{r})$ , variando lentamente com a posição dentro de uma célula unitária do cristal, de modo que os seus elementos de matriz na base de *Wannier* são dados por:

$$V_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \cong V(\mathbf{R}_i) \delta_{ij}. \quad (2.6)$$

O Hamiltoniano do sistema perturbado,  $H = H_0 + V(\mathbf{r})$ , satisfaz a equação de *Schrödinger*

$$[H_0 + V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.7)$$

Como o potencial  $V(\mathbf{r})$  varia fracamente com a posição, podemos expandir a função de onda do cristal perturbado,  $\Psi(\mathbf{r})$ , na base de *Wannier* que contém as características do sistema não perturbado. Sendo assim obtem-se

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N F(\mathbf{R}_j) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.8)$$

onde as funções  $F(\mathbf{R}_j)$  são as chamadas funções envelopes, que dependem fracamente da posição e que modulam as funções de *Wannier* em cada sítio  $\mathbf{R}_j$ .

Substituindo a Eq. (2.8) na Eq. (2.7) e projetando o resultado em um elemento da base de *Wannier* obtemos

$$\sum_j [(H_0)_{ij} + V_{ij}] F(\mathbf{R}_j) = E F(\mathbf{R}_i), \quad (2.9)$$

onde usamos as condições (2.3) e (2.6), sendo:

$$(H_0)_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H_0 a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}, \quad (2.10)$$

os elementos de matriz do Hamiltoniano do cristal perfeito,  $H_0$ , na base de *Wannier*. Podemos ainda escrever

$$(H_0)_{ij} \equiv H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.11)$$

uma forma que expressa a invariância translacional de  $H_0$ .

Desta maneira, a Eq. (2.9) torna-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = E F(\mathbf{R}_i), \quad (2.12)$$

que é exata, exceto pela aproximação indicada na Eq. (2.6).

Como temos  $N$  sítios, a Eq. (2.12) é equivalente a um sistema de  $N$  equações relacionando as  $N$  incógnitas  $F(\mathbf{R}_j)$ . Considerando o fato de que as funções envelopes variam fracamente com a posição e admitindo que as mesmas sejam obtidas dos valores de uma função contínua  $F(\mathbf{r})$  para cada sítio,  $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$ , podemos expandir as quantidades  $F(\mathbf{R}_j)$  em série de *Taylor* em torno do sítio  $\mathbf{R}_i$ . Assim sendo obtem-se

$$F(\mathbf{R}_j) = \left[ 1 + (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \cdot \nabla + \frac{(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)^2}{2!} \nabla^2 + \dots \right] F(\mathbf{R}_i), \quad (2.13)$$

ou seja,

$$F(\mathbf{R}_j) = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} F(\mathbf{R}_i), \quad (2.14)$$

onde usamos a substituição formal  $\nabla \leftrightarrow i\mathbf{k}$ .

Substituindo a Eq. (2.14) na Eq. (2.12) obtem-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F(\mathbf{R}_i) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = E F(\mathbf{R}_i). \quad (2.15)$$

Por outro lado, substituindo a Eq. (2.4) na Eq. (2.1), projetando o resultado em um elemento  $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  da base de *Wannier* e utilizando a Eq. (2.11), encontraremos

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (2.16)$$

Usando agora este último resultado na Eq. (2.15), obtem-se

$$\varepsilon(-i\nabla)F(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

que é a equação de massa efetiva para o modelo de uma banda.

Podemos generalizar os resultados anteriores para um cristal semiconductor infinito com várias bandas acopladas, cujas extremidades ocorrem no ponto  $\mathbf{k}_0 = 0$ , sujeito a uma perturbação externa,  $V(\mathbf{r})$ , que varia fracamente com a posição dentro de uma célula unitária centrada em um sítio,  $\mathbf{R}_j$ , e satisfazendo a uma condição análoga à da Eq. (2.6):

$$V_{\mu\nu}^{ij} = \int a_{\mu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \cong V(\mathbf{R}_i) \delta_{\mu\nu} \delta_{ij}, \quad (2.18)$$

onde  $a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  é a função de *Wannier*, para cada banda  $\nu$ , centrada no sítio  $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$ .

Expandindo a função de onda do sistema perturbado  $\Psi(\mathbf{r})$  na base de *Wannier* obtemos

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,\nu} F_{\nu}(R_j) a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.19)$$

Procedendo então da mesma maneira como no modelo de uma banda, obtemos a equação de *Schrödinger*, análoga a Eq. (2.12):

$$\sum_{j\nu} H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F_\nu(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F_\mu(\mathbf{R}_i) = E F_\mu(\mathbf{R}_i). \quad (2.20)$$

onde, devido a simetria de translação do cristal perfeito, podemos escrever

$$H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = (H_0)_{\mu\nu}^{ij} \equiv \int a_\mu^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H_0 a_\nu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}. \quad (2.21)$$

Como as funções envelopes dependem fracamente da posição, podemos expandir  $F_\nu(\mathbf{R}_j)$  em série de *Taylor* em torno do sítio  $\mathbf{R}_i$ , isto é:

$$F_\nu(\mathbf{R}_j) = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F_\nu(\mathbf{R}_i), \quad (2.22)$$

onde  $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ .

Substituindo esse resultado na Eq. (2.20) e usando-se o análogo da Eq. (2.16) para o modelo multibandas:

$$H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k}) = \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.23)$$

obtemos

$$\sum_\nu [H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{R}_i)\delta_{\mu\nu}] F_\nu(\mathbf{R}_i) = E F_\mu(\mathbf{R}_i), \quad (2.24)$$

que é a generalização da equação de massa efetiva para o modelo de multibandas.

Como as funções envelopes  $F_\nu(\mathbf{R}_j)$  podem ser obtidas a partir de uma função continua  $F_\nu(\mathbf{r})$ , a equação de massa efetiva pode ainda ser escrita como:

$$\sum_\nu [H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{r})\delta_{\mu\nu}] F_\nu(\mathbf{r}) = E F_\mu(\mathbf{r}), \quad (2.25)$$

que é a equação de massa efetiva para o modelo multibandas. Podemos ainda mostrar que a função de onda,  $\Psi(\mathbf{r})$ , do sistema perturbado pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} F_{\nu}(\mathbf{r}) u_{\nu 0}(\mathbf{r}) \quad (2.26)$$

Uma vez obtida a equação de massa efetiva multibandas que descreve o movimento dos portadores (elétrons e buracos) em heteroestruturas semicondutoras, o passo seguinte é escolher o melhor Hamiltoniano para descrever adequadamente as propriedades cristal perfeito. Como neste trabalho estamos interessados no cálculo da transmissividade de buracos, usaremos o modelo *Luttinger* com *stress*, cujos detalhes serão discutidos nas próximas seções.

## 2.2 Hamiltoniano de *Luttinger* na Representação $k \cdot p$

Inicialmente utilizado para determinar massa efetivas e funções de onda próximo a pontos de alta simetria no espaço- $k$ , o método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  tornou-se uma técnica atraente para o cálculo da estrutura de bandas em semicondutores com *gap direto*. Isso se deve ao fato de que as propriedades eletrônicas usuais, tais como, tunelamento, absorção ótica, etc.. dependem fortemente dos detalhes da estrutura de bandas nas vizinhança dos seus extremos, permitindo aproximações específicas e simplificações nos cálculos.

Sem o acoplamento spin-órbita, os estados eletrônicos de um elétron de massa  $m$ , movendo-se num cristal sujeito a um potencial periódico,  $U(r)$ , são obtidos resolvendo a equação de *Schrödinger*:

$$H_0 \psi_{\nu k}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(k) \psi_{\nu k}(\mathbf{r}) \quad (2.27)$$

onde

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

é o Hamiltoniano do cristal perfeito, sendo  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$  o operador momento. Devido a periodicidade do potencial cristalino podemos fazer uso do teorema de *Bloch* e as soluções

da equação acima são da forma:

$$\psi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.29)$$

Como o potencial  $U(\mathbf{r})$  é periódico, as energias com vetor de onda  $\mathbf{k}$  dentro da primeira zona de *Brillouin* são quantizadas, na forma  $E_\nu(\mathbf{k})$ , onde  $\nu$  o índice que classifica esta função em várias bandas de energia.

Substituindo a função de *Bloch* na equação de *Schrödinger* e utilizando o Hamiltoniano dado na Eq. (2.27), encontramos a equação de autovalores

$$\left( H_0 + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_\nu(\mathbf{k}) u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

com

$$H(\mathbf{k}) = H_0 + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad (2.31)$$

sendo  $H(\mathbf{k})$  a representação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  do Hamiltoniano  $H_0$ . Com a inclusão da interação spin-órbita, este Hamiltoniano toma a forma

$$H(k) = H_0 + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + H_{ps0} + H_{kso}, \quad (2.32)$$

onde aparecem dois novos termos,

$$H_{ps0} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [\nabla U(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.33)$$

$$H_{kso} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{k}. \quad (2.34)$$

O termo  $H_{ps0}$  representa a interação do spin com o campo magnético interno, devido ao movimento orbital dos elétrons, com momento  $\mathbf{p}$ , em torno do núcleo e, o termo  $H_{kso}$ , representa a interação do spin com um campo magnético efetivo, produzido pelo movimento do elétron, com momento  $\hbar\mathbf{k}$ , no cristal. Dessa forma, como a velocidade

do elétron em órbita atômica é muito maior que a velocidade do elétron no cristal com momento  $\mathbf{k}$  próximo do extremo ( ponto  $\Gamma$ ), o termo  $H_{kso}$  é muito menor que  $H_{ps0}$  e portanto, pode ser desprezado em cristais com simetria *zincblende*.

A Eq. (2.30) representa uma equação de autovalores para  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  no pequeno volume de uma célula unitária do cristal, onde essas funções são normalizadas e, como  $H(k)$  é um operador hermitiano, as funções  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , para um dado  $\mathbf{k}$ , formam um conjunto completo de funções. Escolhendo um ponto de referência  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ , para o qual  $E_\nu(\mathbf{k})$  e  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  são conhecidos, obtemos a equação de autovalores

$$H(\mathbf{k}_0) u_{\nu\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = E_\nu(\mathbf{k}_0) u_{\nu\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.35)$$

onde, da Eq. (2.31),  $H(\mathbf{k}_0)$  é da forma:

$$H(\mathbf{k}_0) = H_0 + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_0^2 \quad (2.36)$$

Isolando o valor de  $H_0$  e substituindo na Eq. (2.30) encontramos

$$\left( H(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \right) u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_\nu(\mathbf{k}) u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.37)$$

O próximo passo é transformar a equação acima em um sistema matricial de autovalores. Isto é feito, expandindo-se as não conhecidas funções *Bloch*  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  na base completa  $\{u_{\nu\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$ , dos estados de *Bloch* no ponto de alta simetria localizada no ponto  $\mathbf{k}_0 = 0$ ,

$$u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} c_{\nu\mu} u_{\mu 0}(\mathbf{r}). \quad (2.38)$$

Substituindo esta expressão na Eq. (2.37) e projetando o resultado em um estado particular  $u_{\nu 0}(\mathbf{r})$ , e integrando obtemos a equação matricial de autovalores:

$$\sum_{\mu} [H_{\nu\mu}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k})\delta_{\nu\mu}] c_{\nu\mu} \quad (2.39)$$

sendo

$$H'_{\nu\mu}(\mathbf{k}) = \left[ E_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right] \delta_{\nu\mu} + \frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{\nu\mu}^{\alpha} \quad (2.40)$$

com  $\alpha = x, y, z$  e

$$p_{\nu\mu}^{\alpha} = \int u_{\nu 0}^*(\mathbf{r}) p^{\alpha} u_{\mu 0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.41)$$

sendo os elementos de matriz do operador momento, entre os estados de *Bloch* no ponto  $k_0 = 0$  calculados no volume da célula unitária. Embora a Eq. (2.40) seja correta para qualquer valor de  $\mathbf{k}$ , ela é mais útil quando  $\mathbf{k}$  está mais próximo de zero, de modo que a parte não diagonal do Hamiltoniano,  $\frac{\hbar}{m} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{\nu\mu}^{\alpha}$ , pode ser tratado como uma perturbação. Este tratamento foi feito por *Kane* [6] usando uma teoria de perturbação desenvolvida por *Löwdin* [7]. Ao contrário da teoria de perturbação ordinária, que diagonaliza o Hamiltoniano  $H(k)$  por um processo iterativo, a teoria de *Löwdin* considera os estados do sistema divididos em duas categorias,  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ . Os estados pertencentes à categoria  $\mathcal{A}$ , por hipótese os mais importantes, interagem fortemente entre si, porém fracamente com os da categoria  $\mathcal{B}$ . As interações entre  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$  são removidas por um processo iterativo e obtém-se então as interações entre os estados da categoria  $\mathcal{A}$  renormalizados. Até a segunda ordem de perturbação temos:

$$H'_{\nu\mu} = H_{\nu\mu} + \sum_{\gamma}^{\mathcal{B}} \frac{H_{\nu\gamma} H_{\gamma\mu}}{H_{\nu\nu} - H_{\gamma\gamma}} \quad (2.42)$$

onde os índices  $\nu, \mu$  pertencem a categoria  $\mathcal{A}$  e  $\gamma$  a categoria  $\mathcal{B}$ . Na aproximação de *Kane* os estados da categoria  $\mathcal{A}$  são os estados de condução e valência (buraco leve e pesado e *split-off*), e todas as outras bandas pertencem a categoria  $\mathcal{B}$ . Esses estados e os pontos de simetria  $\Gamma$  são ilustrados na Fig. (2.1) para uma estrutura *zinblende*. Essa estrutura

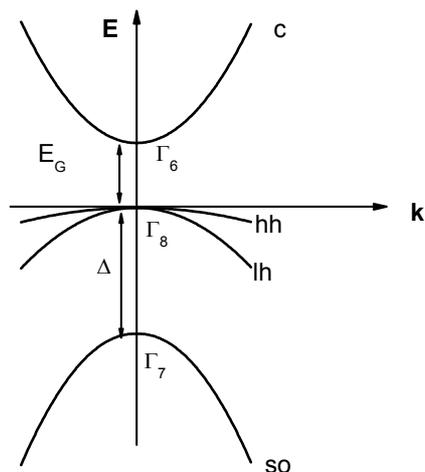


Figura 2.1: Estruturas de bandas dos compostos III-V próximos ao ponto  $\Gamma$ . O gap fundamental é denotado por  $E_G$  e a energia spin-órbita  $\Delta$ .

cristalina pode ser visualizada como duas redes *fcc*, cada uma possuindo um tipo de átomo, o que introduz uma quebra na simetria de inversão espacial presente na estrutura cristalina do diamante que tem um tipo de átomo.

Como nosso interesse nesse trabalho é calcular a transmissividade de buracos leves e pesados em heteroestruturas de dupla barreira, optamos pelo modelo de *Luttinger* [3]. Na aproximação de *Luttinger*, os estados mais importantes ( $\mathcal{A}$ ) são os de valência ( $\Gamma_8$ ) e os demais estados da classe ( $\mathcal{B}$ ), dentre eles, os da banda de buraco separado ( $\Gamma_7$ ) e condução ( $\Gamma_6$ ), sendo tratados com uma pequena perturbação, pois o *gap* de energia  $E_G$  e a medida da interação spin-órbita  $\Delta$ , são muito grandes, quando comparada com as energias de interesse.

