UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS INSTITUTO DE FÍSICA

Éxcitons em Semicondutores Magnéticos Diluídos

Erivelton de Oliveira Alves

ORIENTADOR: Prof. Dr. Márcio A. R. Souza

GOIÂNIA 2006

Universidade Federal de Goiás Instituto de Física

Éxcitons em Semicondutores Magnéticos Diluídos

Erivelton de Oliveira Alves

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Márcio A. R. Souza

Goiânia

2006

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) GPT/BC/UFG

Alves, Erivelton de Oliveira. Éxcitons em semicondutores magnéticos diluídos [manuscrito] / Erivelton de Oliveira Alves. - 2006. 80 f. : figs, tabs.
Orientador: Prof. Dr. Márcio A. R. Souza. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física, 2006. Bibliografia. Apêndices.
1. Tunelamento (Física). 2. Éxcitons. I. Título.

CDU: 53.097:535

Aos meus pais, José e Adelis.

Agradecimentos

- Ao Prof. Márcio Adriano pela oportunidade que me deu em trabalhar sob a sua orientação, pelas discussões e pelo apoio incondicional que me deu durante o trabalho. Principalmente pelo respeito às minhas limitações e pela sua infinita paciência, caro professor muito obrigado!
- Ao Prof. Salviano A. Leão, meu coorientador, pelas discussões e pelo suporte técnico na utilização do FORTRAN.
- Aos meus irmãos, Wellington e Érika, pela força e apoio nos momentos difíceis dessa batalha.
- À minha eterna namorada Elizabeth pelo afago e carinho nos momentos críticos.
- Aos colegas de mestrado Paulo E. R. Weber, Wesley B. Cardoso e Claudinei Caetano, pela ajuda que me deram no trabalho diário com o Linux.
- Aos meus amigos Rafael Otoniel e Thiago Branquinho, companheiros de todas as horas, pelo apoio e amizade.
- Aos demais colegas do mestrado Domingos, Iara, Emílio,... pela amizade, colaboração e convívio durante esse tempo.

Este trabalho foi financiado pela CAPES.

Conteúdo

\mathbf{Li}	Lista de Figuras ii			
\mathbf{Li}	Lista de Tabelas vi			
1	Intr	odução	1	
2	Pro	priedades Gerais dos Materiais Semicondutores	4	
	2.1	Heteroestruturas Semicondutoras	6	
	2.2	Técnicas de Crescimento de Cristais	6	
	2.3	As Aproximações na Teoria de Banda	8	
		2.3.1 Aproximação de Born-Oppenheimer	9	
		2.3.2 Aproximação do Elétron Independente	10	
		2.3.3 Aproximação da Massa Efetiva	11	
	2.4	Propriedades Cristalinas e Eletrônicas	13	
	2.5	Semicondutores Magnéticos Diluídos	15	
		2.5.1 Estrutura Cristalina	15	
		2.5.2 Propriedades Magnéticas	16	
3	Cál	culo da Estrutura Eletrônica	19	
	3.1	O Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	19	
	3.2	Hamiltoniano de Troca	24	
	3.3	Efeitos de Tensão	26	
	3.4	Método Numérico	28	
		3.4.1 O Método da Potência Inversa	29	
4	Éxcitons 3		32	
	4.1	Introdução	32	
	4.2	Propriedades Gerais	33	
	4.3	Éxcitons em Poços Quânticos	35	

	4.3.1 Método Variacional	37
5	Tunelamento Ressonante de Elétrons, Buracos e Éxcitons em um Poço Quânti	co
	Duplo de CdTe/CdMnTe	39
	5.1 Considerações Iniciais	40
	5.2 Resultados	42
6	Conclusões	57
A	pêndices	59
A	Parâmetros para CdMnTe	59
в	Cálculo Analítico da Energia Excitônica em um Poço Quântico	60
Re	eferências Bibliográficas	62

Lista de Figuras

2.1 Sobreposição de materiais de diferentes gaps de energia E_1 e E_2 , $\Delta E = E_1 - E_2$. Descontinuidade na energia potencial nas bordas das bandas de condução e valência.

6

- 2.2 Esquema do aparato experimental para o crescimento de heteroestruturas usando a técnica de MBE. Cada célula de efusão evapora um tipo de material semicondutor que são depositados lenta e alternadamente sobre um substrato. A morfologia da interface e a espessura da amostra é controlada por um feixe de elétrons rasantes que são espalhados ou não dependendo da homogeneidade da superfície.
 7
- 2.4 (a) Estrutura de bandas do GaAs calculada pelo método pseudopotencial [16];
 (b) Estrutura de bandas em torno do ponto Γ para um semicondutor de gap direto mostrando as bandas de condução, buraco leve, buraco pesado e split-off. 14

5.1	Poço quântico duplo assimétrico de $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$, crescido sobre um subs-	
	trato de InSb ($a_0 = 6,4794 \text{\AA}$) utilizado para estudar o tunelamento de portadores.	
	O poço esquerdo de CdTe possui largura de 50 Å, o poço direito de Cd $_{0,96}Mn_{0,04}$ Te	
	possui 90 Å de largura e a barreira entre eles de $Cd_{0,86}Mn_{0,14}Te$ possui 50 Å de	
	largura. A figura mostra os níveis de energia dos dois primeiros autoestados e	
	também a quebra da degenerescência da banda de valência (BV) em bandas de	
	buraco leve (lh - light-hole) e buraco pesado (hh - heavy-hole).	40
5.2	Energia potencial e as densidades de probabilidade para os primeiros estados	
	ligados em um poço quântico duplo. O primeiro estado eletrônico localizado no	
	poço estreito é indicado por el_{1N} , o segundo estado eletrônco localizado no poço	
	largo é indicado por el_{2W} , seguindo a mesma notação no caso dos buracos pesados	
	(hh) e buracos leves (lh)	42
5.3	$Densidade \ de \ probabilidade \ correspondente \ ao \ estado \ eletrônico \ el_{1N} \ para \ dife-$	
	rentes valores de campo elétrico	43
5.4	$Densidade \ de \ probabilidade \ correspondente \ ao \ estado \ eletrônico \ el_{2W} \ para \ dife-$	
	rentes valores de campo elétrico	43
5.5	$Densidade \ de \ probabilidade \ correspondente \ ao \ estado \ de \ buraco \ pesado \ hh_{1N} \ para$	
	diferentes valores de campo elétrico	44
5.6	$Densidade \ de \ probabilidade \ correspondente \ ao \ estado \ de \ buraco \ pesado \ hh_{2W} \ para$	
	diferentes valores de campo elétrico	44
5.7	$Densidade \ de \ probabilidade \ correspondente \ ao \ estado \ de \ buraco \ leve \ lh_{1N} \ para$	
	diferentes valores de campo elétrico	44
5.8	$Densidade \ de \ probabilidade \ correspondente \ ao \ estado \ de \ buraco \ leve \ lh_{2W} \ para$	
	diferentes valores de campo elétrico	44
5.9	Níveis de energia dos estados el_{1N} (linha tracejada) e el_{2W} (linha contínua) em	
	função do campo elétrico aplicado. Na ressonância o campo elétrico é $F_{ress} =$	
	-10,79 kV/cm.	45
5.10	D iferença entre os níveis de energia dos estados el_{1N} e el_{2W} em função do campo	
	elétrico aplicado. Na ressonância a diferença é $\Delta \varepsilon_{min}^{el} = 2,54 meV.$	45
5.11	Níveis de energia dos estados hh_{1N} (linha contínua) e hh_{2W} (linha tracejada) em	
	função do campo elétrico aplicado. Na ressonância o campo elétrico é $F_{ress} =$	
	10, 33 kV/cm.	46
5.12	D iferença entre os níveis de energia dos estados hh_{1N} e hh_{2W} em função do campo	
	elétrico aplicado. Na ressonância a diferença é $\Delta \varepsilon_{min}^{hh} = 0,071 meV.$	46

5.13 Densidade de probabilidade dos estados el_{1N} e el_{1W} na ausência de campo (parte inferior) e com a aplicação do campo elétrico ressonante $F_{ress} = -10,79 \, kV/cm$ 46 5.14 Densidade de probabilidade dos estados hh_{1N} e hh_{1W} na ausência de campo (parte inferior) e com a aplicação do campo elétrico ressonante $F_{ress} = 10,33 \, kV/cm$ 46 5.15 Influência do campo elétrico sobre as posições médias dos estados el_{1N} e el_{2W} . O ponto em que as posições médias são as mesmas corresponde ao campo elétrico ressonante $F_{ress} = -10,79 \, kV/cm.$ 485.16 Influência do campo elétrico sobre as posições médias dos estados hh_{1N} e hh_{2W} . O ponto em que as posições médias são as mesmas corresponde ao campo elétrico ressonante $F_{ress} = 10,33 \, kV/cm.$ 485.17 Energia de ligação do éxciton el_{2W}/hh_{2W} em função do campo elétrico. Nesse caso o elétron el_{2W} tunela do poço magnético (W) para o poço não-magnético (N). 48 5.18 Energia de ligação do éxciton el_{1N}/hh_{1N} em função do campo elétrico. Nesse caso o buraco hh_{1N} tunela do poço não-magnético (N) para o poço magnético (W). 48 5.19 Campo magnético ressonante para os estados de elétrons e buracos pesados em função do campo elétrico aplicado. O ponto de cruzamento entre as duas curvas $(F_{ress} = 6,95 \ kV/cm \ e \ B_{ress} = 2,82 \ T$) nos fornece os campos elétrico e magnético com os quais os dois estados estarão em ressonância simultaneamente. 49 5.20 Efeito do campo magnético sobre as posições médias dos estados de elétrons e buracos pesados para um campo elétrico aplicado de 6,95 kV/cm. O ponto em que as posições médias são iguais corresponde ao campo magnético ressonante $2.82 T.\ldots$ 505.21 Níveis de energia dos estados $h_{2W\uparrow}$, $h_{3N\uparrow}$ e $h_{4W\uparrow}$ para um campo elétrico de 6,95 kV/cm em função do campo magnético. Os pontos de máxima aproximação entre as curvas marcam os pontos de ressonância. 515.22 Efeito do campo magnético sobre as posições médias dos estados $hh_{2W\uparrow}$, $hh_{3N\uparrow}$ e $hh_{4W\uparrow}$ para um campo elétrico aplicado de 6,95 kV/cm. Os pontos em que as posições médias são iguais correspondem aos campo magnéticos ressonantes. . . 515.23 Diferença entre os nívies de energia dos primeiros estados de buraco pesado do sistema em função do campo magnético aplicado. O ponto de mínimo corres-51

5.24	Diferença entre os nívies de energia dos primeiros estados de elétrons do sistema	
	$em \ função \ do \ campo \ magnético \ aplicado. \ O \ ponto \ de \ mínimo \ corresponde \ a$	
	$B_{ress} = 2,82 T. \ldots $	51
5.25	Efeito Zeeman dos níveis de energia dos estados de elétrons e buracos em função	
	do campo magnético aplicado. Vemos a repulsão dos níveis de energia dos estados	
	de buraco pesado devido, em torno de $B_{ress} = 2,82 T.$	53
5.26	Energias de transição com polarizações circulares σ^+ e σ^- entre os estados el_{1N}	
	$\rightarrow hh_{1N} \ e \ el_{2W} \rightarrow hh_{2W}$ para um campo elétrico de 6,95 kV/cm. As energias de	
	ligação excitônica não foram consideradas.	53
5.27	Energia de ligação de éxcitons em função do campo magnético para um campo	
	$elétrico \ de \ 6,95 \ kV/cm.$	54
5.28	Energia de ligação excitônica em função do campo magnético para um campo	
	$elétrico de 8 kV/cm. \dots \dots$	55
5.29	Posição média dos portadores em fução do campo magnético para um campo	
	$elétrico de 8 kV/cm. \dots \dots$	56

Lista de Tabelas

2.1	.1 Observamos que as ligas ternárias da forma $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ se cristalizam ou na estrutura blenda de zince ou na estrutura unretzita, dependendo dos elementos	
	que compõem a liga e da fração molar de Mn	15
3.1	hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ obtido a partir do trabalho de Weiler et al. [26]	25
A.1	Parâmetros para o $Cd_{1-x}Mn_xTe$	59

Resumo

Investigamos o tunelamento ressonante de elétrons e buracos em um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe na presença de campos elétricos e magnéticos aplicados ao longo da direção de crescimento. Mostramos que neste caso é possível alcançar uma condição de tunelamento ressonante simultâneo de elétrons e buracos com spin definido, isto é, um tunelamento ressonante de éxcitons polarizados. Em seguida calculamos a energia de ligação excitônica em função dos campos aplicados, mostrando a forte dependência da energia de ligação com o tunelamento dos portadores. A estrutura eletrônica foi calculada usando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ no modelo multibandas de Kane. Os autoestados foram obtidos resolvendo-se numericamente a equação da massa efetiva usando o método das potência inversa. Os efeitos de tensão da rede cristalina foram tratados pelo modelo de Pikus-Bir. O cálculo de energia de ligação excitônica foi realizado usando o método variacional. Consideramos as interfaces da heteroestrutura perfeitamente abruptas, isto é, efeitos de alargamento das interfaces foram desprezados.

Abstract

In this work we have investigated the tunneling of electron and holes in a CdTe/CdMnTe asymmetric double quantum well heterostructure in the presence of electric and magnetic fields applied in the growth direction. We showed how to obtain the simultaneous resonant tunneling condition for electrons and holes with a defined spin, i.e., the resonant tunneling of polarized excitons. After that, we calculated the excitonic binding energy as a function of the applied fields, point out the dependence of the energy binding with the tunneling carriers. The electronic structure was calculated using the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method in the multiband Kane model. The eigenstates was calculated solving the effective mass equation numerically using the inverse power method. Strain effects was taking into account within Pikus-Bir's model. The exciton binding energy was calculated using the variational method and effects due nonabrupt interface had been neglected.

Capítulo 1 Introdução

Ao longo das últimas décadas a sociedade vem testemunhando um grande aumento no uso de dispositivos optoeletrônicos nas mais diversas atividades do cotidiano, seja ao mudar os canais do aparelho televisor com um controle remoto, seja ao ouvir um CD ou mesmo ao acessar a Internet. Estes dispositivos são largamente usados na conversão de sinais elétricos em ópticos (e vice-versa) para que ocorra a transmissão eficiente da informação. Este mercado crescente e amplo é motivo de enorme interesse na pesquisa e desenvolvimento de dispositivos com melhores desempenhos, seja através da exploração de novos materiais ou de novos fenômenos físicos.

Grande parte do progresso na tecnologia dos dispositivos eletrônicos se deve à técnica MBE (*Molecular Beam Epitaxy - Epitaxia por Feixe Molecular*) que se destaca entre as mais modernas técnicas de crescimento epitaxial por diversas razões. Suas principais características são as baixas taxas de deposição (que permitem o controle preciso, em escala atômica, da espessura das camadas) e a possibilidade de monitorar o crescimento em tempo real (através da difração de elétrons). Isto confere à técnica MBE uma grande confiabilidade no que se refere à espessura, composição e morfologia das camadas crescidas. Trata-se então de uma técnica de excelência para a produção de dispositivos eletrônicos que exigem alta mobilidade eletrônica para operação em alta frequência, como os HEMT's (High Electron-Mobility Transistor) muito usado em sistemas de telecomunicações.

Dessa forma, a técnica de crescimento MBE representa a técnica mais indicada na construção de heteroestruturas semicondutoras. Estas heteroestruturas são obtidas do cresci-

mento alternado de diferentes materiais semicondutores que possuem *gaps* (diferença de energia entre a banda de condução e banda de valência) característicos. Esta sobreposição de materiais provoca uma descontinuidade nas bandas de energia da estrutura resultante, a partir da qual pode ser usada para construir estruturas de confinamento espacial de portadores em uma (poços quânticos), duas (fios quânticos) ou três (pontos quânticos) dimensões. Vale lembrar que nestes sistemas os efeitos quânticos são inevitáveis uma vez que as escalas de tamanho envolvidas são nanométricas.

Estamos especialmente interessados numa classe destas heteroestruturas que são os Semicondutores Magnéticos Diluídos (Diluted Magnetic Semiconductors - DMS) ou simplesmente Semicondutores Semimagnéticos. Os semicondutores semimagnéticos são ligas do tipo $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ obtidas adicionando-se manganês aos compostos semicondutores do tipo II-VI, sendo interessantes por várias razões. Em particular, o nosso sistema consiste de um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe.

As heteroestruturas que incorporam os semicondutores magnéticos diluídos são de considerável interesse porque nelas é possível, através da interação entre os portadores e os íons magnéticos, controlar o gap de energia das camadas magnéticas pela aplicação de um campo magnético [1]. As propriedades físicas do $Cd_{1-x}Mn_x$ Te são baseadas na forte interação de troca sp-d entre os elétrons ou buracos com os elétrons 3d dos íons de Mn^{2+} . As interações magnéticas levam a um incremento significativo dos efeitos magneto-ópticos, como a separação Zeeman de éxciton [2]. Nossa principal motivação é enriquecer o estudo de fenômenos dependentes de spin. O que se busca atualmente é uma maneira de conservar os estados do spin e construir uma corrente spin-polarizada onde todos os elétrons tenham o spin apontando para uma direção preferencial. Isto traz a perspectiva de desenvolvimento de dispositivos spintrônicos tais como filtros de spin [3], transistores baseados em spin [4,5] e memórias de spin [6,7].

