

Marcel Nogueira d' Eurydice

*Estrutura de Bandas de Valência em Poços
Quânticos e Super-Redes de Nitretos na
fase Hexagonal*

São Carlos – SP

Março / 2006

Marcel Nogueira d' Eurydice

*Estrutura de Bandas de Valência em Poços
Quânticos e Super-Redes de Nitretos na
fase Hexagonal*

Dissertação apresentada à Banca Examinadora no Departamento de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Mestre em Física Aplicada Computacional.

Orientador:

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi

MESTRADO EM FÍSICA COMPUTACIONAL
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

São Carlos – SP

Novembro / 2004

Dissertação de Mestrado sob o título “*Estrutura de Bandas de Valência em Poços Quânticos e Super-Redes de Nitretos na fase Hexagonal*”, defendida por Marcel Nogueira d’ Eurydice e aprovada em 28 de Abril de 2006, em São Carlos, São Paulo, pela banca examinadora constituída por:

Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi
Instituto de Física de São Carlos - USP
Orientador

Profa. Dra. Lara Kuhl Teles
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

Prof. Dr. Guennadii Michailovich Gusev
Intituto de Física - USP

Agradecimentos

Meus sinceros agradecimentos são destinados à todas as pessoas que me acompanharam até aqui.

A meus pais, Leila e Orfeu, pela força, incentivo, carinho e todas aquelas coisas que só um pai e uma mãe podem dar ao seu filho.

Ao Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi, mais do que meu orientador, um inestimável amigo que muito me ensinou e ajudou com a Física, a Computação e também na transposição de muitos dos obstáculos que surgiram no desenvolvimento deste e outros trabalhos. Muito obrigado por todos esses anos em que trabalhamos juntos, por tornar a relação aluno professor algo tão próximo quanto possível, desde a época de Iniciação Científica.

À Profa. Dra. Sara Cristina Rodrigues pela sua amizade e por dividir seu profundo conhecimento sempre me apontando os caminhos para atingir meus objetivos.

Ao Prof. Dr. Gonzalo Travieso pelas dicas, ensinamentos em computação, discussões e amizade.

Ao Prof. Dr. Carlos Antônio Ruggiero pela sua figura incomparável, ensinamentos em computação e incentivo.

Ao Prof. Eduardo Ribeiro de Azevêdo pelo grande curso de Eletromagnetismo dado na pós-graduação e também por sua amizade.

Ao Ivan, ao Rodrigo, ao Felipe, à Keila, à Suelene, ao Elton, ao Wesley e a todos os companheiros do Laboratório de Física Computacional pela amizade e assistências de altíssima importância.

A todos os colegas do Instituto de Física de São Carlos, pela ajuda e companheirismo.

À vovó e o vovô, vocês são mais do que um exemplo para mim.

À toda minha família que sempre torceram pelo meu sucesso e me confortaram quando mais precisei.

Aos ilustríssimos moradores da república Maloca, os senhores Véio, Sivão, Pato, Gil-

berti e Preza, nos mais de 2 anos compartilhando de grandes momentos de filosofia, samba, rock e alegria naquele espaço que um dia lembramos com saudades, e que hoje chamamos de lar.

Aos charlies que, estejam onde estiverem: Eric, Adler, Rafael, Renato, Alfraino, Thiago e todo pessoal de Aparecida, trarei como fontes de inspiração para todos os momentos de minha vida, afinal, quem nunca parou para pensar: “O que o Adler faria nessa situação?!”.

A todos os amigos da capoeira pela amizade e apoio nos momentos difíceis, em especial ao Camarão e ao Sagú que trazem e mantêm essa cultura dentro da Universidade.

Aos meus amigos do centro acadêmico (CAASO).

Àqueles que não citei e que fizeram parte, direta ou indiretamente, desta etapa da minha vida.

Muito obrigado!!!

Resumo

Os nitretos semicondutores são materiais de fundamental importância para a optoeletrônica atual. O estudo de estruturas derivadas destes materiais permite seu melhor entendimento e o projeto de novos dispositivos. Neste trabalho apresentamos um modelo para o cálculo autoconsistente de estruturas de bandas de heteroestruturas semicondutoras crescidas na fase hexagonal, utilizando o método *k.p*. O modelo desenvolvido foi implementado e testado para estruturas selecionadas. O método inclui ainda ferramentas para o estudo da distribuição de cargas e implementa modelos teóricos de luminescência, calculados a partir dos resultados obtidos. Foram analisadas estruturas de nitretos semicondutores hexagonais segundo o ponto de vista de suas estruturas de bandas, distribuição de cargas e espectro de luminescência.

Abstract

Semiconductor nitrides are fundamental materials for nowadays optoelectronics. The study of nitride based structures allow its better understanding and novel devices design. In this work we present a *k.p* selfconsistent model to calculate semiconductor bandstructures grown on hexagonal phases. The model was implemented and tested on selected structures. The method calculates charge distribution and implements theoretical luminescence models. Hexagonal semiconductor nitride structures were analyzed according to their bandstructures, charge distribution and luminescence spectra.

Sumário

Lista de Figuras	p. x
Lista de Tabelas	p. xiii
Introdução	p. 1
1 Método k.p e Massa Efetiva	p. 5
1.1 Método <i>k.p</i>	p. 5
1.2 Equação da Massa Efetiva	p. 7
2 Matrizes do Método k.p	p. 10
2.1 Hamiltoniano de Rashba-Sheka-Pikus - <i>Wurtzita</i>	p. 10
2.2 Hamiltoniano RSP 8×8	p. 14
2.3 Hamiltoniano de Luttinger-Kohn - <i>zinc blend</i>	p. 16
2.4 Matriz de Kane-Banda de condução (<i>zinc-blend</i>)	p. 17
2.5 Troca de base	p. 19
3 Tensão	p. 23
3.1 <i>Strain</i>	p. 23
3.2 Hamiltoniano de <i>strain</i> - wurtzita	p. 26
4 Heteroestrutura e Super-rede	p. 28
4.1 A Super-rede	p. 28
4.2 Potencial da Heteroestrutura	p. 32
4.3 Potencial de Coulomb	p. 33

5	Espectro de Fotoluminescência	p. 36
5.1	Expressão para a intensidade de luminescência	p. 36
6	Etapas da simulação	p. 39
6.1	Escrita dos potenciais	p. 39
6.2	Determinação da simetria da super-célula unitária	p. 40
6.3	Diagonalização do Hamiltoniano	p. 41
6.4	Distribuição dos portadores - <i>Nível de Fermi</i>	p. 41
6.5	Potencial de Coulomb autoconsistente	p. 42
6.6	Diagrama das etapas	p. 42
7	Bulk e heteroestrutura - resultados	p. 44
7.1	Cálculo de estrutura de bandas para <i>Bulk</i>	p. 44
7.1.1	InN	p. 44
7.1.2	AlN	p. 46
7.1.3	GaN com <i>strain</i>	p. 48
7.2	Cálculo de estrutura de bandas para heteroestruturas semicondutoras .	p. 49
8	Resultados de luminescência	p. 54
8.1	Liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - variação da concentração	p. 54
8.2	Transporte de carga entre poços vizinhos	p. 57
9	Conclusões	p. 61
Apêndice A - Parâmetros		p. 62
A.1	Parâmetros de <i>Bir-Pikus</i>	p. 62
A.2	Energias entre bandas	p. 63
A.3	Potencial de deformação	p. 64
A.4	Constantes elásticas	p. 65

A.5	Parâmetros de rede	p. 66
A.6	Massas Efetivas	p. 67
	Referências	p. 69

Lista de Figuras

2.1	Níveis de energia da banda de valência e condução no ponto Γ para nitretos com estrutura cristalina hexagonal [1]	p. 14
4.1	Heteroestrutura composta de dois materiais distintos	p. 28
4.2	Super-rede - a heteroestrutura é repetida indefinidamente ao longo da direção de crescimento	p. 29
4.3	Heteroestrutura	p. 32
6.1	primeira zona de Brillouin de uma estrutura cristalina com simetria Hexagonal	p. 40
6.2	Energia de Fermi	p. 42
6.3	Etapas de execução do programa	p. 43
7.1	Estrutura de bandas do InN maciço na fase wurtzita, extraída do artigo de Pugh [2]. A curva pontilhada indica o resultado da estrutura de bandas através do método semi-empírico enquanto a curva cheia indica o resultado do método <i>k.p.</i> . À esquerda direção k_z e à direita direção k_x	p. 45
7.2	Estrutura de bandas para o InN na fase wurtzita obtida com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros apresentados no artigo [2].	p. 46
7.3	Estrutura de bandas do AlN maciço na fase wurtzita, extraída do artigo de Pugh [2]. A curva pontilhada indica o resultado da estrutura de bandas através do método semi-empírico enquanto a curva cheia indica o resultado do método <i>k.p.</i>	p. 47
7.4	Estrutura de bandas para o InN na fase wurtzita obtida com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros apresentados no artigo [2].	p. 47

- 7.5 Estrutura da banda de valência para o GaN maciço na fase wurtzita. **À direita** - nenhuma tensão aplicada. **À esquerda** tensão compressiva de -1% aplicada no material. O eixo vertical representa a energia da banda de valência e os eixos horizontais representam os vetores do espaço recíproco: à direita k_x e à esquerda k_z p. 48
- 7.6 Estrutura de bandas para o GaN na fase wurtzita obtida com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros apresentados no artigo [1]. **À esquerda**: estrutura não-tensionada. **À direita**: tensão compressiva de 1 %. p. 49
- 7.7 Estrutura de bandas de um sistema $Al_{0,2}Ga_{0,8}N/GaN$ para estruturas cristalinas cúbicas e wurtzita. O sistema encontra-se sem a presença de cargas e está sobre tensão nas barreiras $AlGaN$. São desconsideradas as ações dos campos piezoelétrico e devido a polarização espontânea. p. 49
- 7.8 **À esquerda**: Potencial da heteroestrutura $Al_{0,2}Ga_{0,8}N/GaN$, com os potenciais referentes aos buracos pesados, leves e de *split-off*. **À direita**: Estrutura de bandas do sistema. p. 50
- 7.9 Potencial de uma heteroestrutura $Al_{0,2}Ga_{0,8}N/Ga$ somado aos campos piezoelétrico e de polarização espontânea p. 51
- 7.10 **À esquerda**: Potencial após a convergência dos portadores livres para a configuração de menor energia. **À direita**: Estrutura de banda de valência. p. 52
- 7.11 Estrutura de bandas de uma heteroestrutura $Al_{0,2}Ga_{0,8}N/GaN$ extraída do artigo de Chuang *et. al.* [3]. p. 52
- 8.1 Potencial total da liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - **Em cima** - Banda de condução. **Em baixo** - Banda de valência. A concentração x de Al na barreira aumenta da esquerda para a direita. p. 55
- 8.2 Estrutura de bandas da liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - **Em cima** - Banda de condução. **Em baixo** - Banda de valência. A concentração x de Al na barreira aumenta da esquerda para a direita. p. 56
- 8.3 Espectro de luminescência de uma liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - Variando a concentração de Al na barreira é observado um aumento da energia em que ocorre a emissão de luz. p. 57

8.4	Perfil dos potenciais da heteroestrutura para os buracos pesados (HH), leves (LH) e de <i>split-off</i> (CH)	p. 58
8.5	Heteroestrutura dopada $N_A = 1.8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ à esquerda Perfil de potencial. à direita distribuição de cargas	p. 58
8.6	Perfil de potencial: à esquerda $N_A = 9.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ e à direita $N_A =$ $1.8 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$	p. 59
8.7	Distribuição de cargas	p. 59
8.8	Estrutura de bandas	p. 60
8.9	Luminescência	p. 60

Lista de Tabelas

2.1	Massas efetivas da banda valência	p. 11
5.1	Auto-estados bidegenerados	p. 37
6.1	Arquivo de entrada do programa	p. 39
A.1	Tabela de parâmetros A_i para GaN do método k.p para wurtzita. Os parâmetros $A_1 - A_6$ estão em unidade de $\hbar^2/2m_0$	p. 62
A.2	Tabela de parâmetros A_i para AlN do método k.p para wurtzita. Os parâmetros $A_1 - A_6$ estão em unidade de $\hbar^2/2m_0$	p. 62
A.3	Tabela de parâmetros A_i para InN do método k.p para wurtzita. Os parâmetros $A_1 - A_6$ estão em unidade de $\hbar^2/2m_0$	p. 63
A.4	Tabela de parâmetros de energia entre bandas para GaN do método k.p para wurtzita. A energia de <i>gap</i> está em <i>eV</i> e Δ_i em <i>meV</i>	p. 63
A.5	Tabela de parâmetros de energia entre bandas para AlN do método k.p para wurtzita. A energia de <i>gap</i> está em <i>eV</i> e Δ_i em <i>meV</i>	p. 63
A.6	Tabela de parâmetros de energia entre bandas para InN do método k.p para wurtzita. A energia de <i>gap</i> está em <i>eV</i> e Δ_i em <i>meV</i>	p. 64
A.7	Tabela dos potenciais de deformação para GaN do método k.p para wurtzita. Os potenciais de deformação estão em <i>eV</i>	p. 64
A.8	Tabela dos potenciais de deformação para AlN do método k.p para wurtzita. Os potenciais de deformação estão em <i>eV</i>	p. 64
A.9	Tabela das Constantes elásticas para GaN do método k.p para wurtzita. As constantes elásticas estão em <i>GPa</i>	p. 65
A.10	Tabela das Constantes elásticas para AlN do método k.p para wurtzita. As constantes elásticas estão em <i>GPa</i>	p. 65
A.11	Tabela de parâmetros de rede para GaN do método k.p para wurtzita.	p. 66

A.12 Tabela de parâmetros de rede para <i>AlN</i> do método k.p para wurtzita.	p. 66
A.13 Tabela de massas efetivas para <i>GaN</i> do método k.p para wurtzita em unidades de m_0	p. 67
A.14 Tabela de massas efetivas para <i>AlN</i> do método k.p para wurtzita em unidades de m_0	p. 67
A.15 Tabela de massas efetivas para <i>InN</i> do método k.p para wurtzita em unidades de m_0	p. 68

Introdução

Os semicondutores de Si e III-V convencionais não são adequados para a fabricação de dispositivos optoeletrônicos na região do azul-ultra-violeta do espectro [4–8], pois seus *gaps* não são suficientemente grande, ou no caso do Si, não diretos. Por outro lado, dispositivos eletrônicos baseados em GaAs, também não podem ser usados a alta temperatura por causa da energia de *gap*. Os nitretos do grupo III, nitreto de alumínio (AlN), nitreto de gálio (GaN) e nitreto de índio (InN), são particularmente adequados para aplicações nestas áreas. Desta maneira estes materiais, por terem energia do *gap* grande (acima de 3 eV) e serem geralmente diretos, podem ser usados em dispositivos de emissão de luz no violeta, azul e verde, tais como LEDs (Light Emission Diodes) e lasers, e para transistores de alta temperatura. A partir das ligas destes sistemas, AlGaN e InGaN, é possível modular a energia do *gap* e conseqüentemente a emissão num dado comprimento de onda. Isto mostra porque o estudo das propriedades eletrônicas e óticas nestes materiais é muito importante e tem sido assunto de diversas investigações [4, 5].

Ao contrário dos semicondutores III-V tradicionais, como o GaAs e InP cuja fase termodinamicamente mais estável é a estrutura zinblende, a fase mais estável dos nitretos semicondutores (AlN, GaN e InN), é a estrutura wurtzita (hexagonal) [5, 6]. Nestas estruturas ocorrem fenômenos de polarização de dois tipos: a polarização espontânea e a polarização piezoelétrica [9–11]. A polarização espontânea aparece basicamente por causa do tipo de ligação entre os átomos Ga(N). O tamanho de uma das ligações químicas é diferente das outras, o que, somado ao fato de Ga e N terem cargas opostas, sendo o N mais eletronegativo que o Ga, produz uma maior concentração de carga sobre o N. Assim, o potencial total não será nulo e dará origem a um campo elétrico. O campo piezoelétrico surge devido ao efeito do *strain* [12, 13], causado pelo descasamento dos parâmetros de rede na interface, que provoca o deslocamento dos átomos e conseqüentemente modifica o tamanho das ligações entre os átomos [14]. Cabe ressaltar aqui, que nos nitretos semicondutores há a presença de *strain* que afeta drasticamente a estrutura de bandas de valência [4–6, 9]. Portanto, podemos salientar que mesmo na ausência de *strain*, haverá um campo elétrico devido à polarização espontânea. Este campo irá afetar o potencial, possibilitando a existência do gás bidimensional de elétrons e buracos em poços quânticos

isolados. Nas estruturas cúbicas não há a existência de campos elétricos devido à sua simetria [15–17].

Enquanto para a dopagem tipo-n, usualmente feita com Si, já se tem um controle razoável atualmente, a obtenção de material dopado tipo-p com altas concentrações de portadores ainda é assunto de diversos trabalhos [5, 6, 18]. O controle da dopagem tipo-p é fundamental para melhorar o desempenho de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, bem como de dispositivos baseados no transporte, dopados uniformemente no *bulk* ou na liga, tanto na wurtzita, quanto em estruturas cúbicas. O dopante mais utilizado atualmente é o Mg, porém outros aceitadores vêm sendo propostos, tais como o Be e o C. Todos estes elementos entretanto, formam aceitadores profundos, na faixa de 0,1-0,2 eV acima do topo da banda de valência, para materiais tipo *bulk* [15, 19–22].

Várias técnicas têm sido utilizadas para aumentar a eficiência da dopagem tipo-p, utilizando múltiplos poços quânticos e super-redes de AlGaIn/GaN e GaN/InGaIn. Nas estruturas wurtzita estas técnicas possibilitaram obter energias de ionização do nível aceitador mais baixas, aumentando a condutividade tipo-p em várias ordens de magnitude [15, 17, 20]. Uma característica importante é o fato que o campo piezoelétrico pode mudar drasticamente o *bending* devido ao campo gerado pelas cargas, seja para dopagem tipo-p ou tipo-n [12, 15, 17, 23–28]. Ainda com relação a dopagem tipo-p nas estruturas *zinc blend*, as concentrações de aceitadores alcançam valores de 10^{17}cm^{-3} a 10^{19}cm^{-3} [29]. Sendo que na estrutura wurtzita esta concentração pode chegar a 10^{20}cm^{-3} [30]. Uma outra forma de gerar densidade de cargas é através da fotoexcitação ou injeção de corrente, que afetará o campo piezoelétrico e conseqüentemente as propriedades óticas. Isto é demonstrado através da determinação do ganho ótico [25, 27, 31–37].

Do ponto de vista teórico, as propriedades eletrônicas têm sido estudadas tanto na estrutura hexagonal como na cúbica. Porém, o número de trabalhos relacionados à fase wurtzita é maior, sendo que os principais métodos utilizados são: tight-binding [37–39], pseudopotencial empírico [40–46], LMTO (Linearized Muffin-Tin Orbital) [47–50], LAPW (Linear Augmented Plane-Wave Method) [51] e $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ [31, 32, 52–58]. No tratamento de estruturas de poços quânticos e super-redes, os estados da banda de condução são simples de serem calculados, pois possuem um único tipo de portador, os elétrons (banda isotrópica). Diferentemente dos sistemas tipo-n, nos sistemas tipo-p, devemos considerar os diferentes portadores: buracos pesados, buracos leves e buracos de *split-off*. Nos nitretos, como a energia do desdobramento de spin-órbita é muito pequena, cerca de 19 meV [9] para o h-GaN, as bandas de *split-off* irão influenciar a banda de valência, e portanto deverão ser

consideradas. Esta influência é tão grande que os estados de buracos de *split-off* estarão fortemente acoplados com os estados de buracos leves no ponto Γ [31, 52, 53]. Além da influência dos buracos *split-off*, ainda existe outro fator que influencia as estruturas de bandas, a energia de desdobramento do campo cristalino, Δ_{cr} , que também é pequena nos nitretos, sendo cerca de 72 meV para o h-GaN [51]. Este desdobramento porém, só aparece nas estruturas wurtzita devido à sua mais baixa simetria C_{6v} em relação aos materiais cúbicos T_d [9, 52, 53, 55].

Para determinar a estrutura de bandas de buracos, considerando todos os itens descritos acima, diversos autores utilizam Hamiltonianas 6×6 de Luttinger-Kohn (LK) [56, 59–66] e Bir-Pikus (BP) [52–58], para materiais cúbicos e hexagonais, respectivamente. Nestes cálculos a equação da massa efetiva (EME) de multibandas de LK e BP é resolvida através de uma equação matricial, usando um conjunto apropriado de funções auxiliares ou ondas planas como base, tanto em sistemas dopados, como não dopados e incluindo ou não os efeitos do strain. Para os sistemas dopados, os únicos cálculos efetuados são para estruturas wurtzita, como heterojunções de AlGaIn/GaN [67] ou poços quânticos [27] e super-redes [22] de AlGaIn/GaN. Todavia em alguns destes cálculos foi adotado o modelo de uma única banda para a estrutura de banda de valência [27, 67]. Nos nitretos a massa efetiva do buraco pesado é grande, desta forma espera-se que os níveis ocupados sejam de buracos pesados. No entanto os estados de buracos leves e *split-off* influenciam a banda de buracos pesados, e não podem ser desprezados, uma vez que podem alterar o resultado final, da mesma forma que acontece para estruturas cúbicas [61–66].