Quando incluímos o spin do elétron as funções de *Bloch* no topo da banda de valência são usualmente representadas por:  $\{|\uparrow X\rangle, |\uparrow Y\rangle, |\uparrow Z\rangle, |\downarrow X\rangle, |\downarrow Y\rangle, |\downarrow Z\rangle\}$ . Entretanto com o objetivo de simplificar o modelo de *Luttinger*, transformamos o Hamiltoniano efetivo para a base  $|J, M_J\rangle$  dos autoestados de momento angular total  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ , onde a

interação spín-órbita é diagonal, entrando como uma parte não renormalizada na teoria de *Löwdin*. Essa base é obtida aplicando a técnica de *Clebsch-Gordon* para a adição de momentos angulares e tem a forma:

$$\begin{aligned}
u_{3/2,3/2} &\rightarrow |h \uparrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\
u_{3/2,-1/2} &\rightarrow |l \downarrow\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow\rangle + 2|Z \downarrow\rangle] \\
u_{3/2,-3/2} &\rightarrow |h \downarrow\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\
u_{3/2,1/2} &\rightarrow |l \uparrow\rangle = \frac{-i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow\rangle - 2|Z \uparrow\rangle]
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Dessa forma, aplicando a teoria de perturbação de *Löwdin*, juntamente com operações de simetria, o Hamiltoniano de *Luttinger* pode ser escrita como:

$$H_{\nu\mu}(\mathbf{k}) = \left[ E_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right] \delta_{\nu\mu} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\gamma \neq \nu}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_{\alpha} k_{\beta} p_{\nu\gamma}^{\alpha} p_{\gamma\mu}^{\alpha}}{E_{\nu}(0) - E_{\gamma}(0)} \tag{2.44}$$

onde  $\alpha, \beta = x, y, z$  e  $\nu, \mu \in \mathcal{A}$ .

$$\mathbf{H}_L = \begin{pmatrix} P_k + Q_k & -S_k & R_k & 0 \\ -S_k^{\dagger} & P_k - Q_k & 0 & R_k \\ R_k^{\dagger} & 0 & P_k - Q_k & S \\ 0 & R_k^{\dagger} & S^{\dagger} & P_k + Q_k \end{pmatrix} \tag{2.45}$$

onde os elementos da matriz são dados por:

$$\begin{aligned}
P_k &= \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), & Q_k &= \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\
S_k &= \frac{\hbar^2}{2m} 2\sqrt{3} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z, & R_k &= \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} [-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y]
\end{aligned} \tag{2.46}$$

e os parâmetros de *Luttinger*  $\gamma_1, \gamma_2$  e  $\gamma_3$  são constantes reais e são obtidos a partir das massa efetivas do buraco pesado ( $m_{hh}^*$ ) e buraco leve ( $m_{lh}^*$ ) ao longo da direção [100] e do buraco pesado ( $m_{hh}^{*[111]}$ ) ao longo da direção [111]:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \frac{1}{2} \left( \frac{m_0}{m_{lh}^*} + \frac{m_0}{m_{hh}^*} \right) \\
\gamma_2 &= \frac{1}{4} \left( \frac{m_0}{m_{lh}^*} - \frac{m_0}{m_{hh}^*} \right) \\
\gamma_2 &= \frac{1}{4} \left( \frac{m_0}{m_{lh}^*} + \frac{m_0}{m_{hh}^*} - \frac{m_0}{m_{hh}^{*[111]}} \right)
\end{aligned} \tag{2.47}$$

## 2.3 Hamiltoniano de Bir-Pikus

O Hamiltoniano de *Luttinger* foi derivado sob a hipótese de que o parâmetro de rede do cristal hospedeiro era igual ao parâmetro de rede do substrato, onde o material foi crescido e, que não existe nenhuma pressão externa (*stress*) aplicado ao cristal. Dessa forma o nosso sistema está livre de tensões internas (*strain*) e externas (*stress*). Como acontece com a maioria das heteroestruturas obtidas por crescimento epitaxial, a introdução de pressões externas podem mudar a estrutura de bandas do material. Nosso objetivo nesse trabalho é estudar como essas pressões (compressão ou tração) modificam as propriedades de transporte em dupla barreira ressonante.

O *stress* é incorporado na estrutura de bandas como um termo perturbativo de primeira ordem na forma [8]

$$(\mathbf{H}_\varepsilon)_{ij} = \sum_{\alpha\beta} \mathcal{D}_{ij}^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \tag{2.48}$$

onde  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  são os coeficientes do tensor *stress* e  $\mathcal{D}_{ij}^{\alpha\beta}$  são os elementos de matriz do operador deformação  $\mathbf{D}^{\alpha\beta}$  satisfazendo as relações de simetria  $\mathbf{D}^{\alpha\beta} = \mathbf{D}^{\beta\alpha}$  e  $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\beta\alpha}$ . Na base dos estados de *Bloch* em  $|J, M_J\rangle$  o Hamiltoniano  $\mathbf{H}_\varepsilon$  pode ser escrito como:

$$\mathbf{H}_\varepsilon = \begin{pmatrix} P_\varepsilon + Q_\varepsilon & -S_e & R_e & 0 \\ -S_e^\dagger & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & R_e \\ R_e^\dagger & 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & S_e \\ 0 & R_e^\dagger & S_e^\dagger & P_\varepsilon + Q_\varepsilon \end{pmatrix} \tag{2.49}$$

conhecido como hamiltoniano de *Bir-Pikus* [4]. Os termos  $P_\varepsilon, Q_\varepsilon, R_\varepsilon$  e  $S_\varepsilon$  são dados por:

$$\begin{aligned} P_\varepsilon &= a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), & Q_\varepsilon &= -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \\ R_\varepsilon &= \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy}, & S_\varepsilon &= -d (\varepsilon_{zx} - i\varepsilon_{yz}) \end{aligned} \quad (2.50)$$

sendo  $a_v$ ,  $b$  e  $d$  os potenciais de deformação de *Bir-Pikus* que são determinados experimentalmente. Neste trabalho, vamos nos restringir ao *stress* externo uniaxial onde as componentes do tensor deformação satisfazem a relação

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - C_{12}^2} T \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zz} &= -\frac{C_{11}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - C_{12}^2} T \\ R_\varepsilon &= S_\varepsilon = 0, \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde  $C_{11}, C_{12}$ , são constantes elásticas determinadas experimentalmente [11],  $T$  é a pressão externa aplicada,  $T < 0$  (compressão) e  $T > 0$  (tração).

Aplicando uma transformação unitária [9], o Hamiltoniano total  $\mathbf{H}_t = \mathbf{H}_\varepsilon + \mathbf{H}_L$  pode ser bloco-diagonalizado em duas matrizes  $(2 \times 2)$ . Na nova base  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$  e  $|4\rangle$  [10] o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{U} \mathbf{H}_t \mathbf{U}^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{H}^U & 0 \\ 0 & \mathbf{H}^L \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

onde os blocos *upper* e *lower*  $\mathbf{H}^U$  e  $\mathbf{H}^L$  são dados por:

$$\mathbf{H}^U = \begin{pmatrix} P + Q & \tilde{R} \\ \tilde{R}^\dagger & P - Q \end{pmatrix}, \mathbf{H}^L = \begin{pmatrix} P + Q & \tilde{R}^\dagger \\ \tilde{R} & P - Q \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

onde  $P = P_k + P_\varepsilon$ ,  $Q = Q_k + Q_\varepsilon$ ,  $\tilde{R} = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} (\bar{\gamma} k_\rho^2 - 2i\gamma_3 k_\rho k_z)$  e o mometo paralelo

$k_\rho^2 = (k_x^2 + k_y^2)$ . A quantidade  $P_\varepsilon$  (hidrostático) introduz um *shift* na banda de valência, enquanto o termo anisotrópico  $Q_\varepsilon$  (*shear*) produz uma quebra da degenerescência das bandas de buracos em  $k = 0$ . Por simplicidade nós assumimos neste trabalho a aproximação axial, que significa assumir na expressão para  $R_k$ ,  $\gamma_2 = \gamma_3 = \bar{\gamma}$  com  $\bar{\gamma} = \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}$ .

Uma vez obtido o Hamiltoniano  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  dentro do formalismo de massa efetiva, o próximo passo desse trabalho é descrever a técnica da matriz de espalhamento para o cálculo da transmissividade em heteroestruturas de dupla barreira submetidas a tensões externas.

# Referências

- [1] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14, 61 (1970).
- [2] N. W. Aschroft and N. D. Mermin, *Solid Stat Physics* (Holt, Rinehart and Winston, 1976) p.176.
- [3] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955).
- [4] G. E. Pikus and G. L. Bir, Sov. Phys-Solid State, 1, 1502 (1959).
- [5] J. M. Ziman, *Principles of Solids* (cambrige University Press, London, 1972).
- [6] E.O. Kane, J. Phys. Chem. Solids, 1,249,1957.
- [7] P. Lowdin, J. Chem. Phys. 19, 1396 (1955).
- [8] J. M. Hinkley and J. singh, Phys. Rev. B 42, 3546 (1990).
- [9] Broido, D.A. e Sham, S., Phys. Rev. B31, 888 (1985).
- [10] S. L Chuang Phys. Rev. B40, 10379 (1989).
- [11] R. F. S. Hearmon, Rev. Mod. Phys. 18, 409 (1946).

# Capítulo III

## Técnica da Matriz de Espalhamento para o Cálculo da Transmissividade

Um grande número de trabalhos teóricos tem sido desenvolvidos para simular e estudar o tunelamento ressonante em sistemas de baixa dimensionalidade. A técnica da matriz de transferência desenvolvida por *Wessel e Altarelli* [1] na aproximação de massa efetiva é sem dúvida uma das mais utilizadas. Entretanto, é bem conhecido que essa técnica é numericamente instável quando aplicado a sistemas cuja largura da barreira excede alguns angstroms ( $\simeq 10 \text{ \AA}$ ).

Em vista dessas dificuldades que essa técnica apresenta, vamos discutir neste capítulo o cálculo da transmissividade ressonante em heteroestruturas semicondutoras de barreira dupla, cujas camadas estão submetidas a esforços de compressão e tração, usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação da massa efetiva do modelo de *Luttinger-Kohn*. Diferentemente do formalismo da matriz de transferência, a técnica da matriz de espalhamento é numericamente mais estável, permitindo o cálculo da transmissividade para sistemas com barreiras muito grandes ( $L_B \gg 10 \text{ \AA}$ ). De uma maneira geral, a técnica da matriz de espalhamento consiste em relacionar os coeficientes das ondas incidentes na heteroestrutura (emissor e coletor) com os coeficientes das ondas espalhadas (refletidas) nessas mesmas regiões. O procedimento básico para a obtenção

da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva, envolve as seguintes etapas: (1) inicialmente, resolve-se a equação de massa efetiva do cristal perfeito (*bulk*) para uma energia  $E$  e  $k_\rho$  fixados e determinam-se funções envelopes para cada tipo de portador; (2) em seguida, constrói-se a função de onda total em cada região da heteroestrutura como combinações linear das funções envelopes do cristal perfeito; (3) finalmente usa-se a continuidade da função de onda e da densidade de corrente em cada interface e obtém-se a matriz de espalhamento, que relaciona os coeficientes das ondas incidentes (emissor e coletor) na heteroestrutura com os coeficientes das ondas espalhadas (refletidas).

### 3.1 Solução da Equação de Massa Efetiva

Como vimos no capítulo 2, o Hamiltoniano *upper* e *lower* com *stress*, que descreve o movimento dos buracos da banda de valência pode ser escrito como

$$\mathbf{H}^U = \begin{pmatrix} P + Q & \tilde{R} \\ \tilde{R}^\dagger & P - Q \end{pmatrix}, \mathbf{H}^L = \begin{pmatrix} P + Q & \tilde{R}^\dagger \\ \tilde{R} & P - Q \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

No cristal perfeito, devido a simetria de translação, podemos escrever as funções envelopes  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  na seguinte forma  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Assim, a equação de massa efetiva pode ser escrita como

$$\mathbf{H}^{U,L}\mathbf{F}_v(\mathbf{k}) = E\mathbf{F}_v(\mathbf{k}), \quad (3.2)$$

onde  $v = (l, h)$  fixa o tipo de buraco leve ou pesado. As soluções para os autovetores nas bases  $|1\rangle, |2\rangle$  (*upper*) e  $|3\rangle, |4\rangle$  (*lower*) são respectivamente

$$\mathbf{F}_h^U(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} P - Q - E \\ -\tilde{R}^\dagger \end{pmatrix} \text{ e, } \mathbf{F}_l^U(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -\tilde{R} \\ P + Q - E \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{F}_h^L(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} P - Q - E \\ -\tilde{R} \end{pmatrix} \text{ e, } \mathbf{F}_l^L(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -\tilde{R}^\dagger \\ P + Q - E \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

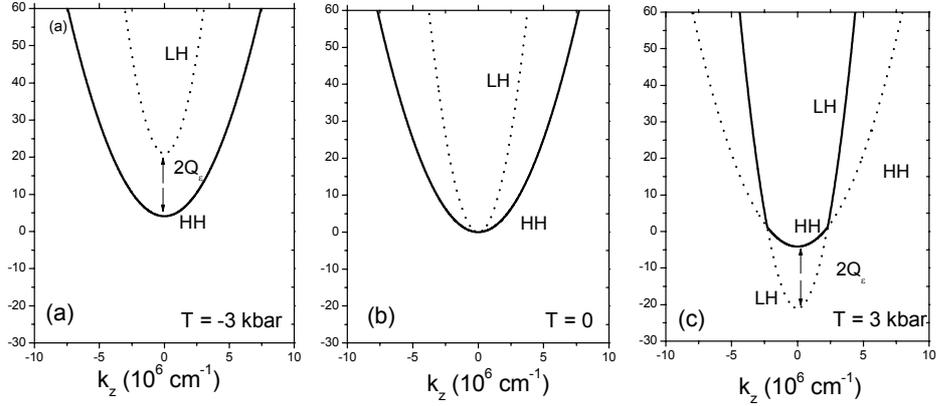


Figura 3.1: Estrutura de banda dos buracos leves (LH) e pesados (HH) para o *bulk* de GaAs, ilustrando a quebra de degenerescência em  $k_\rho = 0$ , devido ao *stress*, nos casos: (a) compressão, (b) sem *stress* e (c) tração.

No *bulk*, sem a presença de campos elétricos que quebrem a simetria de inversão espacial, os autovalores do Hamiltoniano *upper* e *lower* são degenerados:

$$E = P_k + P_\varepsilon \pm \text{sgn}(Q_\varepsilon) \sqrt{(Q_k + Q_\varepsilon)^2 + |\tilde{R}|^2} \quad (3.5)$$

onde o sinal (+) refere-se ao *heavy-hole* (HH) e o sinal (-) para o *light-hole* (LH). O sinal  $\text{sgn}(Q_\varepsilon)$  na Eq. (3.5) é necessário, porque  $Q_\varepsilon$  pode ser negativo (compressão) ou positivo (tração), enquanto a raiz quadrada é convencionalmente tomada como positiva.

Na Fig. (3.1) mostramos a relação de dispersão do *bulk* para o material GaAs no caso de: (a) compressão ( $T = -3 \text{ kbar}$ ), (b) sem *stress* ( $T = 0$ ) e (c) tração ( $T = 3 \text{ kbar}$ ), onde observamos o efeito do *stress* sobre a estrutura de bandas na direção  $k_z$ . Nos casos (a) e (c), observa-se a quebra da degenerescência em  $k_\rho = 0$  por uma quantidade  $2Q_\varepsilon$ , quando comparados com o caso sem *stress*. No caso da tração podemos ainda observar uma troca na posição relativa das bandas HH e LH em relação aos casos (a) e (b).

## 3.2 Natureza das soluções de $k_z$

No esquema de cálculo da matriz de espalhamento o valor de  $k_z$  é uma quantidade importante para a construção da função de onda em cada região da heteroestrutura. Da Eq. (3.5), podemos expressar o valor de  $k_z$  em função da  $E$  e  $k_\rho$ , para  $k_\rho \neq 0$ . Sendo assim:

$$k_z^2 = \frac{1}{2(B^2 - A^2)} \left\{ (2A^2 - G^2) k_\rho^2 - 2EA + 2BQ_\varepsilon \pm \left\{ \left[ (G^2 - 2A^2)k_\rho^2 + 2EA - 2BQ_\varepsilon \right]^2 - 4(B^2 - A^2) \left[ \left(\frac{B}{2}k_\rho^2 + Q_\varepsilon\right)^2 + D^2k_\rho^4 - (E - Ak_\rho^2)^2 \right] \right\}^{1/2} \right\} \quad (3.6)$$

onde

$$A^2 = \left(\frac{\hbar^2\gamma_1}{2m}\right)^2, \quad B^2 = 4\left(\frac{\hbar^2\gamma_2}{2m}\right)^2, \quad C^2 = 12\left(\frac{\hbar^2\gamma_3}{2m}\right)^2 \quad (3.7)$$

$$D^2 = 3\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}\right)\right]^2, \quad E' = E - P_\varepsilon, \quad G^2 = C^2 - B^2 \quad (3.8)$$

e o sinal (+) refere-se ao *heavy-hole* e (-) ao *light-hole*.