Nesse trabalho estudamos o problema do tunelamento polarizado de elétrons, buracos e éxcitons em um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe na presença de um campo elétrico e de um campo magnético aplicados na direção de crescimento. Nosso objetivo é calcular a energia de ligação de éxciton na ocorrência do tunelamento e estudarmos como o seu comportamento pode influenciar na interpretação dos espectros de transição eletrônica observados experimentalmente. A seguir mostramos os tópicos abordados nos respectivos capítulos desta dissertação.

No capítulo 2 descrevemos uma técnica de crescimento utilizada para a obtenção de heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade, as propriedades gerais dos materiais semicondutores convencionais e dos semimagnéticos e as aproximações usadas para solução da equação de Schrödinger.

No capítulo 3 apresentamos brevemente o formalismo do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, no modelo multibanda de Kane, para resolver a equação da massa efetiva. Em seguida escrevemos o hamiltoniano de troca, dentro do modelo de Gaj, e o hamiltoniano de tensão, ambos a serem acrescentados no hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Por último, discutimos o método numérico baseado na técnica das diferenças finitas e no método da potência inversa para resolver a equação de massa efetiva multibandas, e desse modo calcular a estrutura eletrônica do sistema estudado.

No capítulo 4 fazemos uma descrição do problema do éxciton em um poço quântico simples e do método variacional, utilizado para calcular a energia de ligação excitônica.

No capítulo 5 tratamos o tunelamento dos elétrons, buracos e éxcitons em poços quânticos, na presença de campos elétricos e magnéticos aplicados na direção de crescimento. Calculamos a separação Zeeman dos níveis de energia, as energias de transição e as energias de ligação excitônica em função do campo magnético.

No capítulo 6 apresentamos nossas conclusões.

Capítulo 2

Propriedades Gerais dos Materiais Semicondutores

Uma grande classe de dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos têm como matéria prima o material semicondutor. Essa potencial aplicação no campo tecnológico, faz com que esses materiais sejam de grande interesse em pesquisas científicas. Os semicondutores são caracterizados por possuirem uma pequena faixa energia, entre as banda de valência e condução, em que não há estados eletrônicos. Essa região entre as bandas é chamada de faixa proibida ou "gap" de energia. Em geral, esse gap de energia é da ordem de 2 eV para os semicondutores mais comuns e varia com a temperatura.

Os chamados semicondutores intrínsecos são substâncias puras que a T = 0 K, têm a banda de valência com todos os níveis ocupados e a banda de condução com todos os níveis desocupados. Entre os mais utilizados destacam-se o silício com $E_g = 1, 12$ eV e o germânio com $E_g = 0, 67$ eV à temperatura ambiente. Como o gap de energia é relativamente pequeno, perturbações externas, como a temperatura, podem fornecer energia sufuciente para que elétrons da banda de valência possam transpor a faixa proibida e passando a ocupar a banda de condução. A ausência de elétrons na banda de valência se comporta como um portador de carga positiva, chamado buraco.

Os semicondutores intrínsecos são pouco utilizados em dispositivos, entre outras razões, porque sua condutividade é pequena e depende muito da temperatura. Através de técnicas de crescimento de cristais, que serão abordadas posteriormente, foi possível o desenvolvimento de inúmeras ligas semicondutoras pela combinação de vários elementos da tabela periódica. Dessa forma, pode-se alterar as propriedades elétricas de semicondutores intrínsecos se outros elementos forem adicionados à rede cristalina semicondutora. Trata-se do processo de dopagem, onde é acrescentado um determinado tipo de átomo em substituição a um átomo do material no processo de crescimento. Como consequência, o tipo de portador (elétron ou buraco) dominante vai depender da valência da impureza adicionada. Estes são os semicondutores extrínsecos. Os semicondutores dopados tem condutividade que varia pouco com a temperatura e cujo valor é controlado pela concentração de impurezas no cristal.

Os compostos mais conhecidos oriundam de combinações de elementos das colunas III-V e II-VI da tabela periódica, como: PbS, PbSe, GaAs, AlSb, InAl entre outros. É possível também formar compostos ternários e quartenários a partir dos compostos binários. Nesse caso, um dos constituintes é substituído em fração controlada por outro de mesma valência. É importante observar que nessas ligas não há acréscimo de portadores, e as mudanças de interesse ocorrem na estutura da banda. Os compostos mais utilizados são o GaAs e o Ga_{1-x}Al_xAs, principalmente por apresentarem excelente casamento entre as constantes de rede. A variação do parâmetro de rede ($\Delta a/a$) nesses materiais é da ordem de 0,06%, o que justifica o fato de serem tão relevantes para a pesquisa e aplicações tecnológicas.

Nesse trabalho estamos especialmente interessados nas ligas ternárias dos grupos II-VI com o átomo substitucional sendo o manganês, resultando em ligas do tipo $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$. Em particular trataremos de poços quânticos de CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe. A principal característica desses materiais é que na presença de um campo magnético externo, a interação de troca entre os íons magnéticos e os portadores das bandas de condução e valência produz um efeito Zeeman gigante se comparado com os semicondutores convencionais. Neste capítulo discutiremos as principais técnicas de crescimento para obtenção das heteroestruturas semicondutoras, bem como as propriedades cristalinas, propriedades eletrônicas e magnéticas dos semicondutores magnéticos diluídos.

2.1 Heteroestruturas Semicondutoras

Heteroestruturas são empilhamentos de diferentes materias semicondutores. Como os materiais possuem diferentes gaps de energia, teremos uma descontinuidade no perfil de energia potencial. A figura (2.1) mostra o empilhamento de um material tipo A sobre B. Com uma sequência de sobreposição de materiais do tipo ABA, temos um poço quântico.



Figura 2.1: Sobreposição de materiais de diferentes gaps de energia E_1 e E_2 , $\Delta E = E_1 - E_2$. Descontinuidade na energia potencial nas bordas das bandas de condução e valência.

Num poço quântico temos o efeito do confinamento, onde os portadores perdem a liberdade na direção de crescimento mas continuam livres no plano perpendicular. Um parâmetro importante quando se trata de poços quânticos é o alinhamento das bandas na interface das junções entre os dois materiais ("*band-offset*"). Em muitas interfaces esse parâmetro não é bem definido. Estudos realizados por A. Wasiela *et al.* [8], estimou que α_{Mn} varia entre 0,25 e 0,4 para a interface de CdTe/CdMnTe, sem considerar as propriedades magnéticas.

2.2 Técnicas de Crescimento de Cristais

O desenvolvimento dos sistemas de baixa dimensionalidade está ligado aos avanços nas técnicas de crescimento epitaxiais. Essas técnicas se baseiam na deposição de materiais semicondutores sobre um outro cristal similar chamado *substrato*. Existem várias formas de epitaxia, as mais comuns sendo a Deposição por Vapor Químico Organo-Metálico (*Metal*- Organic Chemical Vapour Deposition-MOCVD) e a Epitaxia por Feixe Molecular (Molecular Beam Epitaxy-MBE) [9]. Durante o crescimento da amostra, técnicas de caracterização de interfaces como Difração Eletrônica de Baixa Energia (Low Energy Electron Diffraction - LEED) e a Difração Eletrônica de Alta Energia por Reflexão (Reflection High Energy Electron Diffraction - RHEED) permitem um controle rigoroso nas espessuras das camadas crescidas, possibilitando interfaces extremamente abruptas entre os materiais.

A técnica mais recomendada para o crescimento de heteroestruras semicondutoras é a MBE. Netsa técnica o substrato é colocado em uma câmara de alto-vácuo (10^{-10} torr) e aquecido. Então são lançados sobre o substrato fluxos dos elementos e dos dopantes com taxas controladas, de acordo com as características que se deseja obter para o cristal crescido. Como a taxa de deposição é baixa ($\approx 1\mu m/h$), a técnica se torna inviável para ser utilizada no setor industrial. Esta técnica é bastante conveniente para construção de dispositivo de confinamento tais como poços quânticos, fios quânticos, pontos quânticos e superredes.



Figura 2.2: Esquema do aparato experimental para o crescimento de heteroestruturas usando a técnica de MBE. Cada célula de efusão evapora um tipo de material semicondutor que são depositados lenta e alternadamente sobre um substrato. A morfologia da interface e a espessura da amostra é controlada por um feixe de elétrons rasantes que são espalhados ou não dependendo da homogeneidade da superfície.

2.3 As Aproximações na Teoria de Banda

Quando tratamos de heteroestruturas semicondutoras os efeitos quânticos são inevitáveis, pois as dimensões do sistema são comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie dos elétrons. Estudar a dinâmica de elétrons (ou buracos) confinados, significa resolver a equação de Schrödinger nesse sistema, fazendo uso de algumas aproximações para resolver o problema.

Antes de escrevermos a equação de Schrödinger para a heteroestrutura é conveniente lembrar que, de modo geral, os elétrons de um cristal se dividem em dois grupos: elétrons de valência, que contribuem para as ligações químicas e elétrons do caroço, que estão fortemente ligados em camadas fechadas dos núcleos. Desse modo o hamiltoniano não relativístico para o sistema de elétrons (de valência) e os núcleos que formam o cristal semicondutor pode ser separado nas seguintes contribuições: puramente eletrônica H_{el} , puramente nuclear H_n e mista H_{el-n} , ou seja o hamiltoniano pode ser dado por

$$H = H_{el} + H_n + H_{el-n}.$$
 (2.1)

O termo eletrônico é dado por

$$H_{el} = \sum_{i} -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\vec{r_j} - \vec{r_i}|}$$

onde m_0 é a massa dos elétrons, $\vec{r_i} \in \vec{r_j}$ são as posições dos i-ésimo e j-ésimo elétrons, respectivamente. O primeiro termo do hamiltoniano eletrônico é a energia cinética e o segundo é a energia potencial de interação elétron-elétron. O termo nuclear é dado por

$$H_n = \sum_{\mu} -\frac{\hbar^2}{2M_{\mu}} \nabla_{\mu}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\nu \neq \mu} V_n(\vec{R_{\nu}} - \vec{R_{\mu}}),$$

onde M_{μ} é a massa dos núcleos, $\vec{R_{\mu}} \in \vec{R_{\nu}}$ representa as posições dos núcleos. O primeiro termo do hamiltoniano nuclear é a energia cinética dos núcleos e o segundo é a energia potencial de interação núcleo-núcleo. Para o termo misto temos

$$H_{el-n} = \sum_{i,\mu} V_n(\vec{R_\mu} - \vec{r_i}),$$

que representa o termo de interação elétron-núcleo.

Resolver a equação de Schrödinger com o hamiltoniano dado pela equação (2.1) é extremamente complicado, pois envolve 10^{23} partículas interagentes, e para tratá-la devemos fazer algumas simplificações.

2.3.1 Aproximação de Born-Oppenheimer

A separação dos movimentos nuclear e eletrônico é quase sempre o primeiro passo para qualquer aplicação da mecânica quântica em cristais. Fisicamente essa separação considera a desigualdade entre as massas dos elétrons e dos núcleos (elétrons são 10^3 a 10^4 vezes mais leves que os núcleos), e portanto se pode imaginar que os núcleos se movem bem mais lentamente que os elétrons. Dessa maneira os núcleos se movem no meio de uma distribuição de carga eletrônica cujas flutuações são rápidas demais para afetá-los.

A aproximação de Born-Oppenheimer consiste em separar os movimentos eletrônicos e nucleares, admitindo que o sistema eletrônico responde adiabaticamente a uma mudança nas coordenadas iônicas. Isto é equivalente a escrever a função de onda total como

$$\Phi(\vec{r},\vec{R}) = \eta(\vec{R})\Psi(\vec{r},\vec{R}), \qquad (2.2)$$

onde $\vec{r} = \vec{r_1}...\vec{r_n} \in \vec{R} = \vec{R_1}...\vec{R_n}$ representam as coordenadas dos elétrons e núcleos respectivamente. Observa-se que a função de onda eletrônica Ψ depende parametricamente de \vec{R} , pois considera-se conhecida uma determinada configuração espacial dos núcleos [10].

Assim, o problema eletrônico torna-se o de uma rede estática para uma dada configuração de núcleos, cujas as autofunções e autoenergias são obtidas resolvendo a equação de Schrödinger na forma

$$[H_{el} + H_{el-n}] \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_{\vec{R}} \Psi(\vec{r}, \vec{R}).$$
(2.3)

Da mesma maneira podemos escrever a equação de Schrödinger para o movimento dos núcleos, contudo as propriedades que desejamos estudar não dependerão desse movimento.

2.3.2 Aproximação do Elétron Independente

A dificuldade com a equação (2.3) está na interação entre os elétrons, pois na ausência desta interação, o problema de muitos corpos seria desacoplado em problemas de um corpo. A *aproximação do elétron independente* consiste em escrever a função de onda eletrônica numa combinação de funções de onda que dependam das coordenadas de um único elétron, seja como um produto delas

$$\Psi(\vec{r}) = \psi_1(\vec{r_1})\psi_2(\vec{r_2})...\psi_n(\vec{r_n})$$
(2.4)

ou como um determinante de Slater. O efeito dos outros (n-1) elétrons podem ser desprezados (aproximação do elétron livre) ou tratado através de um potencial médio efetivo (aproximação de Hartree), podendo considerar ainda efeitos de troca (aproximação de Hartree-Fock) e correlação (Funcional Densidade).

A aproximação do elétron independente se justifica porque o mar de elétrons de um sólido se organiza de forma a efetivamente cancelar, a grandes distâncias, o campo coulombiano de cada elétron. Exceto improváveis vizinhos de curta distância, cada elétron se move independentemente sob a ação do campo elétrico médio produzido por todos os outros.

Se substituirmos a equação (2.4) em (2.3) reduzimos o problema de n elétrons para n problemas de um elétron. Então as autofunções do sistema serão obtidas resolvendo a equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$
(2.5)

O termo $U(\vec{r})$, que inclui a interação média entre os elétrons e o potencial dos núcleos, possui a periodicidade do cristal.

A periodicidade do potencial onde se move quase independentemente cada elétron do cristal tem duas consequências importantes. A primeira é o teorema de Bloch: *os autoestados de energia são funções cujo módulo tem a periodicidade do potencial*. A segunda é que o espectro de cada elétron apresenta bandas de níveis de energia distribuídos quase continuamente, separadas por regiões proibidas onde não há níveis de energia.

2.3.3 Aproximação da Massa Efetiva

Esta aproximação tem sido utilizada extensivamente na literatura para descrever o movimento eletrônico perto do extremo da banda na presença de perturbações fracas tais como campos magnético e elétrico externos [11] em semicondutores. Com o avanço na obtenção de poços quânticos, foi natural extender a aproximação da massa efetiva para se calcular as propriedades eletrônicas em heteroestruturas [12].

A aproximação da massa efetiva consiste em substituir o efeito do potencial periódico do cristal por um tensor massa efetiva, cujos elementos são determinados pela estrutura de banda não perturbada. Dentro dessa descrição cada camada da heteroestrutura comportase como um cristal macroscópico e o problema é encontrar as condições de contorno que as autofunções devem satisfazer nas interfaces.

Seja uma heteroestrutura composta de diferentes materiais semicondutores denotados por A e B. Tomando a direção de crescimento ao longo do eixo z e admitindo a invariância translacional no plano $x \hat{o} y$, teremos a interface em um dado ponto $z = z_i$. Uma vez que os materiais possuem gaps de energia diferentes, haverá uma descontinuidade no extremo da banda de condução (valência), que indicaremos por $\delta E_c(\delta E_v)$. O potencial criado pela interface entre os dois materiais entra apenas na diagonal do nosso hamiltoniano, logo não mistura as autofunções.

Os autoestados serão obtidos resolvendo a equação da massa efetiva dentro de cada material, isto é

$$\sum_{\mu} \left[H^{\alpha}_{\nu\mu} \left(\vec{k} \to -i \vec{\nabla} \right) - \delta_{\nu\mu} \delta E_v \right] F^{\alpha}_{\mu\vec{k}} \left(\vec{r} \right) = E_{\nu\vec{k}} F^{\alpha}_{\nu\vec{k}} \left(\vec{r} \right), \tag{2.6}$$

onde $H^{\alpha}_{\nu\mu}$ é o hamiltoniano cristalino que leva em consideração as interações entre as bandas, ν e μ são os índices das bandas e α identifica as camadas da heteroestrutura, sendo $\alpha = A$ ou B para \vec{r} pertencente à camada A ou B. A função $F^{\alpha}_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ é conhecida como função envelope. Dentro desta aproximação pode-se mostrar que as autofunções da equação de Schrödinger podem ser dadas por

$$\Psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \sum_{\nu} u^{\alpha}_{\nu 0}\left(\vec{r}\right) F_{\nu \vec{k}}\left(\vec{r}\right), \qquad (2.7)$$

onde $u^{\alpha}_{\nu 0}$ é a parte periódica das funções de Bloch no centro da zona de Brillouin desse cristal.