O método ***k.p*** utilizado no Laboratório de Física Computacional(LFC) foi desenvolvido ao longo dos últimos 15 anos, dentro do modelo 6×6 de Luttinger-Kohn, generalizado para heteroestruturas semicondutoras cúbicas, representado num conjunto de base de ondas planas [61–66]. Efeitos de *strain* e a inclusão da banda de *split-off* também foram considerados. Para sistemas dopados, a equação da massa efetiva (EME) é resolvida juntamente com a equação de Poisson, onde os efeitos de troca-e-correlação dentro da aproximação da densidade local são levados em conta. Neste trabalho estende-se este método para heteroestruturas semicondutoras hexagonais, onde modifica-se a super-célula unitária com o intuito de descrever a primeira zona de Brillouin (ZB) para uma super-rede crescida na fase wurtzita, determinando os vetores de $\vec{\mathbf{k}}$ da 1ª zona de Brillouin(ZB). Em seguida é incluído a Hamiltoniana desenvolvida por Rashba-Sheka-Pikus que descreve os estados da banda de valência para a wurtzita, incluindo efeitos de *strain*, spin-órbita e campo cristalino [52, 53, 55]. Esta Hamiltonina também é generalizada para heteroestruturas semicondutoras, da mesma forma que foi feita para as estruturas cúbicas. E

finalmente, inclui-se os efeitos da polarização espontânea e da polarização piezoelétrica presentes nestas estruturas. Desta forma, descreve-se de forma mais completa o sistema, dopado ou não, o que será extremamente importante para ter-se um modelo mais realista das propriedades óticas e de transporte destes sistemas.

1 *Método $k.p$ e Massa Efetiva*

1.1 Método $k.p$

Uma rede cristalina é um arranjo periódico de átomos que pode ser descrita matematicamente na forma de uma rede de Bravais e de uma base. Cada base pode ser formada por um ou mais átomos, cada qual gera um pico na distribuição do potencial que descreve a rede cristalina. Um elétron que se move nesta rede sofrerá a ação deste potencial que é periódico.

O Hamiltoniano para um elétron se movendo neste sistema periódico pode ser escrito da seguinte forma:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)\mathbf{p}, \quad (1.1)$$

onde o primeiro termo é a energia cinética do elétron e o segundo termo, $V(\mathbf{r})$, o potencial periódico da rede. O terceiro termo é o acoplamento spin-órbita, sendo $\vec{\sigma}$ o spin do elétron dado pela soma das matrizes de Pauli:

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{\mathbf{i}} + \sigma_y \hat{\mathbf{j}} + \sigma_z \hat{\mathbf{k}}, \quad (1.2)$$

que são definidas pelas matrizes 2×2 , com determinante igual a -1 .

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Escrevendo a equação de Schrödinger independente do tempo, como a equação de autovalores

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)\mathbf{p} \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

e reescrevendo ψ sob o teorema de Bloch

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

onde, $u_{nk}(\mathbf{r})$ tem a periodicidade da rede, \mathbf{k} está contido na 1ª zona de Brillouin e n é um índice banda que percorre um conjunto completo de bandas, ao substituir a equação (1.5) em (1.4) obtém-se:

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)\mathbf{p} + V(\mathbf{r}) + \right. \\ \left. \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \right\} u_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

Segundo o teorema de Bloch para qualquer \mathbf{k} , as funções $u_{nk}(\mathbf{r})$ com a periodicidade de $V(\mathbf{r})$ formam um conjunto ortogonal completo, assim escolhendo $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ pode-se representar qualquer $u_{nk}(\mathbf{r})$ através da somatória em n de $u_{nk_0}(\mathbf{r})$ multiplicado por seus respectivos coeficientes:

$$u_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{n'n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'k_0}(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

Continuando a utilizar $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ como referência, define-se o Hamiltoniano no ponto \mathbf{k}_0 como:

$$\hat{H}_{k_0} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)\mathbf{k}_0 + V(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

de maneira que:

$$\hat{H}_{k_0} u_{nk_0}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}_0) u_{nk_0}(\mathbf{r}). \quad (1.9)$$

Utilizando a definição de H_{k_0} , somando e subtraindo (1.9) de (1.6) e reorganizando os termos, obtém-se a seguinte relação:

$$\left\{ \hat{H}_{k_0} + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \right) \right\} u_{nk}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

Para obter uma equação matricial de autovalores substituímos (1.7) em (1.10), multiplicamos pela esquerda seu complexo conjugado e integramos sobre o volume da célula unitária, resultando em:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right\} c_{n'n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = E_n(\mathbf{k}) c_{nn}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad (1.11)$$

Os elementos da matriz de momento $\mathbf{p}_{nn'}$ são definidos por:

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int_{\text{célula}} u_{nk}^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \right) u_{n'k}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.12)$$

A equação (1.11) é a equação de autovalores para qualquer ponto \mathbf{k} escrita na representação \mathbf{k}_0 . Embora (1.11) seja geral, utiliza-se, na maioria dos trabalhos, apenas os pontos \mathbf{k} próximos a \mathbf{k}_0 , pois então pode-se tratar o termo (1.12) como uma perturbação que leva o problema para a equação da massa efetiva.

1.2 Equação da Massa Efetiva

Tomando os termos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e de spin-órbita como perturbações e utilizando teoria de perturbações ordinária com termos até segunda ordem, a expressão que determina os autovalores de energia do sistema é:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2) + \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{|(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}, \quad (1.13)$$

onde a expressão das autofunções em primeira ordem é:

$$u_{nk_0}^1 = u_{nk_0} + \sum_{n' \neq n} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} u_{n'k_0}. \quad (1.14)$$

Expandindo em torno de um ponto de máximo da banda de valência ou de mínimo da banda de condução, ou seja, em torno de um ponto \mathbf{k}_0 de alta simetria do sistema, o termo $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn}$ da equação (1.13) se aproxima de zero, ou seja, contribui muito pouco para a expressão da energia e pode ser desprezado.

Retirando as contribuições desprezíveis e reorganizando os termos. ao introduzir-se a somatória em termos das componentes espaciais x, y e z representados aqui por α e β , chega-se em:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[(k^2 - k_0^2) + \frac{2}{m_0} \sum_{\alpha\beta} \sum_{n' \neq n} \frac{(k'_\alpha p_{nn'}^\alpha)(k'_\beta p_{n'n}^\beta)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \right]. \quad (1.15)$$

Para simplificar a notação, na equação (1.15) foi utilizada a seguinte substituição:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0, \quad (1.16)$$

onde, a partir da definição (1.12), toma-se $\mathbf{p}_{n'n} = \mathbf{p}_{nn'}^*$.

Finalmente pode-se reduzir a equação da energia a uma equação da massa efetiva, que é dada por:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha\beta} (\mathbf{M}_n^{\alpha\beta})^{-1} k_\alpha k_\beta, \quad (1.17)$$

onde define-se o tensor de massa efetiva como:

$$\mathbf{M}_n^{\alpha\beta} = \left[\frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \left(\frac{p_{nn'}^\alpha p_{n'n}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} + \frac{p_{n'n}^\alpha p_{nn'}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \right) \right]^{-1}. \quad (1.18)$$

Utilizando o mesmo raciocínio de cálculo perturbativo utilizado acima, pode-se considerar a degenerescência de *spins* discriminando os mesmos através de um índice μ . Dessa maneira, a equação da massa efetiva assume a seguinte forma:

$$E_{n_{\mu\mu'}}(\mathbf{k}) = E_{n_{\mu\mu'}}(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha\beta} \left(\mathbf{D}_{n_{\mu\mu'}}^{\alpha\beta} \right)^{-1} k'_\alpha k'_\beta. \quad (1.19)$$

Agora, $\mathbf{D}_{n_{\mu\mu'}}^{\alpha\beta}$ é o tensor de massa efetiva e carrega os índices de momento angular μ . A equação que segue mostra explicitamente a forma do tensor de massa efetiva para estados degenerados:

$$\mathbf{D}_{n_{\mu\mu'}}^{\alpha\beta} = \left[\frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \left(\frac{p_{nn'}^\alpha(\mu\mu') p_{n'n(\mu'\mu)}^\beta}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} + \frac{p_{n'n(\mu'\mu)}^\alpha p_{nn'}^\beta(\mu\mu')}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)} \right) \right]^{-1}. \quad (1.20)$$

O termo $\mathbf{p}_{nn'}(\mu\mu')$ é uma redefinição de $\mathbf{p}_{nn'}$ dado pela equação (1.12) para incluir a degenerescência de momento angular introduzida. A definição de $\mathbf{p}_{nn'}(\mu\mu')$ é:

$$\mathbf{p}_{nn'}(\mu\mu') = \int_{\text{célula}} u_{n_{\mu}k}^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \right) u_{n'_{\mu'}k}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.21)$$

Para a determinação dos elementos do tensor de massa efetiva, é necessário fazer uma análise da simetria do cristal e de sua célula unitária. A wurtzita, em particular, tem simetria C_{6v} e sua estrutura de bandas tem uma quebra de degenerescência dos estados sobre o centro da primeira zona de Brillouin [68, 69].

Com o intuito de tratar os estados próximos à banda de condução, pode-se utilizar de maneira muito eficiente a aproximação de Löwdin [70], onde é escolhido um conjunto de autofunções dos estados que efetivamente interajam com os estados visados (*e.g.* estados da banda de valência) que são definidos como pertencentes a uma classe A. Todos os outros estados, definidos como pertencentes a uma classe B, são tomados como perturbações. Assim os efeitos dos estados da classe B sobre os estados da classe A não são calculados diretamente, mas sim incluídos nos parâmetros de massa efetiva através de ajustes. Os parâmetros podem, então, ser obtidos a partir de métodos de primeiros princípios ou através de ajustes de parâmetros experimentais.

Usando esta aproximação, a análise dos últimos estados ocupados e dos primeiros vazios pode ser feita através de um pequeno número de equações acopladas. Tradicionalmente levam-se em conta os estados do topo da banda de valência e/ou fundo da banda de condução, sendo o número de estados utilizados nas expressões o necessário para o estudo em questão.

2 Matrizes do Método $k.p$

Trabalhos seminais como o de Luttinger e Kohn [71] e de Kane [72], mostram o Hamiltoniano $\mathbf{k.p}$ para as bandas de valência e de condução de cristais semicondutores na fase *zinc blend*. O trabalho aqui apresentado baseia-se nos trabalhos, também seminais, de Rashba e Sheka [68, 69], que derivam a banda de valência para a wurtzita, especificado pra os níveis Γ_9 acoplados, Γ_7 superior e Γ_7 inferior, e de Pikus que posteriormente incluiu os efeitos de *strain* e apresentou a forma invariante no tempo para a banda de valência do Hamiltoniano.

2.1 Hamiltoniano de Rashba-Sheka-Pikus - *Wurtzita*

A dedução do Hamiltoniano que descreve os efeitos da rede cristalina, de simetria hexagonal, sobre a banda de valência foi realizada de maneira elegante, para o grupo de simetria C_{6v} , por Rashba [68]. Em seguida Pikus [69], baseado no trabalho de Rashba, introduziu os efeitos de *spin-órbita* e de *strain* assim como apresentou uma forma invariante no tempo do Hamiltoniano.

O Hamiltoniano independente do tempo, sem *strain* e levando em conta os efeitos de *spin-órbita*, é descrito pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 H_{kp} = & \Delta_1 J_z + \Delta_2 J_z \sigma_z + \sqrt{2} \Delta_3 (J_+ \sigma_- + J_- \sigma_+) + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(A_1 + A_3 J_z^2) k_z^2 \\
 & + (A_2 + A_4 J_z^2) k_{\perp}^2 - A_5 (J_+^2 k_-^2 + J_-^2 k_+^2) - 2i A_6 k_z ([J_z J_+] k_- + [J_z J_-] k_+)]
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Os parâmetros A_i que compõem o Hamiltoniano são conhecidos como os parâmetros de Bir-Pikus [1, 69]. Estes parâmetros descrevem as relações das massas efetivas dos portadores no sistema e estão relacionados segundo a tabela abaixo.

Portadores da banda de valência	m_0/m_{\parallel}	m_0/m_{\perp}
HH	$-(A_1 + A_3)$	$-(A_2 + A_4 - A_5)$
LH	$-(A_1 + A_3)$	$-(A_2 + A_4 + A_5)$
CH	$-A_1$	$-A_2$

Tabela 2.1: Massas efetivas da banda valência

Os parâmetros Δ_i referem-se às separações das bandas de buracos leves **LH**, pesados **HH** e *split-off* pelo campo cristalino **CH**. Eles estão diretamente relacionados com as energias de separação de campo cristalino Δ_{CH} e a energia de separação devido à interação spin órbita Δ_{SO} , que podem ser extraídas de resultados experimentais como, por exemplo, transições óticas interbandas [73]. Tais relações são dadas por:

$$\Delta_1 = \Delta_{CH} \quad , \quad \Delta_2 = \Delta_3 = \frac{\Delta_{SO}}{3} \quad (2.2)$$

e podem ser calculadas através de medidas de transições óticas a partir de:

$$E_{HH} - E_{CH} = \frac{1}{2} \left[\Delta_{CH} + \Delta_{SO} - \sqrt{(\Delta_{CH} + \Delta_{SO})^2 - \frac{8}{3} \Delta_{CH} \Delta_{SO}} \right] \quad (2.3)$$

$$E_{HH} - E_{LH} = \frac{1}{2} \left[\Delta_{CH} + \Delta_{SO} + \sqrt{(\Delta_{CH} + \Delta_{SO})^2 - \frac{8}{3} \Delta_{CH} \Delta_{SO}} \right]$$

Os outros elementos que aparecem no Hamiltoniano (2.1) são os parâmetros da rede recíproca da rede cristalina hexagonal \mathbf{k} , o momento angular J e as matrizes de Pauli σ que estão relacionados pelas equações abaixo:

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2,$$

$$J_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x + iJ_y), \quad 2[J_z J_{\pm}] = J_z J_{\pm} + J_{\pm} J_z, \quad (2.4)$$

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$$

Sendo a representação matricial de \mathbf{J} é dada por:

$$J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

e as matrizes de Pauli por:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Para representar o Hamiltoniano da equação (2.1) matricialmente é necessário escolher um conjunto de funções de Bloch que definam um conjunto ortonormal completo. Pode-se escolher uma base constituída pelas autofunções da banda de valência e que representa os buracos leves, pesados e *split-off* do campo cristalino [1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} |a^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X + iY) \uparrow\rangle \\ |a^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY) \uparrow\rangle \\ |a^{(3)}\rangle = |Z \uparrow\rangle \\ |a^{(4)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY) \downarrow\rangle \\ |a^{(5)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X + iY) \downarrow\rangle \\ |a^{(6)}\rangle = |Z \downarrow\rangle \end{array} \right. \quad (2.7)$$

Utilizando esta base calculam-se os elementos de matriz $\langle a^{(m)} | H_{kp} | a^{(n)} \rangle$ levando à seguinte matriz:

$$H_{kp} = \begin{pmatrix} F & K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ K & G & H & 0 & 0 & \Delta \\ -H & H^* & \lambda & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & K & H \\ 0 & 0 & \Delta & K^* & G & -H^* \\ 0 & \Delta & 0 & H^* & -H & \lambda \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Os elementos λ , θ , F , G , K , H e Δ que aparecem na matriz (2.8) são resultado do agrupamento dos nove parâmetros (A_i e Δ_i) do formalismo da estrutura hexagonal e são relacionados da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\lambda &= A_1 k_z^2 + A_2 k_{\perp}^2 \\
\theta &= A_2 k_z^2 + A_4 k_{\perp}^2 \\
F &= \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta \\
G &= \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta \\
K &= A_5 k_{\perp}^2 \\
H &= iA_6 k_{\perp} k_z \\
\Delta &= \sqrt{2}\Delta_3
\end{aligned} \tag{2.9}$$

No centro da 1ª zona de Brillouin ($\mathbf{k} = 0$) a matriz (2.8) é praticamente diagonal, existindo apenas o parâmetro Δ fora dos blocos diagonais, o que faz com que os buracos leves (**LH**) e *split-off* (**CH**) se misturem de acordo com a magnitude dos valores dos Δ 's.

$$H_{kp}(\mathbf{k} = 0) = \begin{pmatrix} \Delta_1 + \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_1 - \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_1 + \Delta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & \Delta_1 - \Delta_2 & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

Para conhecer os níveis de energia no centro da zona de Brillouin deve-se diagonalizar a matriz (2.10). O resultado dessa diagonalização é dado pelas relações abaixo:

$$\begin{aligned}
E_{HH} &= \Delta_1 + \Delta_2 \\
E_{LH} &= \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2 + \Delta^2} \\
E_{CH} &= \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2 + \Delta^2}
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Considerando $\Delta_i > 0$, as energias da banda de valência no centro da zona de Brillouin são, em ordem decrescente de energia, representadas por buracos pesados (**HH**), buracos leves (**LH**) e *split-off* devido ao efeito do campo cristalino (**CH**). A figura 2.1 [1] é uma ilustração do diagrama de níveis de energia da banda de valência.

A consideração $\Delta_i > 0$ não é sempre verdade, tomando *AlN* como exemplo observa-se que Δ_1 é negativo fazendo com que o topo da banda de valência não seja mais a banda de buracos pesados (**HH**) e sim a banda de buracos de *split-off* (**CH**). Com essa configuração

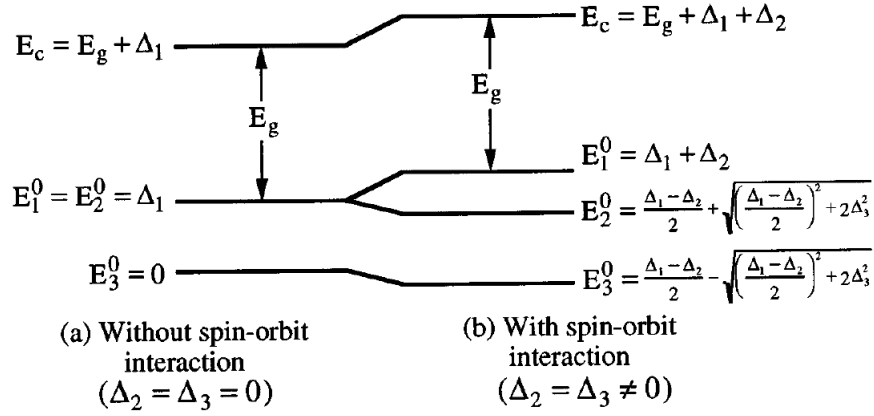


Figura 2.1: Níveis de energia da banda de valência e condução no ponto Γ para nitretos com estrutura cristalina hexagonal [1]

na banda de valência aparecem, em ordem decrescente, **CH**, **HH** e **LH**.

2.2 Hamiltoniano RSP 8×8

Para tornar possível a determinação de espectros teóricos de luminescência, ou seja, para levar em conta as transições diretas da banda de condução para a banda de valência, é necessário a escrita de uma matriz que inclua a banda de condução da estrutura hexagonal.

Da mesma maneira que na seção anterior, utiliza-se o conjunto de autofunções (2.7), acrescentando as autofunções da banda de condução $|S \uparrow\rangle$ e $|S \downarrow\rangle$ para expressar matricialmente o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ independente do tempo.

$$H_{kp} = \begin{pmatrix} E(\mathbf{k}) & \frac{-k_+P_2}{\sqrt{2}} & \frac{k_-P_2}{\sqrt{2}} & k_zP_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-k_-P_2}{\sqrt{2}} & F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{k_+P_2}{\sqrt{2}} & -K & G & H & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ k_zP_1 & -H & H^* & \lambda & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E(\mathbf{k}) & \frac{k_-P_2}{\sqrt{2}} & \frac{-k_+P_2}{\sqrt{2}} & k_zP_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{k_+P_2}{\sqrt{2}} & F & -K & H \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & \frac{-k_-P_2}{\sqrt{2}} & -K^* & G & -H^* \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & k_zP_1 & H^* & -H & \lambda \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

A matriz (2.12) é equivalente à matriz (2.8) no que se refere aos termos da banda de valência, ou seja, os elementos F, G, K, H e λ têm as mesmas definições (2.9). No entanto, lembrando que foi utilizada a aproximação de Löwdin, os novos parâmetros A_i não incluem os estados da banda de condução como perturbações em sua determinação. Os novos elementos de matriz que aparecem são referentes à banda de condução e suas interações com a banda de valência. Estes elementos são definidos como:

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_e^\perp} + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m_e^\parallel}$$

$$P_1^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{m_0}{m_e^\parallel} - 1 \right) \frac{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2}{(E_g + 2\Delta_2)} \quad (2.13)$$

$$P_2^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{m_0}{m_e^\parallel} - 1 \right) \frac{E_g [(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2]}{(E_g + \Delta_2)(E_g + \Delta_1 + \Delta_2) - \Delta_3^2}$$

Levando em conta que a energia de *gap* para os nitretos é muito alta ($\sim 3.4 - 6.0eV$), então a interação da banda de condução com a banda de valência é muito fraca e pode-se assumir uma aproximação parabólica para a banda de condução, ou seja, os parâmetros P_1 e P_2 podem ser desprezados. A matriz (2.12) então assume a seguinte forma:

$$H_{kp} = \begin{pmatrix} E(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K & G & H & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & -H & H^* & \lambda & 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & -K^* & G & -H^* \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & H^* & -H & \lambda \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

2.3 Hamiltoniano de Luttinger-Kohn - *zinc blend*

Além da estrutura hexagonal materiais semicondutores têm simetrias diversas. Uma das mais estudadas é a estrutura cúbica, também conhecida como *zinc blend*, ou estrutura do diamante. Um dos trabalhos mais importantes na literatura no desenvolvimento do método ***k.p*** para *zinc blend* é o artigo de Luttinger-Kohn [71].

O método de determinação é semelhante ao tratado até agora, onde primeiro é determinado um Hamiltoniano sem interação *spin-órbita*. Em seguida escreve-se o termo de *spin-órbita* e soma-se ao Hamiltoniano original, determinando um Hamiltoniano 6×6 praticamente bloco diagonal (com termos de *spin* \uparrow e \downarrow separados) acoplados por um termo fora da diagonal representados por Δ .