Os valores de  $k_{zh}$  e  $k_{zl}$  nem sempre são reais na região do poço e imaginários na região da barreira, mas dependem das magnitudes dos valores de  $k_\rho$  e da energia  $E$ . De fato, fixando-se  $k_\rho$  na Eq. (3.6) e impondo-se as condições necessárias para termos soluções reais ou complexas encontramos para quais intervalos de energia essas condições se verificam, dependendo do tipo de pressão aplicada, compressão ou tração.

### 3.2.1 Compressão

Para o caso de camadas comprimidas (esforço de compressão) as condições acima citadas, podem ser representadas por cinco energias críticas ( $E_{C_1}, E_{C_2}, E_{C_3}, E_{C_4}, E_{C_T}$ ) definidas como:

Região	Energia	$k_{zh}$	$k_{zl}$
<i>i</i>	$E > E_{C_4}$	Real (positivo)	Real (positivo)
<i>ii</i>	$E_{C_4} > E > E_{C_3}$	Real (positivo)	Imaginário Puro
<i>iii</i>	$E_{C_3} > E > E_{C_2} \begin{cases} E_{C_3} > E_{C_T} \\ E_{C_3} < E_{C_T} \end{cases}$	Real (positivo) Imaginário Puro	Real (negativo) Imaginário Puro
<i>iv</i>	$E_{C_2} > E > E_{C_1}$	Complexo	Complexo
<i>v</i>	$E_{C_1} > E$	Imaginário Puro	Imaginário Puro

Tabela 3.1: Natureza das soluções de  $k_z$  para o esforço de compressão.

$$E_{C_1} = P_\varepsilon + Ak_\rho^2 - 4 [G^2k_\rho^2 - 2BQ_\varepsilon] A - \frac{1}{2B^2} \left\{ [G^2k_\rho^2 - 2BQ_\varepsilon]^2 A^2 - B^2 \left[ [G^2k_\rho^2 - 2BQ_\varepsilon]^2 - 4(B^2 - A^2) \left[ \left( \frac{B}{2}k_\rho^2 + Q_\varepsilon \right)^2 + D^2k_\rho^4 + Q_\varepsilon^2 + D^2k_\rho^4 \right] \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.9)$$

$$E_{C_2} = P_\varepsilon + Ak_\rho^2 - 4 [G^2k_\rho^2 - 2BQ_\varepsilon] A + \frac{1}{2B^2} \left\{ [G^2k_\rho^2 - 2BQ_\varepsilon]^2 A^2 - B^2 \left[ [G^2k_\rho^2 - 2BQ_\varepsilon]^2 - 4(B^2 - A^2) \left[ \left( \frac{B}{2}k_\rho^2 + Q_\varepsilon \right)^2 + D^2k_\rho^4 + Q_\varepsilon^2 + D^2k_\rho^4 \right] \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.10)$$

$$E_{C_3} = P_\varepsilon + Ak_\rho^2 - \left\{ \left( \frac{B}{2}k_\rho^2 + Q_\varepsilon \right)^2 + D^2k_\rho^4 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.11)$$

$$E_{C_4} = P_\varepsilon + Ak_\rho^2 + \left\{ \left( \frac{B}{2}k_\rho^2 + Q_\varepsilon \right)^2 + D^2k_\rho^4 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.12)$$

$$E_{C_T} = P_\varepsilon + Ak_\rho^2 + \frac{(B^2 - C^2)k_\rho^2 + 2BQ_\varepsilon}{2A}. \quad (3.13)$$

Essas energias críticas dividem o espectro de energia em cinco regiões (*i*), (*ii*), (*iii*), (*iv*) e (*v*). A natureza de  $k_z$  para o esforço de compressão é mostrada na Tab. (3.1). Essa natureza coincide com aquelas verificadas para o caso sem *stress* descritas na Ref. [1].

### 3.2.2 Tração

No caso de camadas tracionadas, nem sempre as superfícies de energia críticas existem para todos valores dos parâmetros  $k_\rho$ . A partir das definições de  $E_{C_1}$  e  $E_{C_2}$ , podemos mostrar que para valores de  $k_\rho$ , pertencentes ao intervalo  $0 < k_\rho < K_T$  essas energias críticas tornam-se funções complexas deste parâmetro, ao contrário do que acontece com o caso sem *stress* ou esforço de compressão, onde essas energias são sempre funções reais para todo o domínio dos parâmetro  $k_\rho$ . A constante  $K_T$  que depende da intensidade do esforço de tração é definida como

$$K_T = 2\sqrt{\frac{BQ_\varepsilon C^2}{(C^4 - 2B^2C^2 - 4B^2D^2)}} \quad (3.14)$$

onde os valores de  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  são funções dos parâmetros de *Luttinger* definidos na Eq. (3.7) e,  $Q_\varepsilon$  é o potencial de deformação (*stress*), como visto no capítulo anterior. Sendo assim, a natureza de  $k_z$  para as camadas tracionadas, podem ser classificadas de acordo com os valores de  $k_\rho$ , relacionados com o intervalo abaixo referido.

(a)  $0 < k_\rho < K_T$ . Para os valores de  $k_\rho$  pertencentes a este intervalo, as energias  $E_{C_1}$  e  $E_{C_2}$  são funções complexas desse parâmetro e, diferentemente do esforço de compressão só temos duas energias críticas,  $E_{C_3}$  e  $E_{C_4}$  que dividem o espectro de energia em três regiões (i), (ii), (iii). Desta forma a natureza das soluções para  $k_z$  no esforço de tração com  $k_\rho$  pertencente ao intervalo  $0 < k_\rho < K_T$  são classificadas de acordo com a Tab.(3.2). Analisando essa tabela podemos verificar que a natureza de  $k_z$ , nas regiões (ii) e (iii), para valores de  $k_\rho$  no intervalo acima referido, é diferente do caso do material sem *stress* ou *stress* compressivo [vê Tab. (3.1)]. No caso da região (ii) o esforço de tração é responsável pela inversão  $hh \Leftrightarrow lh$  da natureza das soluções de  $k_z$ , tornando  $k_{zh}$  imaginário puro e  $k_{zl}$  real.

(b)  $k_\rho > K_T$ . Neste caso todas as energias críticas são funções reais desse parâmetro, dadas pelas Eqs. [3.9, 3.10, 3.11, 3.12, 3.13] e, do mesmo modo que para as camadas comprimidas,  $E_{C_1}$ ,  $E_{C_2}$ ,  $E_{C_3}$ ,  $E_{C_4}$  e  $E_{C_T}$  dividem o espectro de energia em cinco regiões

Região	Energia	$k_{zh}$	$k_{zl}$
<i>i</i>	$E > E_{C_4}$	Real (positivo)	Real (positivo)
<i>ii</i>	$E_{C_4} > E > E_{C_3}$	Imaginário Puro	Real (positivo)
<i>iii</i>	$E_{C_3} > E$	Imaginário Puro	Imaginário Puro

Tabela 3.2: Natureza das soluções de  $k_z$  para o esforço de tração com  $k_\rho < K_T$ .

Região	Energia	$k_{zh}$	$k_{zl}$
<i>i</i>	$E > E_{C_4}$	Real (positivo)	Real (positivo)
<i>ii</i>	$E_{C_4} > E > E_{C_3}$	Imaginário Puro	Real (positivo)
<i>iii</i>	$E_{C_3} > E > E_{C_2} \begin{cases} E_{C_3} > E_{C_T} \\ E_{C_3} < E_{C_T} \end{cases}$	Real (negativo) Imaginário Puro	Real (positivo) Imaginário Puro
<i>iv</i>	$E_{C_2} > E > E_{C_1}$	Complexo	Complexo
<i>v</i>	$E_{C_1} > E$	Imaginário Puro	Imaginário Puro

Tabela 3.3: Natureza das soluções de  $k_z$  para o esforço de tração com  $k_\rho > K_T$ .

(*i*), (*ii*), (*iii*), (*iv*), (*v*). Neste caso, a natureza de  $k_z$ , para essas regiões é classificada de acordo com a Tab. (3.3).

Como mostra a Tab. (3.3), a natureza de  $k_z$  nas regiões (*ii*) e (*iii*) para o esforço de tração, com  $k_\rho > K_T$  é diferente do esforço de compressão, como vemos na Tab. (3.1). O esforço de tração provoca uma inversão da natureza das soluções de  $k_z$ ; assim na região (*iii*)  $k_{zh}$  torna-se real negativo e  $k_{zl}$  real positivo. A natureza de  $k_z$  para o esforço de compressão como função da energia e  $k_\rho = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  é ilustrada na Fig. (3.2).

De um modo geral, cada uma das regiões acima mencionadas representa uma situação física bem definida, quando o movimento da partícula é descrito em função da energia. Uma das regiões mais interessantes é a região (*iii*), tanto na compressão quanto na tração, quando  $E_{C_3} > E_{C_T}$ . Nessa região para o esforço de compressão, a velocidade de grupo dos buracos leves,  $V_{gl} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} < 0$  para  $k_{zl} > 0$ , o que nos leva a uma velocidade de grupo de sentido contrário a direção de propagação; assim para termos uma  $V_{gl} > 0$  com uma onda propagante na direção  $z$ -positiva, devemos ter  $k_{zl} < 0$ . O mesmo acontece para o esforço de tração para termos  $V_{gh} > 0$  devemos ter  $k_{zh} < 0$ . Essa situação para a compressão é ilustrado na Fig (3.3), onde mostramos o gráfico da velocidade de grupo dos buracos leves em função de  $k_z$  para  $T = -3 \text{ kbar}$  e  $k_\rho = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . Os valores

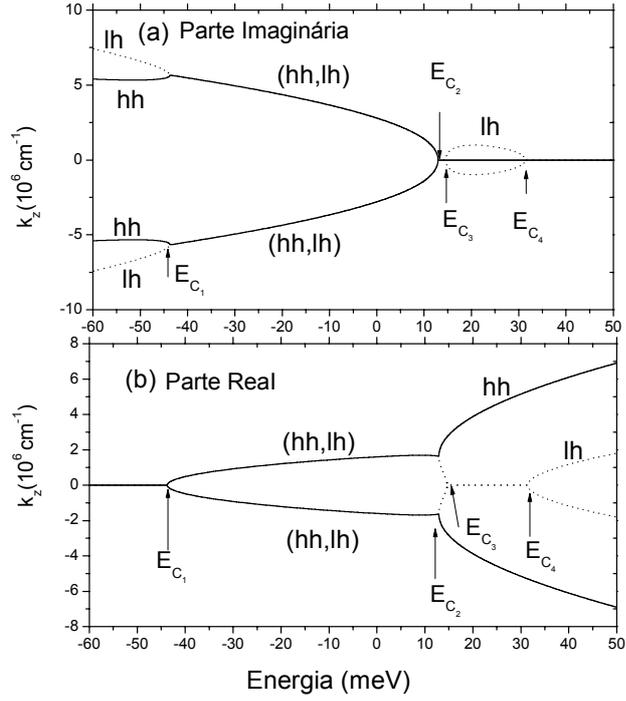


Figura 3.2: Representação da parte real (b) e imaginária (a) da solução de  $k_z$ , com  $T = -3 \text{ kbar}$  (compressão) e  $k_\rho = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , dos buracos leves (linha pontilhada) e pesados (linha contínua) para o *bulk* do GaAs. As energias críticas  $E_{C_1}, E_{C_2}, E_{C_3}, E_{C_4}, E_{C_T}$  dividem o espectro de energia em cinco regiões (i), (ii), (iii), (iv) e (v) cuja natureza está de acordo com a Tab. (3.1).

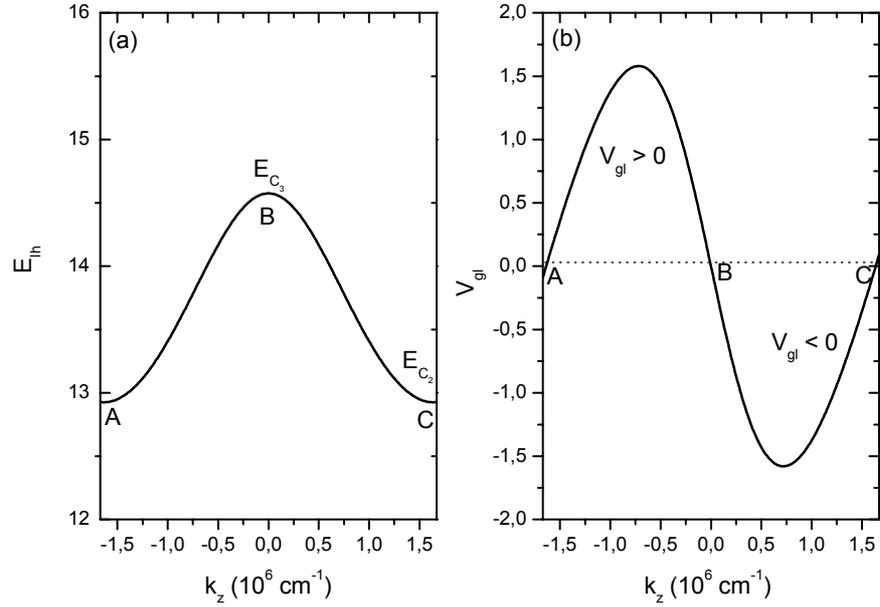


Figura 3.3: (a) Dispersão dos buracos leves e (b) Velocidade de grupo dos buracos leves em função de  $k_z$  para  $k_\rho = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . Entre os pontos A e B a velocidade de grupo  $V_{gl} < 0$  para  $k_z < 0$ .

$k_z < 0$  que vão de A até B correspondem a energias no intervalo  $E_{C_2} < E(k_z, k_\rho) < E_{C_3}$  (região *iii*) onde a velocidade de grupo  $V_{gl} > 0$ .

### 3.3 Formalismo da Matriz de Espalhamento

Nas seções anteriores discutimos as soluções da equação de massa efetiva e a natureza de  $k_z$  necessárias para a construção da função de onda total em cada região da heteroestrutura. Nesta seção, essas soluções serão usadas na obtenção da matriz de espalhamento para o cálculo da transmissividade ressonante em dupla barreira, submetidas a tensões externas.