As condições de contorno que as funções envelopes devem satisfazer nas interfaces decorrem da continuidade da autofunção total $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Portanto em $z = z_i$ ocorre que

$$\Psi_{\vec{k}}^{A}(\vec{\rho}, z_{i}) = \Psi_{\vec{k}}^{B}(\vec{\rho}, z_{i}).$$
(2.8)

Isto implica admitir que a parte periódica das funções de Bloch dos materiais sejam iguais, isto é

$$u_{\nu 0}^{A}\left(\vec{r}\right) = u_{\nu 0}^{B}\left(\vec{r}\right) = u_{\nu 0}\left(\vec{r}\right).$$
(2.9)

Das expressões (2.8) e (2.9), juntamente com a ortogonalidade das funções de Bloch, temos que

$$F_{\nu\vec{k}}^{A}(\vec{\rho}, z_{i}) = F_{\nu\vec{k}}^{B}(\vec{\rho}, z_{i}).$$
(2.10)

Com isso temos uma condição de contorno que estabelece a continuidade das funções envelope na interface.

Considerando a invariância translacional do sistema no plano $x \hat{o} y$, as funções envelope em cada região são reescritas na forma

$$F^{\alpha}_{\nu\vec{k}}\left(\vec{\rho},z\right) = \exp\left(i\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{\rho}\right)F^{\alpha}_{\nu\vec{k}_{\parallel}}\left(z\right),\tag{2.11}$$

onde $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$. Desse modo, a equação da massa efetiva para a parte dependente de z da função envelope em cada camada é obtida a partir da solução da equação

$$\sum_{\mu} \left[H^{\alpha}_{\nu\mu} \left(k_z \to -i\partial/\partial z \right) - \delta_{\nu\mu} \delta E_v \right] F^{\alpha}_{\mu n \vec{k}_{\parallel}} \left(z \right) = E_{\nu n \vec{k}_{\parallel}} F^{\alpha}_{\nu n \vec{k}_{\parallel}} \left(z \right), \tag{2.12}$$

onde, $H^{\alpha}_{\nu\mu}$ representa os elementos do hamiltoniano, obtido pelo método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, que será tratado no capítulo 3 e $E_{\nu n \vec{k}_{\parallel}}$ é a energia da *n*-ésima sub-banda.

Caso um campo magnético $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ seja aplicado ao sistema, a função $F_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ será obtida a partir da equação (2.12) fazendo a substituição $\vec{k} \to -i\vec{\nabla} + \frac{e}{\hbar}\vec{A}$, com *e* sendo o módulo da carga do elétron e \vec{A} o potencial vetorial magnético. Por outro lado, se um campo elétrico \vec{F} for aplicado ao sistema deveremos somar na diagonal do hamiltoniano o termo $e\vec{F} \cdot \vec{r}$ [13].

2.4 Propriedades Cristalinas e Eletrônicas

Dentre as várias estruturas cristalinas existentes, a estrutura blenda de zinco recebe uma atenção especial, pois a maioria dos materiais semicondutores de gap direto, tais como, CdTe, se cristalizam nesta forma. A estrutura blenda de zinco consiste de duas redes cúbicas de face centrada deslocadas uma da outra por um quarto de uma das diagonais principais do cubo. Sua rede de Bravais associada é uma rede fcc, logo sua rede recíproca é uma rede bcc, com a primeira zona de Brillouin sendo um octaedro truncado. Na zona de Brillouin certos pontos ou linhas de alta simetria recebem notações específicas, por exemplo, Γ , X ou L (figura (2.3*b*)). A partir das simetrias desses pontos, mediante argumentos de teoria de grupos, podemos obter um hamiltoniano que satisfaz as propriedades cristalinas.



Figura 2.3: (a) Arranjo espacial dos átomos em uma estrutura blenda de zinco; (b) Primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica de face centrada (octaedro truncado). São mostrados também alguns pontos e linhas de alta simetria.

As ligas formados a partir dos compostos binários III-V ou II-VI, rigorosamente, não são estruturas cristalinas, pois a energia potencial produzida pelos íons não possui simetria de translação devido à distribuição aleatória dos átomos nos sítios da rede. A *aproximação* de cristal virtual consiste na troca do potencial real por um potencial médio. Por exemplo, para um composto $A_{1-x}B_xC$, os átomos C se localizam sobre os sítios de uma das redes fcc enquanto os átomos $A \in B$ ocupam aleatoriamente os sítios da segunda rede fcc. Na aproximação de cristal virtual o potencial aleatório criado pelos átomos $B(V_B) \in C(V_C)$ é trocado por um potencial periódico médio tal que $\langle V \rangle = (1-x) V_A + x V_B + V_C$. Assim, a periodicidade da rede é restabelecida, e os estados eletrônicos podem ser descritos em termos de estados de Bloch.

Podemos calcular a estrutura de bandas e as autofunções através de diferentes métodos: o método das ligações fortes, pseudopotencial, ondas planas ortogonalizadas, funções de Green e o método celular [14, 15]. Como exemplo mostramos na figura (2.4a) a estrutura de banda do GaAs cálculada pelo método pseudopotencial [16].



Figura 2.4: (a) Estrutura de bandas do GaAs calculada pelo método pseudopotencial [16]; (b) Estrutura de bandas em torno do ponto Γ para um semicondutor de gap direto mostrando as bandas de condução, buraco leve, buraco pesado e split-off.

Entretanto, quando se deseja estudar propriedades ópticas e de transporte eletrônico dos semicondutores, o cálculo da estrutura de bandas sobre toda a zona de Brillouin é desnecessário. Isto ocorre porque os portadores (elétrons e buracos) se localizam nas proximidades dos extremos das bandas. Portanto, o nosso interesse é calcular a estrutura eletrônica em torno

Materiais	Estrutura Cristalina	Intervalo de Composição
Zn. Mn S	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0, 10$
	wurtzita	$0, 10 < x \leqslant 0, 45$
Zn. Mn So	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0, 30$
	wurtzita	$0, 30 < x \leqslant 0, 57$
$Zn_{1-x}Mn_xTe$	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0,86$
$Cd_{1-x}Mn_xS$	wurtzita	$0 < x \leqslant 0,45$
$Cd_{1-x}Mn_xSe$	wurtzita	$0 < x \leqslant 0,50$
$\operatorname{Cd}_{1-x}\operatorname{Mn}_{x}\operatorname{Te}$	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0,77$
$Hg_{1-x}Mn_xS$	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0,37$
$Hg_{1-x}Mn_xSe$	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0,38$
$Hg_{1-x}Mn_xTe$	blenda de zinco	$0 < x \leqslant 0,75$

Tabela 2.1: Observamos que as ligas ternárias da forma $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ se cristalizam ou na estrutura blenda de zinco ou na estrutura wurtzita, dependendo dos elementos que compõem a liga e da fração molar de Mn.

dos extremos das bandas de semicondutores com gap direto, com o vetor de onda \vec{k} sendo menor que 1/10 da zona de Brillouin (figura (2.4*b*)). Para este propósito o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, introduzido por Bardeen [17] e Seitz [18], se mostra extremamente útil. Posteriormente iremos tratar do formalismo do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

2.5 Semicondutores Magnéticos Diluídos

2.5.1 Estrutura Cristalina

Do ponto de vista da estrutura cristalina, os semicondutores magnéticos diluídos são ligas semicondutoras em que parte de seus sítios é ocupada por íons magnéticos de um elemento de transição [1]. Os mais estudados são aqueles da forma $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$, onde uma fração dos átomos do grupo II é substituída, aleatoriamente, por átomos de Mn. Sua natureza ternária possibilita o controle do parâmetro de rede e dos parâmetros de banda (energia de *gap*, massas efetivas, etc) através da variação da composição de manganês. Por causa dessa controlabilidade, as ligas $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ são excelentes para a preparação de poços quânticos, superredes e outras heteroestruturas semicondutoras. Na tabela (2.1) é mostrada a família $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ com a sua estrutura cristalina e os intervalos de composição. A estrutura de banda das ligas $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ é qualitativamente igual àquela dos compostos $A^{II}B^{VI}$ que possuem a mesma estrutura cristalina. Em particular, elas possuem gaps diretos com os extremos das bandas ocorrendo no ponto Γ . Devido à presença do acoplamento spin-órbita as três bandas de valência (que se originam dos orbitais *p* ligantes) inicialmente degeneradas, levantam parcialmente sua degenerescência. Surge assim um quadrupleto (simetria Γ_8) com J = 3/2 e um dupleto (simetria Γ_7) com J = 1/2, onde J é o momentum angular total. Quantitativamente, a estrutura de banda do $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ se transforma de uma maneira suave do composto $A^{II}B^{VI}$ para o composto tetraédrico MnB^{VI} . Essa evolução não é estritamente linear, no entanto, a variação linear¹ é uma excelente aproximação para uma descrição quantitativa da dependência dos parâmetros da maioria dos compostos com a concentração de Mn.

Dessa forma, na ausência de um campo magnético externo, a principal diferença entre os sistemas ternários II-VI, sem a presença de íons magnéticos, como, por exemplo, o $Cd_{1-x}Zn_xTe$, e os compostos $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$, é que estes possuem a camada 3d com a metade de sua capacidade de acomodação de elétrons. Como conseqüência, podem ocorrer transições eletrônicas dentro da camada 3d, envolvendo a troca de spin dos elétrons. Essas transições, que ocorrem com energias de aproximadamente 2, 2 eV, dominam as propriedades ópticas desses compostos para concentrações de Mn suficientemente altas (x > 0, 1).

2.5.2 Propriedades Magnéticas

As propriedades mais importantes dos semicondutores magnéticos diluídos surgem da camada 3d do manganês. Na presença de um campo magnético externo, as propriedades eletrônicas dos semicondutores magnéticos diluídos são fortemente influenciadas pela interação de troca entre os elétrons d e os portadores livres das bandas criados, por exemplo, por excitação óptica. Isto ocorre por que o campo magnético orienta os momentos magnéticos localizados, criando uma componente diferente de zero para a componente dos spins de Mn ao longo da

¹O gap de energia do $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x$ Se é uma exceção dessa regra pois apresenta um arco (*bowing*) para pequenos valores de concentração x [19].

direção do campo.

Essa interação de troca entre os elétrons d e os portadores das bandas é descrita, nas vizinhanças do ponto Γ , pelo hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{ex} = \sum_{\vec{R}_i} J(\vec{r} - \vec{R}_i) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma}, \qquad (2.13)$$

onde \vec{S}_i é o operador de spin do íon magnético localizado no sítio \vec{R}_i ($S_i = 5/2$), $\vec{\sigma}$ é o operador de spin dos portadores e $J(\vec{r} - \vec{R}_i)$ é a integral de troca. Como os portadores possuem funções de onda espacialmente estendidas, eles interagem simultaneamente com um grande número de íons de Mn. Isto permite usar a aproximação de campo médio, que consiste em trocar os operadores de spin dos íons de Mn por uma média térmica $\langle \vec{S} \rangle$. Na ausência do campo magnético externo essa média é nula, porém, quando o campo é aplicado ao sistema, a média térmica terá uma componente diferente de zero na direção do campo, $\langle \vec{S}_B \rangle$. Além disso, na aproximação do cristal virtual, a soma sobre os íons é trocada pela soma sobre os sítios da sub-rede dos cátions multiplicada pela fração molar dos íons de Mn. Assim

$$H_{ex} = \left\langle \vec{S}_B \right\rangle \cdot \vec{\sigma} \sum_{\vec{R}_i} J(\vec{r} - \vec{R}_i) = x \left\langle \vec{S}_B \right\rangle \cdot \vec{\sigma} \sum_{\vec{R}} J(\vec{r} - \vec{R}), \qquad (2.14)$$

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

A compreensão das propriedades magnéticas dos semicondutores magnéticos diluídos é limitada para alguns casos limites, como por exemplo, em regime de baixas ² concentrações [1]. Nesse limite, onde os momentos magnéticos dos íons não interagem, a média térmica dos operadores de spin é dada por

$$\langle S_B \rangle = -\frac{5}{2} \mathcal{B}_{5/2} \left(\frac{\frac{5}{2} g_{Mn} \mu_B B}{k_B T} \right), \qquad (2.15)$$

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

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

²Esse regime de baixa concentração depende do composto II-VI considerado. No composto $Hg_{1-x}Mn_xTe$ por exemplo, uma concentração $x \ge 0,0017$ já é considerada alta [20].

Para trabalharmos com valores arbitrários de $x \in T$, utilizaremos o modelo de Gaj [21]. Este modelo fenomenológica basea-se na semelhança existente entre a magnetização observada experimentalmente e a função de Brillouin, que descreve a magnetização no caso de momentos magnéticos não interagentes. Desse modo, a componente da média térmica dos spins de Mn na direção do campo aplicado é descrita pela função de Brillouin ajustando o valor de saturação e introduzindo uma temperatura efetiva,

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

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

$$\langle S_B \rangle = -S_0(x) \mathcal{B}_{5/2} \left(\frac{\frac{5}{2} g_{Mn} \mu_B B}{k_B T_{ef}} \right).$$
(2.16)

A utilidade da equação (2.16) encontra-se no fato de que os parâmetros $S_0 \in T_0$ podem ser tabelados como uma função da fração molar de Mn para cada semicondutor magnético diluído [21]. Os valores de saturação S_0 são menores que 5/2 e diminuem com o aumento da concentração dos íons magnéticos, sugerindo que uma fração dos íons de Mn formam pares ou complexos com ordenamento antiferromagnético que reduzindo o momento magnético final. Os íons restantes se alinham na direção do campo magnético aplicado de acordo com a função de Brillouin com uma T_{ef} maior que a temperatura T, o que também reflete uma interação antiferromagnética entre os íons; T_0 é positivo e aumenta com a concentração.

Capítulo 3 Cálculo da Estrutura Eletrônica

3.1 O Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Até 1955 somente dois conjuntos completos de funções eram usados para resolver problemas de elétrons em sólidos: as funções de Bloch, autofunções do hamiltoniano de um elétron caracterizadas por um índice de banda n e um vetor de onda \vec{k} , e as funções de Wannier, definidas em termos do conjunto de Bloch e caracterizados por um índice de banda n e um vetor de translação da rede \vec{R} . Em 1955, Luttinger e Kohn [11] introduziram um novo conjunto completo de funções. Mostraram que, se as funções de Bloch são conhecidas num ponto particular \vec{k}_0 do espaço \vec{k} , é possível construir um novo conjunto completo de funções, caracterizados por um índice de banda n e vetor de onda \vec{k} e dependente do conjunto de Bloch no ponto \vec{k}_0 . Dessa forma, as funções de Bloch, em cada \vec{k} , podem ser expandidas em termos desse conjunto.

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

$$H\psi\left(\vec{r}\right) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V\left(\vec{r}\right) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}V\left(\vec{r}\right) \cdot \vec{p}\right]\psi\left(\vec{r}\right) = \epsilon\psi\left(\vec{r}\right),\tag{3.1}$$

onde m_0 é a massa do elétron livre. O terceiro termo no hamiltoniano é devido ao acoplamento spin-órbita, onde $\vec{\sigma}$ é a matriz de Pauli. Este hamiltoniano é invariante sob translações por vetores da rede de Bravais. Logo, se $\psi(\vec{r})$ for solução da equação (3.1), $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ também será. Assim, $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ difere de $\psi(\vec{r})$ no máximo por uma constante com módulo unitário; caso contrário, a autofunção poderá crescer para o infinito se repetirmos a translação indefinidamente. Assim, a solução geral (normalizada) da equação anterior é dada por

$$\psi_{\nu\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\nu\vec{k}}\left(\vec{r}\right),$$
(3.2)

onde $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\nu\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ é uma função periódica. $N = \Omega/\Omega_0$ é o número de células unitárias do cristal, sendo Ω o volume do cristal e Ω_0 o volume de uma célula unitária. Esse é o teorema de Bloch e as autofunções $\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ são chamadas de funções de Bloch. A energia é dada por $\epsilon = \epsilon_{\nu}(\vec{k})$, onde ν se refere à banda e \vec{k} é o vetor de onda do elétron. Da equação (3.2) vemos que as funções $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ estão normalizadas no volume de uma célula unitária.

Substituindo as funções de Bloch (3.2) na equação (3.1) obtemos uma equação de autovalores, no volume de uma célula unitária do cristal, para a parte periódica das funções de Bloch $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$:

$$H(\vec{k})u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \left[H_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\vec{\nabla}V(\vec{r})\times\vec{k}\cdot\vec{\sigma}\right]u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}), \quad (3.3)$$

onde

$$H_0 = H(k=0) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \cdot \vec{p}.$$
 (3.4)

O quarto termo na equação (3.3) é proporcional a \vec{k} e tem sua origem na interação spin-órbita. Como este termo é muito pequeno quando comparado com o último termo da equação (3.4) será desprezado [22]. O vetor de onda \vec{k} aparece na equação (3.3) apenas como um parâmetro, assim, para cada valor desse parâmetro, as funções $u_{\nu\vec{k}}(\vec{r})$ formam um conjunto completo.

Através das soluções (3.2) vemos que aquelas com \vec{k} imaginário devem ser descartadas, uma vez que estas autofunções não serão bem comportadas. Como existem alguns intervalos de energia que correspondem a valores imaginários de \vec{k} , surgem as bandas de energias proibidas ou gaps de energia. Os intervalos de energia, onde existem soluções aceitáveis são conhecidos como bandas de energia permitidas.

Modelo de Kane

A localização dos portadores nas proximidades dos extremos das bandas torna essa

região muito importante para o estudo das propriedades eletrônicas e ópticas nos materiais semicondutores. Devido a este fato podemos fazer algumas simplificações no cálculo da estrutura eletrônica. A aproximação de Kane [22] tem por objetivo obter uma forma mais simples de se calcular a estrutura eletrônica.

