

**Bernhard Georg Enders Neto**

**Efeito de Campos Elétricos, Dopagens Não-Abruptas  
e Interfaces Graduais na Estrutura Eletrônica de  
Poços Quânticos de GaAs/AlGaAs e GaN/AlGaN**

Brasília

abril de 2007

Bernhard Georg Enders Neto

**Efeito de Campos Elétricos, Dopagens Não-Abruptas  
e Interfaces Graduais na Estrutura Eletrônica de  
Poços Quânticos de GaAs/AlGaAs e GaN/AlGaN**

Tese apresentada ao programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade de Brasília como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Antonio Luciano de Almeida Fonseca

Universidade de Brasília

Brasília

abril de 2007

*Para minha mãe, que me deu todo suporte inicial e me incentivou a chegar onde estou. Para minha esposa, que me apoiou e fortaleceu, viabilizando a realização de mais um sonho.*

# AGRADECIMENTOS

---

Meus sinceros agradecimentos ao meu orientador, Prof. Antonio Luciano de Almeida Fonseca, por sua paciência durante meu longo período de aprendizado, por suas explicações, sugestões e conselhos práticos, por sua ajuda durante a redação desta tese e, principalmente, por sua amizade.

Ao diretor do Instituto de Física da Universidade de Brasília, Prof. Antônio Cleves Nunes Oliveira, por suas sugestões e suporte administrativo durante a realização desse trabalho.

Ao Prof. Fábio Menezes de Souza Lima que contribuiu de forma fundamental na realização do trabalho de pesquisa e auxiliou na convergência do processo autoconsistente.

A todos os meus professores do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia, que me ofereceram as primeiras bases do conhecimento científico.

A todos os amigos e familiares que de alguma forma contribuíram para a conclusão deste trabalho.

*“Somos aprendizes de uma arte na qual ninguém se torna mestre.”*

*Ernest Hemingway (1899–1961)*

# RESUMO

---

Realizamos estudo sistemático da influência de dois campos de laser intenso linearmente polarizados, em configuração cruzada, nos níveis de energia do elétron e na densidade de estados em poços quânticos de GaAs/AlGaAs. Mostramos que tanto o padrão de confinamento dos portadores de carga quanto a densidade de estados são modificados pela aplicação dos campos. Para radiações intensas de laser polarizado na direção de crescimento da heteroestrutura semicondutora, apenas o perfil da banda de condução é modificado, induzindo fortes desvios para o azul nos níveis de energia que dependem monotonicamente da intensidade e da frequência do laser, além disso, detectamos que tais desvios são mais pronunciados nos níveis de energia mais altos. Por outro lado, polarizações paralelas ao plano das heterointerfaces produzem alterações na densidade de estados, mudando seu perfil suavemente em função da intensidade e frequência do laser aplicado, o que sugere um interessante mecanismo de regulação do laser que pode ser utilizado na prática para ajustar as propriedades ópticas e de transporte de dispositivos semicondutores de baixa dimensionalidade sob ação de laser.

Na ausência de campos, investigamos a influência do perfil não-abrupto de dopagem na densidade do gás de elétrons bidimensional em poços quânticos de GaAs/AlGaAs com interfaces graduais e dopagem modulada em uma das barreiras. Um método de discretização própria para malhas não-uniformes foi proposto a fim de resolver as equações acopladas de Schrödinger e Poisson de maneira autoconsistente. Observamos, para esse sistema, um aumento significativo na densidade bidimensional dos portadores de carga em função do tamanho de difusão dos doadores, apontando assim a provável causa para os baixos valores encontrados em outros trabalhos nos quais um perfil gradual de dopagem não foi considerado. Verificamos ainda que o aumento da largura do espaçador, que separa os portadores de carga das impurezas residuais, diminui o efeito da dopagem gradual no processo de transferência de carga.

Analisamos também o efeito dos campos elétricos internos e das interfaces graduais no perfil da banda de condução e nas energias de transição intersubbanda para poços quânticos de GaN/AlGaN com estrutura wurtzita. Identificamos, mais uma vez, a presença de desvios para azul induzidos pelos campos intensos de polarização bem como pelas interfaces graduais. Enquanto o efeito das polarizações piezoelétrica e espontânea é mais acentuado em poços quânticos mais largos, o efeito produzido pelas interfaces graduais é mais pronunciado para poços mais estreitos, indicando a grande importância desse último efeito em nanodispositivos semicondutores. Um aumento significativo na densidade bidimensional dos portadores de carga em função do tamanho de difusão dos doadores também foi encontrado para poços de GaN/AlGaN com dopagem modulada.

# ABSTRACT

---

A systematic study on the influence of two intense, linearly polarized, nonresonant laser fields, in a crossed configuration, on the electron energy levels and density of states in GaAs/AlGaAs quantum wells is performed. The carrier confinement pattern and the density of states are shown to be modified by the laser beams. For laser field polarizations parallel to the growth direction only the conduction band profile is changed, inducing strong blueshifts on energy levels which depend monotonically on both the laser intensity and frequency, besides, we detected that such blueshifts are larger for higher energy levels. On the other hand, for in-plane polarizations only the density of states is altered, changing its profile smoothly in function of the applied laser intensity and frequency, which suggests an interesting laser tuning mechanism that can be used to adjust the optical and transport properties of low-dimensional semiconductor devices under intense laser fields.

In the absence of laser fields, we investigated the influence of non-abrupt doping profiles on the carrier sheet density in one-side modulation-doped GaAs/AlGaAs graded quantum wells. A proper discretization method for non-uniform meshes was proposed in order to solve the coupled Schrödinger and Poisson equations self-consistently. We noted, for this quantum system, a significant increase in the electron sheet density in function of the donors diffusion length, pointing, therefore, the probable cause for the underestimations in the two-dimensional electron gas density verified in previous works based upon the abrupt doping profile. We also found that the effect of the non-abruptness on the charge transfer is diminished by the increase of spacer layer thickness, which separates the carriers from the remote donors.