A técnica da matriz de espalhamento consiste em relacionar os coeficientes  $(\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_N)$ ,

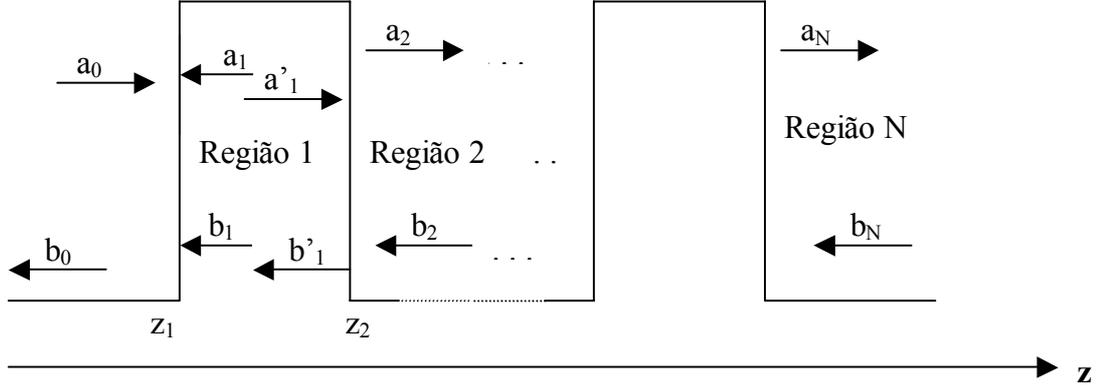


Figura 3.4: Estrutura dupla de barreiras mostrando os coeficientes das ondas incidentes e das ondas, refletidas ou espalhadas, em cada região.

das ondas que incidem nas interfaces de uma heteroestrutura, com os coeficientes das ondas espalhadas (refletidas),  $(\mathbf{a}_N, \mathbf{b}_0)$  como esquematizado na Fig. 3.4. A função de onda em cada região da heteroestrutura é obtida, tomando-se combinações lineares das soluções no cristal perfeito com os mesmos valores de energia  $E$  e momento paralelo  $k_\rho$  para os correspondente valores de  $k_z = \pm k_{zh}, \pm k_{zl}$ . Dessa forma, a função de onda total em cada região  $n$  da heteroestrutura pode ser escrita como

$$\mathbf{F}(\mathbf{z}) = \sum_{v=h,l} a_{v,j} \mathbf{F}_{v,j}(k_{z,v}) e^{ik_{zv}(z-z_n)} + b_{v,j} \mathbf{F}_{v,j}(-k_{z,v}) e^{-ik_{zv}(z-z_n)}, \quad (3.15)$$

aqui, estamos omitindo a função de *Bloch*  $u_0$ , uma vez que as camadas semicondutoras que formam o sistema de dupla barreira (GaAs, AlAs) são de *gap* direto, e portanto, dentro da aproximação de massa efetiva para as heteroestruturas com camadas alaternadas ABAB....  $u_0^{(A)} = u_0^{(B)}$ . Aplicando as condições de contorno na interface  $n + 1$ , ou seja, a conservação da densidade de probabilidade e da densidade de corrente

$$\begin{cases} \mathbf{F}(z_j) |_{z_j} = \text{contínuo} \\ \mathbf{J}_z \mathbf{F}(z_j) |_{z_j} = \text{contínuo} \end{cases} \quad (3.16)$$

sendo  $\mathbf{J}_z$  o operador densidade de corrente para o Hamiltoniano de *Luttinger*, que tem a seguinte forma:

$$\mathbf{J}_z^U = \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z & -i\sqrt{3}\gamma_3k_\rho \\ i\sqrt{3}\gamma_3k_\rho & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z \end{pmatrix}$$

para o Hamiltoniano *upper*

$$\mathbf{J}_z^L = \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z & i\sqrt{3}\gamma_3k_\rho \\ -i\sqrt{3}\gamma_3k_\rho & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z \end{pmatrix}$$

para o Hamiltoniano *lower*, encontramos a seguinte equação matricial:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n11} & \mathbf{M}_{n12} \\ \mathbf{M}_{n21} & \mathbf{M}_{n22} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n+111} & \mathbf{M}_{n+112} \\ \mathbf{M}_{n+121} & \mathbf{M}_{n+122} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

onde as submatrizes de dimensão  $(2 \times 2)$ ,  $\mathbf{M}_{n11}$ ,  $\mathbf{M}_{n12}$ ,  $\mathbf{M}_{n21}$  e  $\mathbf{M}_{n22}$  são os elementos que formam a matriz de transferência usual  $\mathbf{M}$  [3].

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_h^+ & \mathbf{F}_l^+ & \mathbf{F}_h^- & \mathbf{F}_l^- \\ \mathbf{J}_{zh}^+ \mathbf{F}_h^+ & \mathbf{J}_{zl}^+ \mathbf{F}_l^+ & \mathbf{J}_{zh}^- \mathbf{F}_h^- & \mathbf{J}_{zl}^- \mathbf{F}_l^- \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

onde usamos uma notação comprimida para os elementos na forma  $\mathbf{F}_\nu^\pm \equiv \mathbf{F}_\nu(\pm k_{z\nu})$ ,  $\mathbf{J}_{z\nu}^\pm = \mathbf{J}_{z\nu}(\pm k_{z\nu})$ ,  $\nu = h, l$ . O coeficiente  $\mathbf{a}_n$  é o vetor que representa a amplitude da onda incidente para os buracos leves e pesados e  $\mathbf{b}_n$  para as ondas refletidas. Manipulando algebricamente a Eq. (3.17), podemos relacionar os coeficientes das ondas espalhadas numa interface ( $\mathbf{a}_{n+1}$  e  $\mathbf{b}_n$ ) com as incidentes ( $\mathbf{a}_n$  e  $\mathbf{b}_{n+1}$ ), na forma :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{n+1} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

sendo

$$\mathbf{S}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n+111} & -\mathbf{M}_{n12} \\ \mathbf{M}_{n+121} & -\mathbf{M}_{n22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n11} & -\mathbf{M}_{n+112} \\ \mathbf{M}_{n21} & -\mathbf{M}_{n+122} \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

a matriz de espalhamento para a interface  $n + 1$ .

Aplicando as condições de contorno nas interfaces localizadas nas posições  $z = z_1$  e  $z = z_2$ , obtemos:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

que relaciona os coeficientes das ondas espalhadas e incidentes na heteroestrutura. Os coeficientes das ondas que entram na região 1 ( $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}'_1$ ), estão relacionados com os coeficientes que saem ( $\mathbf{a}'_1, \mathbf{b}_1$ ), através da equação matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

onde

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} e^{ik_{zh}d} & 0 & 0 & 0 \\ & e^{ik_{zl}d} & & \\ & & e^{-ik_{zh}d} & \\ & & & e^{-ik_{zl}d} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

é a matriz de espalhamento na região 1 de largura  $d$ . Os valores  $k_{zh}$  e  $k_{zl}$  são vetores de onda ao longo da direção de propagação  $z$ , que são obtidos através da relação de dispersão  $k_z = f(E, k_\rho)$ . A partir das Eqs. (3.22) e (3.23), obtemos a seguinte relação:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

onde  $\otimes$  é o símbolo que representa a composição em série de duas matrizes, cuja regra do produto é dado na Ref. [11]. Da mesma forma usando as Eqs. (3.22) e (3.25), podemos combinar  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2$ :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Aplicando as condições de contorno nas outras interfaces e sempre combinando ondas incidentes e espalhadas em cada estágio da heteroestrutura, obtém-se

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_4 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_4 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

onde

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4 \quad (3.28)$$

é a matriz de espalhamento total para uma heteroestrutura de dupla barreira. Re-definindo os coeficientes na região do emissor e coletor, como

$$\mathbf{a}_4 = \mathbf{t} = \begin{pmatrix} t_h \\ t_l \end{pmatrix}, \mathbf{b}_0 = \mathbf{r} = \begin{pmatrix} r_h \\ r_l \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

e usando o fato de que não temos nenhuma onda incidente na região do coletor, a Eq. 3.27 pode ser reescrita como:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \mathbf{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

onde,  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{r}$  determinam respectivamente as amplitudes de probabilidade de tunelamentos

e reflexões de cada tipo de portador,  $\mathbf{a}_0$  é o coeficiente de entrada e  $\mathbf{S}_{11}, \mathbf{S}_{12}, \mathbf{S}_{21}, \mathbf{S}_{22}$  são os elementos da matriz de espalhamento com dimensão  $2 \times 2$ . Assim os coeficientes das ondas transmitidas obtidos da Eq (3.30) podem ser escritos como  $\mathbf{t} = \mathbf{S}_{11}\mathbf{a}_0$ .

### 3.4 Transmissividade

Uma vez determinado a matriz de espalhamento, que relaciona os coeficientes das ondas incidentes e espalhadas nas regiões do emissor e coletor, o próximo passo é calcular a transmissividade em um sistema de dupla barreira. A transmissividade é uma propriedade importante através do qual podemos determinar os níveis de energia (estados *quase-ligados*) na região do poço, bem como o tempo de vida de cada um desses níveis, pois quando a energia incidente do buraco estiver em ressonância com um desses níveis, surgirá picos nas curvas de transmissão versus energia.

Como mostrado na Ref. [1] a corrente de probabilidade para os portadores,  $\nu = h, l$  em termos das funções envelopes  $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ , e do operador densidade de corrente pode ser escrita como  $j_{z,\nu} = \text{Re}(\mathbf{F}_\nu^\dagger \mathbf{J}_{z\nu} \mathbf{F}_\nu)$ . Assim seguindo a discussão da Ref. [1] e tomando a normalização  $|a_0| = 1$  nós definimos a transmissividade e refletividade como

$$T_\nu = \frac{|t_\nu|^2 \text{Re} \left[ \mathbf{F}_\nu^{+\dagger} J_z \mathbf{F}_\nu^+ \right]_N}{\text{Re} \left[ \mathbf{F}_\nu^{+\dagger} J_z \mathbf{F}_\nu^+ \right]_0} \quad (3.31)$$

$$R_\nu = \frac{|r_\nu|^2 \text{Re} \left[ \mathbf{F}_\nu^{+\dagger} J_z \mathbf{F}_\nu^+ \right]_N}{\text{Re} \left[ \mathbf{F}_\nu^{+\dagger} J_z \mathbf{F}_\nu^+ \right]_0} \quad (3.32)$$

com a condição  $\sum_\nu T_\nu + R_\nu = 1$ , onde  $\nu = h, l$ ,  $N$  e  $0$  indicam as regiões de coletor e emissor, respectivamente.

No próximo capítulo usaremos o formalismo da matriz de espalhamento para calcular a transmissividade em sistemas de dupla barreira, cujas camadas estão sujeitas tensões externas.

# Referências

- [1] R. Wessel and M. Altarelli, Phys. Rev. B **39**, 12 802 (1989).
  - [2] C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, Phys. Rev. B **43**, 7 027 (1990).
  - [3] A. C. Bittencourt, A. M Cohen and G. E. Marques Phys. Rev. B **57**, 4525 (1998).
- M. Cahay, M. McLennan, S. Datta. Phys. Rev. B **17**, 10125 (1988).

# Capítulo IV

## Resultados da Transmissividade

Neste capítulo, usaremos os métodos numéricos descritos anteriormente, para estudar, discutir e apresentar os resultados para o tunelamento ressonante de buracos em uma heteroestrutura semicondutora de dupla barreira do tipo GaAs/AlAs, submetidas à pressões externas, compressão e tração, usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de *Luttinger-Kohn*. Todo o processo de cálculo da transmissividade usando a técnica da matriz de espalhamento pode ser resumido como segue:

(a) inicialmente, resolve-se analiticamente a equação de massa efetiva em cada região da heteroestrutura, usando-se o Hamiltoniano de *Luttinger* com *stress*, obtendo-se os autovalores e autovetores (funções envelopes). A partir da expressão da energia, deriva-se as soluções para o vetor de onda  $k_z$  satisfazendo às condições  $k_{zv} = f(E - V, k_\rho)$ , sendo essas soluções para os estados classificados como *heavy-hole* e *light-hole*. As funções envelopes obtidas das soluções da equação de massa efetiva, são  $\mathbf{F}_\nu^{U,L}(\mathbf{k})$  para os Hamiltonianos *upper* e *lower*; (b) em seguida, constrói-se a função de onda total em cada região da heteroestrutura como combinação linear das quatro ondas planas, correspondentes às quatro soluções  $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ , substituindo-se  $k_{zv} = \pm k_{zh}, \pm k_{zl}$  para um dado valor de energia  $E$  e momento paralelo  $k_\rho = (k_x, k_y)$ ; (c) usando as duas condições de contorno em cada interface, uma que garanta a continuidade da função de onda total e a outra, a conser-

vação da densidade de probabilidade de corrente, podemos obter uma equação matricial que relaciona os coeficientes das ondas incidentes na heteroestrutura (emissor e coletor) com os coeficientes das ondas espalhadas, através da matriz de espalhamento.

No esquema de cálculo descrito acima, devemos conhecer os coeficientes de entrada na região de incidência,  $a_0 = (a_{0_{hh}}, a_{0_{lh}})$ , o que significa dizer que estabelecemos as condições iniciais para o movimento. Cada um desses coeficientes está relacionado com o tipo de buraco no estado *upper* ou *lower*, e depende da escolha inicial da partícula incidente. Assim, por exemplo, para uma partícula incidente do tipo *heavy-hole* no estado *upper* ou *lower* (que denotaremos por HH in) os coeficientes de entrada são  $a_0 = (1, 0)$ ; por outro lado, se incidirmos na entrada uma partícula no estado de valência *light-hole* (LH in), para Hamiltonianos *upper* ou *lower* os coeficientes de entrada são  $(0, 1)$ . Para ambos os Hamiltonianos, *upper* ou *lower* as curvas de transmissividades serão denotadas por HH out e LH out qualquer que seja a partícula incidente.

Os resultados dessa dissertação estão divididos em seções, relacionados aos caso  $k_\rho = 0$  e  $k_\rho \neq 0$ , já que as interpretações de cada uma dessas situações são conceitualmente diferentes. Como já mencionamos neste trabalho, o método da massa efetiva adotado, não inclui acoplamento entre os estados de valência quando o momento lateral  $k_\rho = 0$ , dando origem a dois canais de tunelamento independentes, um para partícula do tipo *heavy-hole* (HH) e outro, *light-hole* (LH) puros. Entretanto, na situação  $k_\rho \neq 0$ , os estados são acoplados (*mixing*) e não podem ser distinguidos; assim usaremos as notações HH e LH apenas por questão de conveniência.

Para estudar o efeito do *stress* no tunelamento de buracos, escolhemos a heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs submetida a *stress* uniaxial  $T$  aplicado na direção (001), conforme ilustrado na Fig. (4.1); quanto às dimensões do sistema, usamos a seguinte notação para representar as larguras do poço e barreiras:  $(L_{B1}, L_P, L_{B2})$ , onde  $L_{B1}$  representa a largura da barreira da esquerda,  $L_P$  a largura do poço e  $L_{B2}$  a largura da barreira da direita. O *stress* com  $T < 0$  e  $T > 0$ , correspondem aos esforços de compressão e tração respectivamente, sendo dados em unidades de *kbar*. Em todos os

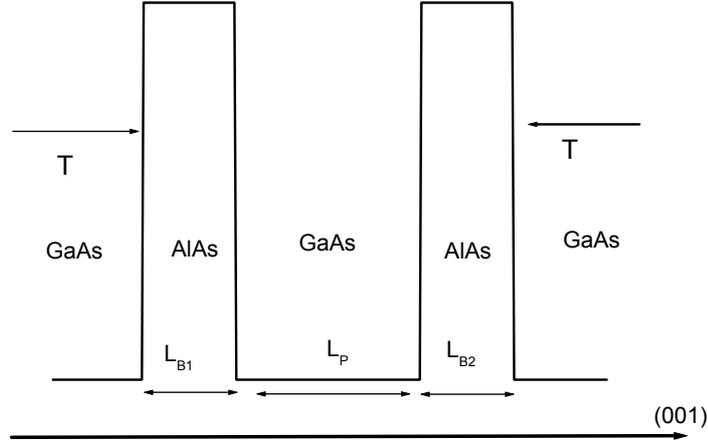


Figura 4.1: Representação esquemática do perfil de potencial de uma heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs com dimensões  $(L_{B1}, L_P, L_{B2})$ , submetida a *stress* uniaxial  $T$  na direção (001). A descontinuidade da banda de valência nas interfaces vale  $\Delta E_V = 550 \text{ meV}$ .

casos usamos o *band-offset*  $\Delta E_V = 550 \text{ meV}$ .

Quando nos referimos ao caso sem *stress*, estamos considerando os termos do Hamiltoniano de *Bir-Pikus*,  $P_\varepsilon$  e  $Q_\varepsilon$  nulos; esses termos aparecem na diagonal do Hamiltoniano de *Luttinger*, sendo responsáveis no *bulk*, pelo *shift* hidrostático ( $P_\varepsilon$ ) da banda de valência e pela separação dos extremos das bandas HH e LH. Os parâmetros de massa efetiva, potenciais de deformação e constantes elásticas para a heteroestrutura de GaAs e AlAs estão listados na Tab. (4.1) [1]. Desde que as constantes elásticas para o GaAs e AlAs são as mesmas, a componente hidrostática  $P_\varepsilon$  somente introduz um *shift* no potencial da estrutura, e isto não muda o potencial da barreira (os *shifts* nos extremos das bandas de valência do GaAs e AlAs são iguais). Contudo devido ao *splitting*  $2Q_\varepsilon$  o alinhamento relativo entre os estados HH e LH no poço quântico são alterados.