Na implementação do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ existem diversos modelos, que se diferenciam por incluir ou não determinadas bandas ou efeitos. Se a estrutura de banda de interesse é perto de uma única banda, tal como o extremo da banda de condução e o acoplamento com as outras bandas é desprezível, então nós podemos aplicar a teoria de perturbação ordinária. Quando somente duas bandas interagem fortemente, como no caso das bandas de buraco pesado e buraco leve, teremos um hamiltoniano 4×4 (modelo de Luttinger [23]). Se a banda *split-off* também for significativa, como por exemplo para o GaN, o hamiltoniano resultante será 6×6 (modelo de Luttinger-Kohn [11]).

No modelo de Kane, o acoplamento entre as bandas de condução (Γ_6), valência (Γ_8) e *split-off* (Γ_7) é considerado exatamente. A interação dessas bandas com as demais bandas é obtida via teoria de pertubação de Löwdin [24]. A interação spin-órbita e efeitos de *spin* também estão incluídos no modelo e são essenciais para se obter as propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras. Assim, o modelo de Kane deve ser usado sempre que estivermos estudando materiais com gaps de energia tais que a interação entre as bandas de condução, valência e *split-off* não puderem ser desprezadas, resultando assim em um hamiltoniano 8×8 . Nesse trabalho usaremos a aproximação de Kane, mas não incluiremos a banda de split-off, resultando em um hamiltoniano 6×6 .

Suponhamos que para $\vec{k} = 0$ as soluções da equação (3.3) sejam conhecidas, isto é,

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

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

$$u_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\mu} c_{\nu\mu}(\vec{k}) u_{\mu0}(\vec{r}).$$
(3.5)

Substituindo a equação anterior na equação (3.3), multiplicando por $u_{\mu 0}^*(\vec{r})$ e integrando sobre uma célula unitária obtemos a seguinte equação matricial de autovalores:

$$\sum_{\mu} \left[H_{\nu\mu} - \epsilon_{\nu}(\vec{k}) \delta_{\nu\mu} \right] c_{\nu\mu} = 0, \qquad (3.6)$$

onde,

$$H_{\nu\mu} = H_{\nu\mu}(\vec{k}) = \left[\epsilon_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\right] \delta_{\nu\mu} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p_{\nu\mu}^{\alpha}$$
(3.7)

е

$$p_{\nu\mu}^{\alpha} = \int_{\Omega_0} u_{\nu0}^* \left(\vec{r} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) u_{\mu0} \left(\vec{r} \right) d\vec{r},$$

com $\alpha = x, y \in z$. Embora a equação (3.6) seja correta para qualquer valor de \vec{k} , ela é mais útil quando \vec{k} está próximo de zero, de modo que a parte não diagonal do hamiltoniano,

$$\frac{\hbar}{m_0} \sum_{\alpha} k_{\alpha} p^{\alpha}_{\nu\mu}$$

possa ser tratada como uma perturbação.

Na aproximação de Kane o hamiltoniano (3.7) é tratado perturbativamente através da teoria de perturbação de Löwdin. No método de Löwdin, os estados são separados em dois conjuntos $\mathcal{A} \in \mathcal{B}$. Assim, a equação (3.5) deve ser reescrita como

$$u_{\nu\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \sum_{\mu}^{\mathcal{A}} c_{\nu\mu}\left(\vec{k}\right) u_{\mu0}\left(\vec{r}\right) + \sum_{\gamma}^{\mathcal{B}} c_{\nu\gamma}\left(\vec{k}\right) u_{\gamma0}\left(\vec{r}\right)$$

onde os índices ν, μ pertencem ao conjunto \mathcal{A} e γ ao conjunto \mathcal{B} . No conjunto \mathcal{A} estão os estados que podem interagir fortemente entre si, mas interagem fracamente com os estados de \mathcal{B} . As interações entre os conjuntos \mathcal{A} e \mathcal{B} são então removidas iterativamente como na teoria de perturbação ordinária, sem tentar remover elementos de matriz conectando estados em \mathcal{A} . Desse modo, obtemos um hamiltoniano *renormalizado* H' que deve ser diagonalizado exatamente, dado por:

$$H_{\nu\mu}' = H_{\nu\mu} + \sum_{\gamma}^{\mathcal{B}} \frac{H_{\nu\gamma} H_{\gamma\mu}}{H_{\nu\nu} - H_{\beta\beta}},\tag{3.8}$$

Para o conjunto \mathcal{A} são escolhidos os estados de condução e valência (elétron, buraco pesado, buraco leve e *split-off*, todos duplamente degenerados), figura (2.4 *b*), colocando todas as outras bandas no conjunto \mathcal{B} .
Através da técnica de Clebsch-Gordon para a adição de momentos angulares obtemos no conjunto \mathcal{A} as funções de base que diagonalizam a interação spin-órbita, isto é,

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

onde as fases foram escolhidas de forma a satisfazer o teorema de Kramers [25], consequentemente, as quatro últimas funções de base são obtidas das quatro primeiras aplicando o operador de Kramers. As funções $|S\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle \in |Z\rangle$ são as funções de Bloch do cristal, que possuem simetria dos orbitais atômicos $s \in p$. Dessa forma, usando a equação (3.8) na equação (3.6), a equação de autovalores que temos que resolver é:

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

onde

$$H_{\nu\mu}' = \left[\epsilon_{\nu}\left(0\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\right]\delta_{\nu\mu} + \frac{\hbar}{m_0}\sum_{\alpha}k_{\alpha}p_{\nu\mu}^{\alpha} + \frac{\hbar^2}{m_0^2}\sum_{\gamma}^{\mathcal{B}}\sum_{\alpha,\beta}\frac{k_{\alpha}k_{\beta}p_{\nu\gamma}^{\alpha}p_{\gamma\mu}^{\beta}}{\epsilon_{\nu}\left(0\right) - \epsilon_{\gamma}\left(0\right)}.$$
 (3.10)

A obtenção dos elementos de matriz permitidos do hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ depende de considerações de simetria e análise de teoria de grupo. Segundo Weiler *et al.* [26] desprezando os efeitos da falta de simetria de inversão da estrutura blenda de zinco, aproximação quasegermânio, o hamiltoniano 6×6 pode ser escrito conforme a tabela (3.1), onde utiliza-se as seguintes definições:

$$\begin{cases} k^{2} = k_{x}^{2} + k_{y}^{2} + k_{z}^{2}, & k^{\pm} = k_{x} \pm ik_{y}, \\ F_{3}^{1} = 2k_{z}^{2} - k_{x}^{2} - k_{y}^{2}, & F_{3}^{2} = \sqrt{3} \left(k_{x}^{2} - k_{y}^{2}\right), \\ F_{4}^{\pm} = \left\{k_{z}, k^{\pm}\right\} = k_{z}k^{\pm} + k^{\pm}k_{z}, & F_{4}^{z} = \left\{k_{x}, k_{y}\right\}, \\ H_{z} = i \left[k_{x}, k_{y}\right], & H^{\pm} = \pm \left[k^{\pm}, k_{z}\right]. \end{cases}$$

$$(3.11)$$

Em nosso hamiltoniano estamos considerando a referência de energia no topo da banda de valência, onde $\epsilon_v(0) = 0$, assim $E_g = \epsilon_c(0) - \epsilon_v(0)$ é o gap de energia do semicondutor. Os parâmetros que constam no hamiltoniano estão listados no Apêndice A.

3.2 Hamiltoniano de Troca

Para incluirmos interação de troca entre os elétrons d e os portadores das bandas na presença de um campo magnético, vamos considerar o caso geral onde o campo é aplicado numa direção qualquer e depois particularizá-lo. Para obtermos o hamiltoniano de troca, faremos uma rotação do sistema de coordenadas no plano $x \partial y$, como mostrado na figura (3.1). Desse modo, um campo magnético aplicado $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$, possui neste novo sistema de coordenadas apenas duas componentes, uma ao longo do eixo z e outra ao longo do eixo y'.



Figura 3.1: Rotação do sistema de coordenadas no plano $x \hat{o} y$, isto é, $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z)$. Neste novo sistema de coordenadas o campo magnético possui apenas duas componentes, uma ao longo do eixo z e outra ao longo do eixo y'.

Usando as funções de base mostradas na equação (3.9), o hamiltoniano de troca (2.14)

,	$-\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [\gamma_3 F_4^- + (\kappa + \frac{7}{4}q) H^-]$	$-rac{\hbar^2}{m_0}(\kappa+rac{5}{2}q)H^+$	$-rac{1}{\sqrt{6}}Pk^+$	$\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 + i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z\right)$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1}{2}k^2 + \frac{\gamma_2}{2}F_3^1\right) \\ -\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{1}{4}q)H_z$
	0	$-\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m_0}qH^+$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{\hbar^2}{mq}[\gamma_3 F_4^-]$ $+(\kappa+\frac{\eta}{4}q)H^-]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk^{-}$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1}{2}k^2 - \frac{\gamma_2}{2}F_3^1\right) \\ +\frac{3}{2}\frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{9}{4}q)H_z$	$\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 - i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z \right)$
	$-rac{\hbar^2}{m_0}(N_1+rac{1}{2})H^-$	0	$\sqrt{rac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{E_g}{+\frac{\hbar^2}{m_0}(F+\frac{1}{2})k^2} - \frac{\frac{\pi^2}{m_0}(N_1+\frac{1}{2})H_z}{m_0(N_1+\frac{1}{2})H_z}$	$rac{1}{\sqrt{2}}Pk^+$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}Pk^{-}$
	$-rac{1}{\sqrt{6}}Pk^{-}$	$\frac{\hbar^2}{m_0} \big(\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 - i \sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z \big)$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1}{2}k^2 + \frac{\gamma_2}{2}F_3^1\right) \\ +\frac{\frac{1}{2}}{\frac{\hbar^2}{m_0}} (\kappa + \frac{1}{4}q)H_z$	$\sqrt{rac{2}{3}}Pk_z$	$-rac{\sqrt{3}}{2}rac{\hbar^2}{m_q}[\gamma_3 F_4^+] + (\kappa+rac{4}{4}q)H^+]$	$-rac{\hbar^2}{m_0}(\kappa+rac{5}{2}q)H^-$
	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk^+$	$-\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1}{2}k^2 - \frac{\gamma_2}{2}F_3^1\right) \\ -\frac{3}{2}\frac{\hbar^2}{m_0} (\kappa + \frac{9}{4}q)H_z$	$\frac{\hbar^2}{m_0} (\frac{\gamma_2}{2} F_3^2 + i\sqrt{3} \frac{\gamma_3}{2} F_4^z)$	0	$-rac{3}{4}rac{\hbar^2}{m_0}qH^-$	$rac{\sqrt{3}}{2}rac{\hbar^2}{m_0}[\gamma_3F_4^+ -(\kappa+rac{7}{4}q)H^+]$
	$\frac{E_g}{+\frac{\hbar^2}{m_0}(F+\frac{1}{2})k^2} + \frac{\hbar^2}{\frac{\hbar^2}{m_0}(N_1+\frac{1}{2})H_z}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk^{-}$	$-rac{1}{\sqrt{6}}Pk^+$	$-rac{\hbar^2}{m_0}(N_1+rac{1}{2})H^+$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$

Tabela 3.1: hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ obtido a partir do trabalho de Weiler et al. [26].

ſ

Т

Т

Т

toma a forma

$$H_{ex} = \begin{bmatrix} 3A\cos\phi & 0 & 0 & 0 & -3A\xi^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3B\cos\phi & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}B\xi^* & -\sqrt{6}B\xi^* \\ 0 & 0 & -B\cos\phi & 0 & 0 & \sqrt{3}B\xi^* & 2B\xi & \sqrt{2}B\xi \\ 0 & 0 & 0 & B\cos\phi & 0 & -\sqrt{6}B\xi^* & \sqrt{2}B\xi & B\xi \\ -3A\xi & 0 & 0 & 0 & -3A\cos\phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}B\xi & -\sqrt{6}B\xi & 0 & -3B\cos\phi & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}B\xi & 2B\xi^* & \sqrt{2}B\xi^* & 0 & 0 & B\cos\phi & 0 \\ 0 & -\sqrt{6}B\xi & \sqrt{2}B\xi^* & B\xi^* & 0 & 0 & 0 & -B\cos\phi \end{bmatrix}$$
(3.12)

onde $\xi = e^{i(\theta + \pi/2)} \operatorname{sen} \phi$, com os ângulos $\theta \in \phi$ definidos na figura (3.1). Temos ainda que

$$A = -\frac{1}{6} N_0 \alpha x \left\langle S_B \right\rangle \quad e \quad B = -\frac{1}{6} N_0 \beta x \left\langle S_B \right\rangle, \tag{3.13}$$

onde $\alpha = \langle S | J(\vec{r}) | S \rangle$ e $\beta = \langle X | J(\vec{r}) | X \rangle = \langle Y | J(\vec{r}) | Y \rangle = \langle Z | J(\vec{r}) | Z \rangle$ são as integrais de troca [27] e N_0 é o número de células unitárias por unidade de volume.

Num caso particular em que o campo magnético seja aplicado na direção de crescimento z, o hamiltoniano de troca é obtido fazendo-se o ângulo $\phi = 0$. Com isso H_{ex} torna-se diagonal e seu efeito é de apenas renormalizar a descontinuidade das bandas nas interfaces, levantando também as degenerescências de spin.

3.3 Efeitos de Tensão

Uma outra característica de semicondutores semimagnéticos é apresentarem uma forte dependência do gap de energia e do parâmetro de rede com a concentração do íon magnético. Dessa forma, uma propriedade inerente dessas heteroestruturas é que elas contém camadas tensionadas, modificando as descontinuidades das bandas nas interfaces e levantando a degenerescência dos estados de buraco leve e pesado no ponto Γ . Por outro lado, quando o cristal sofre uma deformação uniforme ele mantém sua propriedade de ser periódico, de tal forma que o teorema de Bloch pode ainda ser aplicado.

Consideraremos os efeitos de tensão através do modelo de Pikus-Bir [28] para o caso de cristais cúbicos com tensão homogênea biaxial. Este modelo é utilizado para descrever camadas semicondutoras tensionadas pseudomórficas crescidas ao longo da direção (001). O vetor posição \vec{r} para um dado átomo da rede não deformada está relacionado com o vetor posição \vec{r}' para uma rede deformada pela relação,

$$x'_{i} = x_{i} + \sum_{j=1}^{3} \varepsilon_{ij} x_{j} \; ; \; i = 1, 2, 3 \tag{3.14}$$

onde x'_i e x_i são as componentes dos vetores \vec{r}' e \vec{r} , respectivamente, e $\varepsilon_{ij} = (x'_i - x_i)/x_j$ são as componentes do tensor das deformações. Da equação (3.14) pode ser verificado que o traço da matriz $\bar{\varepsilon}$ é igual à razão da variação do volume do cristal sob uma deformação uniforme por unidade de volume, isto é,

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

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

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

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

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

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

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

Das relações anteriores vemos que um cristal uniformemente deformado é ainda periódico, exceto que o potencial cristalino $V(\vec{r})$ deve ser trocado pelo novo potencial $V_{\varepsilon}(\vec{r'})$. Assim, a equação de Schrödinger no sistema de coordenadas do cristal deformado $\vec{r'}$ toma a forma (ver equação (3.3))

$$\left[H\left(\vec{k}\right) + H^{\varepsilon}\right]u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}\left(\vec{r}\right) = \left[H\left(\vec{k}\right) + \sum_{\alpha,\beta}\left(D^{\alpha\beta} - 2\frac{\hbar}{m_{0}}k_{\alpha}p_{\beta}\right)\varepsilon_{\alpha\beta}\right]u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}\left(\vec{r}\right) = \epsilon u_{\nu\vec{k}}^{\varepsilon}\left(\vec{r}\right),$$

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

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

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

$$\begin{cases}
H_{11}^{\varepsilon} = H_{44}^{\varepsilon} = H_{el}^{\varepsilon} = a_c Tr(\bar{\varepsilon}) \\
H_{22}^{\varepsilon} = H_{55}^{\varepsilon} = H_{hh}^{\varepsilon} = a_v Tr(\bar{\varepsilon}) + \frac{b}{2} \left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}\right) \\
H_{33}^{\varepsilon} = H_{66}^{\varepsilon} = H_{lh}^{\varepsilon} = a_v Tr(\bar{\varepsilon}) - \frac{b}{2} \left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}\right)
\end{cases}$$
(3.15)

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

Da equação (3.15) vemos que H^{ε} é diagonal, e seu efeito é modificar o gap de energia dos cristais tensionados e levantar a degenerescência entre o buraco leve e o buraco pesado no ponto Γ , sem levantar as degenerescências de spin. Esse hamiltoniano deve então ser adicionado ao hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ mostrado na tabela 3.1. Reescrevendo a equação (3.15) em termos das componentes do tensor elástico C_{ij} teremos,

$$\begin{cases}
H_{el}^{\varepsilon} = 2a_c \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} \\
H_{hh}^{\varepsilon} = 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} + \frac{b}{2} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} \\
H_{lh}^{\varepsilon} = 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel} - \frac{b}{2} \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{\parallel}
\end{cases}$$
(3.16)

3.4 Método Numérico

Descreveremos agora o método numérico utilizado para resolver a equação da massa efetiva. Na aproximação da massa efetiva k_z é trocado pelo operador diferencial $-i\partial/\partial z$, assim, o hamiltoniano matricial multi-banda **H** obtido pelo método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (tabela 3.1) deve ser simetrizado, uma vez que os parâmetros desse hamiltoniano dependem explicitamente da direção de crescimento, eixo z. Na forma simetrizada temos

$$\mathbf{H}\left(k_{z} \to -i\partial/\partial z\right) = \mathbf{D_{0}} + \frac{1}{2}\left\{\mathbf{D_{1}}, \frac{\partial}{\partial z}\right\} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{D_{2}}\frac{\partial}{\partial z},\tag{3.17}$$

onde $\mathbf{D}_{\mathbf{i}}$ é a matriz dos coeficientes de $(\partial/\partial z)^i$ de $\mathbf{H} \in \{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ é o anticomutador entre as quantidades $\mathbb{A} \in \mathbb{B}$.