No caso de Luttinger-Kohn opta-se por escrever o Hamiltoniano na base que diagonaliza o termo de *spin*, tornando o Hamiltoniano diagonal para ($\mathbf{k} = 0$).

O resultado deste trabalho é o Hamiltoniano apresentado abaixo, que leva em conta as interações dos portadores da banda de valência:

$$\begin{pmatrix}
Q & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\
S^* & T & 0 & R & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\
R^* & 0 & T & -S & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) \\
0 & R^* & -S^* & Q & -\sqrt{2}R^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* \\
-\frac{i}{\sqrt{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S & -i\sqrt{2}R & \frac{1}{2}(Q+T) - \Delta & 0 \\
i\sqrt{2}R^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{2}(Q+T) - \Delta
\end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Os elementos da matriz são dados por:

$$\begin{aligned}
Q &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + \gamma_2)(\mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)\mathbf{k}_z^2] \\
T &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - \gamma_2)(\mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)\mathbf{k}_z^2] \\
S &= i\frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{3}\gamma_3(\mathbf{k}_x - i\mathbf{k}_y)\mathbf{k}_z \\
R &= i\frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{3}[\gamma_2(\mathbf{k}_x^2 - \mathbf{k}_y^2) - 2i\gamma_3\mathbf{k}_x\mathbf{k}_y]
\end{aligned} \quad (2.16)$$

Os parâmetros γ_i que aparecem nas relações (2.16) são conhecidos como os parâmetros de Luttinger e, assim como os parâmetros de Bir-Pikus, estão relacionados às massas efetivas dos buracos na banda de valência. Esses valores se relacionam através das expressões abaixo:

$$\begin{aligned}
m_{HH[100]}^{-1} &= \gamma_1 - 2\gamma_2 \\
m_{HH[111]}^{-1} &= \gamma_1 - 2\gamma_2 \\
m_{LH[100]}^{-1} &= \gamma_1 + 2\gamma_2 \\
m_{LH[111]}^{-1} &= \gamma_1 + 2\gamma_2 \\
m_{SO}^{-1} &= \gamma_1 + \frac{1}{3}\frac{\Delta}{E_g} + \frac{E_p}{\Delta E_p}
\end{aligned} \quad (2.17)$$

2.4 Matriz de Kane-Banda de condução (zinc-blend)

Além de Luttinger-Kohn [71] outro trabalho muito importante na literatura sobre estruturas cristalinas *zinc blend* é o trabalho de E. O. Kane [72] publicado no ano seguinte ao da publicação de Luttinger-Kohn. O trabalho de Kane complementa o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$

introduzindo no Hamiltoniano a interação da banda de valência com a banda de condução. O resultado deste trabalho é apresentado em sua forma matricial, comumente encontrada na literatura:

$$\begin{pmatrix} Eg + Ak^2 & 0 & iP_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & i\sqrt{\frac{1}{3}}P_- & 0 & i\sqrt{\frac{1}{3}}P_z & \sqrt{\frac{2}{3}}P_- \\ 0 & Eg + Ak^2 & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_+ & i\sqrt{\frac{2}{3}}P_z & -P_- & i\sqrt{\frac{2}{3}}P_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_z \\ -iP_- & 0 & Q & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_- & S^* & T & 0 & R & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}P_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}}P_z & R^* & 0 & T & -S & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) \\ 0 & -P_+ & 0 & R^* & -S^* & Q & -\sqrt{2}R^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* \\ -i\sqrt{\frac{1}{3}}P_z & -i\sqrt{\frac{2}{3}}P_- & -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S & -i\sqrt{2}R & \frac{1}{2}(Q+T) - \Delta & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P_+ & -\sqrt{\frac{1}{3}}P_z & i\sqrt{2}R^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{2}(Q+T) - \Delta \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Os elementos da matriz (2.18) são resultado do agrupamento dos parâmetros de Kane como mostrado nas relações abaixo:

$$\begin{aligned} Q &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2)(\mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2) + (\bar{\gamma}_1 - 2\bar{\gamma}_2)\mathbf{k}_z^2] \\ T &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\bar{\gamma}_1 - \bar{\gamma}_2)(\mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2) + (\bar{\gamma}_1 + 2\bar{\gamma}_2)\mathbf{k}_z^2] \\ S &= i\frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{3}\bar{\gamma}_3(\mathbf{k}_x - i\mathbf{k}_y)\mathbf{k}_z \\ R &= i\frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{3}[\bar{\gamma}_2(\mathbf{k}_x^2 - \mathbf{k}_y^2) - 2i\bar{\gamma}_3\mathbf{k}_x\mathbf{k}_y] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Esses são os elementos referentes à banda de valência do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ como definidos anteriormente. Os parâmetros de Kane $\bar{\gamma}_i$ diferem dos parâmetros de Luttinger pela correção devida à modificação da classe A de Löwdin com a introdução da banda de condução. Esta correção é dada pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_1 &= \gamma_1 - \frac{1}{3} \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2 E_g} \\ \bar{\gamma}_2 &= \gamma_2 - \frac{1}{6} \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2 E_g} \\ \bar{\gamma}_3 &= \gamma_3 - \frac{1}{6} \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2 E_g} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Os novos elementos que aparecem na matriz (2.18), devidos à introdução da banda

de condução são:

$$\begin{aligned}
 E_g &= E_c - \frac{\Delta}{3} \\
 A &= \frac{\hbar^2}{m_e} P_+ = P(k_x + ik_y) \\
 P_- &= P(k_x - ik_y) \\
 P_z &= Pk_z
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

onde E_g é a energia de *gap*, a separação entre o novo topo da banda de valência ($\Delta/3$) e o fundo da banda de condução (E_c) e P é o elemento da matriz de momentos entre estados das bandas de condução e valência:

$$P = -i \frac{\hbar}{m_0} \langle x | p_x | u_i \rangle \tag{2.22}$$

As massas efetivas sobre o formalismo de Kane são definidas da mesma forma que nas relações (2.17), apenas substituindo os parâmetros de Luttinger pelos de Kane.

$$\begin{aligned}
 m_e^{-1} &= A + \frac{E_g + \frac{2}{3}\Delta}{E_g + \Delta} \frac{E_p}{E_p} \\
 m_{HH[100]}^{-1} &= \gamma_1 - 2\gamma_2 \\
 m_{HH[111]}^{-1} &= \gamma_1 - 2\gamma_2 \\
 m_{LH[100]}^{-1} &= \gamma_1 + 2\gamma_2 \\
 m_{LH[111]}^{-1} &= \gamma_1 + 2\gamma_2 \\
 m_{SO}^{-1} &= \gamma_1 + \frac{1}{3} \frac{\Delta}{E_g + \Delta} \frac{E_p}{E_p}
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

2.5 Troca de base

Na literatura, diversas bases são usadas para a representação matricial do Hamiltoniano $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Nos trabalhos que estudam a simetria cúbica *zinc blend* utiliza-se, em geral, a base de Luttinger-Kohn [74]. Para uma comparação direta com o Hamiltoniano de Luttinger-Kohn, pode-se fazer uma transformação de base e reescrever a matriz (2.8) nesta nova base.

Uma mudança de base deve ser efetuada a partir de uma matriz unitária, que relaciona quaisquer duas bases de funções ortonormais. Definindo então essa transformação:

$$|b^{(n)}\rangle = U|a^{(n)}\rangle \quad (2.24)$$

onde U é a uma matriz unitária e pode ser escrita como:

$$U = \sum_n |b^{(n)}\rangle \langle a^{(n)}| \quad (2.25)$$

A transformação do Hamiltoniano H_{kp} descrito na base $|a^{(n)}\rangle$ para sua descrição na base $|b^{(n)}\rangle$ é dada pela relação

$$\langle b^k | H | b^l \rangle = \sum_{m,n} \langle a^k | U^\dagger | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | H | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | U | a^l \rangle \quad (2.26)$$

A base utilizada no trabalho de Luttinger-Kohn que descreve a banda de valência é relacionada abaixo:

$$\left\{ \begin{array}{l} |b^{(1)}\rangle = |\frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\ |b^{(2)}\rangle = |\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} [-2|Z \downarrow\rangle + |(X + iY) \downarrow\rangle] \\ |b^{(3)}\rangle = |\frac{3}{2}\frac{-1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [2|Z \downarrow\rangle + |(X - iY) \uparrow\rangle] \\ |b^{(4)}\rangle = |\frac{3}{2}\frac{-3}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\ |b^{(5)}\rangle = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|Z \downarrow\rangle + |(X + iY) \downarrow\rangle] \\ |b^{(6)}\rangle = |\frac{1}{2}\frac{-1}{2}\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} [|Z \downarrow\rangle + |(X - iY) \uparrow\rangle] \end{array} \right. \quad (2.27)$$

Utilizando as autofunções das bases (2.27) e (2.7) pode-se construir a matriz unitária U que leva o Hamiltoniano da base $|a\rangle$ para a base $|b\rangle$:

$$U = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} & 0 & 0 & -\frac{i\sqrt{6}}{3} \\ 0 & -\frac{i\sqrt{6}}{3} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i\sqrt{3}}{3} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{6}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

Calculando a equação (2.26) é obtida a descrição do Hamiltoniano (2.1) na base de Luttinger-Kohn [71]. Para simplificar, renomeando os termos que agrupam os parâmetros, obtém-se a matriz 6×6 na base de Luttinger-Kohn:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{P} + \mathcal{Q} & \sqrt{\frac{2}{3}}S & \frac{R}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{-S}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}}R \\ \sqrt{\frac{2}{3}}S^* & \mathcal{P} - \mathcal{Q} - 4\Delta' & 0 & \frac{R}{\sqrt{3}} & \sqrt{2}(\mathcal{Q} - \Delta') & \frac{3S}{3} \\ \frac{R^*}{\sqrt{3}} & 0 & \mathcal{P} - \mathcal{Q} - 4\Delta' & -\sqrt{\frac{2}{3}}S & \frac{3S^*}{3} & -\sqrt{2}(\mathcal{Q} - \Delta') \\ 0 & \frac{R^*}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}}S & \mathcal{P} + \mathcal{Q} & \sqrt{\frac{2}{3}}R & \frac{-S^*}{\sqrt{3}} \\ \frac{-S^*}{\sqrt{3}} & \sqrt{2}(\mathcal{Q} - \Delta') & \frac{3S}{3} & \sqrt{\frac{2}{3}}R^* & \mathcal{P} + 3\Delta_2 + 4\Delta' & 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}R^* & \frac{3S^*}{3} & -\sqrt{2}(\mathcal{Q} - \Delta') & \frac{-S}{\sqrt{3}} & 0 & \mathcal{P} + 3\Delta_2 + 4\Delta' \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Para facilitar a comparação com o Hamiltoniano do *zinc blend* descrito na próxima seção (2.3), introduz-se essa seguinte notação:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &\equiv P + 2Q/3 - \Delta_2, \\ \mathcal{Q} &\equiv Q/3, \\ \Delta' &\equiv (\Delta_3 - \Delta_2)/3. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Os termos P , Q , R , S e T são resultado, como anteriormente, do agrupamento dos 10 parâmetros existentes no formalismo da estrutura hexagonal. Estes são relacionados abaixo:

$$\begin{aligned}P &= \Delta_1 + \Delta_2 + A_1 k_z^2 + A_2 k_\perp^2, \\Q &= -\Delta_1 + A_3 k_z^2 + A_4 k_\perp^2, \\R &= A_5 k_-^2, \\S &= A_6 k_z k_-.\end{aligned}\tag{2.31}$$

3 Tensão

3.1 Strain

Para determinar o efeito do *strain* nos cristais é necessário compreender que alterações uma compressão ou distensão causam à rede cristalina. Definindo um conjunto de novos eixos que descrevem o material sofrendo algum tipo de tensão, seja compressiva ou distensiva, têm-se:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_x' &= (1 - \varepsilon_{xx})\mathbf{e}_x + \varepsilon_{xy}\mathbf{e}_y + \varepsilon_{xz}\mathbf{e}_z, \\ \mathbf{e}_y' &= \varepsilon_{yx}\mathbf{e}_x + (1 - \varepsilon_{yy})\mathbf{e}_y + \varepsilon_{yz}\mathbf{e}_z, \\ \mathbf{e}_z' &= \varepsilon_{zx}\mathbf{e}_x + \varepsilon_{zy}\mathbf{e}_y + (1 - \varepsilon_{zz})\mathbf{e}_z.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Obtém-se assim, a representação espacial do material relaxado e tensionado, respectivamente, através das seguintes expressões:

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z, \\ \mathbf{r}' &= x\mathbf{e}_x' + y\mathbf{e}_y' + z\mathbf{e}_z'.\end{aligned}\tag{3.2}$$

As mudanças nas forças existentes no interior do material são dadas pela deformação volumétrica do mesmo, ou seja, a diferença da posição de equilíbrio natural dos pontos da rede \mathbf{r} e da posição destes pontos sobre efeito da tensão \mathbf{r}' . Dessa maneira é possível definir o vetor de deformação do sistema, dado por:

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}.\tag{3.3}$$

Definindo o tensor de *strain* como sendo:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

o vetor de deformação pode ser escrito através da seguinte relação:

$$\mathbf{R} = \varepsilon \cdot \mathbf{r} = u(\mathbf{r})\mathbf{e}_x + v(\mathbf{r})\mathbf{e}_y + w(\mathbf{r})\mathbf{e}_z, \quad (3.5)$$

onde:

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}) &= x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{xy} + z\varepsilon_{xz}, \\ v(\mathbf{r}) &= x\varepsilon_{yx} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{yz}, \\ w(\mathbf{r}) &= x\varepsilon_{zx} + y\varepsilon_{zy} + z\varepsilon_{zz}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Ao invés de utilizar $\varepsilon_{\alpha\beta}$, onde α e β representam x , y ou z , para descrever as distorções no material, pode-se utilizar as projeções dessas deformações sobre os eixos de \mathbf{r}' para descrever as mudanças no volume do sistemas. Denominando essas projeções de $e_{\alpha\beta}$ pode-se escrever matematicamente que:

$$e_{\alpha\beta} = \hat{\alpha}' \cdot \hat{\beta}' \approx \varepsilon_{\alpha\beta} + \varepsilon_{\beta\alpha}. \quad (3.7)$$

A aproximação realizada na equação (3.7) leva em conta que a deformação é muito pequena comparado ao tamanho dos parâmetros de rede, assim os termos ε^2 podem ser desprezados.

Comparando as equações (3.7) e (3.6) é fácil verificar que:

$$e_{\alpha\beta} = \frac{\partial f_{\alpha}(\mathbf{r})}{\partial \beta} + \frac{\partial f_{\beta}(\mathbf{r})}{\partial \alpha}. \quad (3.8)$$

A aproximação de pequenas deformações leva a concluir a igualdade das projeções simétricas por reflexão onde então $e_{\alpha\beta} = e_{\beta\alpha}$.

Uma força que age sobre uma unidade de área do cristal é chamada de *stress*. Considerando que a resposta da estrutura cristalina a estes esforços é elástica e utilizando a lei Hooke para descrever os mesmos, é possível encontrar nove componentes independentes de *stress* $F_{Xx}, F_{Xy}, F_{Xz}, F_{Yx}, F_{Yy}, F_{Yz}, F_{Zx}, F_{Zy}$ e F_{Zz} . Os índices maiúsculos representam a direção da força e os índices minúsculos a normal ao plano em que a força está atuando.

Com as considerações acima, em uma aproximação cúbica, e assumindo que não há torques sobre o sistema, as nove componentes de *stress* se reduzem a apenas seis pois $F_{Xy} = F_{Yx}$; $F_{Yz} = F_{Zy}$; $F_{Xz} = F_{Zx}$. Aplicando a lei de Hooke obtém-se:

$$\begin{pmatrix} F_{xx} \\ F_{yy} \\ F_{zz} \\ F_{yz} \\ F_{zx} \\ F_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Examinando a simetria da estrutura cristalina hexagonal e assumindo uma aproximação cúbica para a representação do plano xy , as 36 constantes de elasticidade se reduzem para 6 de maneira que o tensor de elasticidade se reduz a:

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Tendo conhecimento das constantes elásticas e do tensor de *strain*, é possível utilizar a teoria do potencial de deformação para calcular o Hamiltoniano de *strain*, que descreve os efeitos desta deformação sobre os autovalores e autoestados dentro da 1ª zona de Brillouin. O Hamiltoniano pode ser calculado utilizando teoria de perturbação de primeira ordem sendo descrito por:

$$H_\varepsilon^{\alpha\beta} = \sum_{ij} D_{ij}^{\alpha\beta} \varepsilon_{ij}. \quad (3.11)$$

O termo D_{ij} é o operador do potencial de deformação que se transforma sobre operações de simetria. Dessa maneira $D_{ij}^{\alpha\beta}$ é um elemento de matriz de D_{ij} , onde os índices α e β representam o conjunto de autofunções da base na ausência de perturbação. Da mesma maneira que as constantes elásticas, os elementos da matriz D_{ij} podem ser reduzidos analisando-se a simetria do sistema, o qual depende da simetria da base escolhida.

3.2 Hamiltoniano de *strain* - wurtzita

Utilizando-se as considerações da seção anterior, levando-se em conta que o *strain* atua sobre a parte espacial da função de onda, pode-se escrever o Hamiltoniano de *strain* na base (2.7) obtendo-se a seguinte matriz:

$$H_\varepsilon = \begin{pmatrix} F_\varepsilon & K_\varepsilon^* & -H_\varepsilon^* & 0 & 0 & 0 \\ K_\varepsilon & G_\varepsilon & H_\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ -H_\varepsilon & H_\varepsilon^* & \lambda_\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F_\varepsilon & K_\varepsilon & H_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & K_\varepsilon^* & G_\varepsilon & -H_\varepsilon^* \\ 0 & 0 & 0 & H_\varepsilon^* & -H_\varepsilon & \lambda_\varepsilon \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

onde os elementos são dados por:

$$\begin{aligned} \lambda_\varepsilon &= D_1\varepsilon_{zz} + D_2(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \\ \theta_\varepsilon &= D_3\varepsilon_{zz} + D_4(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \\ F_\varepsilon &= \lambda_\varepsilon + \theta_\varepsilon, \\ G_\varepsilon &= \lambda_\varepsilon + \theta_\varepsilon, \\ K_\varepsilon &= D_5\varepsilon_+, \\ H_\varepsilon &= iD_6\varepsilon_{+z}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

as definições de $\varepsilon_{\pm z}$ e ε_{\pm} são dadas por:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\pm z} &= \varepsilon_{xz} \pm i\varepsilon_{yz}, \\ \varepsilon_{\pm} &= \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} \pm 2i\varepsilon_{xy}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Levando-se em conta que a energia do *gap* é muito grande, pode-se considerar que os efeitos de *strain* não afetam a parabolicidade da banda de condução. Neste caso é possível considerar que a banda de condução sofre apenas um deslocamento rígido devido à pressão hidrostática. O Hamiltoniano de *strain*, ao incluir-se a banda de condução, assume então a seguinte forma:

$$H_{kp} = \begin{pmatrix} P_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & F_\varepsilon & -K_\varepsilon^* & -H_\varepsilon^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K_\varepsilon & G_\varepsilon & H_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -H_\varepsilon & H_\varepsilon^* & \lambda_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & F_\varepsilon & -K_\varepsilon & H_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -K_\varepsilon^* & G_\varepsilon & -H_\varepsilon^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & H_\varepsilon^* & -H_\varepsilon & \lambda_\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

onde

$$P_\varepsilon = a_{c\parallel}\varepsilon_{zz} + a_{c\perp}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \quad (3.16)$$

sendo os outros parâmetros iguais aos descritos na equação (3.13)

4 *Heteroestrutura e Super-rede*

O objetivo deste capítulo é estender o método $k.p$, como apresentado para o *bulk*, à representação de uma heteroestrutura. Para tanto são apresentadas as representações das funções de onda de Luttinger-Kohn para uma super-rede e a simetrização dos operadores momento escrevendo os parâmetros do formalismo $k.p$ no espaço de Fourier.

4.1 A Super-rede

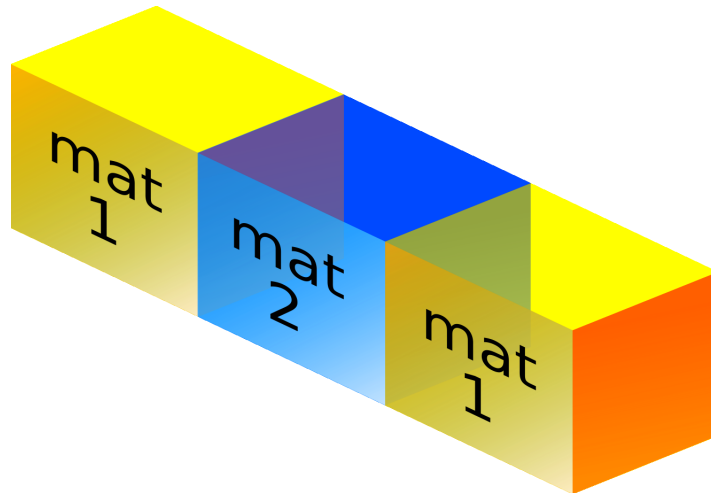


Figura 4.1: Heteroestrutura composta de dois materiais distintos

Uma heteroestrutura é composta por diferentes materiais dispostos um ao lado do outro, como apresentado na figura 4.1 para uma heteroestrutura contendo dois tipos de materiais. Esta configuração define uma variação dos valores de cada um dos parâmetros ao longo da direção de crescimento da heteroestrutura. A heteroestrutura da figura 4.1 é a representação de uma região da super-rede, essa região é reproduzida indefinidamente ao longo da direção de crescimento do material, essa recorrência da configuração define condições periódicas de contorno. A figura 4.1 ilustra a configuração da super-rede.