The effects of internal electric fields and graded interfaces on the conduction band profile and on the energies of intersubband transitions for GaN/AlGaN quantum wells with wurtzite structure were also analyzed. Once more, the presence of blueshifts induced by intrinsic polarization electric fields and by graded interfaces was identified. While the effect of piezoelectric and spontaneous polarizations is more pronounced for larger quantum wells, the effect produced by the graded interfaces is more pronounced for narrow quantum wells, indicating the great importance of this latter effect on semiconductor nanodevices. A significant increase in the electron sheet density in function of the donors diffusion length was also found for modulation-doped GaN/AlGaN quantum wells.

# SUMÁRIO

---

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

LISTA DE SÍMBOLOS

|       |  |    |
|-------|--|----|
| 1     | INTRODUÇÃO   | 20 |
| 1.1   | Motivação  | 21 |
| 1.2   | Objetivo e Organização                                 | 24 |
| 2     | EFEITO DE CAMPOS DE LASER                              | 25 |
| 2.1   | Introdução   | 25 |
| 2.2   | Formalismo   | 27 |
| 2.2.1 | <i>Laser Polarizado ao Longo de z</i>                  | 30 |
| 2.2.2 | <i>Laser Polarizado ao Longo de x</i>                  | 32 |
| 2.3   | Resultados Obtidos                                     | 36 |
| 3     | EFEITO DE DOPAGENS NÃO-ABRUPTAS E INTERFACES GRADUAIS  | 43 |
| 3.1   | Introdução   | 43 |
| 3.2   | Formalismo   | 45 |
| 3.3   | Transferência de Carga e Perfil de Dopagem Não-Abrupto | 46 |
| 3.4   | Discretização em Malha Não-Uniforme                    | 47 |
| 3.5   | Resultados Obtidos                                     | 49 |
| 4     | EFEITO DE CAMPOS DE POLARIZAÇÃO                        | 51 |



|       |   |     |
|-------|---|-----|
| 4.1   | Interesse pelo GaN  | 51  |
| 4.2   | Características dos Nitretos-III                                  | 53  |
| 4.2.1 | <i>Propriedades Estruturais</i>                                   | 54  |
| 4.2.2 | <i>Polarização Espontânea</i>                                     | 56  |
| 4.2.3 | <i>Polarização Piezoelétrica</i>                                  | 58  |
| 4.2.4 | <i>Cargas Induzidas por Polarização</i>                           | 65  |
| 4.2.5 | <i>Campo e Potencial Elétricos Induzido por Polarização</i>       | 66  |
| 4.3   | Resultados Obtidos  | 68  |
| 5     | CONCLUSÕES  | 74  |
| 5.1   | Trabalhos Futuros   | 76  |
|       | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS  | 77  |
|       | APÊNDICE A – PROPRIEDADES FUNDAMENTAIS DOS MATERIAIS INVESTIGADOS | 87  |
| A.1   | Constantes Físicas Fundamentais                                   | 87  |
| A.2   | Parâmetros do GaAs e de suas Ligas                                | 88  |
| A.3   | Parâmetros do GaN e de suas Ligas                                 | 89  |
|       | APÊNDICE B – MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS                         | 92  |
| B.1   | Aproximações por Diferenças Finitas                               | 92  |
| B.1.1 | <i>Aproximações para a Derivada Primeira</i>                      | 94  |
| B.1.2 | <i>Aproximações para a Derivada Segunda</i>                       | 98  |
| B.1.3 | <i>Erros de Arredondamento</i>                                    | 100 |
| B.2   | Determinação dos Autovalores e Autovetores                        | 102 |
| B.2.1 | <i>Bibliotecas Numéricas</i>                                      | 105 |
| B.3   | Discretização Própria   | 106 |

# LISTA DE FIGURAS

---

- FIGURA 1 Largura da banda proibida de energia das ligas de nitretos nas fases wurtzita e zinco-blenda e dos compostos binários como função da constante de rede basal para a fase zinco-blenda 22
- FIGURA 2 Evolução do número de trabalhos científicos publicados envolvendo os materiais semicondutores GaAs e GaN 23
- FIGURA 3 Direção de propagação e de polarização dos feixes de laser e direção de crescimento da heteroestrutura 29
- FIGURA 4 Modificações no perfil da banda de condução e nos níveis de energia de um QW de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As de 150 Å induzidas por um ILF de CO<sub>2</sub> com polarização paralela ao eixo de crescimento  $z$  37
- FIGURA 5 Desvios provocados nos níveis de energia pelo laser intenso de CO<sub>2</sub> num QW de GaAs/Al<sub>0,35</sub>Ga<sub>0,65</sub>As de 200 Å em função da amplitude de oscilação do elétron no campo de laser 38
- FIGURA 6 Densidade de estados para elétrons confinados em um QW de 150 Å de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As sob ação de dois ILF em configuração cruzada 39
- FIGURA 7 Dependência da densidade de estados com a frequência do laser THz para elétrons confinados em um QW de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As de 150 Å sob ação de dois ILF em configuração cruzada 40
- FIGURA 8 Modelo de interface abrupta e de interface gradual utilizado em nosso cálculo autoconsistente 49
- FIGURA 9 Dependência da densidade superficial de elétrons com o tamanho do espaçador para um QW gradual de GaN/AlGaN 50

- FIGURA 10 Ilustração esquemática da estrutura wurtzita do GaN mostrando as constantes de rede  $a$  e  $c$  e o parâmetro interno  $u$  54
- FIGURA 11 Ilustração esquemática da estrutura cúbica (zinco-blenda) do GaN mostrando a constante de rede basal  $a$  55
- FIGURA 12 Estimativa teórica da polarização espontânea não-linear para ligas ternárias de nitretos III-V com estrutura cristalina wurtzita 57
- FIGURA 13 Evidência de polarização piezoelétrica não-linear com relação à deformação nos nitretos binários com estrutura wurtzita 63
- FIGURA 14 Polarização piezoelétrica das ligas ternárias de nitreto em função da fração molar  $x$  usando a aproximação linear e não-linear 64
- FIGURA 15 Efeito dos campos intrínsecos de polarização no perfil da banda de condução e nos níveis de energias dos estados ligados em um QW não-dopado de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N de largura igual a 20 Å 68
- FIGURA 16 Duas primeiras funções de onda normalizadas sob efeito dos campos intrínsecos de polarização em um QW de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N de largura igual a 20 Å 69
- FIGURA 17 Efeito dos campos internos de polarização nas energias de transição intersubbanda em QWs não-dopados de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N 70
- FIGURA 18 Efeito das interfaces graduais nas energias de transição intersubbanda das duas primeiras subbandas em QWs de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N não-dopados e sem campos internos de polarização 71
- FIGURA 19 Dependência da densidade superficial de elétrons com o tamanho do espaçador em um QW gradual de GaN/AlGaN 72
- FIGURA 20 Malha de pontos uniformemente espaçados 93
- FIGURA 21 Aproximação da derivada primeira da função genérica  $f$  no ponto  $x$  por uma reta secante 94
- FIGURA 22 Pontos utilizados na aproximação para a primeira derivada de  $f$  por diferença avançada 96