Usando o método das diferenças finitas de três pontos [29] transformamos o operador diferencial matricial (3.17) em um sistema de equações algébricas sobre uma rede discreta uniforme com N pontos. Logo, a equação (2.12) toma a forma

$$\mathbf{M}_{i-1}\mathbf{F}_{i-1} + \mathbf{M}_i\mathbf{F}_i + \mathbf{M}_{i+1}\mathbf{F}_{i+1} = E\mathbf{F}_i, \qquad (3.18)$$

onde

$$\mathbf{M}_{i\pm 1} = \frac{\mathbf{D}_{2}^{i\pm 1/2}}{\delta^{2}} - \frac{\mathbf{D}_{1}^{i} + \mathbf{D}_{1}^{i\pm 1}}{4\delta} \quad ; \quad \mathbf{M}_{i} = \mathbf{D}_{0}^{i} - \frac{\mathbf{D}_{2}^{i-1/2} + \mathbf{D}_{2}^{i+1/2}}{\delta^{2}} \cdot$$
(3.19)

Nesta equação $\delta = z_{i+1} - z_i$ é o intervalo de discretização do eixo z e i representa o índice espacial, figura (3.2); os índices $n \in \vec{k}_{\parallel}$ foram omitidos.



Figura 3.2: Discretização uniforme do eixo z. O intervalo de discretização é constante e igual $a \ \delta = z_{i+1} - z_i$, com i representando o índice espacial.

As equações (3.18) podem também ser escritas na forma matricial $\mathbf{\bar{H}}\mathbf{\bar{F}} = E\mathbf{\bar{F}}$, resultando em uma equação de autovalores matricial algébrica.

3.4.1 O Método da Potência Inversa

Para obtermos as soluções dessa equação usaremos um método numérico iterativo conhecido como método da potência inversa [30,31]. Para isso, vamos considerar que a matriz $\mathbf{\bar{H}}$ possui autovetores $\mathbf{\bar{F}_1}, \mathbf{\bar{F}_2}, \ldots, \mathbf{\bar{F}_n}$ e correspondentes autovalores E_1, E_2, \ldots, E_n . Assim, uma função inicial $\mathbf{\bar{F}}^{(0)}$ pode ser expandida como uma combinação linear destes autovetores:

$$\bar{\mathbf{F}}^{(0)} = a_1 \bar{\mathbf{F}}_1 + a_2 \bar{\mathbf{F}}_2 + \ldots + a_n \bar{\mathbf{F}}_n.$$
(3.20)

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

$$\left(\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I}\right)^{-m} \bar{\mathbf{F}}^{(0)} = \frac{a_1 \mathbf{F_1}}{\left(E_1 - \lambda\right)^m} + \frac{a_2 \mathbf{F_2}}{\left(E_2 - \lambda\right)^m} + \dots + \frac{a_n \mathbf{F_n}}{\left(E_n - \lambda\right)^m},\tag{3.21}$$

onde λ é um parâmetro ajustável chamado *shift*, **I** é a matriz identidade e m um número inteiro. Se λ for escolhido de modo que ele seja uma boa aproximação para E_i , teremos $|E_i - \lambda| < |E_j - \lambda|$ para todos os j diferentes de i. Deste modo, para um número m suficientemente grande, o resultado da operação (3.21) será um múltiplo de $\mathbf{\bar{F}}_i$, isto é, terá uma componente dominante nesta direção (desde que $a_i \neq 0$). Além disso, quanto mais próximo de E_i for λ , menor será m para obtermos $\mathbf{\bar{F}}_i$ dentro de uma determinada precisão. Deve ser observado também que não existe nada de especial em relação ao autovalor E_i , isto é, o shift λ pode ser escolhido de tal forma que tenha um valor que seja próximo de qualquer um dos autovalores de $\mathbf{\bar{H}}$. A equação (3.21) pode então ser escrita aproximadamente como

$$\left(\bar{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I}\right)^{-m} \bar{\mathbf{F}}^{(0)} \approx \frac{a_i \bar{\mathbf{F}}_i}{\left(E_i - \lambda\right)^m},\tag{3.22}$$

de onde o autovetor $\mathbf{\bar{F}}_i$ e o autovalor E_i podem ser obtidos. Da mesma forma, todos os outros autovalores e autovetores de $\mathbf{\bar{H}}$ podem ser obtidos variando de forma conveniente o valor de λ . Por exemplo, em uma heteroestrutura todas as funções envelope e autoenergias dos estados ligados podem ser obtidas variando λ para valores de energias desde o fundo até o topo do poço de potencial. Para obtermos os autovalores correspondentes aos estados degenerados usamos a técnica de ortonormalização de Gram-Schmidt [32].

As principais características desse método é que ele tem se mostrado muito estável e de convergência bastante rápida¹. Além disso, ele permite estudar poços quânticos com formas arbitrárias.

Além disso, para terminarmos o processo iterativo devemos adotar um critério de convergência. Nesse trabalho o critério é que a diferença entre os autovalores E_i entre duas iterações consecutivas deve ser menor do que 10^{-8} meV, isto é, $|E_i^{(m)} - E_i^{(m-1)}| < 10^{-8}$ meV.

Quanto à função inicial $\mathbf{\bar{F}}^{(0)}$, a única restrição é que ela deve possuir todos os coeficientes a_i diferentes de zero. No entanto, para aumentarmos a velocidade de convergência, escolhemos não apenas uma única função inicial $\mathbf{\bar{F}}^{(0)}$, mas sim, uma função para cada estado. Esta escolha

¹Para aumentarmos a velocidade da convergência, cada nova iteração é iniciada com um novo shift $\lambda = E_i^{(m-1)}$ e com uma nova função $\bar{\mathbf{F}}^{(m-1)}$.

é feita de tal forma que cada uma dessas funções possua características da autofunção de cada estado, como, por exemplo, o número de zeros. Dessa forma, escolhemos como funções iniciais os autoestados do oscilador harmônico, uma vez que elas possuem as características desejadas e, além disso, podem ser facilmente implementadas numericamente.

Capítulo 4 Éxcitons

4.1 Introdução

O conceito de éxciton foi introduzido por Frenkel em 1931 [33], e a sua idéia é que quando um material absorve luz, cada átomo é individualmente excitado e esta excitação propaga-se pelo cristal devido às interações entre os átomos. No modelo apresentado por Frenkel, a função de onda do éxciton é descrita como uma combinação linear de funções de onda de cada elétron do cristal.

Um outro modelo para descrever o éxciton foi proposto por Wannier em 1937 [34]. Considerando a aproximação de partícula independente, o estado fundamental de um material isolante ou semicondutor apresenta bandas de energia completamente vazias. Quando um material absorve radiação e a energia do fóton incidente é suficiente para remover um elétron da banda de valência para a banda de condução, dá-se origem a um portador de carga positiva na banda de valência, chamado buraco. No modelo de Wannier, o éxciton é formado pelo par interagente elétron-buraco. Devido a interação coulombiana, o estado excitado de mais baixa energia é um estado ligado do tipo estado fundamental do átomo de hidrogênio. Basicamente, a diferença entre os dois modelos depende da força de interação entre os átomos do material. Nos cristais iônicos e moleculares, os elétrons estão fortemente ligados aos buracos e cada um com o outro dentro da mesma cela unitária. Estes éxcitons são conhecidos como *éxcitons de Frenkel.* Na maioria dos semicondutores, a interação coulombiana é fortemente blindada via constante dielétrica do material. Com isso, os elétrons e os buracos estão fracamente ligados. Tais éxcitons são conhecidos como *éxcitons de Wannier*. Uma vez que nosso interesse são materiais semicondutores do tipo II-VI, as referências que se seguem em relação ao éxciton correspondem ao modelo de Wannier.

4.2 Propriedades Gerais

A descrição matemática mais simples do éxciton é dada pelo modelo hidrogenóide. Dessa forma, o primeiro estado excitado do cristal é formado por um elétron de massa m_e^* e carga -e na banda de condução e um buraco de massa m_h^* e carga +e na banda de valência. Dentro da aproximação da massa efetiva, o hamiltoniano desse sistema pode ser escrito como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon |\vec{r_e} - \vec{r_h}|},\tag{4.1}$$

onde m_e^* e m_h^* representam as massas efetivas do elétron e buraco respectivamente. Como o éxciton pode se estender por vários parâmetros de rede, consideramos que a interação coulombiana é blindada pela constante dielétrica do meio. Essa consideração só se justifica se o resultado da equação

$$H\Psi\left(\vec{r}_{e},\vec{r}_{h}\right) = E\Psi\left(\vec{r}_{e},\vec{r}_{h}\right) \tag{4.2}$$

mostrar que a distância média do par elétron-buraco é muito maior que o parâmetro de rede do cristal em questão.

A melhor maneira de abordar o problema é escrever a equação (4.1) em termos das coordenadas do centro de massa. A posição relativa entre as duas partículas é

$$\vec{r} = \vec{r_e} - \vec{r_h},\tag{4.3}$$

enquanto a posição do centro de massa do sistema fica definido por

$$\vec{R} = \frac{m_e^* \vec{r_e} + m_h^* \vec{r_h}}{m_e^* + m_h^*}.$$
(4.4)

Depois de alguma manipulação algébrica, reescrevemos o hamiltoniano em termos dessas coordenadas e a equação de Schrödinger fica dada por

$$\left[\frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon r}\right]\Psi(\vec{R},\vec{r}) = E_{nK}\Psi(\vec{R},\vec{r})$$
(4.5)

onde $M = m_e^* + m_h^*$ é a massa total, $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ é a massa reduzida do par elétron-buraco, $\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{R}}$ é o operador relacionado ao movimento do centro de massa do éxciton, $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}}$ é o operador relacionado ao movimento relativo do par elétron-buraco.

Se considerarmos como referência a energia no topo da banda de valência, a energia E_{nK} pode ser dada por

$$E_{nK} = E_g - E_{exc},\tag{4.6}$$

onde E_{exc} é a energia excitônica e E_g é a energia de gap do material. Da equação (4.6), vemos que se desconsiderarmos a interação coulombiana entre eles a energia deste estado é exatamente o valor do gap E_g , caso contrário existirão estados ligados do par elétron-buraco e o cristal terá estados com energia menor que E_g .

Uma vez que separamos o hamiltoniano em uma parte que descreve o movimento do centro de massa e outra que que descreve o movimento relativo, podemos aplicar o método de separação de variáveis e escrever a função de onda como

$$\Psi(\vec{R},\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}} \phi(\vec{r}), \qquad (4.7)$$

onde Ω é o volume do cristal e $\phi(\vec{r})$ satisfaz a seguinte equação:

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon r}\right]\phi(\vec{r}) = \mathcal{E}_n\phi(\vec{r}).$$
(4.8)

A equação (4.8) é a equação do tipo átomo de hidrogênio, onde os estados ligados são descritos pelas autofunções ϕ_{nlm} com autoenergias \mathcal{E}_n . Em particular, para o estado fundamental temos:

$$\phi_{000}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi (a_0^*)^3}} e^{-(r/a_0^*)},$$

$$a_0^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{\mu e^2}$$
(4.9)

onde

é o raio de Bohr efetivo e Ry^\ast

$$\mathcal{E}_0 = -Ry^* = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu \left(a_0^*\right)^2}$$
(4.10)

é o Rydberg efetivo.

Com isso, podemos utilizar a equação (4.9) para testar a blindagem do termo coulombiano pela constante dielétrica. Com valores de ϵ e μ para o CdTe (Apêndice A), obtemos $a_0^{exc} \simeq 60$ Å. Este valor indica a consistência da utilização de um potencial blindado, já que equivale a aproximadamente dez vezes o parâmetro de rede do cristal.

4.3 Éxcitons em Poços Quânticos

A formação de éxcitons ocorre sobretudo em materiais que permitem o confinamento espacial de elétrons e buracos, como, por exemplo, em poços quânticos. Heteroestruturas que permitem este tipo de confinamento foram construídas a partir da proposta de Esaki e Tsu [35] em 1970.



Figura 4.1: Representação de confinamento de portadores em um poço quântico simples ao longo da direção z. São mostrados os potenciais de confinamento $V_e(z_e)$ para os elétrons e $V_b(z_b)$ para os buracos e a transição eletrônica devido a absorção de um fóton de energia $\hbar\omega$ igual a $E_g + \varepsilon_e + \varepsilon_b$.

Para esse sistema, o hamiltoniano pode ser escrito da seguinte forma

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 + V_e(z_e) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 + V_h(z_h) \right] - V\left(|\vec{r_e} - \vec{r_h}| \right), \tag{4.11}$$

onde $V(|\vec{r_e} - \vec{r_h}|)$ é a energia de interação entre o elétron e o buraco e $V_e(z_e)$ e $V_h(z_h)$ são os potenciais de confinamento dos elétrons e buracos ao longo da direção de crescimento. Vemos

que a invariância de translação na direção z é quebrada pelos termos $V_e(z_e)$ e $V_h(z_h)$, o que faz com que o problema não tenha solução analítica.

Devido à anisotropia da banda de valência, as massas efetivas dos buracos são diferentes na direção de crescimento e no plano perpendicular. Dessa forma, o operador energia cinética deve ser reescrito como

$$\frac{p^2}{2m_h^*} \longrightarrow \frac{p_{\scriptscriptstyle \parallel}^2}{2m_{h_{\scriptscriptstyle \parallel}}^*} + \frac{p_{\perp}^2}{2m_{h_{\scriptscriptstyle \parallel}}^*},\tag{4.12}$$

onde $m_x = m_y = m_{\parallel} e m_z = m_{\perp}$. Substituindo (4.12) no hamiltoniano (4.11) temos

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 + V_e(z_e) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_{h_{\perp}}^*} \nabla_{uh}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{h_{\perp}}^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_h(z_h) \right] + V(|\vec{r_e} - \vec{r_h}|), \quad (4.13)$$

onde $\nabla^2_{\parallel h}$ representa a componente do laplaciano no plano xy para os buracos. Na ausência da interação coulombiana os autoestados deste hamiltoniano podem ser escritos na forma

$$\psi(\vec{r_e},\vec{r_h}) = \exp(i\vec{k_{\shortparallel e}}\cdot\vec{
ho_e}+i\vec{k_{\shortparallel h}}\cdot\vec{
ho_h})\chi_{ne}(z_e)\chi_{nh}(z_h),$$

onde $\chi_{n,e}(z_e)$ e $\chi_{n,h}(z_h)$ são as autofunções para os elétrons e buracos ao longo da direção de confinamento, respectivamente. \vec{k}_{ue} e \vec{k}_{uh} são os vetores de onda correspondentes ao movimento livre dos elétrons e buracos no plano $x \hat{o} y$, com $\vec{\rho}_e$ e $\vec{\rho}_h$ sendo os vetores posição neste plano $(\vec{r} = \vec{\rho} + z\hat{k})$.

Podemos reescrever o hamiltoniano (4.13) em termos das coordenadas do centro de massa do éxciton no plano $x \hat{o} y$, resultando em

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_e^* + m_{h_{\rm H}}^*)} \nabla_{R_{\rm H}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\rm H}^*} \nabla_{\rho}^2 + V(|\vec{r_e} - \vec{r_h}|)$$

$$+ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2}{dz_e^2} + V_e(z_e) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_{h\perp}^*} \frac{d^2}{dz_h^2} + V_h(z_h) \right],$$
(4.14)

onde $\mu^* = m_e^* m_{h_{\parallel}}^* / (m_e^* + m_{h_{\parallel}}^*)$ é a massa reduzida efetiva do éxciton no plano, $\vec{\rho} = \vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h$ é o vetor posição relativa no plano, $\vec{R}_{\parallel} = \frac{m_e^* \vec{\rho}_e + m_{h_{\parallel}}^* \vec{\rho}_h}{m_e^* + m_{h_{\parallel}}^*}$ é a posição do centro de massa no plano. Com isso, a função de onda do par elétron-buraco pode ser dada pelo produto

$$\phi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{K}_{\scriptscriptstyle ||} \cdot \vec{R}_{\scriptscriptstyle ||}) \varphi(z_e, z_h, \vec{\rho}), \qquad (4.15)$$

onde S é a área do cristal no plano $x \hat{o} y$.