As funções de Luttinger-Kohn podem ser representadas por:



Figura 4.2: Super-rede - a heteroestrutura é repetida indefinidamente ao longo da direção de crescimento

$$\langle \mathbf{r}s | jm_j \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \langle \mathbf{r}s | jm_j \rangle \quad (4.1)$$

onde denota-se s como sendo a coordenada de *spin* e Ω é o volume da célula unitária. Para o cálculo das heteroestruturas é necessário introduzir a periodicidade da super-rede, $K = (2\pi/d)l$ onde $l = 1, 2, \dots, N, \dots$ e d é o período da super-rede. Assim as funções de Luttinger-Kohn assumem a seguinte configuração:

$$\langle \mathbf{r}s | jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} \rangle = \langle \mathbf{r}s | jm_j \mathbf{k} + \mathbf{K} \rangle \quad (4.2)$$

sendo: $\mathbf{K} = K_x \mathbf{e}_x + K_y \mathbf{e}_y + K_z \mathbf{e}_z$

ou seja,

$$\langle \mathbf{r}s | jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\mathbf{k} + K_x \mathbf{e}_x + K_y \mathbf{e}_y + K_z \mathbf{e}_z)\mathbf{r}} \langle \mathbf{r}s | jm_j \rangle \quad (4.3)$$

Nesta base pode-se escrever as autofunções da super-rede como:

$$\langle \mathbf{r}s | \nu \mathbf{k} \rangle = \sum_{jm_j K} \langle jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} | \nu \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{r}s | jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} \rangle \quad (4.4)$$

Numa heteroestrutura, os parâmetros de Bir-Pikus A_i variam com a disposição espacial dos diferentes materiais, sendo A_i descrito por uma função $A_i = A_i(\mathbf{r})$, conceito este que está generalizado na equação (4.5) em pela função $f(\mathbf{r})$.

Para representar $f(\mathbf{r})$ leva-se em conta que f pode assumir valores diferentes em diferentes pontos do espaço real, determinando regiões discretas de maneira arbitrária, definidas por cada material que constitui a heteroestrutura. Este esquema é representado unidimensionalmente na figura (4.1) ou segundo a seguinte definição:

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} f_1 & \dots & d_{x_0} \leq x \leq d_{x_1}, & d_{y_0} \leq y \leq d_{y_1}, & d_{z_0} \leq z \leq d_{z_1} \\ f_2 & \dots & d_{x_1} \leq x \leq d_{x_2}, & d_{y_1} \leq y \leq d_{y_2}, & d_{z_1} \leq z \leq d_{z_2} \\ f_1 & \dots & d_{x_2} \leq x \leq d_{x_3}, & d_{y_2} \leq y \leq d_{y_3}, & d_{z_2} \leq z \leq d_{z_3} \\ \vdots & & & & \\ f_n & \dots & d_{x_{n-1}} \leq x \leq d_{x_n}, & d_{y_{n-1}} \leq y \leq d_{y_n}, & d_{z_{n-1}} \leq z \leq d_{z_n} \end{cases}, \quad (4.5)$$

$$\text{onde: } \begin{cases} d_{x_0} = -D_x/2, & d_{x_n} = D_x/2 \\ d_{y_0} = -D_y/2, & d_{y_n} = D_y/2 \\ d_{z_0} = -D_z/2, & d_{z_n} = D_z/2 \end{cases}, \quad (4.6)$$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla. \quad (4.7)$$

No formalismo para o cálculo de heteroestruturas os elementos da matriz RSP que acompanham k_i devem assumir uma forma de operador. Para isso utiliza-se a relação $k_i = p_i/\hbar$.

Os operadores \hat{p}_{x_i} e os parâmetros de Bir-Pikus A_i determinam um novo operador e variam espacialmente segundo a disposição dos materiais na “construção” da heteroestrutura. Para calcular a atuação desse novo operador sobre os vetores da base de Luttinger-Kohn é necessário determinar suas relações de comutação e simetrizá-los, pois estes novos operadores precisam ser hermitianos.

A expressão que simetriza os novos operadores na sua forma mais geral $f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i}\hat{p}_{x_j}$ é dada por:

$$f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i}\hat{p}_{x_j} \Rightarrow \frac{1}{2} \left[\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_j} + \hat{p}_{x_j}^\dagger f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i} \right]. \quad (4.8)$$

Da mesma maneira podemos assumir $\hat{p}_{x_j} = \hat{1}$ e obtemos uma regra de simetrização para o operador $f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i}\hat{1}$:

$$f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i}\hat{1} \Rightarrow \frac{1}{2} \left[\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r})\hat{1} + \hat{1} f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i} \right] = \left[\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r}) + f(\mathbf{r})\hat{p}_{x_i} \right] \quad (4.9)$$

Portanto os elementos da matriz (2.1) são operadores que intermediam um produto escalar como descrito nas equações (4.8) e (4.9) discutidas acima. Lembrando que as funções de Luttinger-Kohn são dadas por:

$$\langle \mathbf{r}s | jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\mathbf{k} + K_x \mathbf{e}_x + K_y \mathbf{e}_y + K_z \mathbf{e}_z) \mathbf{r}} \langle \mathbf{r}s | jm_j \rangle.$$

Para simplificar assumir-se-á a partir daqui que $|\mathbf{K}\rangle = |\mathbf{k}\mathbf{K}\rangle$, de forma que $\mathbf{K} \equiv \mathbf{K} + \mathbf{k}$.

Por definição os elementos de matriz a serem calculados são:

$$\langle \mathbf{K} | f(\mathbf{r}) | \mathbf{K}' \rangle = \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}. \quad (4.10)$$

Esta é a definição da transformada de Fourier, onde o volume V é a região de periodicidade, ou seja, impõe-se condições de contorno periódicas para f . Assim garante-se o bom comportamento da função e a integral pode ser calculada. Para explicitar o caráter de transformada de Fourier pode-se fazer uma substituição de variável $\mathbf{K}'' = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$ ou de maneira mais explícita:

$$\int_V e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = \int_V e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \equiv \int_V e^{-i\mathbf{K}''\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \check{f}(\mathbf{K}''), \quad (4.11)$$

onde: $\mathbf{K}'' = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$

ou seja, da própria definição de transformada de Fourier:

$$\check{f}(\mathbf{K}'') = \int_V e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (4.12)$$

Seguindo o mesmo raciocínio e aplicando os operadores \hat{p} e \hat{p}^\dagger em f obtêm-se a seguinte relação:

$$\langle \mathbf{K} | \frac{1}{2} [\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r}) + f(\mathbf{r}) \hat{p}_{x_i}] | \mathbf{K}' \rangle = \frac{\hbar(K_{x_i} + K'_{x_i})}{2V} \int_V e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}, \quad (4.13)$$

que pode ser expressa em função da equação (4.10) como segue:

$$\langle \mathbf{K} | \frac{1}{2} [\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r}) + f(\mathbf{r}) \hat{p}_{x_i}] | \mathbf{K}' \rangle = \frac{\hbar(K_{x_i} + K'_{x_i})}{2V} \langle \mathbf{K} | f(\mathbf{r}) | \mathbf{K}' \rangle. \quad (4.14)$$

Da mesma forma, pode-se calcular o elemento de matriz do operador simetrizado $f(\mathbf{r})\hat{p}\hat{p}$:

$$\langle \mathbf{K} | \frac{1}{2} \left[\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r}) \hat{p}_{x_j} + \hat{p}_{x_j}^\dagger f(\mathbf{r}) \hat{p}_{x_i} \right] | \mathbf{K}' \rangle = \frac{\hbar^2 (K_{x_i} K'_{x_j} + K_{x_j} K'_{x_i})}{2V} \int_V e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}, \quad (4.15)$$

e expressá-lo também segundo a equação (4.10) como realizado anteriormente:

$$\langle \mathbf{K} | \frac{1}{2} \left[\hat{p}_{x_i}^\dagger f(\mathbf{r}) \hat{p}_{x_j} + \hat{p}_{x_j}^\dagger f(\mathbf{r}) \hat{p}_{x_i} \right] | \mathbf{K}' \rangle = \frac{\hbar^2 (K_{x_i} K'_{x_j} + K_{x_j} K'_{x_i})}{2V} \langle \mathbf{K} | f(\mathbf{r}) | \mathbf{K}' \rangle. \quad (4.16)$$

Dessa maneira, são calculados os coeficientes de Fourier dos parâmetros de massa efetiva que variam de um material para a outro. Todos os cálculos são realizados no espaço de Fourier. Assim os resultados obtidos, como por exemplo o potencial Coulombiano dos portadores livres, a distribuição de cargas e funções de onda, estão no espaço dos momentos e para a devida observação nas coordenadas espaciais x , y e z é necessária a transformação de Fourier inversa.

4.2 Potencial da Heteroestrutura

O potencial da heteroestrutura age como uma perturbação sobre o sistema e deve ser tratado como tal. Este é formado pelas diferenças das energias de *gap* dos diferentes materiais que compõem a super-rede, como pode ser visto na figura 4.2.



Figura 4.3: Heteroestrutura

Utilizando teoria de perturbações para calcular os elementos de matriz do potencial da heteroestrutura que compõem o Hamiltoniano total obtém-se a seguinte expressão até segunda ordem:

$$\begin{aligned}
{}^1\langle jm_j \mathbf{k} | V_{HET} | j' m_{j'} \mathbf{k}' \rangle^1 &= \langle jm_j \mathbf{k}_0 | V_{HET} | j' m_{j'} \mathbf{k}_0 \rangle + \\
&+ i \frac{\hbar}{m_0} \langle jm_j \mathbf{k}_0 | \nabla V_{HET} | j' m_{j'} \mathbf{k}'_0 \rangle \sum_{\mu \neq \nu} \left[\frac{\langle jm_j \mathbf{k}_0 | \mathbf{p} | j' m_{j'} \mathbf{k}'_0 \rangle}{E_{jm_j} - E_{j' m_{j'}}} \right]
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Nas heteroestruturas consideradas, os potenciais tem forma quadrada. Apesar disto, o fato de as interfaces entre os materiais não serem abruptas nos permite assumir que este potencial é suave, podendo-se desprezar o segundo termo da expressão, que depende da derivada primeira, e escrever o potencial na forma matricial como se segue:

$${}^1\langle jm_j \mathbf{k} | V_{HET} | j' m_{j'} \mathbf{k}' \rangle^1 = \langle jm_j \mathbf{k}_0 | V_{HET} | j' m_{j'} \mathbf{k}_0 \rangle \tag{4.18}$$

Estendendo os cálculos à região de periodicidade da heteroestrutura, como na seção anterior, pode-se escrever os elementos de matriz com sendo:

$$\langle jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} | V_{HET} | j' m_{j'} \mathbf{k}' \mathbf{K}' \rangle = \langle \mathbf{K} | V_{HET} | \mathbf{K}' \rangle \delta_{jj'} \delta_{m_j m_{j'}} \tag{4.19}$$

Na equação (4.19) pode-se observar que a matriz de V_{HET} é diagonal com relação a $jm_j, j'm_{j'}$, pois o operador potencial não promove transições eletrônicas, apenas confina os portadores em poços ou barreiras. Então o que resta são os coeficientes de Fourier $\langle \mathbf{K} | V_{HET} | \mathbf{K} \rangle$ que se encontram ao longo da diagonal dos blocos 6×6 ou 8×8 no Hamiltoniano total do sistema.

4.3 Potencial de Coulomb

O potencial de Coulomb é um dos termos do Hamiltoniano total da heteroestrutura que leva em conta a interação de muitos corpos devido a presença de cargas no sistema. Conhecida a distribuição de densidade $\rho(\mathbf{r})$ dessas cargas é possível calcular o potencial através da equação de Poisson dada por:

$$\nabla^2 V_c(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi e}{\epsilon} \rho(\mathbf{r}) \tag{4.20}$$

A distribuição de densidade de carga $\rho(\mathbf{r})$ pode ser dividida em duas partes, uma da densidade de portadores livres $p(\mathbf{r})$ e outra de impurezas ou aceitadores N_A :

$$\rho(\mathbf{r}) = e [p(\mathbf{r}) - N_A(\mathbf{r})]. \quad (4.21)$$

Dessa maneira, resta apenas calcular a transformada de Fourier do potencial Coulombiano que, após a separação das densidades de cargas, pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\langle jm_j \mathbf{k} \mathbf{K} | V_C | j' m_{j'} \mathbf{k}' \mathbf{K}' \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon |\mathbf{K} - \mathbf{K}'|} \langle \mathbf{K} | p(\mathbf{r}) - N_A(\mathbf{r}) | \mathbf{K}' \rangle \delta_{jj'} \delta_{m_j m_{j'}}. \quad (4.22)$$

Calculando-se as transformadas de Fourier da equação (4.22) separadamente, obtém-se a seguinte expressão para os coeficientes de Fourier da densidade de aceitadores N_A :

$$\langle \mathbf{K} | N_A(\mathbf{r}) | \mathbf{K}' \rangle = \left(\frac{N_s}{d} \right) A(K - K'), \quad (4.23)$$

onde é definido o coeficiente de Fourier:

$$A(K) = \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \frac{e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma}}. \quad (4.24)$$

A densidade de portadores $p(\mathbf{r})$ pode ser calculada a partir do quadrado das funções de onda dos estados vazios, ou seja, estados que perderam carga para átomos aceitadores. Dessa forma, a distribuição de densidade de carga é dada por:

$$p(\mathbf{r}) = \sum_s \sum_{|\nu \mathbf{k}\rangle_{\text{vazios}}} |\langle \mathbf{r} s | \nu \mathbf{k} \rangle|^2. \quad (4.25)$$

Utilizando a definição (4.4) das autofunções da super-rede, o quadrado das funções de onda assume a seguinte expressão:

$$|\langle \mathbf{r} s | \nu \mathbf{k} \rangle|^2 = \sqrt{\Omega} \sum_{jm_j} \sum_{j'm_{j'}} \sum_{K''K'''} \langle jm_j \mathbf{k} \mathbf{K}'' | \nu \mathbf{k} \rangle \langle \nu \mathbf{k} | j' m_{j'} \mathbf{k} \mathbf{K}''' \rangle \times \langle \mathbf{r} | \mathbf{K}'' - \mathbf{K}''' \rangle \langle jm_j \mathbf{k} | \mathbf{r} s \rangle \langle \mathbf{r} s | j' m_{j'} \mathbf{k} \rangle. \quad (4.26)$$

Tomando a média na célula unitária do material e somando sobre as coordenadas de *spin*, removendo as flutuações espaciais na escala atômica de comprimentos, a média é diagonal em $j, m_j, j', m_{j'}$, sendo os elementos diagonais dados por:

$$\sum_s \overline{|\langle \mathbf{r}s | \nu \mathbf{k} \rangle|^2} = \sqrt{\Omega} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j \mathbf{k} K'' | \nu \mathbf{k} \rangle \langle \nu \mathbf{k} | j' m_{j'} \mathbf{k} K''' \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{K}'' - \mathbf{K}''' \rangle. \quad (4.27)$$

Resultando na seguinte expressão para a distribuição de densidade:

$$p(\mathbf{r}) = \sum_{|\nu \mathbf{k}\rangle_{\text{vazios}}} \sqrt{\Omega} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j \mathbf{k} K'' | \nu \mathbf{k} \rangle \langle \nu \mathbf{k} | j' m_{j'} \mathbf{k} K''' \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{K}'' - \mathbf{K}''' \rangle. \quad (4.28)$$

Calculando-se a transformada de Fourier da equação (4.28) obtém-se:

$$\langle \mathbf{K} | p | \mathbf{K}' \rangle = \frac{1}{\Omega} P(\mathbf{K} - \mathbf{K}'), \quad (4.29)$$

onde P é definido por:

$$P(\mathbf{K}) = \sum_{|\nu \mathbf{k}\rangle_{\text{vazios}}} \sum_{jm_j} \sum_{K''K'''} \langle jm_j \mathbf{k} K'' | \nu \mathbf{k} \rangle \langle \nu \mathbf{k} | j' m_{j'} \mathbf{k} K''' - \mathbf{K} \rangle. \quad (4.30)$$

O sistema como um todo é neutro quando este encontra-se em equilíbrio exigindo que:

$$\langle \mathbf{K} | p(\mathbf{r}) | \mathbf{K} \rangle - \langle \mathbf{K} | N_A(\mathbf{r}) | \mathbf{K} \rangle = 0 \quad (4.31)$$

para garantir a neutralidade do sistema.

5 *Espectro de Fotoluminescência*

Este capítulo tem o intuito de introduzir um modelo que permita calcular o espectro de luminescência de heteroestruturas semicondutoras. Os cálculos até aqui realizados determinam num conjunto a estrutura de bandas de heteroestruturas semicondutoras (através dos autovalores de energia calculados), a energia de Fermi, a distribuição probabilística dos portadores nos sistemas estudados e ainda os autoestados referentes aos autovalores determinados. Estes elementos permitem calcular e entender as transições e recombinações dos pares elétron-buraco envolvidas nos sistemas em estudo.

5.1 Expressão para a intensidade de luminescência

A luminescência pode ser definida como a emissão de fótons causada pela recombinação radioativa espontânea de pares elétron-buraco que se encontram em distribuições de quase equilíbrio térmico após serem excitados por um processo externo qualquer. Um modelo para a sua intensidade é proposto de maneira geral pela seguinte expressão [74–76].

$$I(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{c} \frac{e^2}{m_0c^2} \sum_{if} f_{if} N_i (1 - N_f) \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{if}}{(E_i - E_f - \hbar\omega)^2 + \gamma_{if}^2}. \quad (5.1)$$

Tal expressão é regida pela distribuição Lorentziana $\frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{if}}{(E_i - E_f - \hbar\omega)^2 + \gamma_{if}^2}$ que leva em conta o alargamento γ_{if} da transição devido ao tempo de vida médio finito. O termo f_{if} representa a força do oscilador da transição de dipólo ótica entre os estados $|k_{inicial}\rangle$ e $|k_{final}\rangle$, com energias E_i e E_f respectivamente, sob luz polarizada na direção x e é dado pela expressão:

$$f_{if} = \frac{2|\langle k_i | p_x | k_f \rangle|^2}{m_0(E_i - E_f)}. \quad (5.2)$$

Os termos N_i e N_f representam as probabilidades de ocupação desses estados.

Os objetos em estudo são os elétrons, na banda de condução, e os buracos pesados, leves e de *split-off*, na banda de valência. Definindo-se os identificadores de estado n_p para o índice da banda do portador p , σ_p para o *spin* (que pode assumir os estados \uparrow e \downarrow) e \vec{k} para o ponto da zona de Brillouin, identifica-se os estados da seguinte forma, na notação de *bra* e *kets*.

Banda de condução	Banda de valência
$ n_e \vec{k} \sigma_e\rangle$	$ n_{hh} \vec{k} \sigma_{hh}\rangle$
	$ n_{lh} \vec{k} \sigma_{lh}\rangle$
	$ n_{so} \vec{k} \sigma_{so}\rangle$

Tabela 5.1: Auto-estados bidegenerados

Onde foi substituído o índice p por e , hh , lh e so que representam elétrons, buracos pesados, buracos leves e de *split-off* respectivamente.

Reescrevendo a equação (5.1) segundo a notação da Tabela 5.1 obtém-se a expressão:

$$I(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{c} \frac{e^2}{m_0c^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n_e} \sum_{n_q} f_{n_e N_q}(\mathbf{k}) N_{n_e \mathbf{k}} (1 - N_{n_q \mathbf{k}}) \times \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{n_e \mathbf{k} n_q \mathbf{k}}}{(E_{n_e}(\mathbf{k}) - E_{n_q}(\mathbf{k}) - \hbar\omega)^2 + \gamma_{n_e \mathbf{k} n_q \mathbf{k}}^2}, \quad (5.3)$$

onde q assume o caráter dos portadores da banda de valência hh, lh e so .

A equação (5.2) da força de oscilador também muda escrita segundo a notação da Tabela 5.1:

$$f_{n_e n_q}(\mathbf{k}) = \frac{2}{m_0} \sum_{\sigma_e \sigma_q} \frac{|\langle n_e \sigma_e \mathbf{k} | p_x | n_q \sigma_q \mathbf{k} \rangle|^2}{(E_{n_e}(\mathbf{k}) - E_{n_q}(\mathbf{k}))}. \quad (5.4)$$

Para calcular os elementos da matriz momento deve-se levar em consideração o fato de que, na maioria dos sistemas em estudo, a banda de condução é fracamente ligada à banda de valência, pois a energia do *gap* é, em geral, muito alta para os nitretos (com excessão do *InN*). Neste caso, os elementos de matriz não nulos são aqueles que levam em conta as transições dos estados eletrônicos da banda de condução para os estados eletrônicos na banda de valência de buracos leves, pesados e *split-off*.

Dessa maneira, a expressão acima é dada por:

$$f_{n_e n_q} = \frac{4}{m_0[E_{n_e} - E_{n_q}]} [|\langle n_e \uparrow | p_x | n_q \uparrow \rangle|^2 + |\langle n_e \downarrow | p_x | n_q \uparrow \rangle|^2]. \quad (5.5)$$

Com o resultado acima, resta conhecer a distribuição dos portadores para poder calcular o espectro de luminescência segundo a expressão (5.1)

Todos os portadores envolvidos nas recombinações tem o caráter de férmions, que ocupam os estados estacionários determinados por poços quânticos. Assim as distribuições de probabilidade de ocupação da equação (5.3), para elétrons e buracos, são regidas pela função de distribuição de Fermi como mostrado nas equações abaixo:

$$N_{n_e \mathbf{k}} = \frac{1}{e^{(E_F - E_{n_e}(\mathbf{k}))/k_B T} + 1}, \quad (5.6)$$

$$[1 - N_{n_q \mathbf{k}}] = \frac{1}{e^{(E_F - E_{n_q}(\mathbf{k}))/k_B T} + 1}. \quad (5.7)$$

Onde k_B é a constante de Boltzmann. Essas últimas relações determinam uma dependência com a temperatura para a fotoluminescência.