- FIGURA 23 Pontos utilizados na aproximação para a primeira derivada de  $f$  por diferença atrasada 97
- FIGURA 24 Pontos utilizados na aproximação de segunda ordem para a primeira derivada de  $f$  por diferença central 98
- FIGURA 25 Erro relativo percentual em função do espaçamento  $\Delta x$  na aproximação da derivada de  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  utilizando precisão dupla 102
- FIGURA 26 Erro relativo percentual em função do espaçamento  $\Delta x$  na aproximação da derivada de  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  utilizando precisão quádrupla 103
- FIGURA 27 Exemplo de discretização própria de um poço de potencial retangular 110

# LISTA DE TABELAS

---

- TABELA 1 Porção central da tabela periódica mostrando os elementos semicondutores 21
- TABELA 2 Níveis de energias calculados na ausência e presença dos campos de laser e desvios para o azul sofridos em decorrência da ILF polarizada ao longo do eixo  $z$  37
- TABELA 3 Valores recomendados pelo CODATA para algumas constantes físicas fundamentais utilizadas neste trabalho 87
- TABELA 4 Valores dos parâmetros básicos utilizados neste trabalho para os compostos binários GaAs, AlAs e InAs a baixas temperaturas 88
- TABELA 5 Valores dos parâmetros básicos utilizados neste trabalho para a liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  a baixas temperaturas 88
- TABELA 6 Valores recomendados para alguns parâmetros básicos dos compostos binários de nitreto com estrutura wurtzita 89
- TABELA 7 Valores recomendados para alguns parâmetros básicos da liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  com estrutura wurtzita 89
- TABELA 8 Valores recomendados para a polarização espontânea e para algumas propriedades elásticas dos compostos binários de nitreto com estrutura wurtzita 90
- TABELA 9 Valores das constantes elásticas e constantes piezoelétricas para a liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  com estrutura wurtzita 91
- TABELA 10 Erro relativo percentual em função de  $\Delta x$  na aproximação da derivada primeira de  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  por diferenças finitas centrais 101

# LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

---

|      |  |    |
|------|--|----|
| GaAs | arseneto de gálio                        | 20 |
| Al   | alumínio                                 | 20 |
| Ga   | gálio                                    | 20 |
| GaN  | nitreto de gálio                         | 21 |
| AlN  | nitreto de alumínio                      | 21 |
| InN  | nitreto de índio                         | 21 |
| 2DEG | gás de elétrons bidimensional            | 22 |
| HEMT | transistor de alta mobilidade eletrônica | 22 |
| ILF  | campo de laser intenso                   | 25 |
| FEL  | laser de elétron livre                   | 25 |
| QW   | poço quântico                            | 25 |
| THz  | terahertz                                | 25 |
| MDQW | poço quântico com dopagem modulada       | 26 |
| EMR  | radiação eletromagnética                 | 26 |
| DOS  | densidade de estados                     | 26 |
| 3DEG | gás de elétrons tridimensional           | 26 |
| DFKE | efeito Franz-Keldysh dinâmico            | 26 |
| MBE  | epitaxia por feixe molecular             | 43 |
| MDF  | método de diferenças finitas             | 44 |
| BC   | banda de condução                        | 46 |
| LED  | diodo emissor de luz                     | 51 |
| WZ   | wurtzita                                 | 53 |
| ZB   | zinco-blenda                             | 54 |
| Si   | silício                                  | 54 |

|        |   |     |
|--------|---|-----|
| CdTe   | telureto de cádmio                                      | 62  |
| HRTEM  | microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução | 70  |
| MOVPE  | epitaxia de fase vapor de metalorgânicos                | 71  |
| CODATA | <i>committee on data for science and technology</i>     | 87  |
| ED     | equação diferencial                                     | 92  |
| EDF    | equação de diferenças finitas                           | 93  |
| ELT    | erro local de truncamento                               | 95  |
| SOR    | método de relaxação sucessiva                           | 105 |
| CGM    | método do gradiente conjugado                           | 105 |
| LAPACK | <i>linear algebra package</i>                           | 105 |

# LISTA DE SÍMBOLOS

---

|  |   |    |
|--|---|----|
| $x$  | fração molar da liga                      | 20 |
| $V_0$  | altura da barreira de potencial           | 27 |
| $\Theta(z)$  | função degrau de Heaviside                | 27 |
| $L$  | largura do poço de potencial              | 27 |
| $z$  | direção de crescimento da heteroestrutura | 27 |
| $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}_\perp, z)$             | função de onda tridimensional             | 27 |
| $S$  | área de normalização                      | 27 |
| $\mathbf{k}$   | vetor de onda plana                       | 27 |
| $\mathbf{r}_\perp$                                     | posição planar                            | 27 |
| $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ | vetores cartesianos unitários             | 27 |
| $\chi_n(z)$  | função de onda envelope                   | 27 |
| $E_n(\mathbf{k})$                                      | espectro de energia                       | 27 |
| $\hbar$  | constante reduzida de Plank               | 27 |
| $\varepsilon_n$  | níveis de energia dos estados ligados     | 27 |
| $m^*$  | massa efetiva do elétron                  | 27 |
| $m_A^*$  | massa efetiva do elétron no poço          | 27 |
| $m_B^*$  | massa efetiva do elétron na barreira      | 27 |
| $\rho(E)$  | densidade de estados                      | 27 |
| $\delta(x)$  | delta de Dirac                            | 27 |
| $g_s$  | fator de degenerescência do spin          | 28 |
| $D(E)$   | densidade de estados por unidade de área  | 28 |
| $L_{\max}$   | largura máxima do poço quântico           | 28 |
| $\mathbf{r}$   | vetor posição                             | 28 |
| $\mathbf{p}$   | operador momento                          | 29 |