4.3.1 Método Variacional

São poucos os potenciais para os quais a equação de onda de Schrödinger possui solução exata. Quando nos aproximamos mais realisticamente de um problema, diversas interações devem ser levadas em consideração, tais como: interação coulombiana, spin-órbita, campos elétrico e magnético, etc. Com isso, torna-se necessário a utilização de métodos numéricos ou de aproximação que permitam obter autovalores e autofunções para potenciais que não conduzam a equações diferenciais que possam ser resolvidas exatamente. Uma das maneiras de encontrar soluções aproximadas para a equação de Schrödinger com o hamiltoniano (4.14) é o *método variacional.*

De modo geral, o método permite calcular um limite superior para o estado de menor energia de um sistema ¹. Para isso, escolhe-se uma função de onda que dependa de um certo número de parâmetros $\Psi(\lambda_1, ..., \lambda_i)$ e calcula-se o valor esperado de H,

$$E(\lambda_1, ..., \lambda_i) = \frac{\int \Psi^* H \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \ge E_0.$$
(4.16)

Então, calcula-se os valores numéricos dos parâmetros a partir da condição de minimização

$$\frac{\partial E(\lambda_1,...,\lambda_i)}{\partial \lambda_i} = 0$$

e, conseqüentemente, a energia total.

No caso do éxciton em um poço quântico, cuja função de onda é dada por (4.15), podemos escrever a função de onda $\varphi(z_e, z_h, \rho)$ como

$$\varphi(z_e, z_h, \rho) = \chi_{1e}(z_e)\chi_{1h}(z_h)\xi(\rho),$$

onde $\chi_{1e}(z_e)$ e $\chi_{1h}(z_h)$ serão calculadas numericamente e $\xi(\rho)$ é a função tentativa, dada por

$$\xi(\rho) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{1}{a} \exp(-\frac{2\rho}{a}).$$

¹Embora esse método seja usualmente aplicado para o calcular a energia do estado fundamental, ele pode também ser usado para se obter os estados excitados do sistema; neste caso deve ser usada a técnica de ortogonalização de Gram-Schmidt [32].

Esta função corresponde ao estado fundamental do átomo de hidrogênio bidimensional com o parâmetro variacional *a*.

Calculando o valor esperado de H, temos

$$\langle H \rangle = \int d\vec{r}_e d\vec{r}_h \phi^*(\vec{r}_e, \vec{r}_h) H \phi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E_K + E_z + \int dz_e dz_h d\vec{\rho} \chi_{1e}(z_e) \chi_{1h}(z_h) \xi(\rho) [-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\scriptscriptstyle \rm H}^*} \nabla_{\rho}^2 + V(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|)] \chi_{1e}(z_e) \chi_{1h}(z_h) \xi(\rho)$$

com $E_K = \frac{\hbar^2 K_u^2}{2(m_e^* + m_{hu}^*)}$ e $E_z = E_{gap} + |E_{1e}| + |E_{1h}|$. Definindo a energia de ligação excitônica como $E_{ex} = \langle H \rangle - E_K - E_z$, temos

$$E_{ex} = \int d\vec{\rho}\xi(\rho) \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\scriptscriptstyle \Pi}^*} \nabla_{\rho}^2\right) \xi(\rho) + \int dz dz' d\vec{\rho} |\chi_{1e}(z_e)|^2 |\chi_{1h}(z_h)|^2 |\xi(\rho)|^2 V(\rho, z_e - z_h).$$
(4.17)

Dessa forma, a energia de ligação excitônica será calculada numericamente usando o princípio variacional via um programa desenvolvido em linguagem FORTRAN. A exatidão da energia de ligação depende principalmente da escolha da *função tentativa* e do número de parâmetros variacionais envolvidos. Segue no apêndice B o cálculo da energia de ligação e uma comparação com o resultado obtido para o átomo de hidrogênio no caso bidimensional ²

³⁸

²Para uma descrição do átomo de hidrogênio em duas e três dimensões ver [36].

Capítulo 5

Tunelamento Ressonante de Elétrons, Buracos e Éxcitons em um Poço Quântico Duplo de CdTe/CdMnTe

Heteroestruturas semicondutoras como poços quânticos duplos são extensamente estudadas na literatura, tanto teórica quanto experimentalmente [37–41]. Esses sistemas são constituídos por dois poços quânticos simples separados por uma barreira de potencial. Ao incidirmos uma radiação sobre essa estrutura, elétrons serão promovidos da banda de valência para a banda de condução, podendo tunelar de um poço para outro antes de recombinar. O efeito do tunelamento ressonante, induzido pela aplicação de um campo elétrico estático, trouxe novas perspectivas para a construção de dispositivos opto-eletrônicos [42, 43].

Neste capítulo investigamos inicialmente o tunelamento de portadores, devido à aplicação de um campo elétrico na direção de crescimento. Em seguida, estudamos o efeito de um campo magnético, aplicado juntamente com o campo elétrico, e verificamos a possibilidade de tunelamento simultâneo do par elétron-buraco, ou seja do éxciton. O tunelamento de portadores em heteroestruturas II-VI é mais influenciado pelos efeitos excitônicos, uma vez que as energias de ligação são maiores que em heteroestruturas III-V (para o CdTe a energia de ligação excitônica é $\varepsilon_b^{bulk} \approx 13,6$ meV e para o GaAs é $\varepsilon_b^{bulk} \approx 4,4$ meV). Dessa forma, estudamos o comportamento da energia de ligação excitônica em função dos campos aplicados. Conhecendo a energia de ligação poderemos interpretar os espectros de energia de transição, observando o tunelamento do éxciton ou de portadores isolados.

5.1 Considerações Iniciais

A heteroestrutura que investigamos é mostrada na figura (5.1), e consiste de um poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe. Como consideramos um substrato de InSb $(a_0 = 6, 4794\text{\AA})$, tanto os poços quanto as barreiras tornam-se tensionados devido a diferença do parâmetro de rede do substrato e da liga. Esse efeito modifica o gap de energia dos cristais e levanta a degenerescência entre buraco leve e buraco pesado, sem levantar a degenerescência de spin. As barreiras (com parâmetro $a_0 = 6, 4663\text{\AA}$), sofrem uma deformação de distensão, ao passo que os poços não-magnético (com o parâmetro $a_0 = 6, 4870\text{\AA}$) e o magnético (com parâmetro $a_0 = 6, 4811\text{\AA}$) sofrem uma deformação de compressão.



Figura 5.1: Poço quântico duplo assimétrico de $CdTe/Cd_{1-x}Mn_x Te$, crescido sobre um substrato de InSb ($a_0 = 6, 4794 \text{ Å}$) utilizado para estudar o tunelamento de portadores. O poço esquerdo de CdTe possui largura de 50 Å, o poço direito de Cd_{0,96}Mn_{0,04}Te possui 90 Å de largura e a barreira entre eles de Cd_{0,86}Mn_{0,14}Te possui 50 Å de largura. A figura mostra os níveis de energia dos dois primeiros autoestados e também a quebra da degenerescência da banda de valência (BV) em bandas de buraco leve (lh - light-hole) e buraco pesado (hh - heavy-hole).

A aplicação de um campo elétrico externo modifica o potencial que atua sobre os por-

tadores, podendo aproximar os níveis de energia dos estados localizados em cada poço. Nesse caso, se o campo elétrico aplicado colocar os dois primeiros estados eletrônicos em ressonância, necessariamente ele separa os dois primeiros estados de buraco. Na condição de máxima aproximação dos níveis de energia, a densidade de probabilidade de encontrar a partícula é a mesma nos dois poços, com isso, um portador inicalmente localizado em um dos poços ficará tunelando de um poço para outro.

Nas últimas duas décadas vários trabalhos teóricos e experimentais envolvendo o tunelamento em poços quântico duplos de GaAs/AlGaAs foram publicados. Estudos com esses sistemas mostraram a observação de radiação eletromagnética emitida pela oscilação de cargas [44], o tempo de tunelamento dos portadores entre poços adjacentes [45, 46], a energia de ligação e as energias de transição de éxcitons sob a influência de campos elétricos [47] e magnéticos [48]. Mais recentemente, trabalhos envolvendo semicondutores do tipo $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$ revelam fenômenos dependentes de spin como o tunelamento de éxcitons polarizados [49] e o processos de spin-flip [50].

Em um semicondutor magnético diluído quando um campo magnético é aplicado na direção de crescimento, o acoplamento entre os estados de cada poço é alterado. Isso ocorre devido a interação de troca, dada por H_{ex} , que muda a altura das barreiras internas e a profundidade do poço magnético. Com a energia potencial passando a depender do campo magnético, a diferença entre os níveis de energia dos poços adjacentes e o confinamento dos portadores passam a depender dos spins dos portadores. Ou seja, aplicando um campo elétrico ou magnético ao longo da direção de crescimento podemos alterar o acoplamento entre os estados de cada poço, mas não conseguiremos colocar os estados de elétrons e buracos em ressonância simultânea. No entanto, verificaremos que com a aplicação conjunta de campos magnético e elétrico podemos alcançar a condição de tunelamento simultâneo e calcular a energia de ligação de éxciton em termos dos campos ressonantes. Todos os parâmetros utilizados estão relacionados no apêndice A.

5.2 Resultados

Campo Elétrico

Inicialmente vejamos as densidades de probabilidade para os primeiros estados ligados em cada poço, na ausência de campos externos. A figura (5.2) mostra a energia potencial e os estados de elétrons, buracos leves e buracos pesados de acordo com a seguinte notação: o primeiro estado eletrônico, que está localizado no poço mais estreito, é denotado por el_{1N} , o segundo estado eletrônico, que está localizado no poço mais largo, é denotado por el_{2W} , seguindo a mesma notação para os estados de buraco leve e buraco pesado. Os índices $N \in W$ representam se os estados estão confinados no poço magnético que, é o mais largo (width), ou no poço não-magnético que é o mais estreito (narrow). Observamos que os estados de buraco leve não estão completamente em seus poços por perceberem a presença do poço adjacente, isso por terem massa da ordem de cinco vezes menor que o buraco pesado.



Figura 5.2: Energia potencial e as densidades de probabilidade para os primeiros estados ligados em um poço quântico duplo. O primeiro estado eletrônico localizado no poço estreito é indicado por el_{1N} , o segundo estado eletrônico localizado no poço largo é indicado por el_{2W} , seguindo a mesma notação no caso dos buracos pesados (hh) e buracos leves (lh).

O efeito do campo elétrico sobre as densidades de probabilidade é mostrado nas figuras (5.4) a (5.8). Das figuras (5.3) e (5.4) vemos que a amplitude de probabilidade dos estados de elétron diminui em um poço aumentando em outro, em função do campo elétrico. Para esse intervalo de variação do campo elétrico, a probabilidade de encontrar o elétron em um dado poço é máxima para F = 0 kV/cm e mínima para F = -14 kV/cm, tanto para o estado el_{1N} quanto para el_{2W}.





Figura 5.3: Densidade de probabilidade corresposdente ao estado eletrônico el_{1N} para diferentes valores de campo elétrico.

Figura 5.4: Densidade de probabilidade corresposdente ao estado eletrônico el_{2W} para diferentes valores de campo elétrico.

Das figuras (5.5) e (5.6), vemos que a probabilidade de encontrarmos o buraco pesado em um dado poço é praticamente a mesma até um campo elétrico de 10 kV/cm. A partir desse valor entretanto, a amplitude de probabilidade do buraco pesado diminui subitamente em um determinado poço e aumenta no outro. Já os estados de buraco leve, como não ficam completamente confinados em um dado poço, mostram-se extremamente sensíveis ao campo elétrico. Vemos com as figuras (5.7) e (5.8), que um campo elétrico de 3 kV/cm é suficiente para modificar de maneira significativa a forma do estado. Para campos maiores os estados lh_{1N} e lh_{2W} deixam de ser estados ligados.

A partir desses resultados fica claro que podemos determinar o valor do campo elétrico para o qual a probabilidade de encontrar o portador, num poço ou no outro, seja a mesma. O valor do campo elétrico ressonante é determinado examinando como os níveis de energia variam



Figura 5.5: Densidade de probabilidade corresposdente ao estado de buraco pesado hh_{1N} para diferentes valores de campo elétrico.



Figura 5.7: Densidade de probabilidade corresposdente ao estado de buraco leve lh_{1N} para diferentes valores de campo elétrico.

em função do campo.

As figuras (5.9) e (5.11) mostram o campo elétrico aproximando os níveis de energia dos estados até um valor mínimo. O ponto de máxima aproximação entre os níveis corresponde ao campo elétrico ressonante, que nesse caso é $F_{ress} = -10,79$ kV/cm para os estados de elétron e $F_{ress} = 10,33$ kV/cm para os estados de buraco pesado. No caso de poços separados por uma barreira muito larga, não haveria acoplamento entre os poços e as curvas dos níveis de energia iriam se cruzar. Mas como a barreira possui 50 Å de largura, existe um acoplamento



Figura 5.6: Densidade de probabilidade corresposdente ao estado de buraco pesado hh_{2W} para diferentes valores de campo elétrico.



Figura 5.8: Densidade de probabilidade corresposdente ao estado de buraco leve lh_{2W} para diferentes valores de campo elétrico.





Figura 5.9: Níveis de energia dos estados el_{1N} (linha tracejada) e el_{2W} (linha contínua) em função do campo elétrico aplicado. Na ressonância o campo elétrico é $F_{ress} = -10, 79 \, kV/cm.$

Figura 5.10: Diferença entre os níveis de energia dos estados el_{1N} e el_{2W} em função do campo elétrico aplicado. Na ressonância a diferença é $\Delta \varepsilon_{min}^{el} = 2,54 \text{ meV}.$

entre os poços. A partir do valor do campo elétrico ressonante os níveis passam a interagir repulsivamente, fazendo com que a separação dos níveis aumente. Nas figuras (5.10) e (5.12) plotamos a diferença entre os níveis de energia em função do campo. A diferença mínima observada entre os níveis é um parâmetro utilizado para o cálculo do tempo de tunelamento dos portadores de um poço para outro. Essas diferenças mínimas são $\Delta \varepsilon_{min}^{el} = 2,54$ meV e $\Delta \varepsilon_{min}^{hh} = 0,071$ meV.

Uma vez determinado os valores de campo elétrico que coloca em ressonância os estados de elétron e buraco pesado, aplicamos o campo ressonante e vemos que a densidade de probabilidade de encontrar o portador fica distribuída em ambos os poços, conforme visto nas figuras (5.13) e (5.14).

Outra forma de verificar o tunelamento dos potadores é pensarmos em termos da posição média, $\langle z_i \rangle = \langle \varphi_i | z | \varphi_i \rangle$. De acordo com as figuras (5.13) e (5.14), na condição de ressonância as densidades de probabilidade estão distribuídas nos dois poços, o que faz com



Figura 5.11: Níveis de energia dos estados hh_{1N} (linha contínua) e hh_{2W} (linha tracejada) em função do campo elétrico aplicado. Na ressonância o campo elétrico é $F_{ress} = 10, 33 \, kV/cm.$



Figura 5.13: Densidade de probabilidade dos estados el_{1N} e el_{1W} na ausência de campo (parte inferior) e com a aplicação do campo elétrico ressonante $F_{ress} = -10,79 \, kV/cm$ (parte superior).



Figura 5.12: Diferença entre os níveis de energia dos estados hh_{1N} e hh_{2W} em função do campo elétrico aplicado. Na ressonância a diferença é $\Delta \varepsilon_{min}^{hh} = 0,071 \, meV.$



Figura 5.14: Densidade de probabilidade dos estados hh_{1N} e hh_{1W} na ausência de campo (parte inferior) e com a aplicação do campo elétrico ressonante $F_{ress} = 10,33 \, kV/cm$ (parte superior).

que as posições médias dos portadores coincidam. Com isso, a posição média deve confirmar o valor do campo elétrico ressonante obtido anteriormente. Nas figuras (5.15) e (5.16) mostramos a variação de $\langle z_i \rangle$ com o campo elétrico. Vemos que a medida que aumentamos o campo, a posição média do portador que estava localizado no poço não-magnético passa a localizar-se no poço magnético e vice-versa. No valor do campo ressonante as posições médias estão na região da barreira. Isso não significa que o elétron ou o buraco esteja dentro da barreira, mas sim que a probabilidade do portador estar no poço direito ou esquerdo seja praticamente a mesma. Vemos ainda que a tunelamento ocorre de maneira suave para os estados de elétrons enquanto ocorre de maneira mais abrupta para os estados de buracos pesados.

Sendo assim, a energia de ligação excitônica deve ser função do campo elétrico, visto a ocorrência do tunelamento dos portadores entre os poços adjacentes. Na figura (5.17) vemos a variação da energia de ligação do éxciton el_{2W}/hh_{2W} em função do campo elétrico. Observase que à medida que o *overlap* (sobreposição) das funções de onda $\varphi_{2W}^{el}(z)\varphi_{2W}^{hh}(z)$ diminui, a energia de ligação diminui de maneira suave, devido ao tunelamento do elétron el_{2W} para o poço não-magnético. Da figura (5.18) é possível fazer a mesma análise, e à medida que o buraco pesado hh_{1N} tunela para o poço magnético a energia de ligação diminui abruptamente. Em ambos os casos, a energia de ligação deveria ir a zero após o tunelamento do portador. O fato é que mesmo com o tunelamento, a função de onda do portador deixa uma cauda remanescente no poço original. Portanto, embora menor, permanece não nulo o *overlap* e a energia de ligação permanece diferente de zero.