Parâmetros	GaAs	AlAs
$\gamma_1$	6,85	3,45
$\gamma_2$	2,1	0,68
$\gamma_3$	2,9	1,29
$C_{11}$ (dyn/cm <sup>2</sup> )	11,88	11,88
$C_{12}$ (dyn/cm <sup>2</sup> )	5,38	5,38
$E_G$ (eV)	1,42	2,766
$a$ (eV)	-9,77	-9,77
$b$ (eV)	-1,7	-1,7

Tabela 4.1: Parâmetros de massa efetiva e potenciais de deformação.

## 4.1 Transmissividade para $k_\rho = 0$

Nos casos tratados nessa seção, iremos considerar a situação em que o buraco caminha da esquerda para a direita com incidência normal, ou seja,  $k_\rho = 0$ . Essa é a situação mais simples para esse tipo de problema, já que os estados de valência *heavy-hole* e tipo *light-hole* são desacoplados entre si, o que nos fornece dois canais de tunelamento independentes. Ambos os Hamiltonianos *upper* e *lower* são idênticos nesse caso. Os resultados são obtidos usando-se o modelo de *Luttinger* fazendo-se  $k_\rho = 0$ .

### 4.1.1 Sem *Stress*

A Fig. (4.2) mostra o comportamento do buraco pesado (HH) e buraco leve (LH) para uma heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) do tipo GaAs/AlAs. Podemos observar dois canais de transmissão independentes, como já foi mencionado anteriormente, pois os estados de valência HH e LH são desacoplados para  $k_\rho = 0$ . Como a massa efetiva da partícula LH (*light-hole*) é bem menor que a da partícula HH (*heavy-hole*), esta apresenta uma probabilidade muito maior de tunelamento. Porém, pelo fato da partícula HH ser mais pesada, este canal apresenta um número maior de picos ressonantes, ou seja, um maior número de estados *quase-ligados* dentro do poço. Esses resultados estão em perfeita concordância com a Fig. (3) na Ref. [1], onde a transmissividade é calculada pelo método da matriz de transferência e não de espalhamento.

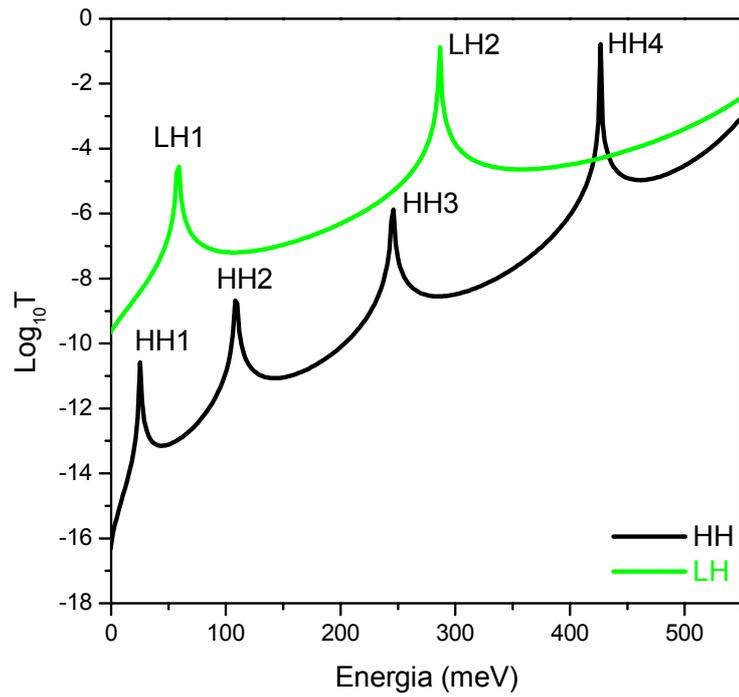


Figura 4.2: Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) através da heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs, (30,50,30) com  $k_\rho = 0$  e  $T = 0$  (sem *stress*).

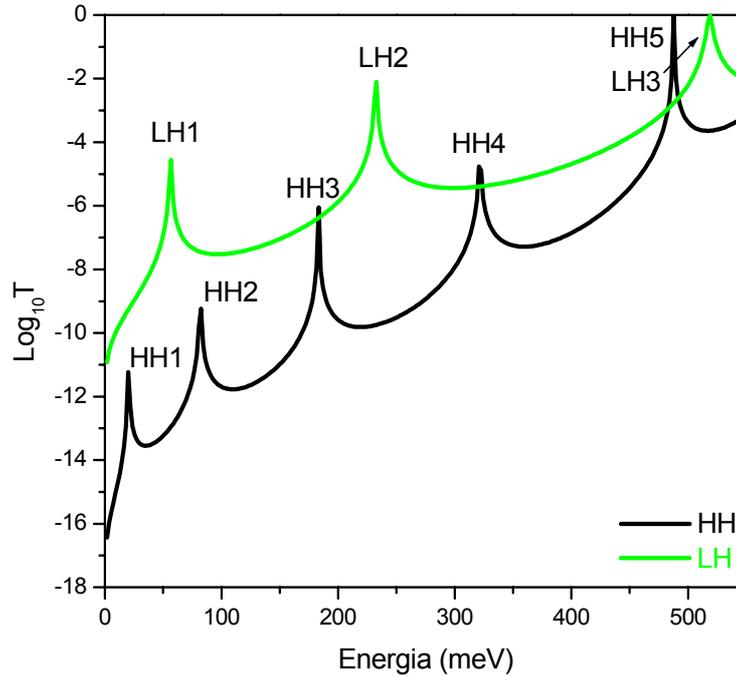


Figura 4.3: Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) para o sistema de dupla barreira (30,60,30) de GaAs/AlAs para  $T = 0$  (sem *stress*) com  $k_{\rho} = 0$ .

Na Fig. (4.3) mostramos o gráfico da transmissividade dos buracos pesados (HH) e leves (LH) para uma heteroestrutura de dupla barreira (30,60,30) do tipo GaAs/AlAs, para o caso sem *stress*. Novamente a curva de transmissividade do canal LH é maior pois sua massa efetiva é menor. O número de estados *quase-ligados* cresce, uma vez que o aumento da largura do poço aumenta o confinamento dos buracos (HH e LH). O terceiro estado de buraco leve por se menos ligado, aparece na curva transmissividade com um pico mais largo, o que evidencia um menor tempo de vida desse buraco nesse estado.

#### 4.1.2 Compressão

Na Fig. (4.4), mostramos a transmissividade dos buracos leves e pesados para um sistema de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs, para um esforço  $T = -3$  kbar (compressão,

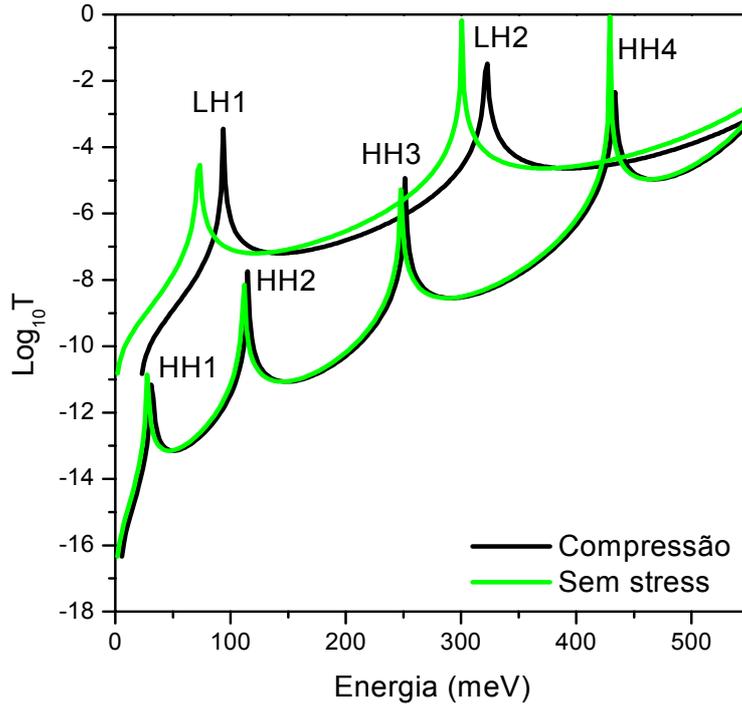


Figura 4.4: Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) para o sistema de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs para  $T = -3$  kbar com  $k_\rho = 0$ .

linha contínua preta) e  $T = 0$  (sem *stress*, linha contínua verde). A transmissividade do buraco leve é maior que a do buraco pesado, já que sua massa efetiva é menor. Notamos que a seqüência dos primeiros estados ressonantes quando o *stress* é considerado continua a mesma da Fig. (4.2), onde o estado ressonante mais baixo corresponde ao *heavy-hole* puro (HH1) e o segundo estado corresponde a um *light-hole* puro (LH1), etc.

Quando o *stress* é aplicado verificamos que ocorre um maior deslocamento do pico ressonante para a direita do *light-hole* (LH1) do que o deslocamento do pico para direita do *heavy-hole* (HH1). Isto acontece porque o *stress* quebra a degenerescência dos estados de valência em  $k_\rho = 0$  e o termo diagonal  $P_\varepsilon - Q_\varepsilon$  na compressão ( $P_\varepsilon > 0, Q_\varepsilon < 0$ ) confina menos os buracos leves produzindo maior deslocamento dos níveis ressonantes para esse portador. Diferentemente do caso com *strain* mostrado na Ref. [3] o deslocamento dos

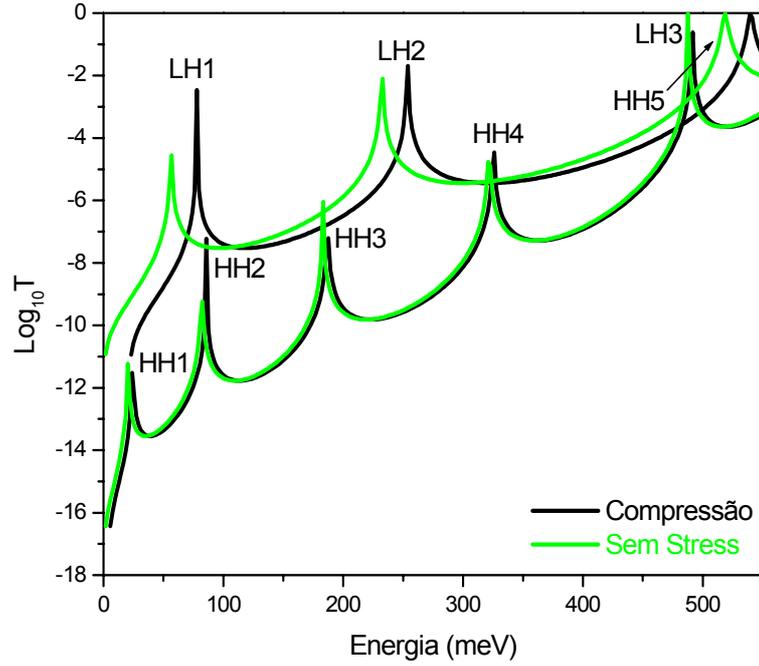


Figura 4.5: Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e leves (acima) para o sistema de dupla barreira (30,60,30) de GaAs/AlAs para  $T = -3 \text{ kbar}$  e  $k_\rho = 0$ .

picos ressonantes para os dois portadores é sempre na direção de crescimento da energia, uma vez que  $P_\varepsilon > Q_\varepsilon$ .

Na Fig. (4.5) mostramos o gráfico da transmissividade de *light-hole* e *heavy-hole* para um esforço de compressão,  $T = -3 \text{ kbar}$  (curva preta) e  $T = 0$  (curva verde) para o sistema (30, 60, 30). Como acontece na Fig. (4.3), com as mesmas escalas, ocorre um aumento o número de picos tanto para *light-hole* quanto para *heavy-hole*.

### 4.1.3 Tração

Vamos agora discutir resultados referentes a transmissividade dos buracos leves e pesados em uma heteroestrutura de dupla barreira GaAs/AlAs, quando submetida a um esforço de tração ( $T > 0$ ), para  $k_\rho = 0$ . Neste caso  $P_\varepsilon < 0$ ,  $Q_\varepsilon > 0$ , com  $|P_\varepsilon| > |Q_\varepsilon|$ .

Na Fig. (4.6) comparamos a transmissividade dos buracos leves e pesados para um

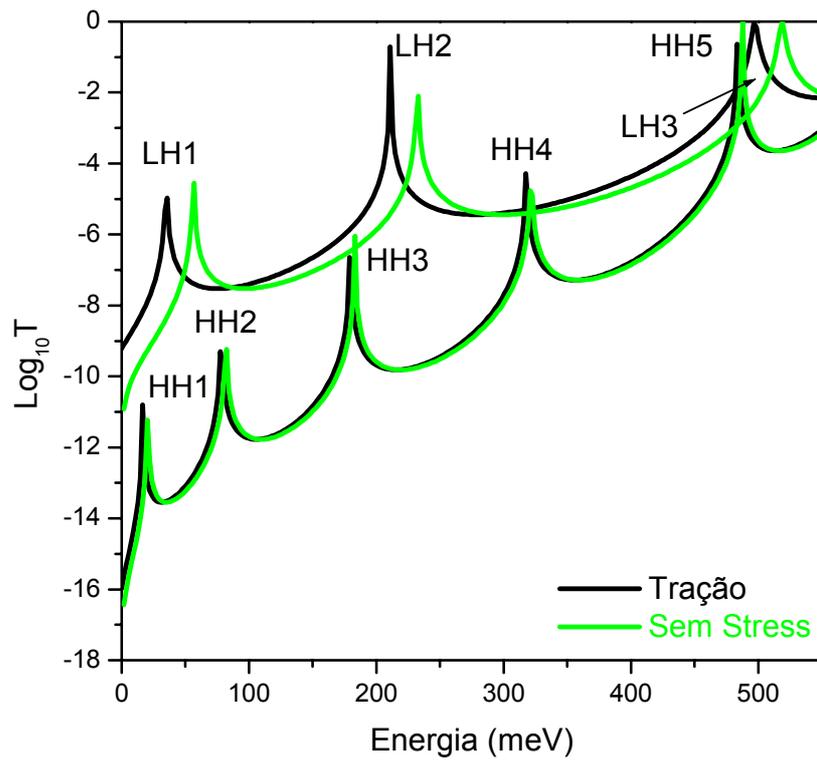


Figura 4.6: Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e dos buracos leve (acima), através de uma heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs, (30,60,30) com  $k_p = 0$ , para um esforço de tração  $T = 3 \text{ kbar}$  (curva preta) e  $T = 0$ , sem *stress* (curva verde).

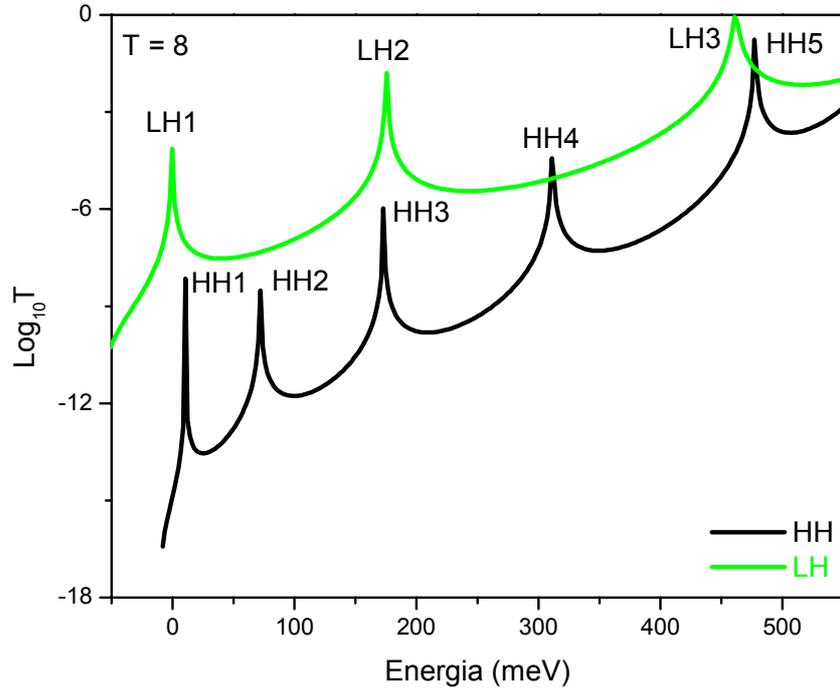


Figura 4.7: Transmissividade dos buracos pesados (abaixo) e dos buracos leve (acima), através de uma heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs, (30,60,30) com  $k_\rho = 0$ , para um esforço de tração  $T = 8 \text{ kbar}$  .

esforço de tração  $T = 3 \text{ kbar}$  (curva preta) e  $T = 0$  (curva verde), para um sistema (30,60,30), usando os parâmetros de acordo com a Tab. (4.1). Diferentemente do esforço de compressão ocorre um deslocamento dos picos ressonantes para a esquerda (menores energia), uma vez que  $P_\varepsilon < 0$  e  $|P_\varepsilon| > |Q_\varepsilon|$ . Esse deslocamento é muito maior para os buracos leves do que para os buracos pesados, e o nível LH1 fica bem mais próximo do nível fundamental HH1. É de se esperar portanto que para valores de  $T$  muito grande o esforço de tração provoque uma inversão do estado fundamental, passando de HH1 para LH1. Isso é verificado na Fig. (4.7) para  $T = 8 \text{ kbar}$  , onde observamos que o estado LH1 passa a ser o estado fundamental.