6 Etapas da simulação

Este capítulo tem como objetivo explicar à luz dos capítulos anteriores as simulações e apresentar suas etapas em ordem seqüencial. Ao final do capítulo, é apresentado um diagrama de blocos que mostra como o programa é executado.

6.1 Escrita dos potenciais

Todas as informações necessárias para o desenho do potencial estão contidas num arquivo denominado “*entrada.het*” que deve ser criado no diretório onde o programa será executado. A tabela abaixo mostra a relação dos parâmetros no arquivo de entrada.

$N_{camadas}^o$	Rank								
Δ_1	Δ_2	Δ_3	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7
E_{gap}	a	c	ε^{-1}	P_{const}	A_{const}				
$m_e^{\perp-1}$	$m_{HH}^{\perp-1}$	$m_{LH}^{\perp-1}$	$m_{CH}^{\perp-1}$	$m_e^{\parallel-1}$	$m_{HH}^{\parallel-1}$	$m_{LH}^{\parallel-1}$	$m_{CH}^{\parallel-1}$		
C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}				
D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6				
z_{inicio}	z_{final}	$missmatch$							
\vdots									
NS_{maj}	NS_{min}	$D0$	A_{0G}						
K_x	K_y	K_z	G_x	G_y	G_z	N_i	p_1	p_2	p_3
M_x	B_t	B_1	B_2						
M_t	D_r								
ST	XT	TT	NT						
\vdots									

Tabela 6.1: Arquivo de entrada do programa

Os últimos parâmetros da tabela (6.1) são variáveis globais ou parâmetros de execução do programa.

Todos os cálculos do formalismo descrito nas seções anteriores são realizados no espaço de Fourier, ou seja envolvem o cálculo do elemento de matriz $\langle \mathbf{K} | f(\vec{r}) | \mathbf{K}' \rangle$. Para realizar

essa tarefa utiliza-se uma das rotinas do pacote **FFTW-3.0** [77] para a determinação dos coeficientes da transformada de Fourier referentes a cada um dos parâmetros. Os quais são escritos no mesmo arquivo “*entrada.het*” e poderão ser reutilizados posteriormente.

6.2 Determinação da simetria da super-célula unitária

Para cada direção de crescimento estudada, deve-se analisar a simetria da 1ª zona de Brillouin (**ZB**), de forma a determinar a representação irredutível, que é definida pelos pontos da região que, através de operações de rotação e reflexão, leva a todos os pontos da **ZB**. Dessa forma reduz-se os erros numéricos gerados pelo algoritmo garantindo um único cálculo para os pontos equivalentes de toda **ZB**, o que, além de garantir a simetria do problema, reduz a quantidade de cálculos efetuados pelo computador.

A representação irredutível é exemplificada na figura 6.2 que ilustra a 1ª zona de Brillouin orientada na direção (0001).

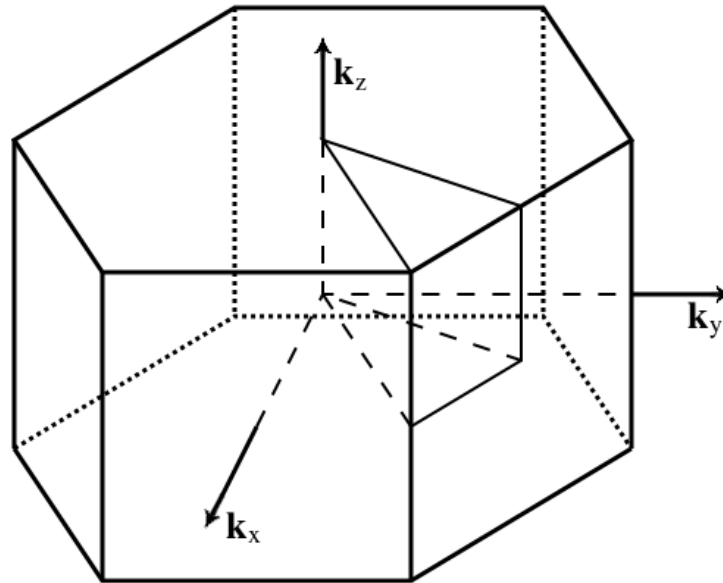


Figura 6.1: primeira zona de Brillouin de uma estrutura cristalina com simetria Hexagonal

Na direção (0001), a disposição geométrica hexagonal leva à escolha da região destacada como a zona irredutível, pois por simetria ela representa, através de rotações e reflexões, as outras regiões, determinando assim a equivalência dos pontos nela contidos.

6.3 Diagonalização do Hamiltoniano

Nessa etapa constrói-se o Hamiltoniano total do sistema na base de Luttinger sobre a heteroestrutura $|jm_j\mathbf{k}\mathbf{K}\rangle$ em sua forma matricial.

O Hamiltoniano total da heteroestrutura é dado pela equação (6.1) reescrita abaixo:

$$H_{total} = H_{kp} + H_{kp_{strain}} + V_{HET} + V_{pol} + V_{piezo} + V_C \quad (6.1)$$

Os termos que aparecem no Hamiltoniano total (6.1) são os Hamiltonianos $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ H_{kp} e $H_{kp_{strain}}$ referentes a estrutura cristalina do material e *strain*, respectivamente; os potenciais da heteroestrutura V_{HET} , do campo elétrico devido a polarização espontânea V_{pol} , do campo piezo elétrico V_{piezo} e o potencial Coulombiano.

O termo do potencial Coulombiano não é conhecido previamente e entra no Hamiltoniano como um potencial “tentativo” e que deverá ser determinado autoconsistentemente. Os passos da autoconsistência serão descritos adiante.

Para diagonalizar a matriz utiliza-se a rotina CHEEVX da biblioteca de álgebra linear **LAPACK** [78]. Essa rotina diagonaliza matrizes Hermitianas, otimizando os cálculos, e considerando apenas sua parte superior (ou inferior), retornando autovalores selecionados (autoenergias do sistema) e seus respectivos autovetores (autofunções do sistema).

A diagonalização é realizada para cada um dos pontos presentes na 1ª zona de Brillouin.

6.4 Distribuição dos portadores - *Nível de Fermi*

Para a determinação do nível de Fermi divide-se a zona de Brillouin em pedaços iguais, preenchendo cada um com portadores segundo o critério de preenchimento da menor energia para maior, caso os portadores sejam elétrons, ou da maior para a menor, caso sejam buracos. A figura 6.2 mostra ilustrativamente um corte paralelo ao plano xy com um conjunto de bandas de valência no caso hipotético onde todas as bandas são parabólicas.

O último estado ocupado determina a superfície de Fermi e sua projeção é ilustrada pelo plano que corta as bandas na figura 6.2, na perspectiva do corte estabelecido, assim os estados ocupados são aqueles que se encontram acima do plano indicado.

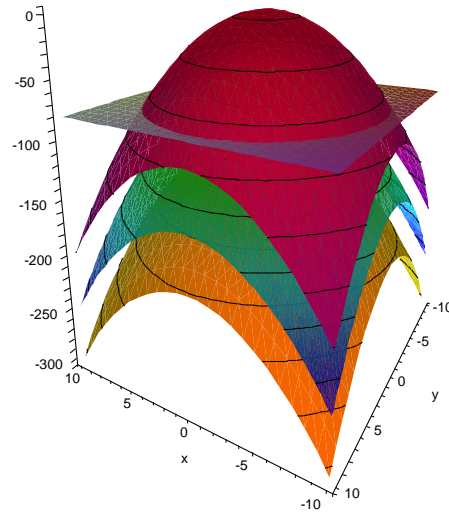


Figura 6.2: Energia de Fermi

6.5 Potencial de Coulomb autoconsistente

Parte-se de um potencial Coulombiano que não descreve a distribuição dos portadores no equilíbrio, pois essa condição não é conhecida previamente. Ao diagonalizar o Hamiltoniano da super-rede é obtido um conjunto de autoestados e suas respectivas autoenergias.

Assim, com o preenchimento dos estados ocupados segundo o critério da seção anterior, pode-se calcular numericamente as equações (4.29) e (4.23) e com isso recalculamos a energia Coulombiana do sistema e sua nova energia de Fermi.

Caso a nova energia de Fermi, seja significativamente diferente da anterior, indicando que o sistema não se encontra no equilíbrio, utiliza-se a energia Coulombiana calculada na iteração, em conjunto com a anterior, para construir um novo Hamiltoniano, que será diagonalizado! Esse processo é repetido até que o valor da energia de Fermi convirja para um valor e estabilize.

Esse processo caracteriza o cálculo autoconsistente, o qual se espera convergir sempre para a situação de equilíbrio.

6.6 Diagrama das etapas

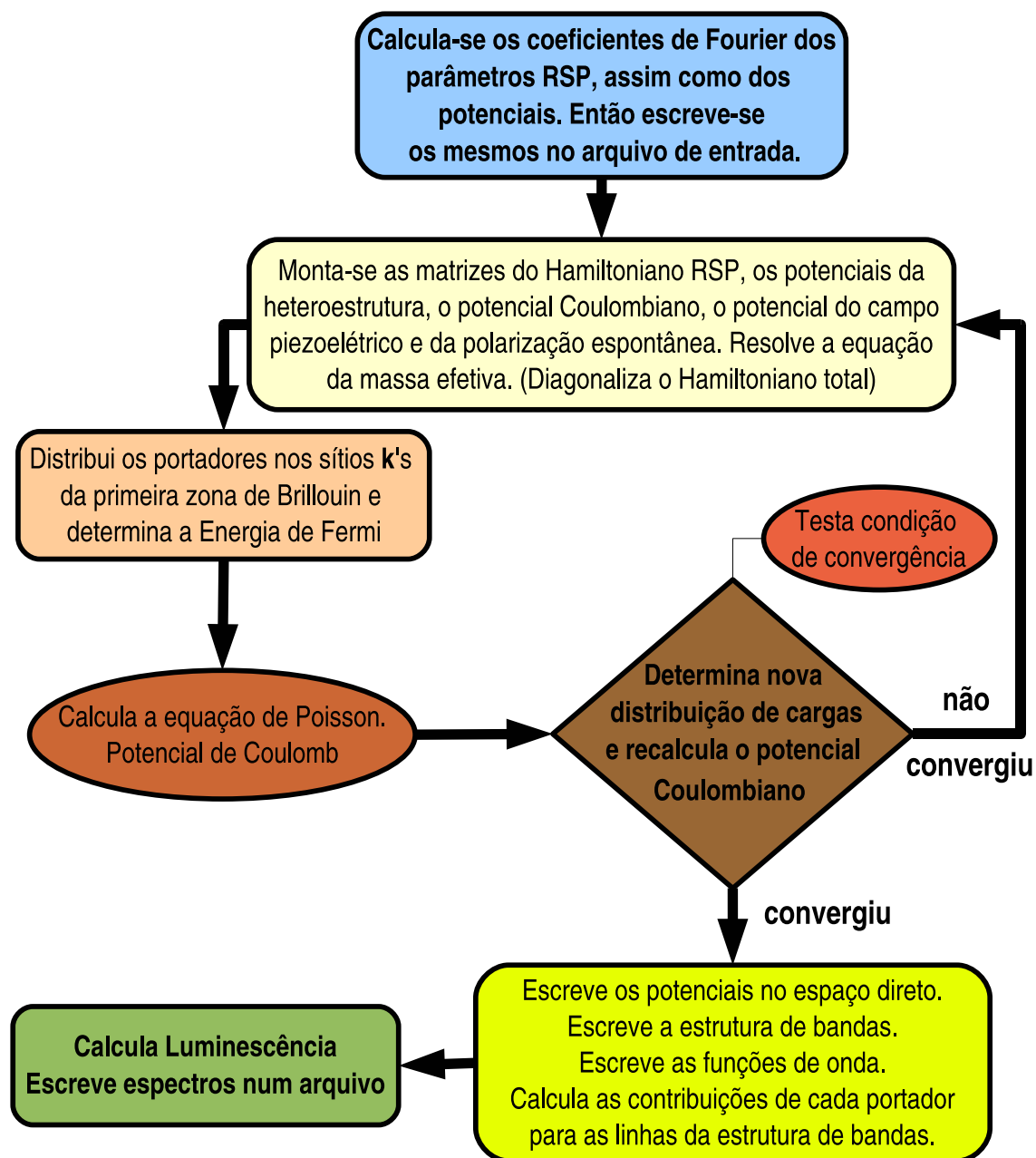


Figura 6.3: Etapas de execução do programa

7 *Bulk e heteroestrutura - resultados*

Com o intuito de validar o programa desenvolvido, é necessário realizar comparações com resultados encontrados na literatura. Para tanto foi escolhido um conjunto de artigos com cálculos de estruturas de bandas de *bulk* assim como de super-redes com e sem a presença de cargas.

7.1 Cálculo de estrutura de bandas para *Bulk*

Nessa seção são mostrados resultados de estruturas de bandas de valência de *bulk* para os nitretos *AlN*, *InN* e *GaN* apresentando as relações de dispersão que caracterizam esses materiais.

Os parâmetros A_i e Δ_i são geralmente obtidos a partir de resultados de cálculos com métodos semi-empíricos, tal como o método de Cheilikowsky-Coehn [79] ou cálculos de primeiros princípios. Os resultados apresentados para *InN* e *AlN* são de cálculos realizados com esses parâmetros obtidos da maneira descrita acima.

7.1.1 InN

No artigo [2], Pugh apresenta parâmetros de massa efetiva de nitretos semicondutores com estrutura cristalina na fase hexagonal para uso em cálculos utilizando o método *k.p*. Ele parte de uma estrutura de bandas calculada com o método semi-empírico e utiliza o método de Monte Carlo para ajustar os parâmetros A_i de forma a reproduzir a estrutura calculada inicialmente.

A figura 7.1 mostra a relação de dispersão para a banda de valência do nitreto de índio (*InN*).

Para a validação dos resultados do método *k.p* desenvolvido nesse trabalho, são uti-

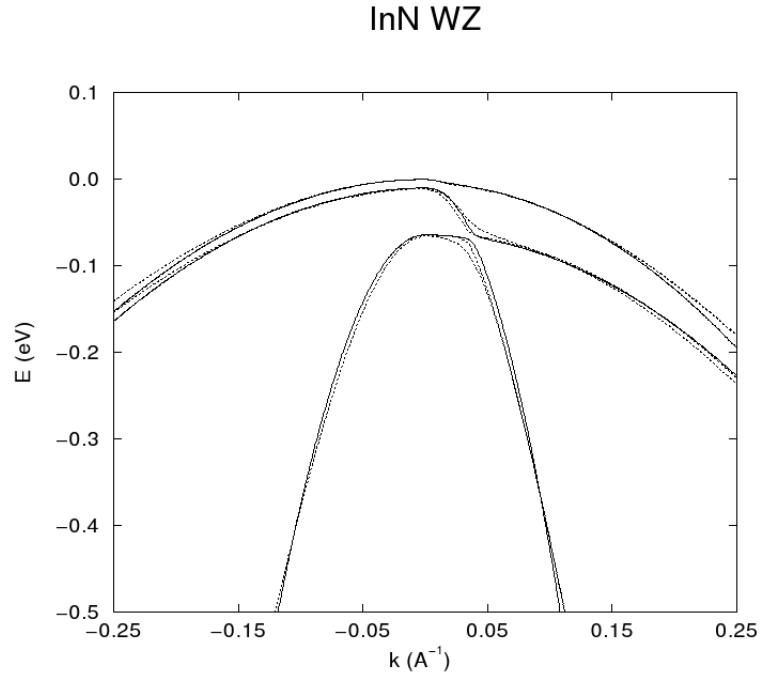


Figura 7.1: Estrutura de bandas do InN maciço na fase wurtzita, extraída do artigo de Pugh [2]. A curva pontilhada indica o resultado da estrutura de bandas através do método semi-empírico enquanto a curva cheia indica o resultado do método *k.p.* À esquerda direção k_z e à direita direção k_x

lizados os parâmetros obtidos no artigo citado. Utilizando a matriz Hamiltoniana **RSP** 6×6 , calcula-se a relação de dispersão da banda de valência para os mesmos pontos k apresentados na figura 7.1. O resultado obtido com o método desenvolvido é apresentado na figura 7.2. Os parâmetros utilizados podem ser conferidos nas tabelas (A.3,A.6).

Comparando os gráficos é possível observar uma correspondência direta dos resultados, com a observação do *anti-crossing* das bandas de buraco leve e de *split-off* perto de $k_x = 0.05 \text{ \AA}^{-1}$ e uma dispersão parabólica na direção k_x . A ordem das bandas, no ponto Γ do topo ao fundo da banda de valência é dada por **HH**, **LH** e **CH**.

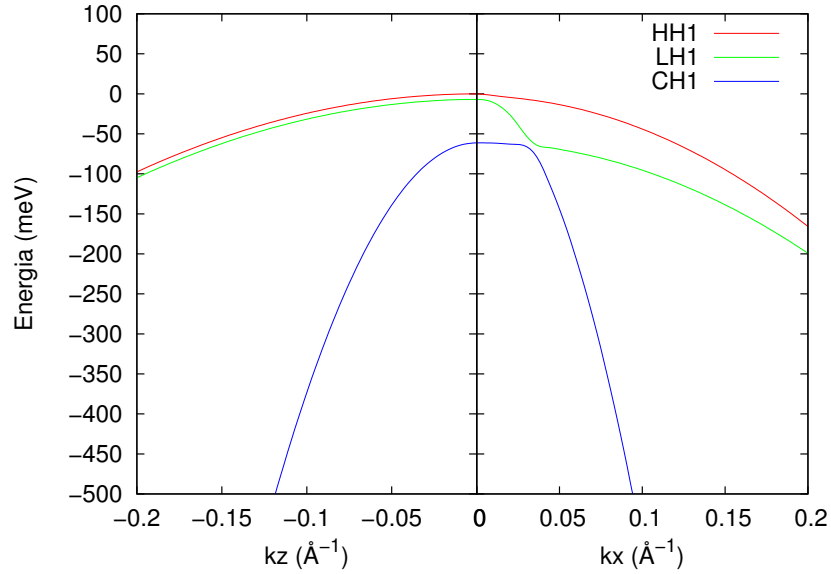


Figura 7.2: Estrutura de bandas para o InN na fase wurtzita obtida com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros apresentados no artigo [2].

7.1.2 AlN

O nitreto de alumínio pertence à classe dos semicondutores de energia de *gap* elevado, ou extremamente elevado nesse caso ($E_g \approx 6.0eV$). São utilizados para a construção de Diodos Emissores de Luz (LED) que trabalham na faixa do ultravioleta com comprimentos de onda abaixo dos 200-250 nm.

Da mesma maneira que na seção anterior, são utilizados os parâmetros do artigo [2] para validar os resultados do AlN maciço. A figura 7.3 mostra um cruzamento de bandas na direção k_z próximo à posição $k_z = -0.1 \text{ \AA}$. Utilizando os parâmetros listados na tabela (A.1), obtém-se a relação de dispersão apresentada na figura 7.4.

A figura 7.4 mostra uma boa correspondência com os resultados de [2]. O modelo apresenta o cruzamento indicado na figura 7.3, além de mostrar bandas com curvaturas semelhantes à medida que k se afasta do ponto Γ . Também observa-se que por Δ_1 ser negativo para o nitreto de alumínio, a banda de valência apresenta uma inversão na ordem das bandas que aparecem na relação de dispersão, ou seja, a curva que ocupa o topo da banda de valência no ponto Γ é referente à um buraco de *split-off* (**CH**), na seqüência aparecem buracos pesados (**HH**) e leves (**LH**). Após o cruzamento no ponto $k_z = 0.1 \text{ \AA}$, a interação do buraco de *split-off* com o buraco pesado faz com que o primeiro acompanhe a relação de dispersão do segundo. Isso deve-se ao fato da massa efetiva do buraco de *split-off* na direção k_z ser muito menor do que a massa efetiva do buraco pesado, que não

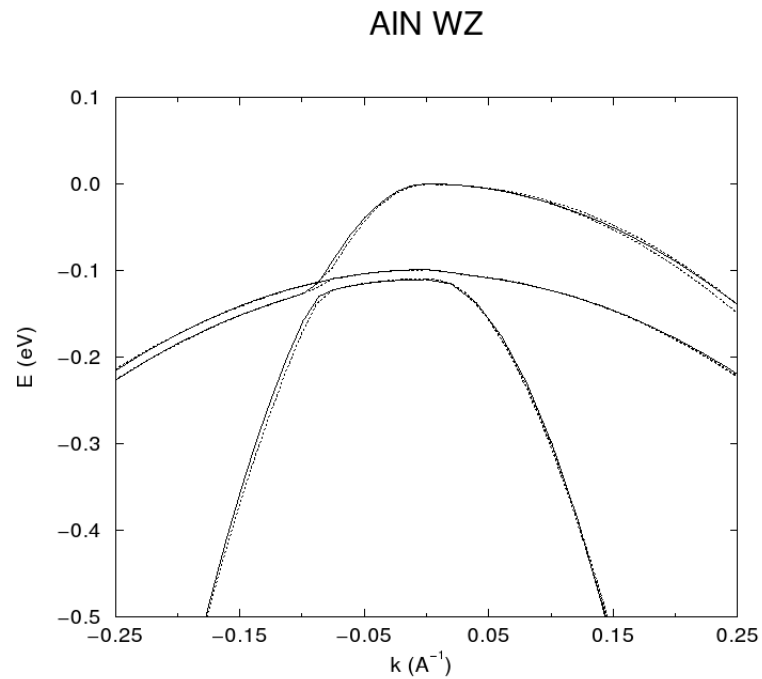


Figura 7.3: Estrutura de bandas do AlN maciço na fase wurtzita, extraída do artigo de Pugh [2]. A curva pontilhada indica o resultado da estrutura de bandas através do método semi-empírico enquanto a curva cheia indica o resultado do método $k.p.$

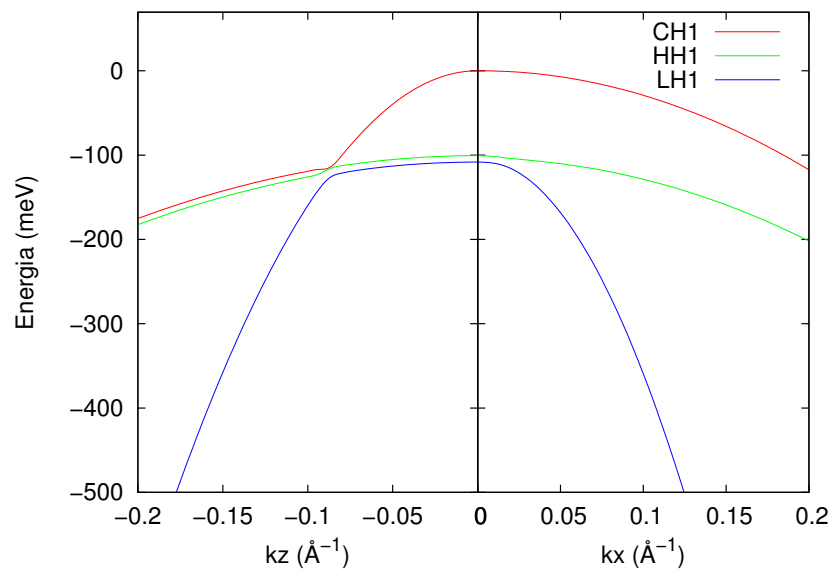


Figura 7.4: Estrutura de bandas para o InN na fase wurtzita obtida com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros apresentados no artigo [2].

sofre qualquer alteração em sua dispersão com a aproximação do buraco de *split-off*.