|                                    |   |    |
|------------------------------------|---|----|
| $e$                                | carga elementar   | 29 |
| $\mathbf{A}(t)$                    | potencial vetor   | 29 |
| $A_j(t)$                           | componentes do potencial vetor                            | 29 |
| $A_{0j}$                           | intensidade do potencial vetor                            | 29 |
| $F_{0j}$                           | intensidade do campo de laser                             | 29 |
| $\omega_j$                         | freqüência do campo de laser                              | 29 |
| $\mathbf{F}$                       | vetor campo elétrico                                      | 29 |
| $\mathcal{U}$                      | operador unitário   | 30 |
| $\alpha(t)$                        | parâmetro de revestimento do laser                        | 30 |
| $\alpha_{0j}$                      | amplitude de oscilação do elétron no campo de laser       | 30 |
| $V[z - \alpha(t)]$                 | potencial revestido de laser                              | 31 |
| $\tau$                             | tempo de passagem dos elétrons pelo poço                  | 31 |
| $\langle v \rangle$                | velocidade média dos elétrons no poço                     | 31 |
| $\langle V[z - \alpha(t)] \rangle$ | média temporal do potencial revestido de laser            | 31 |
| $V_{DC}$                           | potencial independente do tempo                           | 32 |
| $J_0(x)$                           | função de Bessel de ordem zero                            | 32 |
| $V_{AC}$                           | potencial dependente do tempo                             | 32 |
| $J_\nu(x)$                         | função de Bessel de ordem $\nu$                           | 32 |
| $G^+(n, \mathbf{k}; t > t')$       | função de Green retardada                                 | 33 |
| $D_n(E)$                           | densidade de estados da $n$ -ésima subbanda               | 35 |
| $F_0(k_x)$                         | função auxiliar envolvendo funções de Bessel de ordem par | 35 |
| $\chi_j(z)$                        | função de onda envelope da $j$ -ésima subbanda            | 45 |
| $E_j$                              | $j$ -ésimo nível de energia                               | 45 |
| $\epsilon(z)$                      | constante dielétrica em função da posição                 | 45 |
| $V(z)$                             | energia potencial   | 45 |
| $V_H(z)$                           | potencial de Hartree                                      | 45 |
| $N_D^+(z)$                         | concentração de doadores ionizados                        | 45 |
| $N_A^-(z)$                         | concentração de aceitadores ionizados                     | 45 |
| $n_e(z)$                           | concentração dos portadores de carga                      | 45 |

|  |  |    |
|--|--|----|
| $V_{XC}(z)$                              | potencial de troca e correlação                          | 46 |
| $N_{S_j}$                                | a densidade superficial do 2DEG                          | 46 |
| $E_F$                                    | nível de Fermi   | 46 |
| $L_D$                                    | largura da região de depleção                            | 46 |
| $N_D(z)$                                 | concentração de doadores                                 | 46 |
| $N_A(z)$                                 | concentração de aceitadores                              | 46 |
| $g_D$                                    | fator de degenerescência                                 | 47 |
| $N_D^0$                                  | concentração nominal de dopantes                         | 47 |
| $L_S$                                    | largura do espaçador                                     | 47 |
| $\text{erf}(z)$                          | função erro normalizada                                  | 47 |
| $D_l$                                    | comprimento de difusão dos doadores                      | 47 |
| $N_A^0$                                  | concentração nominal de aceitadores                      | 47 |
| $n$                                      | número total de subintervalos da malha                   | 48 |
| $\Delta z_i$                             | $i$ -ésimo passo da malha não-uniforme                   | 48 |
| $a$                                      | parâmetro ou constante de rede basal                     | 54 |
| $c$                                      | parâmetro ou constante de rede axial                     | 54 |
| $u$                                      | parâmetro interno da estrutura cristalina wurtzita       | 54 |
| $P_{ABN}^{\text{sp}}$                    | polarização espontânea em ligas de nitreto               | 56 |
| $P_{AN}^{\text{sp}}, P_{AN}^{\text{sp}}$ | polarização espontânea em compostos binários de nitretos | 56 |
| $b$                                      | parâmetro de encurvamento                                | 57 |
| $\varepsilon_{kl}$                       | deformação elástica                                      | 58 |
| $\sigma_{ij}$                            | tensão mecânica  | 58 |
| $C_{ijkl}$                               | elementos do tensor elástico                             | 58 |
| $C_{ij}$                                 | constantes elásticas                                     | 58 |
| $S_{ij}$                                 | constantes de deformação elástica                        | 59 |
| $\varepsilon_3$                          | deformação ao longo do eixo $c$                          | 59 |
| $\varepsilon_1$                          | deformação ao longo do plano da base                     | 59 |
| $\nu(0001)$                              | razão de Poisson   | 59 |
| $\sigma_1$                               | tensão no plano da base do cristal                       | 60 |

|                            |  |     |
|----------------------------|--|-----|
| $P_i^{pz}$                 | componentes da polarização piezoelétrica                         | 60  |
| $d_{il}$                   | módulos piezoelétricos   | 60  |
| $e_{kl}$                   | constantes piezoelétricas  | 60  |
| $P^{pz}$                   | polarização piezoelétrica  | 61  |
| $a_{buffer}$               | constante de rede basal da camada de <i>buffer</i>               | 61  |
| $a(x)$                     | constante de rede basal em função da fração molar da liga        | 61  |
| $P_{ABN}^{pz}$             | polarização piezoelétrica das ligas de nitreto                   | 64  |
| $P_{AN}^{pz}, P_{BN}^{pz}$ | polarização piezoelétrica dos nitretos binários                  | 64  |
| $P_{ABN}$                  | polarização total em ligas de nitreto                            | 65  |
| $\nabla P$                 | gradiente de polarização   | 65  |
| $\rho_P$                   | densidade de carga induzida por polarização                      | 65  |
| $\sigma_{ABN}$             | densidade de carga bidimensional para superfícies                | 65  |
| $\sigma_{ABN/GaN}$         | densidade de carga bidimensional para interfaces                 | 65  |
| $F_w$                      | intensidade do campo elétrico no poço                            | 66  |
| $F_b$                      | intensidade do campo elétrico na barreira                        | 66  |
| $L_w$                      | largura do poço  | 66  |
| $L_b$                      | largura da barreira  | 66  |
| $P_w$                      | polarização total no poço  | 67  |
| $P_b$                      | polarização total na barreira                                    | 67  |
| $\epsilon_w$               | constante dielétrica do material do poço                         | 67  |
| $\epsilon_b$               | constante dielétrica do material da barreira                     | 67  |
| $E_{ABN}^g$                | largura da banda proibida para ligas ternárias de nitretos III-V | 90  |
| $\Delta x$                 | passo da malha em $x$  | 93  |
| $R_N$                      | resto de Lagrange  | 95  |
| $\Delta t$                 | intervalo de tempo ou passo da malha em $t$                      | 100 |
| $\Delta y$                 | passo da malha em $y$  | 100 |
| $E_{rel}$                  | erro relativo percentual   | 101 |
| $n$                        | quantidade de intervalos da malha                                | 104 |
| <b>A</b>                   | matriz tridiagonal   | 104 |