Finalizamos esta seção, mostrando na Fig. (4.8), a transmissividade dos buracos leves (lado esquerdo) e pesados (lado direito) para uma heteroestrutura com barreiras simétri-

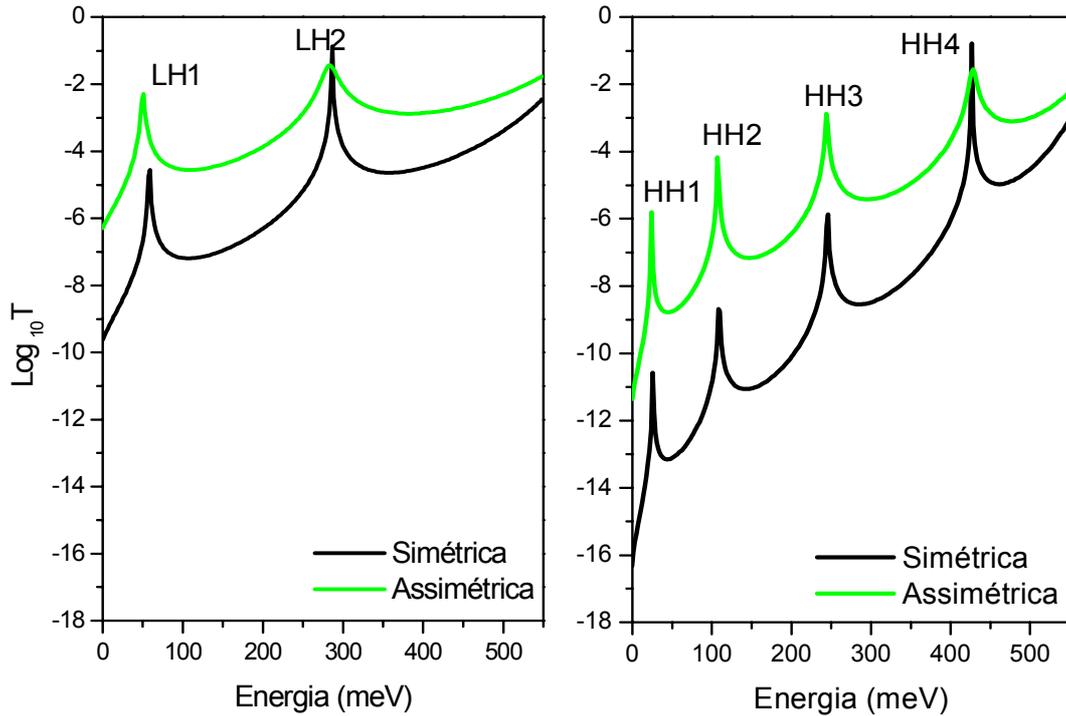


Figura 4.8: Transmissividade dos buracos (a) pesados e (b) leves, através de heteroestrutura de barreiras assimétricas de GaAs/AlAs (10,50,30) (curva verde) e simétrica (30,50,30) (curva preta) com  $k_\rho = 0$  e  $T = 2$ .

cas (30,50,30) (curva preta) e assimétricas (10,50,30) (curva verde) para um esforço de tração  $T = 2 \text{ kbar}$ . Notamos que a diminuição na largura da barreira, produz um considerável aumento na transmissividade dos buracos leves e pesados. Verifica-se ainda que as posições dos picos mais confinados HH1, HH2 e LH1 continuam praticamente ao mesmos, quando comparadas com o caso de barreiras simétricas, o mesmo não acontecendo para os estados de maior energia HH4 e LH2 que estão próximos do contínuo. Podemos observar ainda um alargamento dos picos de transmissividade no caso de barreiras assimétricas, o que indica que o tempo de vida de uma partícula nesses estados *quase-ligados* diminui em relação ao caso das barreiras simétricas.

Os resultados discutidos até agora foram obtidos para  $k_\rho = 0$ , ou seja, numa situa-

ção onde *light-hole* e *heavy-hole* são desacoplados. Na próxima seção apresentaremos os resultados da transmissividade para  $k_\rho \neq 0$  que leva em conta a estrutura de bandas na região do coletor.

## 4.2 Transmissividade para $k_\rho \neq 0$

Quando confinamos os buracos leves e pesados na região do poço de dupla barreira em heteroestruturas, surgirá subbandas de valência  $E_{HHn}(k_\rho)$  e  $E_{LHn}(k_\rho)$ , que podem ser derivadas da aproximação de massa efetiva. Para valores de  $k_\rho \neq 0$ , essas subbandas podem interagir fortemente, modificando as massas efetivas dessas partículas, quando comparadas com aquelas observadas no cristal perfeito, o que pode indicar que a transmissividade deve mudar sensivelmente com o parâmetro  $k_\rho$ . Essa interação é descrita em termos dos elementos fora da diagonal do Hamiltoniano de *Luttinger* que são proporcionais a  $k_\rho$ . Já os termos nas diagonais  $P_\varepsilon - Q_\varepsilon$  e  $P_\varepsilon + Q_\varepsilon$  mudam a separação relativa entre os estados HH e LH no poço quântico, e indiretamente, influenciam na mistura dos estados de valência.

Analisaremos nesta seção, os resultados no processo de tunelamento dos buracos leves e pesados em heteroestrutura de dupla barreira constituídas pelos mesmos materiais do caso  $k_\rho = 0$ , sendo agora nosso parâmetro  $k_\rho \neq 0$ . A partir de agora, os símbolos usados para rotularem os estados ressonantes HHn e LHn, serão usados somente por conveniência de notação, já que o acoplamento entre as bandas acaba com o significado que dá origem a essas denominações. Assim por exemplo o acoplamento é responsável pelo aparecimento de picos HHn (LHn) na energia ressonante de LHn (HHn).

### 4.2.1 Sem stress

Na Fig. [(4.9) (a)–(d)] mostramos a transmissividade de buracos leves e pesados na aproximação axial para uma dupla barreira de GaAs/AlAs (30,50,30) com momento  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 0$ . O forte acoplamento (*mixing*) entre a partícula *light-hole* e *heavy-hole*

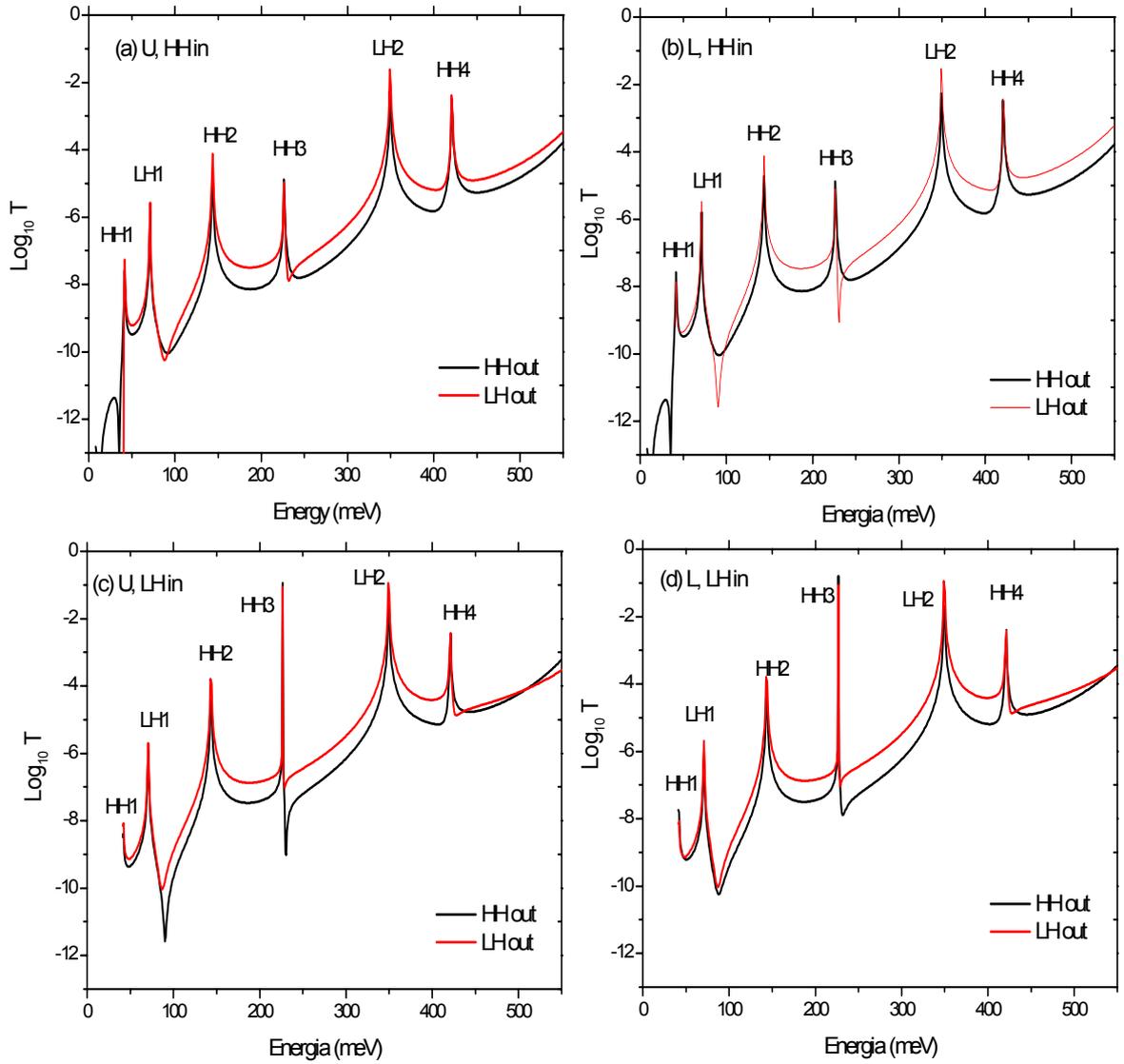


Figura 4.9: Transmissividade dos buracos pesados e leves, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 0$ . (a) e (b) para o Hamiltoniano *upper*; (c) e (d) para o Hamiltoniano *lower*.

é evidenciado pelas curvas de transmissividade HH out e LH out que estão em magnitudes mais próximas uma das outras.

Para o caso *heavy-hole* incidente (HH in), [ Figs. 4.9 (a) e (b)] os picos ressonantes dos buracos leves e pesados emergem na curva de transmissividade para a mesma energia, mostrando a forte mistura entre eles. A transmissividade para a saída *heavy* (HH out) é aumentada devido à mistura, comparando-se ao caso  $k_\rho = 0$ , onde essa situação não ocorre. Para o caso *light-hole* incidente (LH in), [ Figs. 4.9 (c) e (d)], o acoplamento entre os estados de valência também aparece como um pico no canal *light hole* na energia ressonante correspondentes ao estados quase estacionários HH na região do poço. Note que para os Hamiltonianos *upper* e *lower*, as magnitudes curvas de transmissividade HH in  $\rightarrow$  LH out são diferentes, embora as posições dos picos sejam as mesmas. Observe ainda que a separação de energia  $\Delta E$  entre os dois primeiros estados, HH e LH vale  $\Delta E = 29,3 \text{ meV}$ .

## 4.2.2 Compressão

Na Fig. [4.10 (a)–(d)], mostramos os gráficos da transmissividade de buracos leves e pesados através da heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs (30,50,30) para um esforço de compressão  $T = -3 \text{ kbar}$  e  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . Neste caso *stress* compressivo aumenta a separação entre os estados fundamentais HH1 e LH1,  $\Delta E = 35,04 \text{ meV}$  em comparação com o caso sem *stress*, reduzindo um o *mixing* entre esses estados. Para o caso *light-hole* incidente (LH in) [ Figs. 4.10 (c) e (d)], observa-se a não ocorrência da ressonância para o nível HH1, uma vez que neste caso, o tunelamento só se inicia a partir da energia  $E_{C_4} = 50,94 \text{ meV}$  e a pico ressonante HH1 corresponde a uma energia  $E_{HH1} = 47,59 < E_{C_4}$ . Para o caso *heavy-hole* incidente (HH in) [ Figs. 4.10 (a) e (b)], o tunelamento se inicia a partir de  $E_{C_3} = 21,9 \text{ meV} < E_{HH1}$ , neste caso as transmissividades HH out e LH out emergem em todos os níveis ressonantes do poço (HH1, LH1, HH2, HH3, LH2, HH4). A transmissividade para a saída *heavy* (HH out) é aumentada devido a mistura (*mixing*), comparando-se ao caso  $k_\rho = 0$ ; isto é mostrado

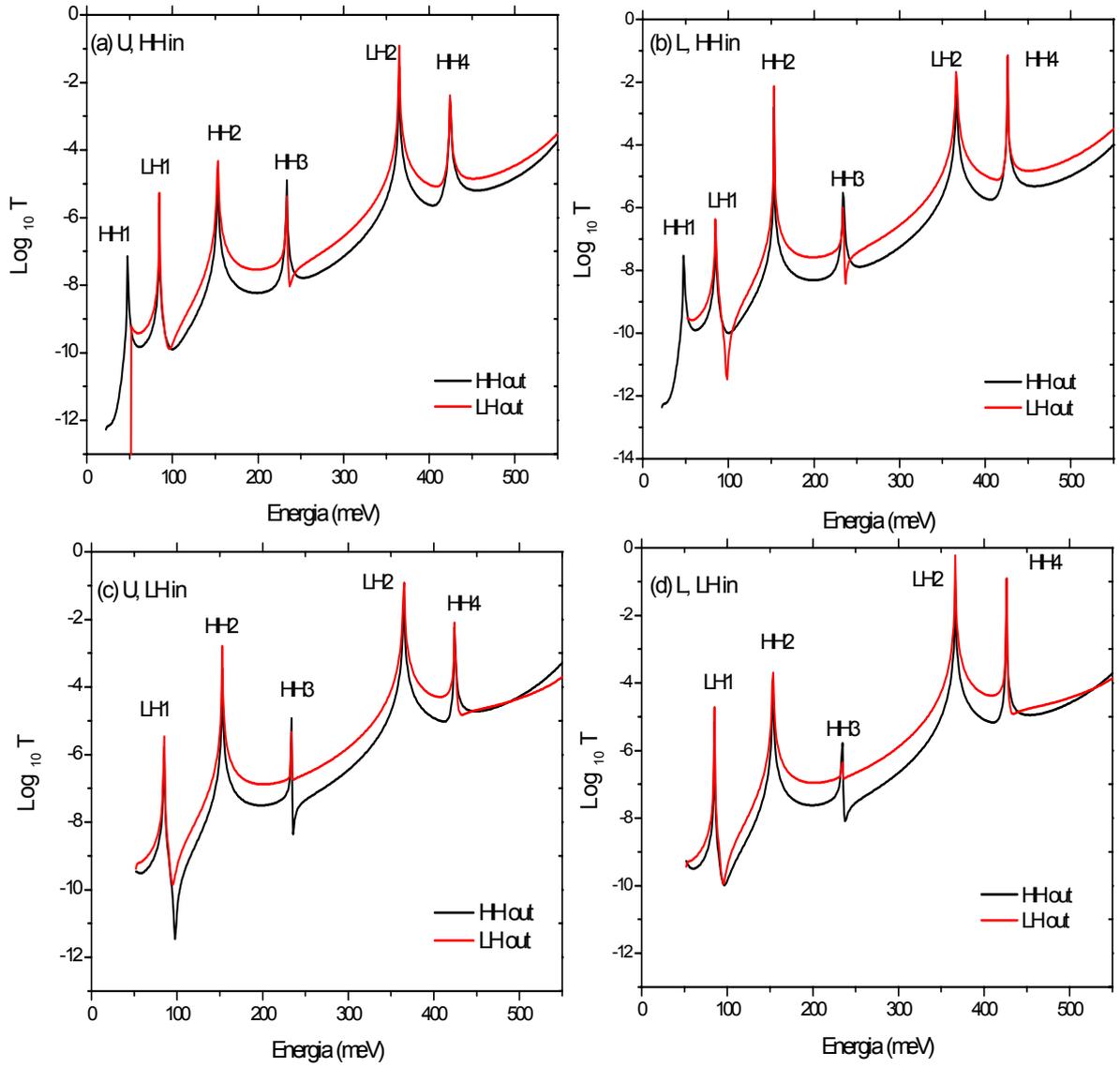


Figura 4.10: Transmissividade dos buracos pesados e leves, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = -3 \text{ kbar}$ . (a) e (b) para o Hamiltoniano *upper*; (c) e (d) para o Hamiltoniano *lower*.