O tempo de tunelamento pode ser estimado considerando apenas os estados ressonantes e tratando o problema como um sistema de dois níveis. Neste caso, a função de onda na ressonância é escrita como uma combinação linear dos autoestados dos poços isolados [51]. Com isso, o tempo de tunelamento fica dado por $\tau_{tun} = \frac{\pi\hbar}{\Delta\epsilon}$, donde obtemos os tempos $\tau^{el} = 0,81$ ps e $\tau^{hh} = 29$ ps, para elétrons e buracos respectivamente.

Campo Elétrico e Magnético

Como nosso sistema possui um poço com uma pequena concentração de íons magnéticos, o efeito Zeeman sobre os estados localizados nesse poço será maior. Com isso a aplicação de



Figura 5.15: Influência do campo elétrico sobre as posições médias dos estados el_{1N} $e \ el_{2W}$. O ponto em que as posições médias são as mesmas corresponde ao campo elétrico ressonante $F_{ress} = -10, 79 \, kV/cm$.



Figura 5.17: Energia de ligação do éxciton el_{2W}/hh_{2W} em função do campo elétrico. Nesse caso o elétron el_{2W} tunela do poço magnético (W) para o poço não-magnético (N).



Figura 5.16: Influência do campo elétrico sobre as posições médias dos estados hh_{1N} $e hh_{2W}$. O ponto em que as posições médias são as mesmas corresponde ao campo elétrico ressonante $F_{ress} = 10, 33 \, kV/cm$.



Figura 5.18: Energia de ligação do éxciton el_{1N}/hh_{1N} em função do campo elétrico. Nesse caso o buraco hh_{1N} tunela do poço não-magnético (N) para o poço magnético (W).

um campo magnético na direção de crescimento também modificará o acoplamento entre os estados dos poços adjacentes, podendo também colocar os portadores em ressonância.

Vimos na primeira parte dos resultados que se aplicarmos um campo elétrico ao sistema, no sentido negativo¹ do eixo z (ver figura (5.10)), poderemos diminuir a diferença de

 $^{^1\}mathrm{A}$ partir de agora ao nos referirmos ao campo elétrico, mencionaremos apenas seu módulo

energia entre os estados eletrônicos, aumentando, conseqüentemente, a diferença de energia entre os estados de buracos. Veremos agora que aplicando simultaneamente os campos elétrico e magnético, o efeito do campo elétrico será aumentar o valor do campo magnético ressonante entre os estados de buracos com um dado spin, diminuindo o valor desse campo para os estados eletrônicos, resultando em um tunelamento ressonante simultâneo polarizado de elétrons e buracos.

Na figura (5.19) mostramos como varia o campo magnético ressonante (campo magnético necessário para colocar um dado portador com determinado spin em ressonância) para os elétrons e para os buracos em função do campo elétrico aplicado. Podemos observar que o efeito do campo elétrico sobre o campo magnético ressonante é bem maior sobre os estados eletrônicos, o que é uma conseqüência do fato do efeito Zeeman ser quatro vezes maior sobre os estados de buracos, conforme equação (3.13), uma vez que $|N_0\beta| = 4|N_0\alpha|$. Além disso, o ponto de cruzamento entre as duas curvas ($F_{ress} = 6,95$ kV/cm e $B_{ress} = 2,82$ T) nos fornece os campos elétrico e magnético com os quais os dois estados estarão em ressonância simultaneamente.



Figura 5.19: Campo magnético ressonante para os estados de elétrons e buracos pesados em função do campo elétrico aplicado. O ponto de cruzamento entre as duas curvas ($F_{ress} = 6,95$ $kV/cm \ e \ B_{ress} = 2,82 \ T$) nos fornece os campos elétrico e magnético com os quais os dois estados estarão em ressonância simultaneamente.



Figura 5.20: Efeito do campo magnético sobre as posições médias dos estados de elétrons e buracos pesados para um campo elétrico aplicado de 6,95 kV/cm. O ponto em que as posições médias são iguais corresponde ao campo magnético ressonante 2,82 T.

Como vimos anteriormente, podemos verificar se os valores dos campos elétrico e magnético ressonantes correspondem à condição de ressonância simultânea observando a posição média dos portadores. Observamos pela figura (5.20) que para os portadores com spin para baixo, o ponto onde as posições médias são iguais correspondem aos campos de ressonância simultânea. Os estados com spin para baixo tornam-se estendidos entre os dois poços e assim a densidade de probabilidade de encontrar o par elétron-buraco fica distribuída no poço magnético e não-magnético. Isto é uma conseqüência da diminuição da altura da barreira interna e da aproximação entre os níveis de energia provocados pela presença tanto do campo elétrico como do campo magnético. Em contrapartida vemos que os estados com spin para cima se localizam ainda mais em seus respectivos poços quânticos como resultado do aumento da altura da barreira interna e do aumento na separação dos níveis de energia. Com exceção do estado $h_{2W\uparrow}$, que para campo magnético em torno de 3,5 T, acaba entrando em ressonância com estado $hh_{3N\uparrow}$ e também tunela do poço magnético para o poço não-magnético, conforme mostrado nas figuras (5.21) e (5.22).



Figura 5.21: Níveis de energia dos estados $hh_{2W\uparrow}$, $hh_{3N\uparrow}$ e $hh_{4W\uparrow}$ para um campo elétrico de 6,95 kV/cm em função do campo magnético. Os pontos de máxima aproximação entre as curvas marcam os pontos de ressonância.



Figura 5.22: Efeito do campo magnético sobre as posições médias dos estados $hh_{2W\uparrow}$, $hh_{3N\uparrow} e hh_{4W\uparrow}$ para um campo elétrico aplicado de 6,95 kV/cm. Os pontos em que as posições médias são iguais correspondem aos campo magnéticos ressonantes.



Figura 5.23: Diferença entre os nívies de energia dos primeiros estados de buraco pesado do sistema em função do campo magnético aplicado. O ponto de mínimo corresponde a $B_{ress} = 2,82$ T.



Figura 5.24: Diferença entre os nívies de energia dos primeiros estados de elétrons do sistema em função do campo magnético aplicado. O ponto de mínimo corresponde a $B_{ress} = 2,82 T.$

O comportamento da diferença de energia dos níveis dos primeiros estados de cada poço

é mostrado nas figuras (5.23) e (5.24), considerando a aplicação do campo elétrico ressonante em função do campo magnético. Observamos que para B = 0 T a diferença de energia é menor para os estados de elétron pois ocampo elétrico aproximou os níveis desse estado. Observamos que para os estados hh_{1N↓} e hh_{2W↓}, à medida que aumentamos o campo magnético a diferença entre os níveis de energia vai diminuindo até o valor mínimo de 0, 22 meV, voltando a aumentar a partir desse valor devido ao efeito Zeeman. O mesmo acontece para a diferença de energia entre os estados el_{1N↓} e el_{2W↓}, que atinge o valor mínimo de 2,75 meV onde os níveis estão em ressonância. Na condição de ressonância simultânea entre níveis de elétrons e buracos, as diferenças entre os níveis de energia nos fornecem diferentes tempos de tunelamento, $\tau^{el} = 0,75$ ps e $\tau^{hh} = 9,4$ ps. O que significa que mesmo induzindo a ressonância simultânea com campos externos, o buraco pesado é mais de doze vezes mais lento que o elétron para tunelar.

A partir dos níveis de energia dos portadores, calculamos as energias de transição com polarições circulares $\sigma^+ e \sigma^-$ correspondentes às transições diretas $el_{1N\downarrow} \rightarrow hh_{1N\downarrow} e el_{2W\downarrow} \rightarrow$ $hh_{2W\downarrow}$. Na polarização σ a luz se propaga ao longo do campo magnético aplicado (configuração de Faraday).

O efeito Zeeman dos níveis de energia e as energias de transição, para um campo elétrico de 6,95 kV/cm, são mostradas na figuras (5.25) e (5.26). Na figura (5.25) deveríamos observar a repulsão entre os estados $el_{1N\downarrow}/el_{2W\downarrow}$ que ocorre no campo magnético ressonante. Isso acaba não ficando evidente devido à escala da figura. Contudo, é possível observar que os estados $hh_{1N\downarrow}/hh_{2W\downarrow}$ interagem repulsivamente, para valores em torno do campo magnético ressonante. Ainda em torno do campo magnético ressonante, ocorre o *anticrossing* das energias de transição devido a ressonância simultânea entre os estados de elétron e buraco pesado (figura (5.26)).



Figura 5.25: Efeito Zeeman dos níveis de energia dos estados de elétrons e buracos em função do campo magnético aplicado. Vemos a repulsão dos níveis de energia dos estados de buraco pesado devido, em torno de $B_{ress} = 2,82 T.$



Figura 5.26: Energias de transição com polarizações circulares $\sigma^+ e \sigma^-$ entre os estados $el_{1N} \rightarrow hh_{1N} e el_{2W} \rightarrow hh_{2W}$ para um campo elétrico de 6,95 kV/cm. As energias de ligação excitônica não foram consideradas.

Energia de Ligação Excitônica

A energia excitônica depende do confinamento dos portadores em seus respectivos poços. Portanto é de se esperar que esta energia apresente um valor máximo quando os portadores estiverem bem localizados e um valor mínimo quando ocorrer a ressonância, visto que tanto os estados de elétron quanto os de buraco pesado ficam homogeneamente distribuídos sobre os dois poços. É claro que se os portadores estiverem localizados em diferentes poços a energia de ligação excitônica será ainda menor, como discutido anteriormente (ver figuras (5.17) e (5.18)). Em alguns trabalhos teóricos [52] e experimentais [53, 54] sobre éxcitons em poços quânticos, a energia de ligação excitônica, embora dependa do campo magnético, é considerada constante. Veremos que para heteroestruturas semimagnéticas a energia de ligação excitônica depende fortemente do campo magnético aplicado, sobretudo no estudo do tunelamento ressonante.

Dessa forma calculamos a energia de ligação excitônica em função do campo magnético, para o campo elétrico ressonante aplicado, conforme mostrado na figura (5.27). Vejamos inicialmente o que ocorre com os portadores que possuem spin para baixo. Observando os estados



Figura 5.27: Energia de ligação de éxcitons em função do campo magnético para um campo elétrico de 6,95 kV/cm.

desses portadores vemos que o éxciton $el_{1N\downarrow}/hh_{1N\downarrow}$, para B=0 T, possui energia de ligação (~29 meV) maior que éxciton el_{2W}/hh_{2W} (~24 meV). Essa diferença se dá pelo fato dos estados $el_{1N\downarrow}/hh_{1N\downarrow}$ estarem mais confinados que em seus respectivos poços que os estados $el_{2W\downarrow}/hh_{2W\downarrow}$. Verificamos que a energia excitônica dos estados $el_{1N\downarrow}/hh_{1N\downarrow}$ e $el_{2W\downarrow}/hh_{2W\downarrow}$ diminui com o aumento campo magnético, até um valor mínimo, voltando a aumentar com o campo em seguida. Exatamente no valor de campo magnético ressonante ($B_{ress}=2,82$ T) as energias excitônicas coincidem, visto que a densidade de probabilidade, tanto dos estados de elétrons quanto os estados de buracos pesados, é a mesma entre os poços adjacentes. Porém, há uma inversão no comportamento da energia para B>B_{ress}, uma vez que os estados $el_{1N\downarrow}/hh_{1N\downarrow}$ que antes do tunelamento estavam localizados no poço não-magnético, passam a se localizar no poço magnético, o que faz com que a energia de ligação seja menor que a do éxciton $el_{2W\downarrow}/hh_{2W\downarrow}$ que agora localiza-se no poço não-magnético.

Com o auxílio da figura (5.20) podemos entender o que ocorre no caso dos portadores com spin para cima. Dessa figura vemos que os estado $hh_{1N\uparrow}$ mantém seu confinamento quase inalterado e por isso a energia de ligação do éxciton $el_{1N\uparrow}/hh_{1N\uparrow}$, mostrada na figura (5.27), praticamente não varia com o campo. Porém a posição média do estado de buraco $hh_{2W\uparrow}$ mostra que, para B>3,5 T, esse portador entra em ressonância com o estado $hh_{3N\uparrow}$ e acaba tunelando do poço magnético para o poço não-magnético, o que faz com que a energia de ligação do éxciton $el_{2W\uparrow}/hh_{2W\uparrow}$ diminua abruptamente nesse intervalo.

Consideramos também o caso em que os portadores com spin para baixo tunelam de maneira independente, ou seja fora da condição de ressonância simultânea. A análise do comportamento da energia excitônica é semelhante à do caso ressonante. Vemos que a curva da energia de ligação, figura (5.28), caracteriza bem o tunelamento independente dos portadores: decresce suavemente até B=3,2 T enquanto os elétrons tunelam de um poço para outro, após esse valor a energia aumenta rapidamente devido ao tunelamento dos buracos.



Figura 5.28: Energia de ligação excitônica em função do campo magnético para um campo elétrico de 8 kV/cm.

Se estabelecermos uma comparação entre as figuras (5.20) e (5.29), vemos que a variação do campo elétrico faz com que o os estados de elétron e buraco atinjam a ressonância para diferentes valores de campo magnético. Isto significa que em sistemas constituídos de poços quânticos duplos sempre podemos alcançar a ressonância simultânea, onde a magnitude



Figura 5.29: Posição média dos portadores em fução do campo magnético para um campo elétrico de 8 kV/cm.

dos campos elétricos e magnéticos ressonantes vai depender das dimensões do sistema e dos materiais constituintes da heteroestrutura.

Capítulo 6 Conclusões

Calculamos a estrutura eletrônica em um sistema de poço quântico duplo assimétrico de CdTe/CdMnTe, na presença de campos elétrico e magnético aplicados na direção de crescimento da amostra. Os autoestados do sistema foram obtidos resolvendo-se numericamente a equação da massa efetiva com o hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ no modelo multibanda de Kane.

Inicialmente estudamos a influência da aplicação de um campo elétrico sobre o sistema. Nosso objetivo nessa parte foi estudar a variação da energia de ligação excitônica com o campo elétrico e calcular os tempos de tunelamento dos portadores. Verificamos então que ocorre o tunelamento individual de elétrons e buracos dependendo do sentido do campo elétrico aplicado. Do comportamento dos níveis dos portadores em função campo elétrico, observamos que no ponto de ressonância os níveis atingem uma diferença mínima de energia que para o elétron é 2,54 meV e para o buraco pesado é 0,071 meV. Com isso calculamos os tempos de tunelamento e verificamos que os buracos pesados são cerca de 35 vezes mais lentos que os elétrons para tunelarem, devido ao fato de terem maior massa. Com as autofunções do sistema em função do campo elétrico, calculamos a energia de ligação excitônica. Como a energia de éxciton depende do confinamento do portador no poço, verificamos que essa energia decresce à medida que o elétron (ou buraco) tunela de um poço para outro com a aplicação do campo elétrico.

A seguir estudamos o tunelamento de éxcitons em um poço quântico duplo induzido pela aplicação de campos elétrico e magnético na direção de crescimento. Assim, nosso objetivo foi estudar a dependência da energia de éxciton com o campo magnético no processo de tunelamento entre os pares elétron-buraco. Calculamos a separação Zeeman dos níveis de energia em ambos os poços para um campo elétrico de 6,95 kV/cm. Calculamos as energias de transição em função do campo magnético, sem considerar a energia de ligação excitônica. Em seguida calculamos a energia de éxciton em função do campo magnético e verificamos que a variação da energia de ligação é bastante significante ($\sim 15 \text{ meV}$) à medida em que os éxcitons de portadores com spin para baixo tunelam. Isto nos leva a concluir que os espectros de energia de transição típicos de trabalhos sobre tunelamento em poços duplos, devem sofrer variações devido ao tunelamento acoplado do par elétron-buraco.