7.1.3 GaN com *strain*

O nitreto de gálio, assim como o nitreto de alumínio, apresenta uma energia de *gap* elevada ($E_g \approx 3.4eV$) e tem sido utilizado para a construção de dispositivos de alta potência, ou de alta frequência e também, por apresentar *gap* direto, em dispositivos optoeletrônicos na faixa do visível. Este material tem sido utilizado para o desenvolvimento de leitores óticos na faixa do azul que definem um novo padrão para DVDs (Sony Blue Ray).

A figura 7.5, extraída do trabalho de Chuang *et al.* [1], que utiliza parâmetros A_i extraídos de cálculos de primeiros princípios, apresenta estruturas de bandas para o GaN em duas situações distintas: à esquerda é mostrado o material não tensionado e à direita quando aplicado um *strain* compressivo de -1% .

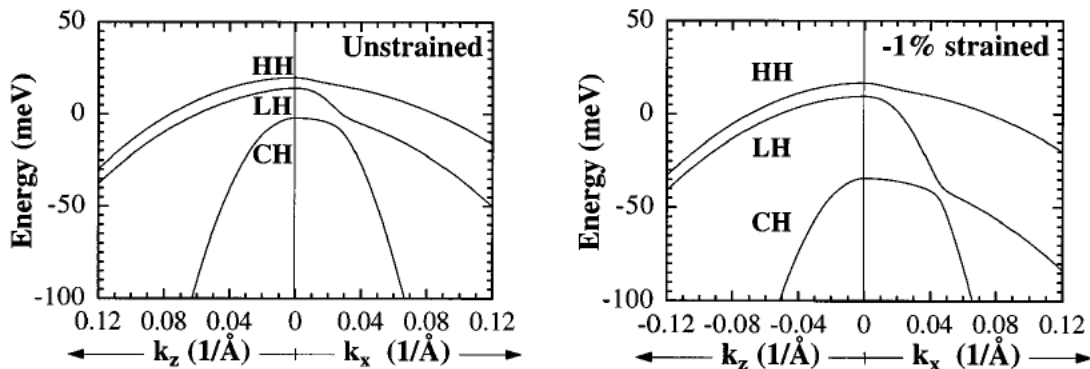


Figura 7.5: Estrutura da banda de valência para o GaN maciço na fase wurtzita. À **direita** - nenhuma tensão aplicada. À **esquerda** tensão compressiva de -1% aplicada no material. O eixo vertical representa a energia da banda de valência e os eixos horizontais representam os vetores do espaço recíproco: à direita k_x e à esquerda k_z .

Novamente, ao calcular-se a estrutura de bandas com os parâmetros utilizados por [1] e colaboradores (ver tabelas A.1 e A.4), obtém-se a estrutura de bandas apresentada na figura. 7.6.

A correspondência dos resultados, como observado para os outros materiais, é muito próxima com uma leve divergência da dispersão à medida que k se afasta do ponto Γ .

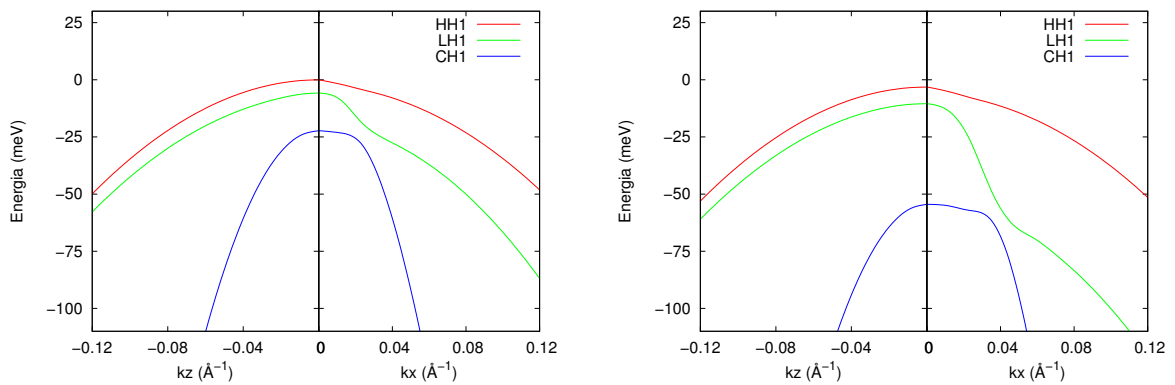


Figura 7.6: Estrutura de bandas para o GaN na fase wurtzita obtida com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros apresentados no artigo [1]. À esquerda: estrutura não-tensionada. À direita: tensão compressiva de 1 %.

7.2 Cálculo de estrutura de bandas para heteroestruturas semicondutoras

Com os resultados para *bulk* devidamente testados, resta garantir que os cálculos sobre a base da heteroestrutura estão sendo realizados maneira correta. Para tanto foi escolhido o resultado de um cálculo $k \cdot p$ de uma heteroestrutura ($Al_xGa_{1-x}N/GaN$), extraído do artigo de Park e Chuang [3].

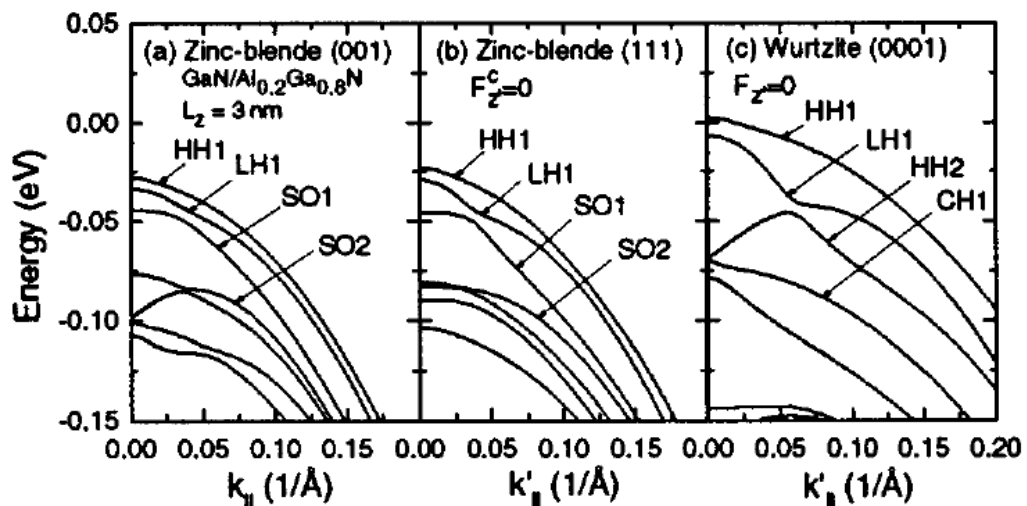


Figura 7.7: Estrutura de bandas de um sistema $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$ para estruturas cristalinas cúbicas e wurtzita. O sistema encontra-se sem a presença de cargas e está sobre tensão nas barreiras $AlGa$ N. São desconsideradas as ações dos campos piezoelétrica e devido a polarização espontânea.

Sistemas com estrutura cristalina hexagonal crescidos na direção (0001), assim como

os com estrutura cúbica crescidos na direção (111), apresentam um campo piezoelétrico induzido devido ao *strain*. Além do campo piezoelétrico induzido os sistemas com simetria hexagonal orientados na direção (0001) apresentam um campo elétrico devido à polarização espontânea na barreira [3].

Numa primeira configuração desconsidera-se os efeitos do campo elétrico devido à polarização espontânea e ao campo piezoelétrico. Esta estrutura é uma liga $Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ crescida sobre um substrato de GaN . Como o substrato impõe seu parâmetro de rede, a tensão é exercida apenas na barreira ($AlGaN$).

Pode-se observar a figura (7.7) extraída da referência [3], que compara a estrutura de bandas do sistema com simetria hexagonal (*wurtzita*) orientado na direção (0001), com as do sistema de simetria cúbica (*zinc blend*) orientados nas direções (100) e (111).

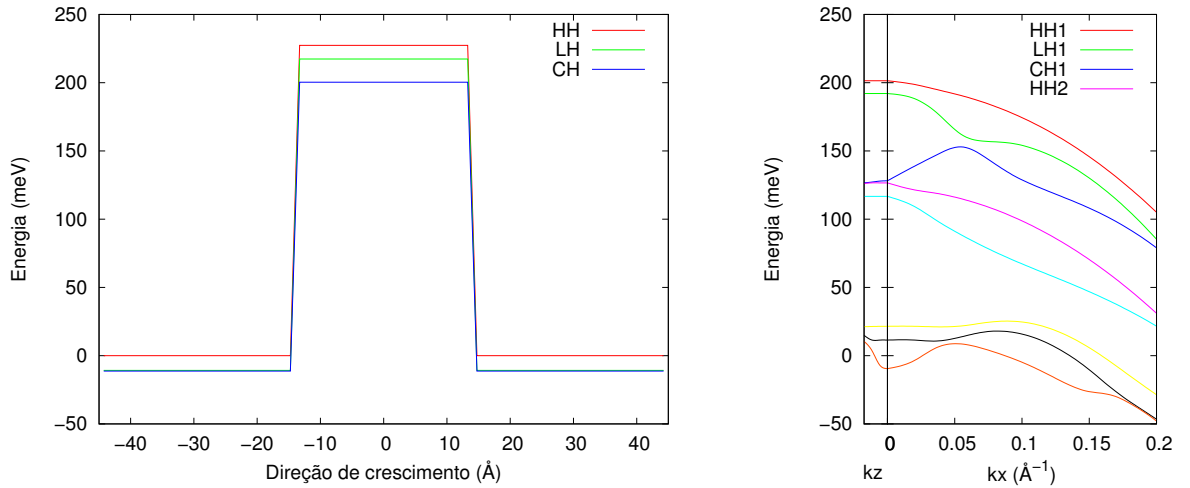


Figura 7.8: **À esquerda:** Potencial da heteroestrutura $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$, com os potenciais referentes aos buracos pesados, leves e de *split-off*. **À direita:** Estrutura de bandas do sistema.

A figura. 7.8 apresenta a simulação deste sistema, com o programa desenvolvido, utilizando os parâmetros do artigo referência. À esquerda pode-se observar os potenciais autoconsistentes obtidos com a simulação. São observados três poços quânticos diferentes, um para buracos pesados, outro para buracos leves e um terceiro para buracos de *split-off*. Isto ocorre devido à interação *spin-órbita*, que separa os estados de buracos leves e pesados dos de *split-off* e ainda devido ao *strain*, que atua diferentemente em cada um dos tipos de portadores. A estrutura de bandas, apresentada à direita de figura, é compatível com o resultado mostrado na figura extraído do artigo: as separações entre as bandas de energia tem os mesmos valores e o ocorre um *anticrossing* entre a primeira e a segunda subbandas para k_x em torno de 0.5 \AA^{-1} .

Numa outra situação é incluído o campo elétrico devido a polarização espontânea e o campo piezoelétrico no sistema e, como no trabalho de Chuang [3], considerando que a soma de ambos dê uma resultante de $1.55 \times 10^8 (V/m)$ obtém-se a configuração do poço quântico apresentada na figura 7.9.

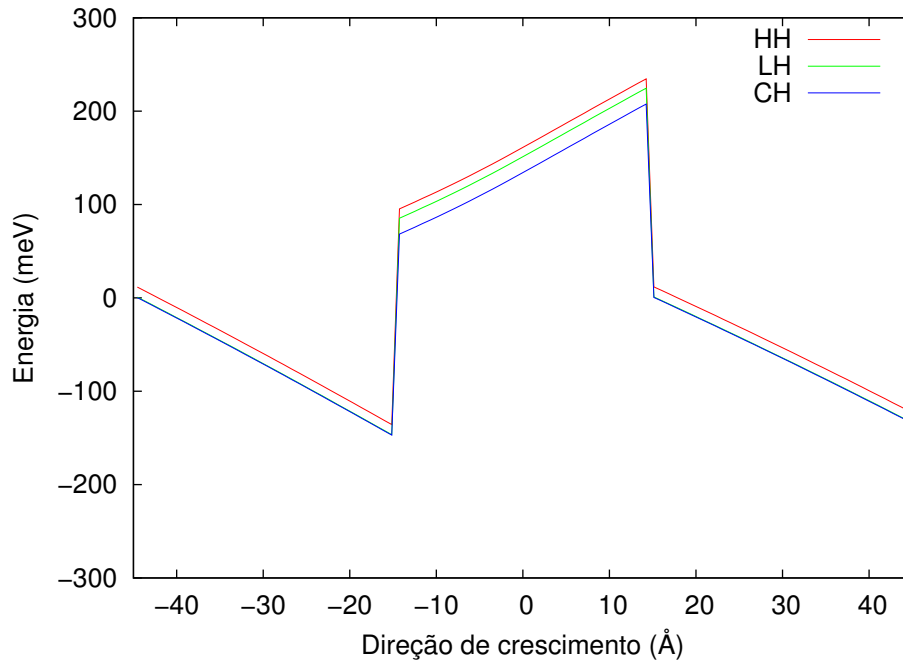


Figura 7.9: Potencial de uma heteroestrutura $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$ somado aos campos piezoelétrico e de polarização espontânea

A heteroestrutura da figura 7.9 encontra-se sem a presença de cargas, o que lhe garante o perfil linear. No artigo referência [3] o poço (GaN) encontra-se dopado negativamente com uma densidade superficial de portadores fixos $N_A = 2 \times 10^{13} cm^{-2}$. Partindo de uma configuração inicial dos portadores livres, foi rodado o programa autoconsistente até que estes encontrem a configuração de mais baixa energia, resultando no poço de potencial apresentado na figura 7.10. Ao lado do potencial é apresentada a estrutura de banda de valência calculada para este sistema.

O potencial final assume um perfil suavizado devido à redistribuição dos portadores livres no ciclo autoconsistente, é importante notar o entortamento que ocorre no ponto mais profundo do poço. Esse efeito é mais evidente devido ao acúmulo dos portadores nessa região. Dessa maneira, o potencial Coulombiano efetivo é mais intenso nesse local. A estrutura de bandas sofre um deslocamento de para baixo, assim como ocorre uma separação dos níveis de energia de buraco pesado (**HH2**) e *split-off* (**CH1**).

A figura 7.11 foi extraída do artigo [3] e mostra uma estrutura de bandas para uma heteroestrutura $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$ semelhante à figura 7.8. Apesar de as primeiras bandas

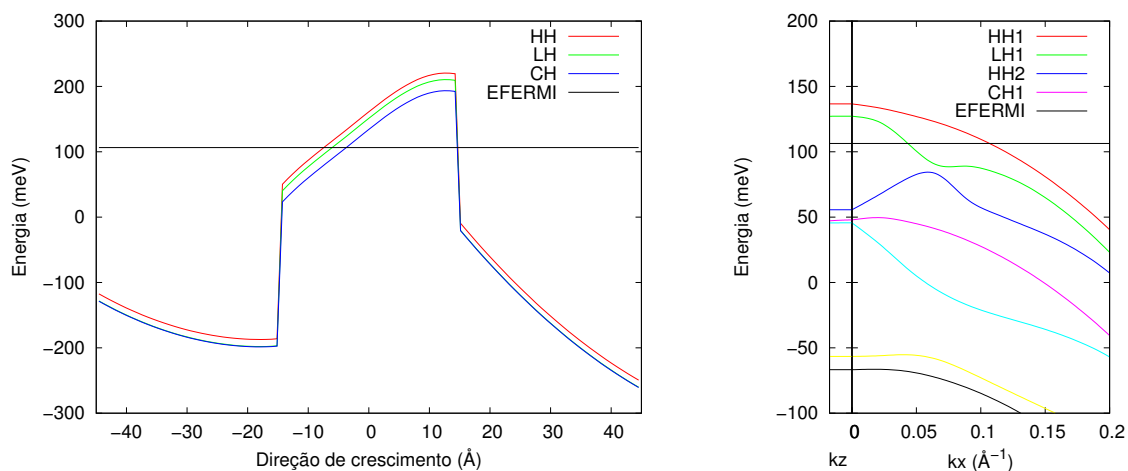


Figura 7.10: **À esquerda:** Potencial após a convergência dos portadores livres para a configuração de menor energia. **À direita:** Estrutura de banda de valência.

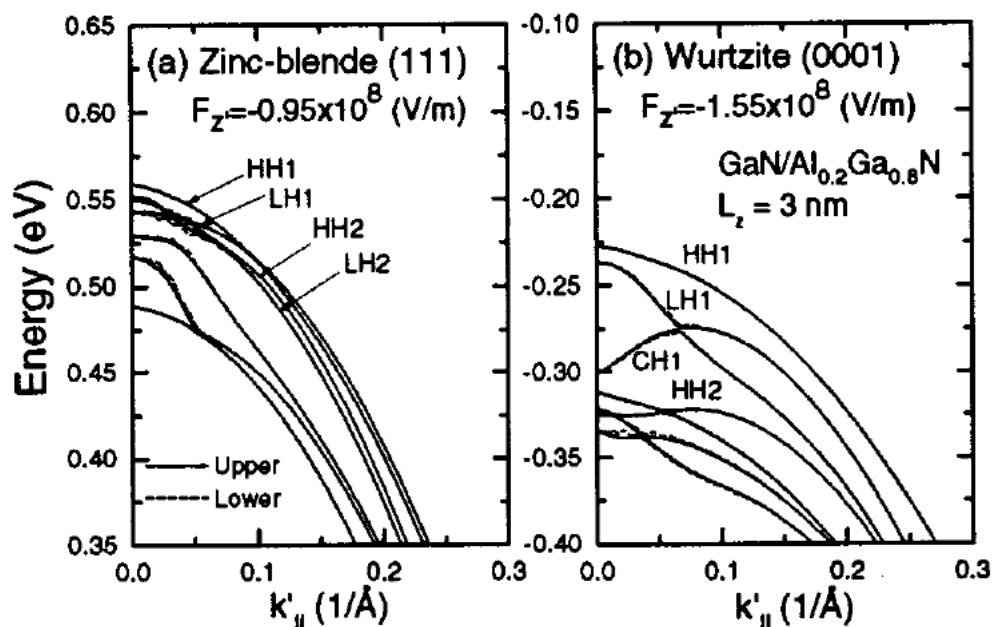


Figura 7.11: Estrutura de bandas de uma heteroestrutura $Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$ extraída do artigo de Chuang *et. al.* [3].

apresentarem comportamento semelhante nas duas figuras, o que representa comportamentos semelhantes dos estados ocupados nos dois sistemas, as bandas próximas ao topo da barreira apresentam comportamento diferenciado.

A falta de conhecimento de todos os parâmetros do sistema extraído da literatura pode ser responsável pelas diferenças apresentadas, visto que em alguns trabalhos na literatura a barreira de potencial para este sistema é de aproximadamente 100 meV, em franca contradição com o valor por nós utilizados, de aproximadamente 200 meV, considerando um *band-mismatch* de 40% como utilizado em [61].

8 *Resultados de luminescência*

A compreensão do fenômeno de luminescência é fundamental para a construção de dispositivos óticos. Nitretos na fase cristalina hexagonal realizam transições eletrônicas de *gap* direto não precisando de intermediador, um *fônon* por exemplo, para que um elétron sofra um decaimento da banda de condução para a banda de valência.

Para obter-se uma boa estimativa da luminescência em nitretos pode-se calcular somente as transições permitidas entre os estados da banda de condução para a banda de valência.