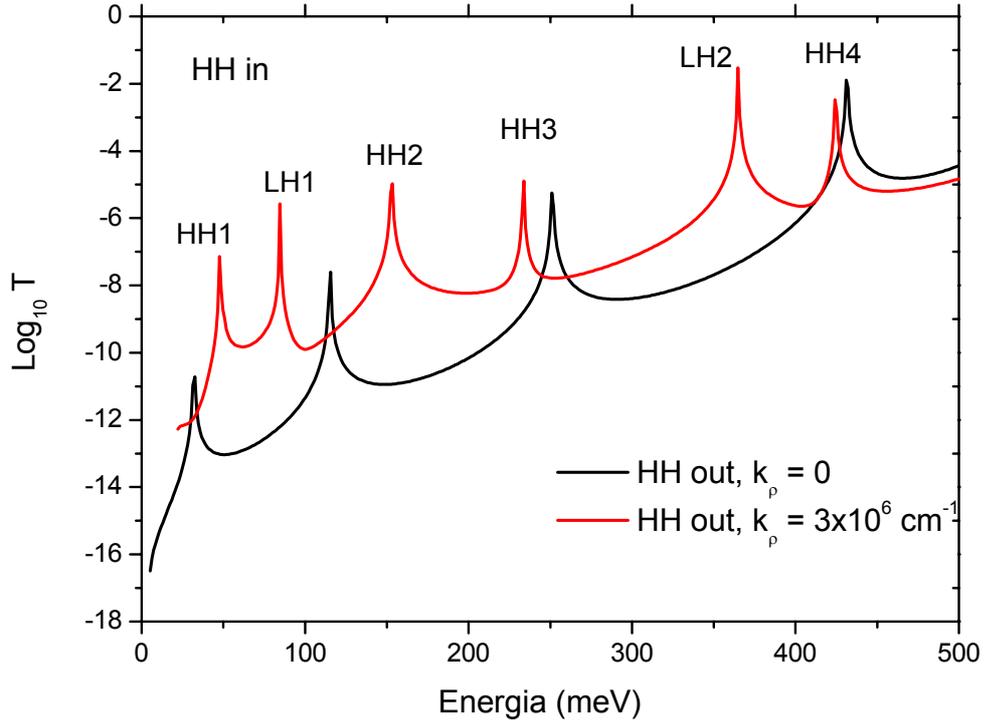


Figura 4.11: Transmissividade dos buracos pesados (HH out) através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs para  $T = -3 \text{ kbar}$  nos casos  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  (acima) e  $k_\rho = 0$  (abaixo).

na Fig. (4.11), onde comparamos essa transmissividade (HH out) para o Hamiltoniano *upper* com a transmissividade HH para  $k_\rho = 0$ . A redução do *mixing* na compressão é ilustrado na Fig. (4.12), onde mostramos os canais HH in  $\rightarrow$  HH out, HH in  $\rightarrow$  LH out, LH in  $\rightarrow$  LH out e LH in  $\rightarrow$  HH out para Hamiltoniano *upper* nos casos de compressão,  $T = -6 \text{ kbar}$  e sem *stress*,  $T = 0$ , para  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ ; note que a magnitude da transmissividade fora da ressonância dos buracos pesados, HH out e LH out diminui com a presença dos *stress* uniaxial para ambas as entradas HH in e LH in, observe ainda nas Figs [4.12 (c)–(d)], que o *stress* suprime o nível LH1 nas transmissividades HH out e LH out para a entrada LH in, uma vez que esse nível está abaixo da energia  $E_{C4}$ , onde os buracos leves tem vetores de onda  $k_z$  complexos.

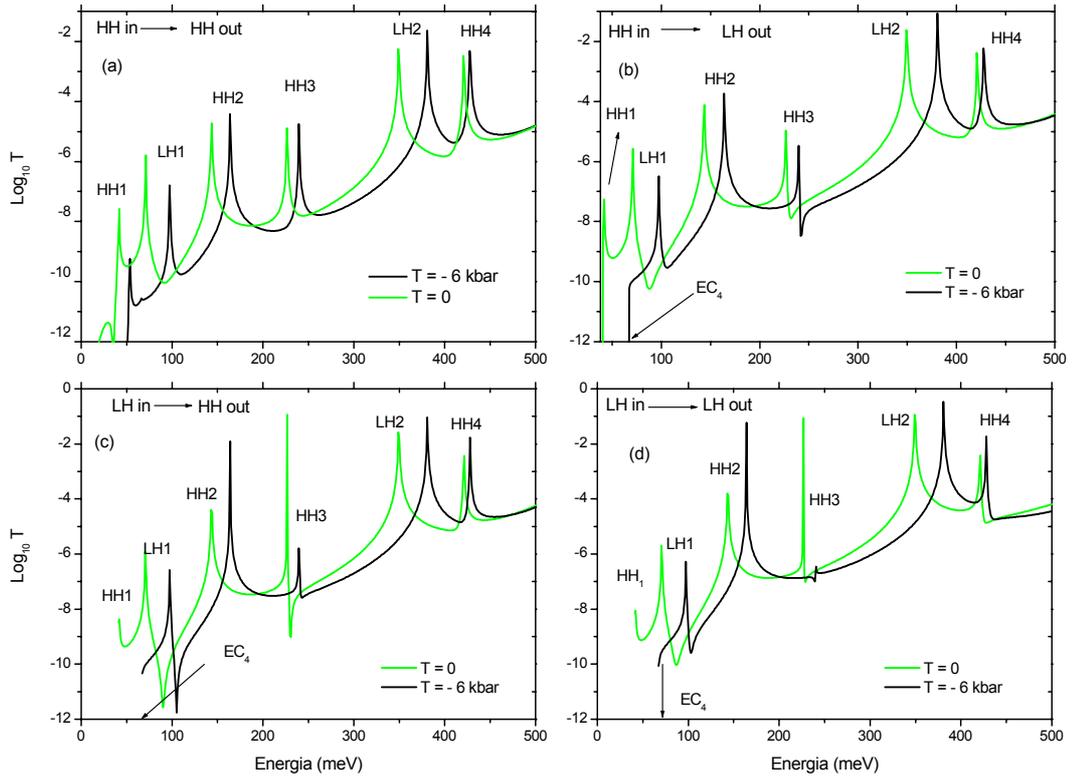


Figura 4.12: Transmissividade dos buracos pesados e leves para o Hamiltoniano *upper*, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com  $k_p = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ , para  $T = 0$  (sem stress) e  $T = -6 \text{ kbar}$ , (a) HH in  $\rightarrow$  HH out, (b) HH in  $\rightarrow$  LH out ; (c) LH in  $\rightarrow$  HH out e (d) LH in  $\rightarrow$  LH out.

### 4.2.3 Tração

Nesta subseção, vamos discutir os resultados para a transmissividade de buracos leves e pesados para esforço de tração ( $T > 0$ ), usando o mesmo material do caso de compressão. Como no *bulk*, este esforço muda completamente o caráter das soluções para energia  $E$ , e vetor de onda  $k_z$ , é responsável pela mudança de ordenamento dos picos ressonantes, e como veremos, também, pelo fato da curva de transmissividade do *heavy-hole* estar acima da curva *light-hole* para qualquer canal de entrada.

Na Fig. [4.13 (a)–(d)], mostramos os gráficos da transmissividade de buracos leves e pesados através da heteroestrutura de dupla barreira de GaAs/AlAs (30,50,30) para um esforço de tração  $T = 3 \text{ kbar}$  e  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . Note que a magnitude da transmissividade dos buracos pesados (HH out) para qualquer canal de entrada em ambos os Hamiltonianos (*upper* ou *lower*) é maior que dos buracos leves (LH out). Ocorre uma redução da separação em energia dos estados fundamentais HH1 e LH1,  $\Delta E = 24,24 \text{ meV}$  em comparação com os caso sem *stress* ( $\Delta E = 29,3 \text{ meV}$ ) e compressão ( $\Delta E = 35,04 \text{ meV}$ ), aumentando o *mixing* (mistura) entre os estados HH e LH. Note que para os Hamiltonianos *upper* e *lower*, as magnitudes curvas de transmissividade HH in  $\rightarrow$  LH out, LH in  $\rightarrow$  HH out, são diferentes principalmente para regiões fora de ressonância, embora as posições dos picos sejam as mesmas. Da mesma forma que nos casos anteriores, para o caso HH in incidente Fig. [4.13 (a)–(b)], a transmissividade para a saída *heavy* (HH out) é fortemente aumentada devido à mistura. Isso é mostrado na Fig. (4.14) onde comparamos canal HH in  $\rightarrow$  HH out para o Hamiltoniano *upper* para os esforços de tração, compressão e sem *stress* para  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ ; note que a magnitude da curva da transmissividade para a tração é bem maior que os outros esforços para o mesmo valor de  $k_\rho$ . Sendo assim, além dos efeitos do *mixing* (mistura) entre os estados de valência, que é responsável pelo aumento da probabilidade de transmissão, em comparação com o caso  $k_\rho = 0$ , o esforço de tração é um outro mecanismo que pode ser usado para aumentar o transporte de partículas na direção do crescimento dessas heteroestruturas. O mesmo não acontece para a partícula mais leve, a tração aumenta

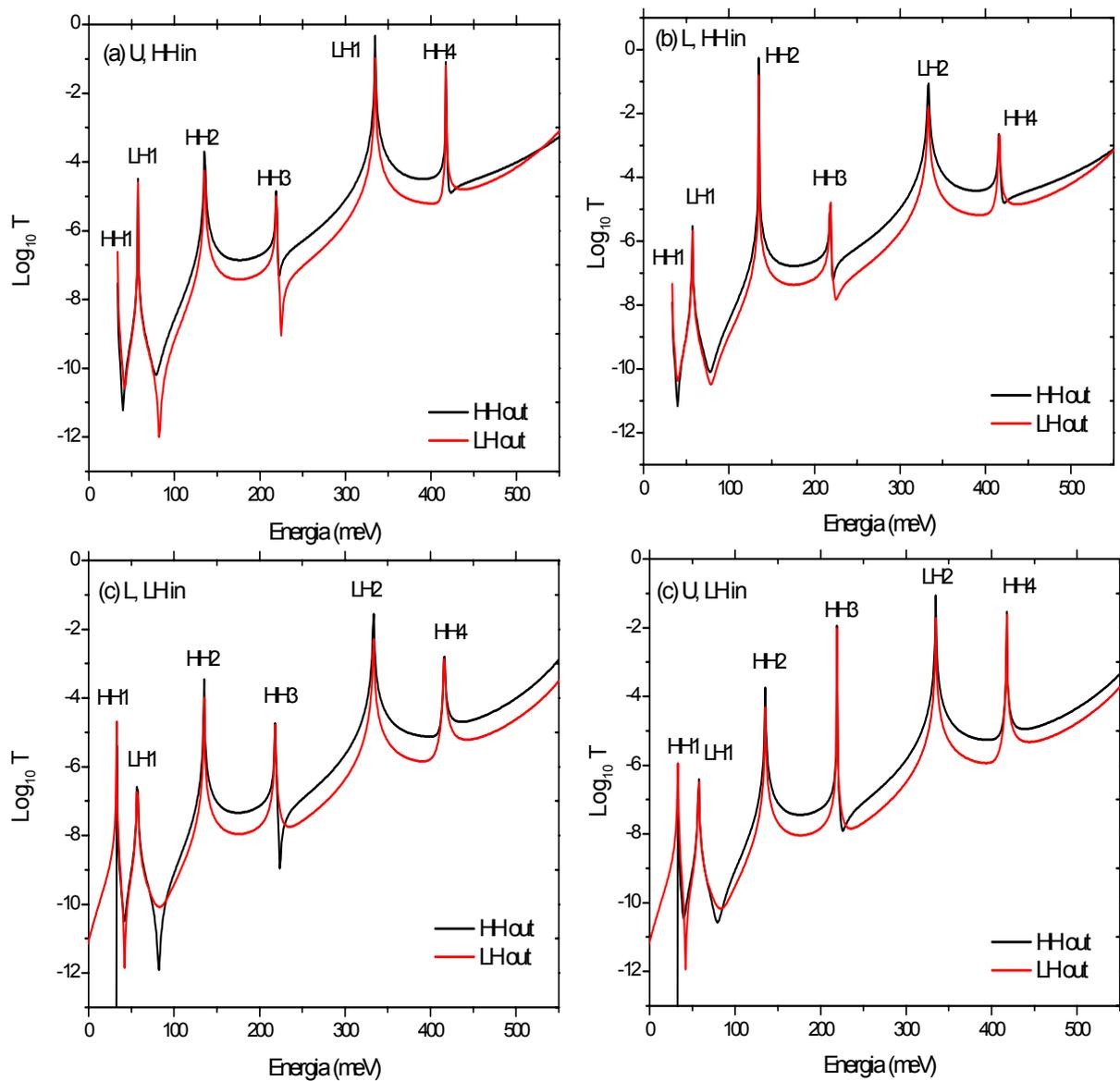


Figura 4.13: Transmissividade dos buracos pesados e leves, através de heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com  $k_p = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 3 \text{ kbar}$ . (a) e (b) para o Hamiltoniano *upper*; (c) e (d) para o Hamiltoniano *lower*.