|                  |   |     |
|------------------|---|-----|
| $d_i$            | elementos da diagonal principal                   | 104 |
| $e_i$            | elementos não-nulos fora da diagonal principal    | 104 |
| $\lambda$        | autovalores da matriz tridiagonal                 | 104 |
| $x_{\text{esq}}$ | posição na extremidade esquerda da malha          | 107 |
| $x_{\text{dir}}$ | posição na extremidade direita da malha           | 107 |
| $x_0^-, x_0^+$   | pontos de descontinuidade de massa                | 107 |
| $m_{i+1/2}$      | valor da massa em um ponto intermediário da malha | 108 |
| $\theta$         | número real                                       | 108 |
| $\bar{L}$        | largura média do poço quântico discretizado       | 110 |

# 1 INTRODUÇÃO

---

**H**ETEROESTRUTURAS podem ser definidas como estruturas semicondutoras heterogêneas feitas de dois ou mais semicondutores diferentes [1], de tal forma que a região de transição ou interface dos diferentes materiais desempenha um papel essencial na ação de qualquer nanodispositivo. Os semicondutores participantes das heteroestruturas envolvem os elementos da parte central da tabela periódica (veja Tabela 1 na página seguinte). Cada elemento da coluna III pode ser combinado com um elemento da coluna V para formar o chamado composto III-V. Dos elementos mostrados, doze compostos III-V distintos podem ser formados. O composto mais utilizado é o arseneto de gálio (GaAs), mas todos eles podem ser utilizados em heteroestruturas, a escolha depende da aplicação. Na prática, composto III-V são quase sempre utilizados em heteroestruturas, ao invés de isolados. Dois ou mais compostos distintos podem ser usados para formar ligas. Um exemplo comum é o arseneto de gálio-alumínio ( $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ), onde  $x$  é a fração do cristal ocupada por átomos de alumínio (Al) e  $1 - x$  é a fração ocupada por átomos de gálio (Ga). Assim não temos apenas uma quantidade finita de compostos diferentes, mas uma faixa contínua de materiais, já que é possível fazer heteroestruturas de composição gradual, nas quais a composição varia continuamente ao longo da estrutura do dispositivo.

Durante muito tempo as principais heteroestruturas utilizadas na fabricação de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos de baixa dimensionalidade foram aquelas compostas pelo GaAs e suas ligas. Esse fato pode ser explicado devido a uma gama de vantagens oferecidas por esses materiais, dentre elas podemos citar: ótima qualidade de interface, pequena diferença entre as constantes dielétricas das camadas constituintes, baixa concentração de impurezas residuais, alta mobilidade eletrônica a baixa temperatura, possibilidade de alta concentração de dopagem nas barreiras, dentre outras.

TABELA 1 – Porção central da tabela periódica mostrando os elementos das colunas II a VI, utilizados em heteroestruturas.

| II | III | IV | V  | VI |
|----|-----|----|----|----|
|    |     |    | N  |    |
|    | Al  | Si | P  | S  |
| Zn | Ga  | Ge | As | Se |
| Cd | In  |    | Sb | Te |
| Hg |     |    |    |    |

## 1.1 MOTIVAÇÃO

Recentemente o interesse da comunidade científica pelas heteroestruturas compostas por GaAs vem sendo substituído pelos materiais chamados de nitretos do grupo III, compostos por nitreto de gálio (GaN) e suas ligas, conforme mostra a Figura 2. Muitos trabalhos atuais têm sido publicados a respeito da eletrônica dos nitretos do grupo III. Esses resultados experimentais indicam que os efeitos de polarização previstos nos nitretos influenciam sobremaneira a performance dos dispositivos baseados em tais materiais.

De acordo com [Strite e Morkoç \[2\]](#), os nitretos do grupo III foram sintetizados pela primeira vez já em 1928 [\[3\]](#). Todavia o estudo experimental desses materiais foi dificultado por anos pela baixa qualidade das amostras. Somente no início da década de 90, com o progresso da técnica de crescimento epitaxial de cristais, uma melhor qualidade nos filmes de nitretos fabricados foi atingida a um nível suficiente para produção de dispositivos em aplicações práticas. O marco na exploração dos nitretos foi a demonstração em 1991 por [Akasaki et al. \[4\]](#) e [Nakamura, Senoh e Mukai \[5\]](#) de LEDs azuis eficientes baseados em GaN. Guiado pelo sucesso na realização desses dispositivos, o campo de pesquisa em nitretos explodiu nos anos seguintes, como mostra a Figura 2 na página 23. A disponibilidade de boas amostras de heteroestruturas estimulou uma extensa investigação teórica e experimental do GaN e suas ligas com nitreto de alumínio (AlN) e nitreto de índio (InN). Descobriu-se então que as propriedades desses materiais são significativamente diferentes das propriedades de materiais muito melhores explorados como o GaAs e outros semicondutores III-V.