8.1 Liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - variação da concentração

A configuração $Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al_xGa_{1-x}N$ determina múltiplos poços quânticos dispostos periodicamente, levando em conta uma descontinuidade da banda de valência (*band mismatch*) de 40%. Considerando que o dispositivo seja crescido em um substrato de GaN , haverá uma tensão biaxial nas barreiras elevando o *gap* entre a banda de valência e a banda de condução. Neste caso em particular não está sendo levado em conta o campo piezoelétrico e o campo devido a polarização espontânea.

Para os cálculos de luminescência os poços estão dopados negativamente de maneira uniforme com concentração de aceitadores $N_A = 6.8 \times 10^{18} cm^{-3}$. Aumentando proporção (x) de Al na barreira, aumenta-se a profundidade dos poços quânticos provocando um deslocamento nos picos de luminescência.

Utilizando-se o Hamiltoniano $\mathbf{k.p}$ 8×8 do formalismo hexagonal **RSP** e considerando-se uma aproximação parabólica para a banda de condução, calcula-se a estrutura de bandas de valência e de condução. Para encontrar a configuração de menor energia para cada um dos sistemas, realizaram-se cálculo autoconsistentes.

A figura 8.1 mostra os potenciais das bandas de valência e condução somados ao potencial de Coulomb devido à distribuição de cargas total do sistema, para concentrações

diferentes de Al na barreira. Os efeitos de *strain* não estão somados a estes potenciais. É importante notar que a energia de *gap* entre os poços da banda de condução e de valência se mantém constante, pois à medida que a profundidade do poço na banda de valência aumenta a banda de condução é deslocada.

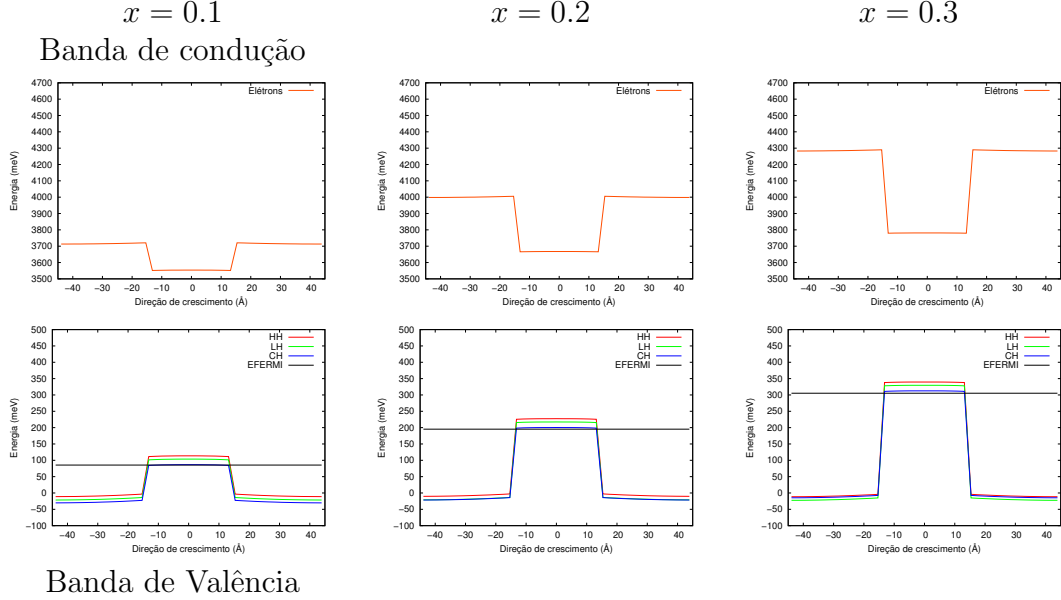


Figura 8.1: Potencial total da liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - **Em cima** - Banda de condução. **Em baixo** - Banda de valência. A concentração x de Al na barreira aumenta da esquerda para a direita.

Também pode-se observar os efeitos causados sobre a estrutura de bandas das heteroestruturas em função da variação da concentração de Al na barreira. A figura 8.2 mostra o cálculo da estrutura de bandas de buracos e elétrons, podendo ser observado que, à medida em que a profundidade do poço aumenta, os estados da banda de valência, se afastam uns dos outros, assim como do fundo do poço. Na banda de condução, com aproximação parabólica, é importante notar que com $x = 0.1$ existe apenas um estado dentro do poço e com o aumento da concentração deste parâmetro outros estados vão surgindo.

A distância entre os estados do topo da banda de valência para o fundo da banda de condução, apesar da energia de *gap* se manter constante, aumenta gradativamente com o aumento de x , este efeito é melhor observado quando analisa-se o espectro de luminescência onde é observado um deslocamento dos picos de intensidade.

O cálculo da intensidade do espectro de luminescência pode ser efetuado utilizando a equação (5.3), levando em conta as probabilidades de transição dos estados da banda de condução para a banda de valência. A figura 8.3 mostra o espectro de luminescência dos

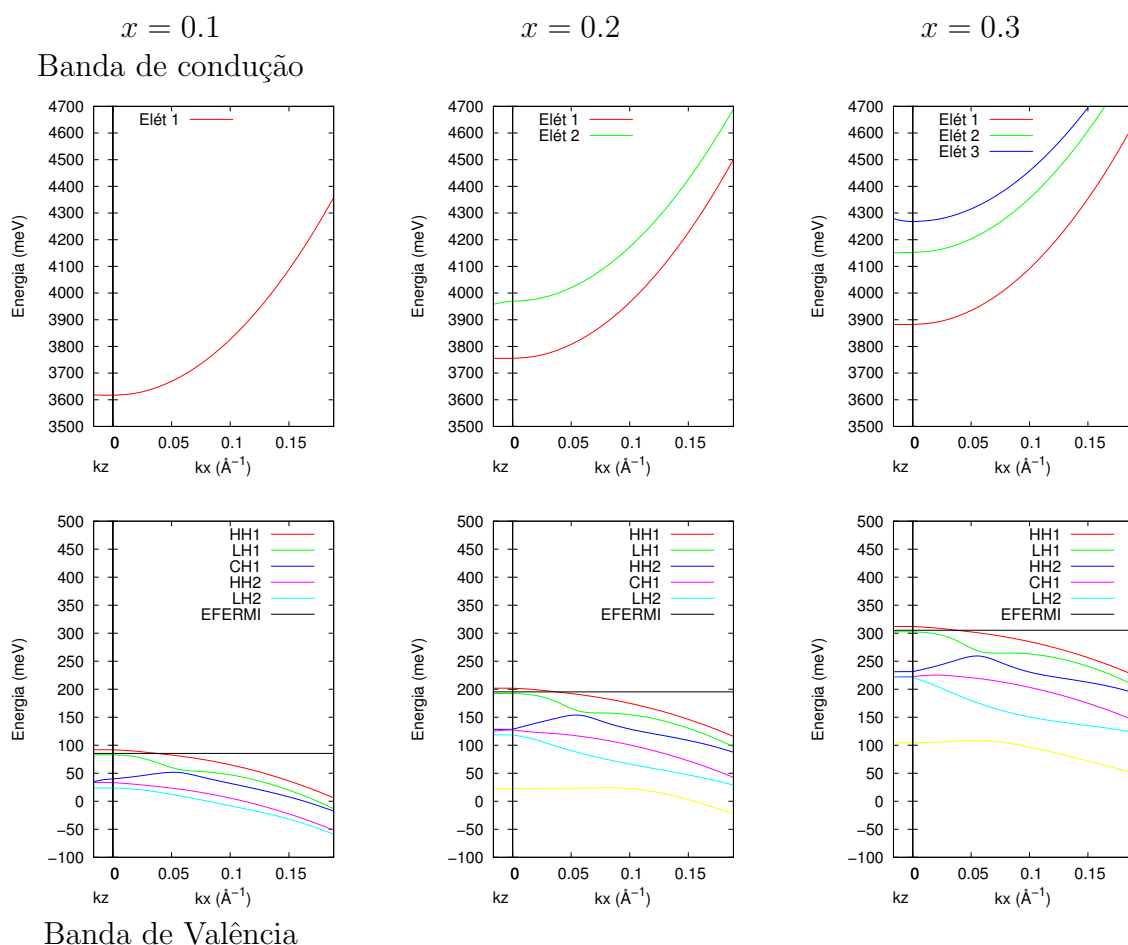


Figura 8.2: Estrutura de bandas da liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - **Em cima** - Banda de condução. **Em baixo** - Banda de valência. A concentração x de Al na barreira aumenta da esquerda para a direita.

poços apresentados na figura 8.1, onde cada um dos picos de intensidade refere-se a uma concentração específica de Al na barreira.

Na figura 8.3 observa-se que a emissão de luz ocorre acima do espectro visível, devido ao gap elevado dos nitretos de gálio(GaN) e alumínio(AlN), 3,4eV e 6,0eV respectivamente. Com o aumento do gap na barreira, com o incremento do parâmetro x , obtém-se a emissão em valores de energia ainda mais elevados.

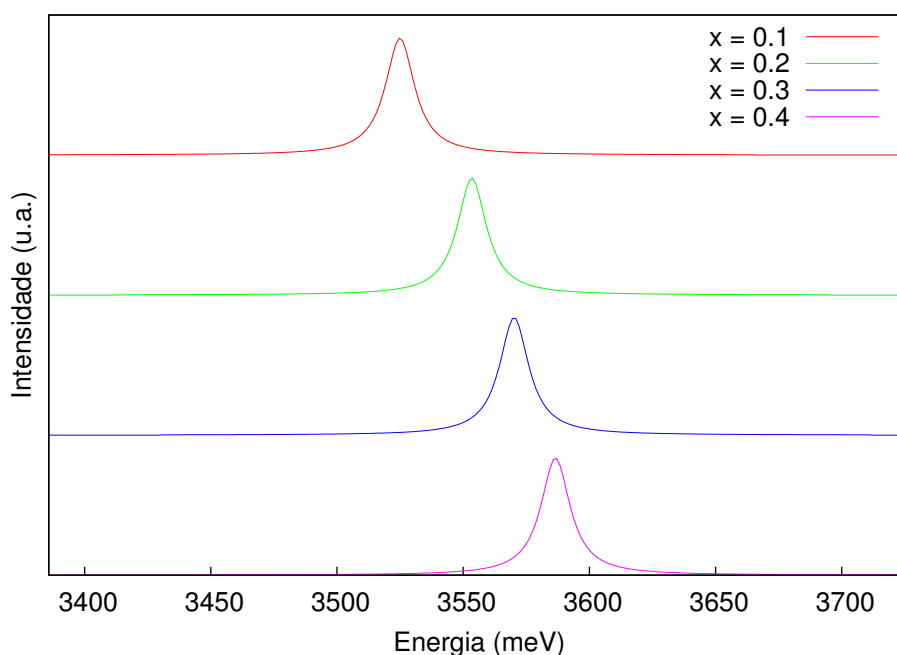


Figura 8.3: Espectro de luminescência de uma liga $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ - Variando a concentração de Al na barreira é observado um aumento da energia em que ocorre a emissão de luz.

8.2 Transporte de carga entre poços vizinhos

Dispositivos reais são super-redes e podem apresentar parâmetros geométricos de rede diversos mudando a característica de sua periodicidade ao longo da direção de crescimento. É possível fazer uma análise dessas variações ao calcular-se as interações desses poços mudando explicitamente o tamanho dos poços e das barreiras, sendo possível analisar o transporte de carga entre os poços adjacentes, com a blindagem associada ao aumento de portadores no sistema.

A heteroestrutura em estudo tem comprimento da barreira $L_b = 30.2 \text{ \AA}$ e comprimento do poço $L_p = 28.9 \text{ \AA}$, o que faz com que os poços tenham uma altura ligeiramente diferente dos seus vizinhos. Como ilustrado na figura 8.4.

Para observar o trânsito das cargas entre esses 3 poços em função ao aumento de cargas, foi calculada autossistentemente a heteroestrutura com densidades de portadores diferentes. Numa primeira situação, com uma densidade de portadores $N_A = 1.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ observa-se, figura 8.5, que o perfil dos poços é muito pouco alterado, pois o potencial Coulombiano, devido à carga efetiva, é muito pequeno comparado ao tamanho dos poços.

Da equação de Poisson (4.20), a derivada segunda do potencial é igual distribuição

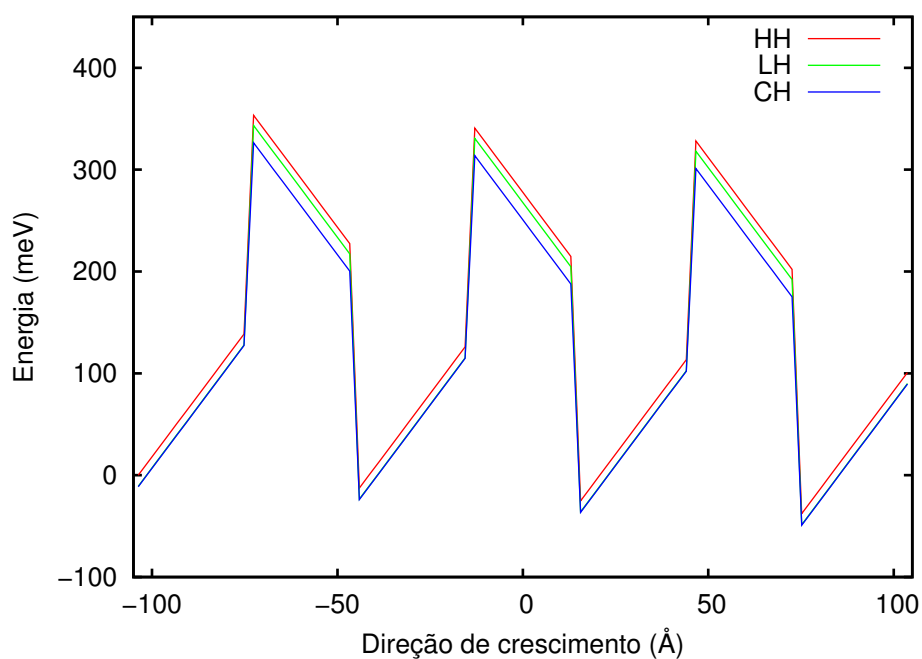


Figura 8.4: Perfil dos potenciais da heteroestrutura para os buracos pesados (**HH**), leves (**LH**) e de *split-off* (**CH**)

da densidade de portadores do sistema. Separando os potenciais dos portadores livres ($V_{C_{livres}}$) e fixos ($V_{C_{fixos}}$) pode-se calcular a distribuição de portadores livres $p(\mathbf{r})$ a partir da relação:

$$p(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{r})}{4\pi e^2} \nabla^2 V_{C_{livres}} \quad (8.1)$$

A figura 8.5-(b) ilustra a distribuição dos portadores livres para este sistema dopado de $N_A = 1.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. O modelo prevê que a diferença entre as alturas dos poços

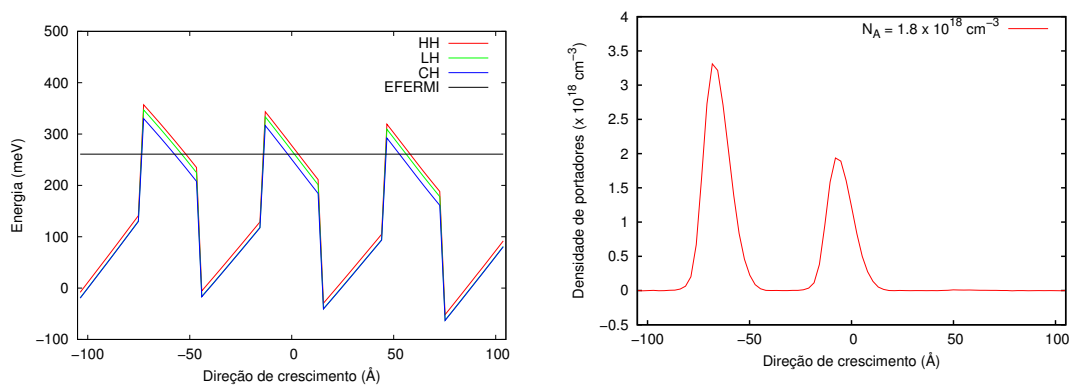


Figura 8.5: Heteroestrutura dopada $N_A = 1.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ **à esquerda** Perfil de potencial. **à direita** distribuição de cargas

gera um acúmulo de cargas no poço mais profundo, pois este detém os estados de maior energia, sendo então preferenciais para a ocupação pelos portadores livres.

Aumentando a densidade de portadores para $N_A = 9.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ e $N_A = 1.8 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ é possível notar um aumento na suavização dos poços, como mostrado na figura 8.6, pois a maior presença de cargas na heteroestrutura eleva o potencial efetivo consideravelmente.

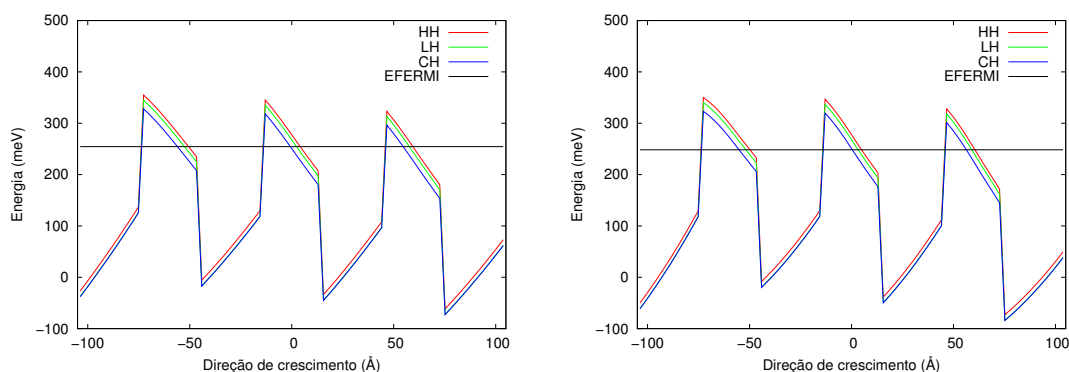


Figura 8.6: Perfil de potencial: **à esquerda** $N_A = 9.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ e **à direita** $N_A = 1.8 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

Um efeito interessante observado nesse sistema (ver figura 8.7) é o transito de cargas entre os poços vizinhos devido à blindagem dos potenciais da heteroestrutura pelos portadores na medida em que sua densidade aumenta. Quando os primeiros estados são ocupados o potencial dos poços se alinham, aproximando as energias dos estados de mesma identificação em poços diferentes tornando semelhantes as distribuições de portadores em cada um dos poços.

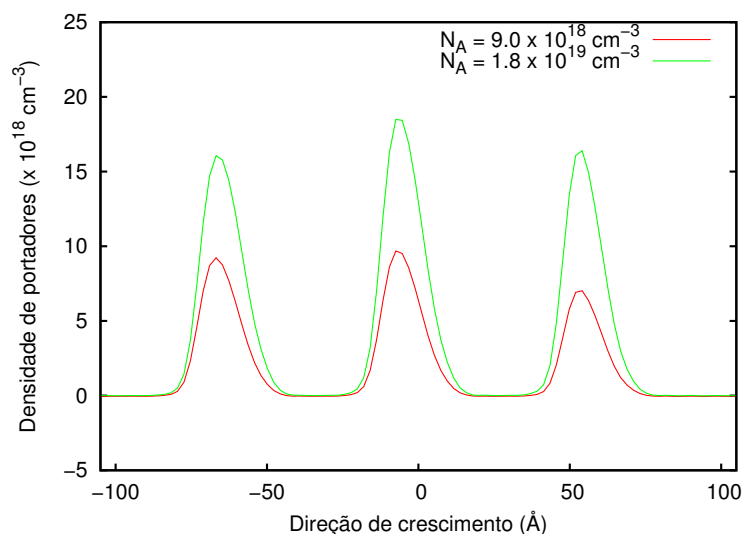


Figura 8.7: Distribuição de cargas

Os efeitos causados na estrutura de bandas são mostrados na figura 8.8 mostrando uma tendência dos estados de massa efetivas próximas de se tornar em degenerados. Os poços tendem a um perfil que mantenham próximas as características eletrônicas das primeiras bandas.

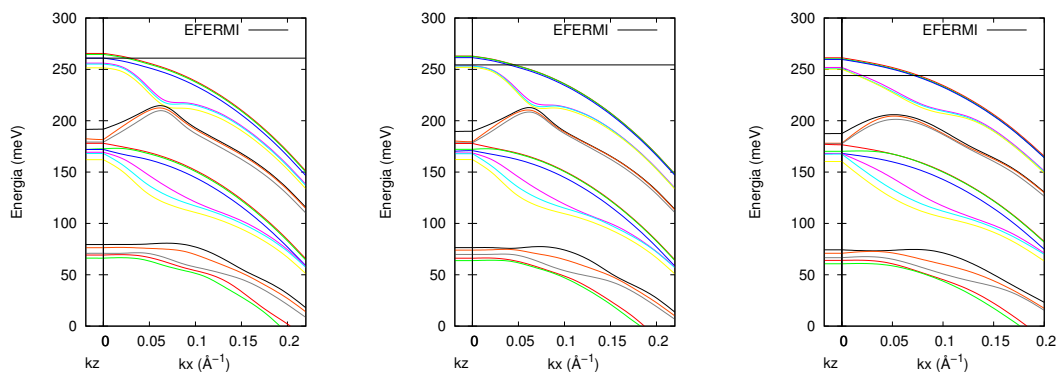


Figura 8.8: Estrutura de bandas

A ligeira diferença entre as alturas dos poços e a redistribuição das cargas não refletem grandes mudanças no espectro de luminescência do sistema, como pode ser visto na figura 8.9, pois a separação das bandas de buraco pesado ($\sim 1\text{meV}$) provoca um alargamento imperceptível no pico de emissão. O alargamento observado na emissão do sistema com $N_A = 1.8 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ é devido à ocupação do próximo conjunto de estados, buracos leves, de mais baixa energia ($\sim 15\text{meV}$).