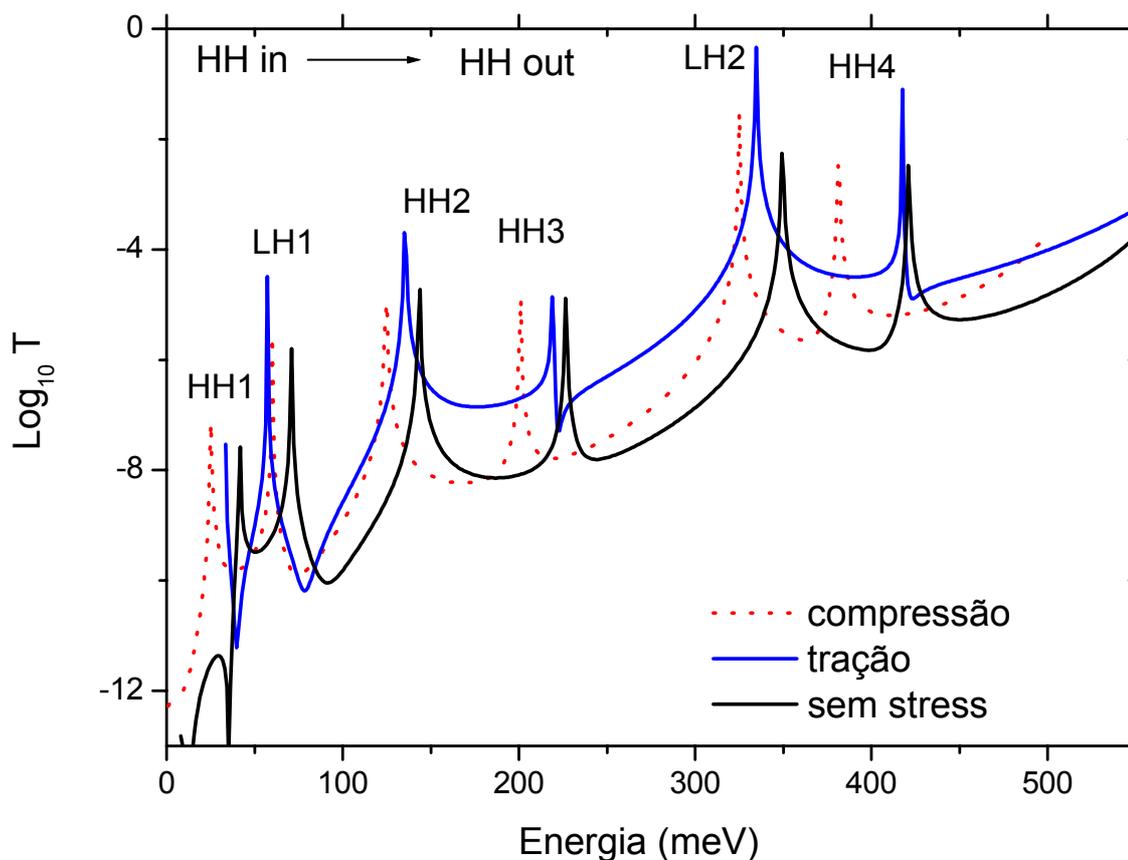


Figura 4.14: HH in  $\rightarrow$  HH out , através da heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 3 \text{ kbar}$ . Note que devido ao *mixing*, transmissividade é maior para o esforço de tração.

a mistura, aumentado a sua massa efetiva ; assim as curvas de transmissividades LH out estão abaixo da curva HH out. Isto é evidenciado na Fig. (4.15) onde comparamos canal LH in  $\rightarrow$  LH out para o Hamiltoniano *upper* para os esforços de tração, compressão e sem *stress* para o momento  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ ; note que a magnitude da curva da transmissividade para o esforço de tração menor do que esforço de compressão para o mesmo valor de  $k_\rho$ .

Para finalizar, mostramos a transmissividade de buracos leves e pesados, numa heteroestrutura de dupla barreira , (30,50,30), Fig. (4.16) para  $k_\rho = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 3 \text{ kbar}$ ,

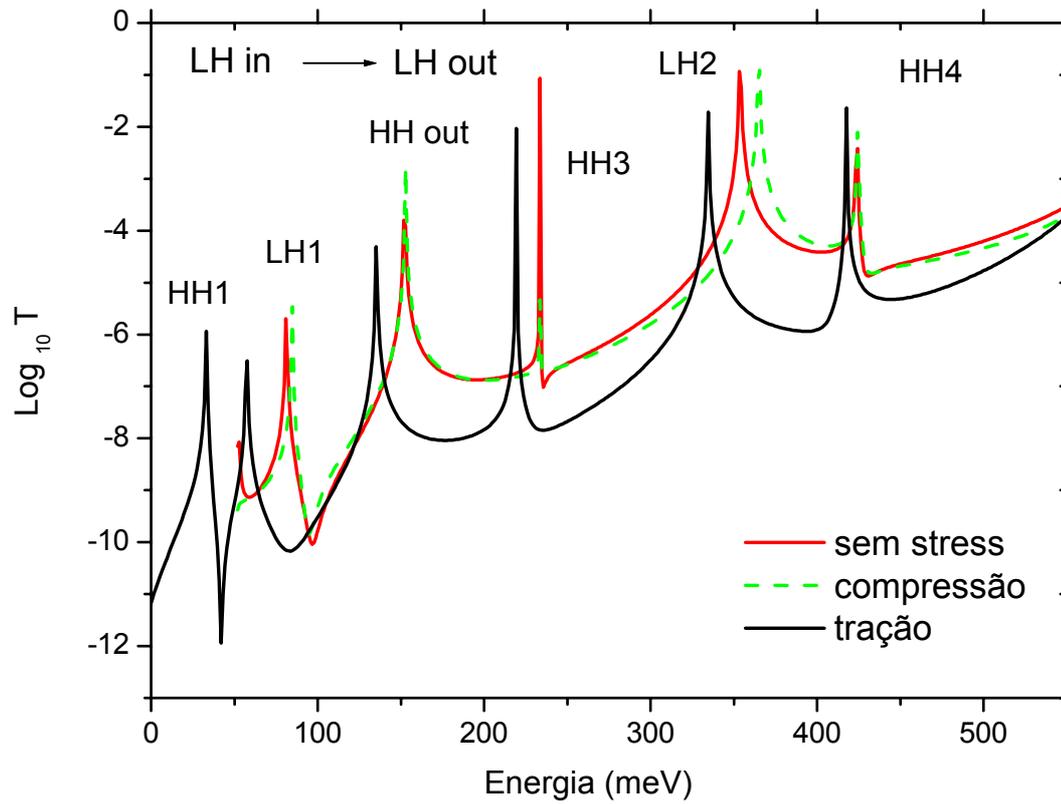


Figura 4.15: LH in  $\rightarrow$  LH out , através da heteroestrutura de dupla barreira (30,50,30) de GaAs/AlAs com  $k_p = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 3 \text{ kbar}$ . Note que a transmissividade é menor para o esforço de tração.

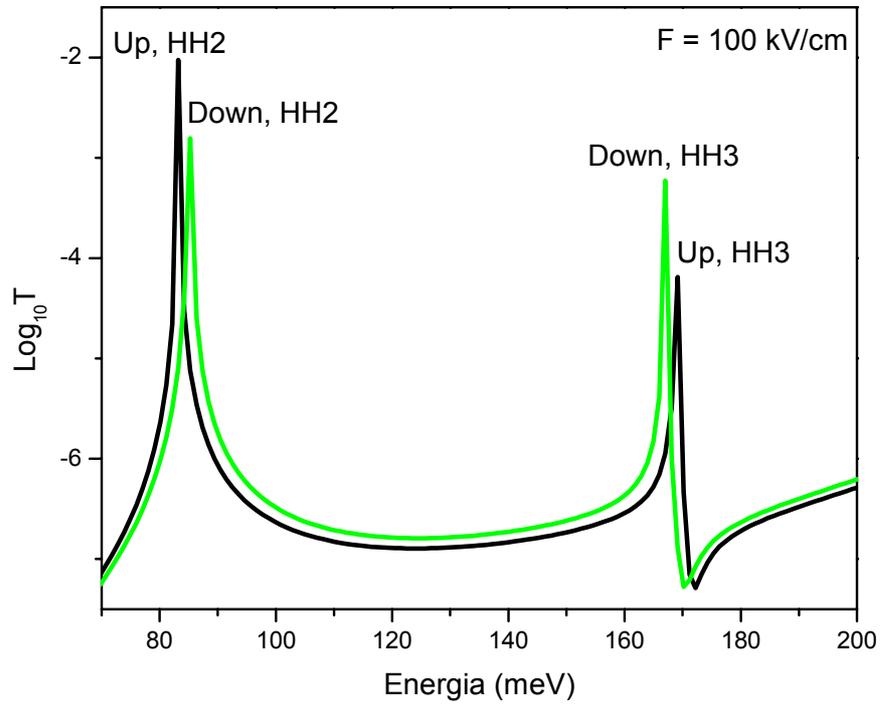


Figura 4.16: Transmissividade de buracos através de heteroestrutura de dupla barreira simétrica (30,50,30) de GaAs/AlAs para  $k_p = 3 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  e  $T = 3$ , sujeito a um campo elétrico de intensidade  $F = 100 \text{ kV/cm}$ , mostrando apenas os picos ressonantes HH2 e HH3, para os quais os efeitos do campo se torna melhor visualizados.

através do canal HH in $\rightarrow$ HH out, na presença de um campo elétrico aplicado na direção- $z$ , cuja intensidade é  $F = 100 \text{ kV/cm}$ . O efeito do potencial de confinamento associado a presença do campo elétrico quebra a simetria de inversão espacial, resultando numa separação dos estados degenerados *upper e lower* (degenerescência de *Kramer* ).

# Referências

- [1] Shun. Lien.Chuang, Phys. Rev. **B 43**, 9649 (1991).
- [2] C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, Phys. Rev. **B 43**, 7 027 (1990).
- [3] A. C. Bittencourt, A. M Cohen and G. E. Marques Phys. Rev. **B 57**, 4525 (1998).

# Capítulo V

## Conclusões

Apresentamos nesta dissertação o cálculo da transmissividade ressonante de buracos em heteroestruturas semicondutoras de GaAs/AlAs submetidas a tensões externas, usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de *Luttinger-Kohn*.

Esse problema, foi teoricamente investigado por *Chao e Wessel* [1], onde também foi utilizado o material do tipo GaAs/AlAs sem *stress*, porém com a técnica da matriz de transferência. Como resultado, observou-se um forte acoplamento entre os estados de *heavy-hole* e *light-hole*, o que resultou em um aumento da probabilidade de tunelamento de buracos nesses materiais. O *mixing* (mistura) é um forte mecanismo que muda a dinâmica dos buracos. Assim, um controle desse *mixing* é fundamental para melhorar as performances dos dispositivos opto-eletrônicos, lasers, fotodetectores etc ; isso pode ser feito através de campos externos, como o campo elétrico e *stress*. Portanto o *stress* como uma perturbação externa, desempenha um papel importante na investigação das propriedades óticas e de transporte em heteroestruturas semicondutoras e oferece a possibilidade de projetar dispositivos opto-eletrônicos e de alta velocidade com a performance desejável.

Motivados pela versatilidade da técnica da matriz de espalhamento, que incorpora facilmente perturbações externas como campos elétricos e *stress*, nos propusemos nessa dissertação estudar os efeitos de pressões externas no tunelamento ressonante de buracos

na banda de valência, para um sistema de dupla barreira do tipo GaAs/AlAs, na presença ou não de campo elétrico.

No cálculo das propriedades de transporte, usando a técnica da matriz de espalhamento, é fundamental conhecermos a natureza das soluções de  $k_z$  e as funções envelopes  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  no cristal perfeito. Isso foi feito no capítulo 3 através da aproximação de massa efetiva. Afim de diminuir o custo computacional o Hamiltoniano de *Luttinger-Kohn-Pikus* foi bloco-diagonalizado em duas matrizes ( $2 \times 2$ ), *upper* e *lower* usando a aproximação axial. Os estados *upper* e *lower*  $E_{hh}$  e  $E_{lh}$  são degenerados sem a presença de campo elétrico

Dentro do esquema da matriz de espalhamento o momento  $k_z$  é uma quantidade importante para a construção da função de onda em cada região da heteroestrutura, cuja a natureza para os dois tipos de portadores (buraco leve ou pesado) depende da energia  $E$ , do momento paralelo as camadas  $k_\rho$  e do tipo de esforço, tração ( $T > 0$ ) e compressão ( $T < 0$ ). Como foi visto no capítulo 3, para o esforço de compressão existem cinco energias críticas  $E_{C_1}$ ,  $E_{C_2}$ ,  $E_{C_3}$  e  $E_{C_4}$ ,  $E_{CT}$  que dividem espectro de energia em cinco regiões, das quais dependem a natureza de  $k_z$ . Para o esforço de tração as energias críticas  $E_{C_1}$  e  $E_{C_2}$ , são funções reais, apenas a partir de um certo momento crítico,  $K_T = 2\sqrt{\frac{BQ_\varepsilon C^2}{(C^4 - 2B^2C^2 - 4B^2D^2)}}$ . Assim a natureza de  $k_z$  para a tração se divide em dois casos: (a)  $0 < |k_\rho| < K_T$  e (b)  $|k_x| > K_T$ . Nos dois casos ocorre uma inversão da natureza das soluções de  $k_z$  (HH $\leftrightarrow$ LH), nas regiões (ii) e (iii) quando comparadas com o esforço de tração, provocando uma inversão nas magnitudes das curvas de transmissividades (HH out  $\leftrightarrow$  LH out ).

No capítulo IV, apresentamos e discutimos os resultados para a transmissividade de buracos em heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira do tipo GaAs/AlAs sujeitas a *stress* uniaxial na direção de crescimento para os caso de  $k_\rho = 0$  e  $k_\rho \neq 0$ . Nesses resultados temos usado o fato de que as constantes elásticas no GaAs e AlAs são iguais, assim o termo hidrostático  $P_\varepsilon$  produz um *shift* em toda a heteroestrutura, mais não muda a altura da barreira. Contudo, o termo  $Q_\varepsilon$  produz uma quebra de degenerescência

dos estados de valência, provocando uma separação relativa dos níveis de buracos HH e LH na região do poço.

Como resultado geral, para  $k_\rho = 0$  os buracos leves e pesados são desacoplados, e observa-se que a transmissividade dos buracos leves é maior que dos buracos pesados para qualquer tipo de esforço. Na compressão,  $P_\varepsilon > 0$ ,  $Q_\varepsilon < 0$ ; e como  $|P_\varepsilon| > |Q_\varepsilon|$  observa-se um deslocamento rígido dos picos ressonantes na direção de crescimento da energia quando comparados com caso sem *stress* ( $T = 0$ ). O inverso ocorre para a tração, onde  $P_\varepsilon < 0$ ,  $Q_\varepsilon < 0$ ,  $|P_\varepsilon| > |Q_\varepsilon|$ . Em ambos os esforços o deslocamento dos picos é maior para o buraco leve, que é a partícula mais leve. Dessa forma na tração, ocorre uma inversão do estado fundamental no poço quântico, passando de HH1 para LH1, isso foi verificado para  $T = 8 \text{ kbar}$ .

Para  $k \neq 0$ , sem *stress*, ocorre um aumento das probabilidades de transmissão para qualquer canal de entrada, principalmente para os buracos pesados, quando comparados com o caso  $k = 0$ , que evidencia um forte acoplamento entre subbandas de buracos (HH,LH), que modifica suas massas efetivas na região do poço quântico. A inclusão do *stress* através do termo anisotrópico  $Q_\varepsilon$ , modifica a separação relativa entre os estados HH e LH e indiretamente modifica a extensão do *mixing* (mistura). Assim na compressão, ocorre uma redução do *mixing* diminuindo a probabilidade de transmissão dos buracos pesados e leves. Como no caso sem *stress*, as curvas HH out estão sempre abaixo da curva LH out. Para o esforço de tração ocorre uma inversão da natureza de  $k_z$  e as probabilidades dos buracos pesados HH out é maior que dos buracos leves LH out. Ocorre uma redução da separação em energia dos estados fundamentais HH e LH no poço quântico em comparação com os caso sem *stress* e compressão, aumentando o *mixing* (mistura) entre os estados. Assim, devido ao aumento indireto do *mixing*, ocorre um aumento da transmissividade dos buracos pesados HH out e uma diminuição nos buracos leves LH out em comparação com os caso sem *stress* e compressão, para o mesmo valor de  $k_\rho$ .

Portanto o *stress* é um mecanismo importante que pode controlar a mistura dos

estados, as probabilidades e o tempo de tunelamento dos portadores, sendo um mecanismo importante que pode ser usado em dispositivos semicondutores para aumentar ou diminuir o transporte de partículas na direção de crescimento dessas heteroestruturas.

Para finalizar, entendemos que todos esses efeitos seriam melhor investigados através do cálculo da corrente de tunelamento. Infelizmente devido ao custo computacional e a limitação do tempo para o término dessa dissertação, reservamos essa tarefa para trabalhos futuros.

# Referências

- [1] C. Y. P. Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **43**, 7 027 (1990), R. Wessel and M. Altarelli, *Phys. Rev. B* **39**, 12 802 (1989).