Posteriormente deveremos investigar os efeitos do alargamento das interfaces no processo de tunelamento, uma vez que esses efeitos passam a ser significativos à medida que se diminuem as dimensões do sistema e ainda fazer a evolução temporal do sistema incluindo a interação entre elétrons e buracos.
Apêndice A

Parâmetros para CdMnTe

Tabela A.1: Parâmetros para o $Cd_{1-x}Mn_xTe$		
Parâmetro	Unidade	$Cd_{1-x}Mn_xTe$
E_g	eV	1,606+1,592x
E_p	eV	18, 5
$\delta E_c / \delta E_v$	%	70/30
γ_1	—	1,27-0,75x
γ_2	_	-0,31+0,04x
γ_3	_	-0,09-0,10x
F	—	0,515 - 0,002x
N_1	—	1,23-0,96x
q	—	0,05
κ	—	-0,65+0,96x
a_0	Å	6,487-0,148x
C_{11}	$(10^{10} Pa)$	5,36-0,71x
C_{12}	$(10^{10} Pa)$	3,70-0,46x
a_c	eV	-3,96
a_v	eV	0, 55
b	eV	-1, 2
S_0	—	$0, 5+2, 0 \exp\left(-x/0, 075\right)$
T_0	K	$62,0x - 390,0x^2 + 1200,0x^3$
$N_0 \alpha$	eV	0,22
N_0eta	eV	-0,88
Δ	eV	0,927
g_c^*	—	-0,74
m_e^*	m_0	0,103+0,067x
m_{lh}^{*}	m_0	0, 12 + 0, 14x
m^*_{hh}	m_0	0,53+0,41x
$m_{hh}^{*[111]}$	m_0	0,69+0,41x
m_{so}^*	m_0	0,28-0,13x
C_{44}	$(10^{10} Pa)$	1,99-0,33x
d	eV	-2, 8
ϵ	—	9,3

Apêndice B Cálculo Analítico da Energia Excitônica em um Poço Quântico

O potencial de interação entre um elétron e um buraco, dado pelo último termo da equação (4.1), em um sistema de simetria cilíndrica, pode ser escrito na forma

$$V(|\vec{r_e} - \vec{r_b}|) \to V(\rho, |z - z'|) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}}$$
 (B.1)

Fazendo a transformada de Fourier bidimensional do potencial coulombiano este pode ser escrito em uma forma separável nas variáveis ρ e z - z'

$$V(\rho, z - z') = -\frac{1}{A} \sum_{\vec{g}} \frac{e^2}{2\epsilon g} e^{-g|z - z'| + i\vec{g}\cdot\vec{\rho}}.$$
 (B.2)

Assim, substituindo o potencial interação na equação (4.17), temos

$$E_{ex} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\scriptscriptstyle \rm II}^*} (\frac{8}{\pi a^2}) \int d\vec{\rho} e^{-2\rho/a} (\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\rho}) e^{-2\rho/a} - \frac{1}{A} \sum_{\vec{g}} \frac{e^2}{2\epsilon g} f(g) \int d\vec{\rho} (\frac{8}{\pi a^2}) e^{-4\rho/a + i\vec{g}\cdot\vec{\rho}}, \quad (B.3)$$

onde

$$f(g) = \int dz \int dz' |\chi_{1e}(z)|^2 e^{-g|z-z'|} |\chi_{1b}(z')|^2.$$
(B.4)

Calculando as derivadas na equação (B.3) obtemos

$$\begin{split} E_{ex} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\scriptscriptstyle \parallel}^*} (\frac{8}{\pi a^2}) \left[\frac{4}{a^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-4\rho/a} - \frac{2}{a} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} d\rho e^{-4\rho/a} \right] \\ &- \frac{1}{A} \sum_{\vec{g}} \frac{e^2}{2\epsilon g} f(g) \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} d\rho d\theta \rho(\frac{8}{\pi a^2}) e^{-4\rho/a + ig\rho\cos\theta} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\scriptscriptstyle \parallel}^*} (\frac{8}{\pi a^2}) \left[\frac{8\pi}{a^2} \int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-4\rho/a} - \frac{4\pi}{a} \int_0^{\infty} d\rho e^{-4\rho/a} \right] \\ &- \frac{1}{A} \sum_{\vec{g}} \frac{e^2}{2\epsilon g} f(g) (\frac{8}{\pi a^2}) \int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-4\rho/a} 2\pi J_0(g\rho), \end{split}$$

onde

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{ix\cos\theta}$$

é a função de Bessel de primeira espécie de ordem 0 [32]. Calculando as integrais em ρ

$$\int_0^\infty d\rho \rho e^{-4\rho/a} = \frac{a^2}{16} \quad ; \quad \int_0^\infty d\rho e^{-4\rho/a} = \frac{a}{4}$$

obtemos

$$E_{ex} = \left[\frac{2\hbar^2}{\mu_{\scriptscriptstyle \parallel}^* a^2} - \frac{1}{A} \sum_{\vec{g}} \frac{e^2}{2\epsilon g} f(g) \int_0^\infty dx x e^{-x} J_0(\beta x)\right],$$

onde fizemos $x = 4\rho/a$ e $\beta = ga/4$. Usando o resultado tabelado [55]

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^{\nu+1} J_\nu(\beta x) dx = \frac{2^\alpha (2\beta)^\nu \Gamma(\nu+3/2)}{\sqrt{\pi} (\alpha^2+\beta^2)^{\nu+3/2}},$$

válido quando $\operatorname{Re}[\nu] > -1$ e $\operatorname{Re}[\alpha] > \operatorname{Im}|\beta|$, e sabendo que $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$, encontramos

$$E_{ex} = \left[\frac{2\hbar^2}{\mu_{\scriptscriptstyle \parallel}^* a^2} - \frac{1}{A} \sum_g \frac{e^2}{2\epsilon g} f(g) \frac{1}{(1+\beta^2)^{3/2}}\right].$$
 (B.5)

Escrevendo a equação (B.5) em unidades do raio de Bohr efetivo $\left(a_o^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{\mu_{\scriptscriptstyle \parallel}^*e^2}\right)$ e do Rydberg efetivo $\left(Ry^* = \frac{\hbar^2}{2\mu_{\scriptscriptstyle \parallel}^*a_o^{*2}}\right)$ temos

$$E_{ex}/Ry^* = \left[\frac{4}{\tilde{a}^2} - \frac{1}{A}\sum_{\vec{g}}\frac{4\pi}{\tilde{g}}f(\tilde{g})\frac{4^3a_o^{*2}}{[16 + (\tilde{g}\tilde{a})^2]^{3/2}}\right]$$
(B.6)

onde usamos as definições $\tilde{a} = a/a_o^*$, $\tilde{g} = ga_o^*$, $\tilde{z} = z/a_o^*$ e $\chi_{ip} = \sqrt{a_o^*}\chi_{ip}$. Transformando o somatório em \vec{g} em uma integral

$$\frac{1}{A}\sum_{\vec{g}} \to \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\vec{g},$$

obtemos

$$E_{ex} = \left[\frac{4}{\tilde{a}^2} - \int d\tilde{g}f(\tilde{g}) \frac{128}{[16 + (\tilde{g}\tilde{a})^2]^{3/2}}\right] Ry^*$$

Dessa maneira, para obtermos a energia de éxciton, calculamos as integrais das equações (B.4) e (B), ficando com uma expressão da energia dependente do parâmetro $E_{ex}(\tilde{a})$. Minimizamos a expressão da energia, determinamos o valor do parâmetro e consequentemente o valor da energia excitônica.

Para verificar esse resultado, vamos considerar o caso de um sistema estritamente bidimensional. Isto significa z = z' e portanto $f(\tilde{g}) = 1$, logo

$$E_{ex} = \left[\frac{4}{\tilde{a}^2} - \frac{128}{\tilde{a}} \int_0^\infty \frac{dx}{\left[16 + x^2\right]^{\frac{3}{2}}}\right] Ry^*,$$

onde fizemos $x = \tilde{g}\tilde{a}$. Resolvendo a integral

$$\int_{0}^{\infty} \frac{dx}{\left[\gamma + x^{2}\right]^{\frac{3}{2}}} = \frac{x}{\gamma \left(\gamma + x^{2}\right)^{1/2}} \bigg|_{0}^{\infty} = \frac{1}{\gamma}$$

temos

$$E_{ex}(\tilde{a}) = \left[\frac{4}{\tilde{a}^2} - \frac{8}{\tilde{a}}\right] Ry^* = \left[\frac{1}{\tilde{a}^2} - \frac{2}{\tilde{a}}\right] 4Ry^*.$$

Minimizando o valor da energia obtemos:

$$\frac{\partial E_{ex}}{\partial \tilde{a}} = \left[1 - \frac{1}{\tilde{a}}\right] \frac{8Ry^*}{\tilde{a}^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{a} = 1.$$

Assim, o valor da energia de ligação excitônica para o caso estritamente bidimensional é

$$E_{ex}(\tilde{a}=1) = -4Ry^*,$$

concordando com o resultado obtido pela solução exata da equação de Schrödinger para o caso do "átomo de hidrogênio" bidimensional [36].

Bibliografia

- [1] J. K. Furdyna. Diluted Magnetic Semiconductors. J. Appl. Phys., 64, R29, 1988.
- [2] M. C. Debnath, I. Souma, M. Takahashi, T. Sato, R. Pittini, F. Sato, M. Tanaka e Y. Oka. Excitonic properties of Cd_{1-x}Mn_xTe quantum wells grown by molecular beam epitaxy. J. Cryst. Growth, **229**, 109, 2001.
- [3] J. C. Egues. Spin-Dependent Perpendicular Magnetotransport through a Tunable ZnSe/Zn_{1-x}Mn_xSe Heterostructure: A Possible Spin Filter? Phys. Rev. Lett., 80, 4578, 1998.
- [4] A. A. Shokri, M. Mardaani e K. Esfarjani. Spin filtering and spin diode devices in quantumwire systems. Physica E, 27, 325, 2005.
- [5] I. A. Buyanova, W. M. Chen, B. Monemar, P. S. Toropov, Y. V. Terent'ev, S. V. Sorokin, A. V. Lebedev, S. V. Ivanov e P. S. Kop'ev. On the spin injection in ZnMnSe/ZnCdSe heterostructures. Physica E, 13, 568, 2002.
- [6] P. Recher, E. V. Sukhorukov e D. Loss. Quantum Dot as Spin Filter and Spin Memory. Phys. Rev. Lett., 85, 1962, 2000.
- [7] D. D. Awschalom, M. E. Flatté e N. Samarth. Microelectronic devices that function by using the spin of the electron are a nascent multibillion-dollar industry - and may lead to quantum microchips. Scientific American Brasil, 2, 41, 2002.
- [8] A. Wasiela, P. Peyla, Y. Merle d'Aubigne, J. E. Nicholls, D. E. Ashenford e B. Lunn. Magneto-optical study of CdTe/CdMnTe multiple quantum wells with low potential barriers. Semicond. Sci. Technol., 7, 571, 1992.
- [9] P. Bhattacharia. Semiconductor Optoeletronic Devices. Prentice Hall, 1994. p. 35-50, New Jersey.
- [10] J. D. M. Vianna, A. Fazzio e S. Canuto. Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional. Editora da Livraria da Física, 2004. páginas 125-131.

- [11] J. M. Luttinger e W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. Phys. Rev., 97, 869, 1955.
- [12] M. G. Burt. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. J. Phys. Condens. Matter, 4, 6651, 1992.
- [13] E. L. Ivchenko e G. E. Pikus. Superlattices and Others Heterostructures: Symetry and Optical Phenomena, volume 110 of Springer Series in Solid-State Sciences. Springer-Verlag, 1973. capítulo 3, página 39.
- [14] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. Solid State Physics. Saunders College, Philadelphia, 1976. capítulos 8-11.
- [15] F. Bassani. Methods of Band Calculations Applicable to III-V Compounds, volume 1 of Semiconductors and Semimetals. Academic Press., 1966. New York, páginas 21-74.
- [16] B. K. Ridley. Quantum Processes in Semiconductors. Clarendon Press., 1982.
- [17] J. Bardeen. An Improved Calculation of the Energies of Metalic Li and Na. J. Phys. Chem. Sol., 6, 367, 1938.
- [18] F. Seitz. The Modern Theory of Solids. McGraw Hill, 1940. New York, capítulo 10, página 352.
- [19] R. B. Bylsma, W. M. Becker, J. Kossut e U. Debska. Dependence of energy gap on x and T in Zn_{1-x}Mn_xSe: The role of exchange interaction. Phys. Rev. B, 33, 8207, 1986.
- [20] J. C. Egues. Spin-Dependent Phenomena in Mn-Based Semiconductor Heterostructures. Tese de Doutorado, The Ohio State University, 1996. página 9.
- [21] J. A. Gaj, R. Planel e G. Fishman. Relation of magneto-optical properties of free excitons to spin alignment of Mn²⁺ ions in Cd_{1-x}Mn_xTe. Sol. St. Comm., 29, 435, 1979.
- [22] E. O. Kane. Physics of III-V Compounds The $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Method, volume 1 of Semiconductors and Semimetals. Academic Press Compounds, 1966. New York, páginas 75-100.
- [23] J. M. Luttinger. Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory. Phys. Rev., 102, 1030, 1956.
- [24] P. Lowdin. A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory. J. Phys. Chem. Sol., 19, 1396, 1951.
- [25] C. Kittel. Quantum Theory of Solids. John Wiley. New York, capítulo 9, página 179.

- [26] M. H. Weiler, R. L. Aggarwal e B. Lax. Warping- and inversion-asymmetry-induced cyclotronharmonic transitions in InSb. Phys. Rev. B, 17, 3269, 1978.
- [27] J. Kossut. Band Structure and Quantum Transport Phenomena in Narrow-Gap Diluted Magnetic Semiconductors. Academic Press, 1988. New York, página 183.
- [28] G. L. Bir e G. E. Pikus. Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors. Wiley, 1974.
- [29] R. W. Hornbeck. Numerical Methods Quantum Publishers. 1975. New York.
- [30] D. S. Watkins. Fundamentals of Matrix Computations. Wiley, 1991. Singapore.
- [31] C. Juang, K. J. Kuhn e R. B. Darling. Stark shift and field-induced tunneling in $Al_xGa_1 xAs/GaAs$ quantum-well structures. Phys. Rev. B, 41, 12047, 1990.
- [32] G. B. Arfken e H. J. Weber. Mathematical Methods for Physicists. Academic Press., 4 edition, 1995. página 558.
- [33] J. Frenkel. On the Transformation of light into Heats in Solids. Phys. Rev., 37, 17, 1931.
- [34] G. H. Wannier. The Structure of Eletronic Excitation Levels in Insulating Crysta. Phys. Rev., 52, 191, 1937.
- [35] L. Esaki e R. Tsu. Superllatice and Negative Differencial Conductivity in Semiconductors. IBM J. Res. and Dev., 14, 61, 1970.
- [36] S. L. Chuang. Physics of optoelectronic devices. wiley Serie in Pure and Applied Optics. wiley-Interscience publication, 1995. página 102.
- [37] S. R. Andrews, C. M. Murray, R. A. Davies e T. M. Kerr. Stark effect in strongly coupled quantum wells. Phys. Rev. B, 37, 8198, 1988.
- [38] R. P. Leavitt e J. W. Little. Simple method for calculating exciton binding energies in quantum-confined semiconductors structures. Phys. Rev. B, 42, 11774, 1990.
- [39] M. H. Szymanska e P. B. Littlewood. Excitonic binding in coupled quantum wells. Phys. Rev. B, 67, 193305, 2003.
- [40] E.D. Silva, J.A.K. Freire e E.F. Silva Jr. Electric field and interface fluctuation effects in CdTe/Cd₁?xMn_xTe strained quantum wells. Physica E, 17, 227, 2003.
- [41] K. Kayanuma, K. Seo, K. Nishibayashi, A. Murayama, Y. Oka, I.A. Buyanova e W.M. Chen. Transient photoluminescence spectroscopy of spin injection dynamics in double quantum wells of diluted magnetic semiconductors. J. Lumin., **119?120**, 418, 2006.

- [42] D. Ahn. Enhancement of the Stark effect in coupled quantum wells for optical switching devices. IEEE J. Quantum Electron., 25, 2260, 1989.
- [43] Y. Tokuda, K. Kanamoto e N. Tsukada. Self-electro-optic effect based on anticrossing of excitonic transitions in a coupled quantum well structure. Appl. Phys. Lett., 56, 166, 1990.
- [44] H. G. Roskos, M. C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D. A. B. Miller, A. M. Fox, S. Schmitt-Rink e K. Köhler. Coherent submillimeter-wave emission from charge oscillations in a double-well potential. Phys. Rev. Lett., 68, 2216, 1992.
- [45] S. Luryi. Polarization Oscilations in Coupled Quantum Wells A Scheme for the Generation of Submillimeter Electromagnetic Waves. IEEE J. Quantum Electron., 27, 54, 1991.
- [46] N. Shimizu, T.i Furuta, T. Waho e T. Mizuta. Tunneling Time between Resonantly Coupled Quantum Wells: Measurement and Comparison with h/Δε. Jpn. J. Appl. Phys., 29, 1757, 1990.
- [47] M. M. Dignam e J. E. Sipe. Exciton states in coupled double quantum wells in a static electric field. Phys. Rev. B, 43, 4084, 1991.
- [48] C. L. B. Ríos e N. Porras-Montenegro. Magnetoexciton states in GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As double quantum wells: The effects of well-width asymmetry. Phys. Rev. B, 68, 155316, 2003.
- [49] K. Kayanuma, E. Shirado, M. C. Debnath, I. Souma, S. Permogorov e Y. Oka. Tunneling of spin polarized excitons in double quantum wells of Cd_{1-x}Mn_xTe and CdTe. Physica E, 10, 295, 2001.
- [50] M. D. Martin, L. Viña, M. Potemski e K. H. Ploog. On the Spin-Flip Mechanisms of Eletrons in Semiconductor Quantum Wells. Phys. Stat. Sol., 215, 229, 1999.
- [51] S. Luryi. Possibility of a Direct Observation of the Time Evolution in Heterostructure Barrier Tunneling. Sol. St. Comm., 65, 787, 1988.
- [52] C. P. Hilton, W. E. Hagston e J. E. Nicholls. Variational Methods for Calculating Exciton Binding Energies in Quantum Well Structures. J. Phys. A, 25, 2395, 1992.
- [53] B. Kuhn, W. Ossau, A. Waag, R. N. Bicknell-Tassius e G. Landwehr. Excited Excitons States in CdTe/(CdMn)Te Quantum Wells. J. Cryst. Growth, 117, 871, 1992.
- [54] Th. Pier, K. Hieke, B. Henninger, W. Heimbrodt, O. Goede, H.-E. Gumlich, J. E. Nicholls, M. O' Neill, S. J. Weston e B. Lunn. Exciton Transfer in Semimagnetic Double Quantum Well Structures. J. Cryst. Growth, 138, 889, 1994.

[55] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryshik. Table of integrals, series and products. Academic Press, 5 edition, 1994.