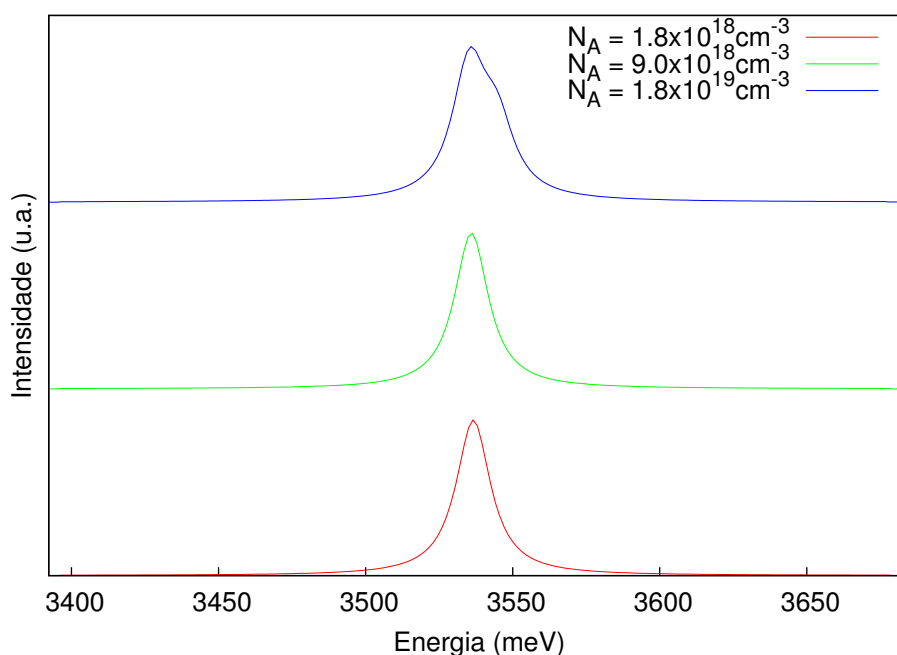


Figura 8.9: Luminescência

9 *Conclusões*

Neste trabalho estendi o método $k.p$ utilizado no Laboratório de Física computacional para uso em materiais com estrutura cristalina hexagonal. O método baseia-se no método autoconsistente, podendo ser utilizado para simulações computacionais de heteroestruturas dopadas ou não, visando a análise de dispositivos eletrônicos.

Os sistemas alvo deste trabalho, os nitretos semicondutores, são de importância fundamental para a eletrônica moderna, pois trata-se dos materiais que permitem a existência da optoeletrônica nos comprimentos de onda de verde ao ultravioleta. A existência de um método modular e extensível de cálculo de estrutura eletrônica e de propriedades óticas de heteroestruturas para sistemas hexagonais permite a busca de novos arranjos geométricos e composicionais auxiliando o projetos de novos dispositivos.

O estudo incluiu testes com sistemas bem estabelecidos da literatura bem como a simulação de sistemas com abordagens não antes executadas, como por exemplo o estudo do transporte de carga entre poços adjacentes.

O projeto envolveu um intenso esforço na remodelagem de código e na escrita de novas funções aperfeiçoando inclusive as funcionalidades já existentes no modelo e melhorando o desempenho do mesmo em projetos executados em paralelo no laboratório. Também, a modularização do código facilitará futuras extensões do código e simplificará sua manutenção.

Apesar de concluída a etapa de implementação do método autoconsistente para estruturas na fase hexagonal, o método aqui desenvolvido, longe de estar concluído, demanda novos esforços na direção de desenvolver um formalismo para a inclusão de troca-correlação no modelo ou ainda, de permitir seu uso para estruturas de mais baixa dimensionalidade, como por exemplo pontos e fios quânticos. Neste sentido vejo reais possibilidades de continuação no desenvolvimento desse método.

Quanto às heteroestruturas e super-redes de nitretos semicondutores, apenas uma exploração inicial foi feita, devendo o método ser utilizado para estudos mais sistemáticos.

APÊNDICE A – Parâmetros

A.1 Parâmetros de *Bir-Pikus*

Referências	[80]	[2]	[1, 3]
A_1	-7.71	-6.90	-6.56
A_2	-0.60	-0.73	-0.91
A_3	7.02	6.11	5.65
A_4	-3.08	-4.19	-2.83
A_5	-3.04	-3.94	-3.13
A_6	-4.00	-5.96	-4.86

Tabela A.1: Tabela de parâmetros A_i para **GaN** do método **k.p** para wurtzita. Os parâmetros $A_1 - A_6$ estão em unidade de $\hbar^2/2m_0$

Referências	[80]	[2]	[1, 3]
A_1	-4.61	-4.17	-3.95
A_2	-0.54	-0.58	-0.27
A_3	4.10	3.68	3.68
A_4	-1.59	-2.17	-1.84
A_5	-1.76	-2.27	-1.95
A_6	-2.15	-2.21	-2.91

Tabela A.2: Tabela de parâmetros A_i para **AlN** do método **k.p** para wurtzita. Os parâmetros $A_1 - A_6$ estão em unidade de $\hbar^2/2m_0$

Referências	[80]	[2]
A_1	-9.65	-8.21
A_2	-0.71	-0.68
A_3	8.96	7.57
A_4	-4.17	-5.23
A_5	-4.18	-5.11
A_6	-5.37	-5.96

Tabela A.3: Tabela de parâmetros A_i para **InN** do método **k.p** para wurtzita. Os parâmetros $A_1 - A_6$ estão em unidade de $\hbar^2/2m_0$

A.2 Energias entre bandas

Referências	[80]	[2]	[1, 3]
E_g	3.50	3.51	3.44
Δ_1	22.30	30.00	16.00
Δ_2	3.70	3.70	4.00
Δ_3	3.70	3.70	4.00

Tabela A.4: Tabela de parâmetros de energia entre bandas para **GaN** do método **k.p** para wurtzita. A energia de *gap* está em *eV* e Δ_i em *meV*

Referências	[80]	[2]	[1, 3]
E_g	6.22	6.24	6.28
Δ_1	-93.20	-104.00	-58.50
Δ_2	3.70	3.70	6.80
Δ_3	3.70	3.70	6.80

Tabela A.5: Tabela de parâmetros de energia entre bandas para **AlN** do método **k.p** para wurtzita. A energia de *gap* está em *eV* e Δ_i em *meV*

Referências	[80]	[2]
E_g	2.03	2.00
Δ_1	37.30	57.00
Δ_2	3.70	3.70
Δ_3	3.70	3.70

Tabela A.6: Tabela de parâmetros de energia entre bandas para **InN** do método **k.p** para wurtzita. A energia de *gap* está em *eV* e Δ_i em *meV*

A.3 Potencial de deformação

Referências	[3]
D_1	-1.70
D_2	6.30
D_3	8.00
D_4	-4.00
D_5	-4.00
D_6	-5.65

Tabela A.7: Tabela dos potenciais de deformação para **GaN** do método **k.p** para wurtzita. Os potenciais de deformação estão em *eV*.

Referências	[3]
D_1	-2.89
D_2	4.98
D_3	7.87
D_4	-3.94
D_5	-3.34
D_6	-3.88

Tabela A.8: Tabela dos potenciais de deformação para **AlN** do método **k.p** para wurtzita. Os potenciais de deformação estão em *eV*.

A.4 Constantes elásticas

Referências	[3]	[1]
C_{11}	390	
C_{12}	145	
C_{13}	106	158
C_{33}	398	267
C_{44}	105	
C_{66}	123	

Tabela A.9: Tabela das Constantes elásticas para **GaN** do método **k.p** para wurtzita. As constantes elásticas estão em *GPa*.

Referências	[3]	[1]
C_{11}	398	
C_{12}	140	
C_{13}	127	120
C_{33}	382	395
C_{44}	96	
C_{66}	129	

Tabela A.10: Tabela das Constantes elásticas para **AlN** do método **k.p** para wurtzita. As constantes elásticas estão em *GPa*.

A.5 Parâmetros de rede

Referências	[1, 3]
a	3.1892 Å
c	5.1850 Å

Tabela A.11: Tabela de parâmetros de rede para **GaN** do método **k.p** para wurtzita.

Referências	[1, 3]
a	3.112 Å
c	4.982 Å

Tabela A.12: Tabela de parâmetros de rede para **AlN** do método **k.p** para wurtzita.

A.6 Massas Efetivas

Referências	[80]	[2]
m_e^{\parallel}	0.14	0.16
m_{HH}^{\parallel}		1.27
m_{LH}^{\parallel}		1.27
m_{CH}^{\parallel}		0.14
m_e^{\perp}	0.15	0.12
m_{HH}^{\perp}		1.02
m_{LH}^{\perp}		0.11
m_{CH}^{\perp}		1.36

Tabela A.13: Tabela de massas efetivas para **GaN** do método **k.p** para wurtzita em unidades de m_0

Referências	[80]	[2]
m_e^{\parallel}	0.24	0.27
m_{HH}^{\parallel}		2.04
m_{LH}^{\parallel}		2.04
m_{CH}^{\parallel}		0.24
m_e^{\perp}	0.24	0.18
m_{HH}^{\perp}		2.08
m_{LH}^{\perp}		0.20
m_{CH}^{\perp}		1.71

Tabela A.14: Tabela de massas efetivas para **AlN** do método **k.p** para wurtzita em unidades de m_0

Referências	[80]	[2]
m_e^{\parallel}	0.10	0.14
m_{HH}^{\parallel}		1.56
m_{LH}^{\parallel}		1.56
m_{CH}^{\parallel}		0.12
m_e^{\perp}	0.10	0.10
m_{HH}^{\perp}		1.25
m_{LH}^{\perp}		0.09
m_{CH}^{\perp}		1.46

Tabela A.15: Tabela de massas efetivas para ***InN*** do método ***k.p*** para wurtzita em unidades de m_0

Referências

- 1 CHUANG, S.; CHANG, C. *Physical Review B*, v. 54, n. 4, p. 2491, July 1996. And references therein.
- 2 PUGH, S. K. *Semiconductor Science and Technology*, v. 14, p. 23, 1999.
- 3 PARK, S.; CHUANG, S. *Journal of Applied Physics*, v. 87, n. 1, p. 353, january 2000.
- 4 JAIN, S. C.; WILLANDER, M.; NARAYAN, J.; OVERSTRAETEN, R. van. *Journal of Applied Physics*, v. 87, p. 965, 2000.
- 5 AMBACHER, O. *Journal of Applied Physics*, v. 31, p. 2653, 2000.
- 6 ORTON, J. W.; FOXON, C. T. *Rep. Prog. Phys*, v. 61, p. 1, 1998.
- 7 STRITE, S.; MORKOÇ, H. *J. Vac. Sci. Technol.*, B20, p. 1237, 1992.
- 8 NAKAMURA, S. *Semicond. Sci. Technol.*, v. 14, p. R27, 1999.
- 9 PANKOVE, J. I.; MOUSTAKAS, T. D. *Semiconductors and Semimetals*. [S.l.]: Academic Press, 1998,1999.
- 10 YU, E. T.; DANG, X. Z.; ASBEG, P. M.; LAU, S. S.; SULLIVAN, G. J. *J. Vac. Sci. Technol*, B17, p. 1742, 1999.
- 11 FIORENTINI, V.; BERNARDINI, F.; SALA, F. D.; CARLO, A. D.; LUGLI, P. *Physical Review B*, v. 60, p. 8849, 1999.
- 12 SALA, F. D.; CARLO, A. D.; LUGLI, P.; BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V.; SCHOLZ, R. *Applied Physics Letters*, v. 74, p. 2002, 1999.
- 13 HONDA, T.; MIYAMOTO, T.; SAKAGUCHI, T.; KAWANISHI, H.; KOYAMA, F.; IGA, K. *Journal of Crystal Growth*, v. 189/190, p. 644, 1998.
- 14 WAGNER, J.; RAMAKRISHNAN, A.; OBLOH, H.; MAIER, M. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 3863, 1999.
- 15 KOZODOY, P.; HANSEN, M.; DENBAARSA, S. P.; MISHRA, U. K. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 3681, 1999.
- 16 KUMAKURA, K.; MAKIMOTO, T.; KOBAYASHI, N. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 39, p. 2428, 2000.
- 17 KUMAKURA, K.; KOBAYASHI, N. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 38, p. L1012, 1999.

- 18 EDGAR, J. H.; STRITE, S.; AKASAKI, I.; AMANO, H.; WETZEL, C. *Properties Processing and Applications of Gallium Nitride and Related Semiconductors*. [S.l.]: EMI Datareview Series, 1999.
- 19 BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V.; BOSIN, A. *Applied Physics Letter*, v. 70, p. 2990, 1997.
- 20 SAXLER, A.; MITCHEL, W. C.; KUNG, P.; RAZEGHI, M. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 2023, 1999.
- 21 F. Mireles and S. E. Ulloa, v. 58, p. 3879, Physical Review B.
- 22 GOEPFERT, I. D.; SCHUBERT, E. F.; OSINSKY, A.; NORRIS, P. E.; FALIEEV, N. N. *Journal of Applied Physics*, v. 88, p. 2030, 2000.
- 23 IM, J. S.; KOLLMER, H.; OFF, J.; SCHOLZ, F.; HANGLEUTER, A. *Mat. Sci. and Eng*, B59, p. 315, 1999.
- 24 CHICHIBU, S. F.; AND, M. P. M. A. C. A.; MINSKY, M. S.; DEGUCHI, T.; COHEN, P. K. D.; FLEISHCHER, S. B.; KELLER, S.; SPECK, J. S.; BOWERS, J. E.; HU, E.; MISHRA, U. K.; COLDREN, L. A.; DENBAARS, S. P.; WADA, K.; SODA, T.; NAKAMURA, S. *Mat. Sci. and Eng.*, B59, p. 298, 1999.
- 25 PENG, L.-H.; CHUANG, C.-W.; LOU, L.-H. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 795, 1999.
- 26 DALFORS, J.; BERGMAN, J. P.; HOLTZ, P. O.; SERNELIUS, B. E.; MONEMAR, B.; AMANO, H.; AKASAKI, I. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 3299, 1999.
- 27 PARK, S.-H.; CHUANG, S.-L. *Applied Physics Letter*, v. 72, p. 3103, 1998.
- 28 HSU, L. *Applied Physics Letter*, v. 73, p. 339, 1998.
- 29 KUMAKURA, K.; MAKIMOTO, T.; KOBAYASHI, N. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 39, p. L195, 2000.
- 30 KOZODOY, P.; XING, H.; DENBAARS, S. P.; MISHRA, U. K.; SAXLER, A.; PERRIN, P.; ELHAMRI, S.; MITCHEL, W. C. *Journal of Applied Physics*, v. 87, p. 1832, 2000.
- 31 AHN, D.; PARK, S.-H. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 35, p. 6079, 1996.
- 32 PARK, S.-H.; AHN, D. *Applied Physics Letter*, v. 71, p. 398, 1997.
- 33 SUZUKI, M.; UENOYAMA, T. *Journal of Applied Physics*, v. 80, p. 6868, 1996.
- 34 CHOW, W. W.; WRIGHT, A. F.; NELSON, J. S. *Applied Physics Letter*, v. 68, p. 296, 1996.
- 35 FRANKOWSKY, G.; STEUBER, F.; HÄRLE, V.; SCHOLZ, F.; HANGLEITER, A. *Applied Physics Letter*, v. 68, p. 3746, 1996.
- 36 AHN, D. *Journal of Applied Physics*, v. 76, p. 8206, 1994.

- 37 JEON, J. B.; LEE, B. C.; SIRENKO, Y. M.; KIM, K. W.; LITTLEJOHN, M. A. *Journal of Applied Physics*, v. 82, p. 386, 1997.
- 38 JENKINS, D. W.; HONG, R.-D.; DOW, J. D. *Superlat. Microstruct*, v. 3, p. 365, 1987.
- 39 YANG, T.; NAKAJIMA, S.; SAKAI, S. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 34, p. 5912, 1995.
- 40 MAJEWSKI, J. A.; STÄDELE, M.; VOGEL, P. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc*, v. 449, p. 887, 1997.
- 41 PUGH, D. J. D. S. K.; BRAND, S.; ABRAM, R. A. *Journal of Applied Physics*, v. 86, p. 3768, 1999.
- 42 PUGH, S. K.; DUGDALE, D. J.; BRAND, S.; ABRAM, R. A. *Semicond. Sci. Technol.*, v. 14, p. 23, 1999.
- 43 WRIGHT, A. F. *Journal of Applied Physics*, v. 82, p. 2833, 1997.
- 44 YEO, Y. C.; CHONG, T. C.; LI e M. F. *Journal of Applied Physics*, v. 83, p. 1429, 1998.
- 45 VOGEL, D.; KRÜGER, P.; POLLMANN, J. *Physical Review B*, v. 55, p. 12836, 1997.
- 46 KARCH, K.; WAGNER, J. M.; BECHSTEDT, F. *Physical Review B*, v. 57, p. 7043, 1998.
- 47 KIM, K.; LAMBRECHT, W. R. L.; SEGALL, B.; SCHILFGAARDE, M. van. *Physical Review B*, v. 56, p. 7363, 1997.
- 48 KIM, K.; LAMBRECHT, W. R. L.; SEGALL, B. *Physical Review B*, v. 53, p. 16310, 1996.
- 49 KIM, K.; LAMBRECHT, W. R. L.; SEGALL, B. *Physical Review B*, v. 56, p. 7018, 1997.
- 50 CHRISTENSEN, N. E.; GORCZYCA, I. *Physical Review B*, p. 4397, 1994.
- 51 SUZUKI, M.; UENOYAMA, T.; YANASE, A. *Physical Review B*, v. 52, p. 8132, 1995.
- 52 SIRENKO, Y. M.; JEON, J. B.; LEE, B. C.; KIM, K. W.; LITTLEJOHN, M. A.; STROSCIO, M. A.; IAFRATE, G. J. *Physical Review B*, v. 55, p. 4360, 1997.
- 53 SIRENKO, Y. M.; JEON, J. B.; KIM, K. W.; LITTLEJOHN, M. A.; STROSCIO, M. A. *Physical Review B*, v. 53, p. 1997, 1996.
- 54 REN, G. B.; LIU, Y. M.; BLOOD, P. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 1117, 1999.
- 55 CHUANG, S.-H. P. e S.-L. *Journal Applied Physics*, v. 87, p. 353, 2000.
- 56 CHUANG, S. L.; CHANG, C. S. *Applied Physics Letter*, v. 68, p. 1657, 1996.

- 57 JEON, J. B.; SIRENKO, Y. M.; KIM, K. W.; LITTLEJOHN, M. A.; STROSCIO, M. A. *Solid State Commun.*, v. 99, p. 423, 1996.
- 58 DUGDALE, D. J.; BRAND, S.; ABRAM, R. A. *Physical Review B*, v. 61, p. 12933, 2000.
- 59 AHN, D.; PARK, S.-H. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 35, p. 6079, 1996.
- 60 FAN M. F. LI, T. C. C. e. J. B. X. W. *J. Applied Physics Letter*, v. 80, p. 3471, 1996.
- 61 RODRIGUES, S. C. P. *Estrutura de Bandas de Heteroestruturas Semicodutoras Dopadas Tipo-p*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 2001.
- 62 RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. *Applied Physics Letter*, v. 76, p. 1015, 2000.
- 63 RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. *Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors*, v. 74, p. 2000.
- 64 RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE e J. R. *Physica B*, p. 2000.
- 65 RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. *Physical Review B*, 2001.
- 66 RODRIGUES, S. C. P.; SIPAHI, G. M.; SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R. *J. Phys. Cond. Matt.*, 2001.
- 67 HSU, L.; WALUKIEWICZ, W. *Applied Physics Letter*, v. 74, p. 2405, 1999.
- 68 RASHBA, E. *Soviet Physics Solid State*, v. 1, p. 368, 1959.
- 69 PIKUS, G. *Soviet Physics JETP*, v. 14, p. 898, april 1962.
- 70 LöWDIN, P. *Journal of Chemical Physics*, v. 19, p. 1396, 1951.
- 71 LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. *Physical Review*, v. 97, p. 869, 1955.
- 72 KANE, E. O. *J. Phys. Chem. Solids*, v. 1, p. 82, 1956.
- 73 DINGLE, R. *Physical Review B*, v. 4, p. 1211, 1971.
- 74 SIPAHI, G. M. *Teoria do Confinamento de Buracos em Heteroestruturas semicondutoras do tipo δ -Doping*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 1997.
- 75 YU, M. C. P. *Fundamental of Semiconductors Physics and Materials Properties*. [S.l.]: Springer, 1996.
- 76 SIPAHI, G. M.; ENDERLEIN, R.; SCOLFARO, L.; LEITE, J.; SILVA, E. da; LEVINE, A. *Physical Review B*, v. 57, p. 9168, 1998.
- 77 FRIGO, M.; JOHNSON, S. G. *FFTW version 3.0*. 2006, acessado em janeiro de 2006. Disponível em: <<http://www.fftw.org/>>.

78 ANDERSON, E.; BAI, Z.; BISCHOF, C.; BLACKFORD, S.; DEMMEL, J.; DONGARRA, J.; CROZ, J. D.; GREENBAUM, A.; HAMMARLING, S.; MCKENNEY, A.; SORENSEN, D. *LAPACK Users' Guide*. Third. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999. ISBN 0-89871-447-8 (paperback).

79 R, C. J.; L, C. M. *Physical Review B*, v. 14, p. 556, 1976.

80 PUGH, S. K. *Journal of Applied Physics*, v. 86, p. 3768, 1999.