Os semicondutores de banda proibida larga têm atraído grande atenção da comunidade científica devido às suas excelentes propriedades físicas para a fabricação de nanodispos-

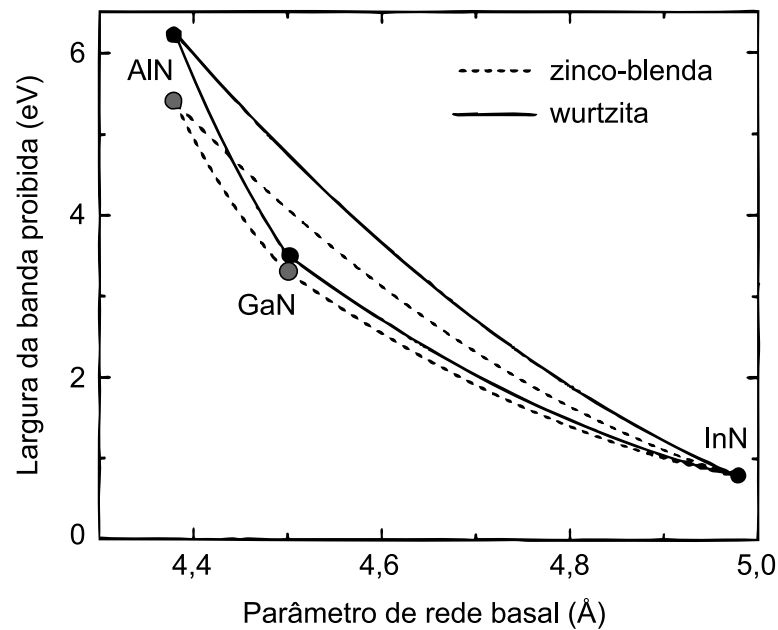


FIGURA 1 – Largura da banda proibida de energia das ligas de nitretos nas fases wurtzita (curvas sólidas) e zinco-blenda (tracejadas) e dos compostos binários (pontos) como função da constante de rede basal para a fase zinco-blenda.

Fonte: [Vurgaftman e Meyer \[6\]](#)

sitivos eletrônicos e ópticos que exigem alta potência, alta frequência e alta temperatura. Os Semicondutores de banda proibida larga mais promissores são os nitretos do grupo III, tais como os compostos binários AlN, GaN e InN. Tais materiais cobrem uma grande variedade de bandas proibidas de energia, desde 1,9 eV para o InN, passando por 3,4 eV para o GaN e chegando a 6,2 eV para o AlN, conforme pode ser verificado pela Figura 1. A separação espacial entre os portadores de carga no gás de elétrons bidimensional (2DEG) e os doadores ionizados faz do transistor de alta mobilidade eletrônica (HEMT) composto por GaN/AlGaN um dos dispositivos preferidos pela indústria da nanotecnologia. Adicionalmente, por causa dos grandes coeficientes piezoelétricos e da falta de casamento entre as constantes de rede entre AlN e GaN, um campo elétrico de polarização, induzido pela tensão da rede, é gerado na heterojunção ou no poço quântico de GaN/AlGaN e pode induzir uma alta densidade de carga. Trabalhos recentes [7] mostraram que a polarização espontânea aparece também na fase wurtzita dos nitretos-III e é comparável à polarização piezoelétrica. Desse modo, ambos efeitos de polarização contribuem para a formação do campo de polarização e podem induzir um grande 2DEG.

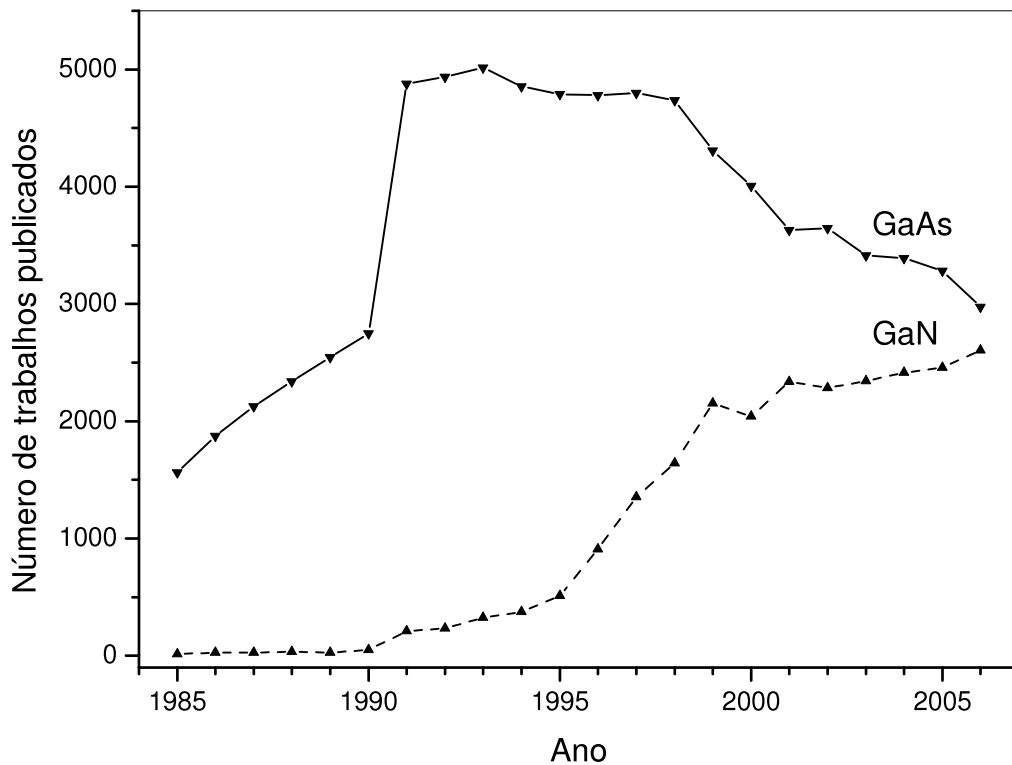


FIGURA 2 – Evolução do número de trabalhos científicos publicados envolvendo os materiais semicondutores GaAs e GaN.

Fonte: ISI *Web of Science*, disponível em: <http://isiknowledge.com>

Alguns dos efeitos peculiares aos nitretos já foram explicados. Contudo, devido à aplicação recente desses materiais à indústria e também devido às imperfeições estruturais típicas dos cristais epitaxiais crescidos com as técnicas empregadas atualmente, o entendimento preciso e detalhado da física dos nitretos do grupo III ainda está por vir.

Provavelmente, a área menos explorada e compreendida na física emergente dos nitretos do grupo III é a eletrostática desses materiais e, em particular, os efeitos da polarização elétrica. Tal deficiência pode ser explicada, em parte, pelo surgimento tardio da teoria quântica da polarização elétrica em cristais, que ficou conhecida somente em 1992 [8, 9, 10, 11]. Além disso, a maioria dos desenvolvimentos da teoria de polarização elétrica em cristais e subseqüentes aplicações práticas foram realizados, em grande parte, com materiais ferroelétricos e dielétricos, enquanto o primeiro esforço para aplicar tal teoria a materiais semicondutores é datado de 1997 [12].

Entender o papel que a polarização macroscópica desempenha nos nitretos do grupo III tem importantes implicações práticas e teóricas. Campos intensos de polarização em



heteroestruturas baseadas em GaN são responsáveis por uma alta corrente crítica e desvio para o vermelho em lasers de pequeno comprimento de onda [13]. Em estruturas de transição intersubbanda de grande comprimento de onda, os campos elétricos induzidos pela polarização aumentam o tempo de relaxação e reduz a altura efetiva da barreira [14]. O gás de elétrons bidimensional (2DEG) induzido pela polarização em HEMTs permite atingir concentrações de portadores de carga de até  $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , resultando em dispositivos de excelente performance [15]. Para projetar esses e outros dispositivos de nitretos do grupo III e otimizar suas características um conhecimento sólido dos efeitos de polarização faz-se necessário.

## 1.2 OBJETIVO E ORGANIZAÇÃO

O objetivo do presente trabalho é investigar a influência de campos elétricos (externos e internos), perfis de dopagem e interfaces graduais em algumas propriedades eletrônicas relevantes em poços quânticos simples de GaAs/AlGaAs e GaN/AlGaN. O texto está organizado da seguinte maneira:

No [Capítulo 2](#) apresentamos o formalismo matemático utilizado na investigação dos efeitos de dois campos de laser intenso não-ressonante e de grande comprimento de onda na densidade de estados e nos níveis de energia dos elétrons confinados em poços quânticos simples de GaAs/AlGaAs.

O [Capítulo 3](#) traz o estudo da influência de perfis não-abruptos de dopagem na estrutura eletrônica de poços quânticos de GaAs/AlGaAs com dopagem modulada em uma das barreiras de AlGaAs e com interfaces graduais. Ênfase é dada na dependência da densidade superficial dos portadores com a largura do espaçador e com o tamanho de difusão dos doadores.

Os efeitos de campo elétrico interno, interfaces graduais e dopagens não-abruptas nas energias de transição intersubbanda, no potencial de confinamento e na densidade do gás de elétrons bidimensional em poços quânticos de GaN/AlGaN sujeitos aos efeitos não-lineares das polarizações espontânea e piezoelétrica é o tema do [Capítulo 4](#).

Finalmente, no [Capítulo 5](#), apresentamos as conclusões finais, destacando os resultados mais importantes obtidos, e descrevemos as possibilidades de trabalhos futuros.

## 2 EFEITO DE CAMPOS DE LASER

---

NESTE CAPÍTULO apresentamos o formalismo matemático utilizado na investigação dos efeitos de dois campos de laser intenso não-ressonante e de grande comprimento de onda sobre a densidade de estados e nos níveis de energia dos elétrons confinados em poços quânticos simples de GaAs/AlGaAs. Os resultados obtidos revelam a presença de desvios para o azul nos níveis de energia e uma alteração significativa na densidade de estados. Ambos os efeitos apresentam dependência monotônica com a intensidade e a frequência dos lasers incidentes, o que sugere um mecanismo de sintonia do laser no qual seja possível, por exemplo, melhorar o desempenho de dispositivos optoeletrônicos em presença de campos de laser.

### 2.1 INTRODUÇÃO

Com o advento de fontes de laser linearmente polarizadas, de grande potência e grande comprimento de onda, novas possibilidades surgiram no estudo da interação do campo de laser intenso (ILF) com elétrons em semicondutores [16, 17, 18]. No caso particular de heteroestruturas semicondutoras, a situação é ainda mais interessante devido à possibilidade de confinamento dos portadores de carga dentro de uma região nanométrica, reduzindo assim a dimensionalidade do sistema. Essa possibilidade de confinamento foi investigada com o uso de fontes de laser ajustáveis de alta qualidade, como o laser de CO<sub>2</sub> ou laser de elétron livre (FEL), aplicadas a sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade [19, 20]. Como consequência, alguns fenômenos importantes associados com o 2DEG induzido por laser foram previstos teoricamente [21, 22, 23] e observados [24, 25] em laboratório.

Cálculos teóricos das mudanças induzidas por ILF no nível de energia da primeira subbanda [26] e na mobilidade [27] para elétrons em poço quântico (QW), além da energia de ligação de uma impureza hidrogenóide confinada em QW [28], já foram desenvolvidos. As taxas de espalhamento elétron-fônon e elétron-impureza, sob radiação terahertz (THz)

para elétrons em uma heterojunção simples foram calculadas por Cao e Lei [29]. Essencialmente, o mesmo formalismo foi considerado no estudo de mecanismos de regulação para emissão de laser [26] e tunelamento ressonante induzido por laser [30] em uma heteroestrutura de barreira dupla. No caso de poço quântico com dopagem modulada (MDQW), um ajuste similar foi encontrado [31, 32] para a densidade do 2DEG. Aliás, na presença de uma radiação eletromagnética (EMR) linearmente polarizada, modificações na densidade de estados (DOS) em gás de elétrons tridimensional (3DEG) [23, 33] e em 2DEG [23] foram sistematicamente investigados, levando à predição teórica do efeito Franz-Keldysh dinâmico (DFKE) [23], que foi detectado em 1997 por Kono et al. [34].

No caso de um quase-2DEG, isto é, um gás de elétrons confinado em uma região do poço de largura finita, efeitos importantes de radiação THz foram obtidos para a dependência da DOS com a energia do elétron em QWs modelados com alturas de barreira finitas [35] e infinitas [36]. Nesses trabalhos, Xu tratou a interação elétron-fônon de forma exata, considerando o caso mais geral, qual seja o de feixes de laser compostos por fótons ressonantes, levando em consideração, desse modo, processos de absorção e emissão. Como conseqüência, os somatórios e as integrais envolvidas nas expressões obtidas para a correção do DOS devido à presença de campos de laser são demasiadamente grandes. No entanto, a possibilidade de obter modificações na estrutura eletrônica de um quase-2DEG induzido por laser e confinado em um QW com larguras e alturas finitas usando apenas feixe de laser não-ressonante<sup>1</sup> ainda não havia sido explorada, apesar do fato de as expressões matemáticas envolvidas serem relativamente simples.

Tendo em vista que a DOS é um dos elementos centrais no cálculo de quase todas as propriedades físicas mensuráveis, consideramos relevante a tarefa de investigar em detalhes as mudanças induzidas nessa propriedade devido à incidência de uma fonte não-ressonante de laser intenso em QWs. Ademais, a possibilidade de aumentar o desvio para o azul (*blue-shift*), induzido por laser, nos níveis de energia do elétron pela aplicação simultânea de dois feixes de laser linearmente polarizados, em uma configuração cruzada, não foi investigada até hoje. Julgamos também ser importante investigar como a presença de laser intenso não-ressonante e de grande comprimento de onda afeta o perfil de potencial, os níveis de energia e a DOS para elétrons confinados em um QW simples.

---

<sup>1</sup>A condição de não-ressonância entre a frequência do laser e a estrutura do QW foi observada em nossos cálculos. Tal condição simplesmente requer que a frequência do laser esteja abaixo do valor crítico para o qual a energia do fóton poderia atingir qualquer energia de transição relevante para os portadores no QW.

## 2.2 FORMALISMO

Na ausência de radiação eletromagnética, os níveis de energia e a densidade de estados podem ser facilmente computados para elétrons quase-2D confinados em poços quânticos com barreiras de altura finita, dentro da aproximação da massa efetiva. Nesse caso o potencial é dado por

$$V_0(z) = V_0 \Theta \left( |z| - \frac{L}{2} \right), \quad (2.1)$$

onde  $V_0$  é a altura da barreira,  $\Theta(z)$  é a função degrau de Heaviside e  $L$  é a largura do poço. Se considerarmos o eixo  $z$  como sendo perpendicular as interfaces do QW, a função de onda do elétron quase-2D é dada então por [37, 38, 39]

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}_\perp, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\perp} \chi_n(z), \quad (2.2)$$

onde  $S$  é a área de normalização,  $\mathbf{k} \equiv k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}$  é o vetor de onda plana,  $\mathbf{r}_\perp \equiv x \hat{\mathbf{x}} + y \hat{\mathbf{y}}$  é a posição planar e  $\chi_n(z)$  representa a função de onda envelope. O espectro de energia pode então ser obtido de

$$E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}, \quad (2.3)$$

onde cada subbanda é identificada pelo índice  $n = 1, 2, \dots$  tal que  $\varepsilon_n$  representa os níveis de energia dos estados ligados,  $\hbar = h/2\pi$  representa a constante reduzida de Plank (vide Tabela 3 na página 87) e  $m^*$  é a massa efetiva do elétron.

No caso de QWs não-dopados, as energias  $\varepsilon_n$  são os autovalores de um operador Hamiltoniano que descreve o movimento do elétron em um poço quântico retangular. Esses autovalores são as soluções de certas equações transcendentais que surgem das condições de contorno para  $\chi_n(z)$  e  $\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial \chi_n}{\partial z}$  nas heterointerfaces [37, 39]. Esta última condição de contorno envolve as massas efetivas (dependentes da posição) do canal e da barreira,  $m_A^*$  e  $m_B^*$ , respectivamente. Uma vez que todos os níveis de energia ligados foram determinados, a DOS pode ser calculada pela sua formulação geral, ou seja,

$$\rho(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta[E - \varepsilon(\mathbf{k})]. \quad (2.4)$$

Para o caso mais simples de elétrons 2D em QW retangular, esse somatório corresponde à

seguinte expressão integral [39]:

$$\rho(E) = g_s \sum_n \frac{S}{4\pi^2} \iint \delta \left[ E - \varepsilon_n - \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \right] dk_x dk_y, \quad (2.5)$$

onde  $g_s (=2)$  é o fator de degenerescência do spin e  $m^*$  é a média de  $m^*(z)$ , ou seja, é massa efetiva média ao longo da direção de crescimento. A integral na Eq. (2.5) pode ser resolvida em termos da função degrau de Heaviside usando coordenadas polares no espaço  $\mathbf{k}$ . Isso reduz a expressão para a densidade de estados (por unidade de área) a

$$\frac{\rho(E)}{S} \equiv D(E) = \rho_0 \sum_n \Theta(E - \varepsilon_n), \quad (2.6)$$

onde  $\rho_0 \equiv g_s m^* / (2\pi\hbar^2)$  é a unidade “natural” para essa quantidade. A Eq. (2.6) descreve o perfil escada usual para a dependência da DOS 2D com a energia dos portadores na ausência de campos externos [39].

Já que estamos interessados em elétrons pertencentes a um quase-2DEG, sujeito a um ILF não-ressonante e de grande comprimento de onda, o primeiro passo é verificar, para um determinado QW, se a energia do fóton é menor que a largura da banda proibida do material do poço e se está abaixo da energia de excitação intersubbanda, condição que assegura a ausência de processos de emissão ou absorção.

Visto que, para determinada altura da barreira  $V_0$ , a energia intersubbanda diminui com o aumento da largura do poço [38], estabelecemos uma largura máxima  $L_{\max}$  para o poço acima da qual a condição de não-ressonância não é observada. Depois disso, escolhemos um certo  $L < L_{\max}$  a fim de determinar o potencial efetivo e os correspondentes níveis de energia dos estados ligados, levando em consideração uma aproximação não-perturbativa desenvolvida, inicialmente, para descrever o comportamento de átomos sob campo de laser intenso [40]. Se levarmos em consideração a equação de Schrödinger semiclássica (dependente do tempo) para um elétron se movendo sob as força combinadas do poço quântico retangular e do campo de laser e assumirmos que o campo de radiação pode ser descrito, na região do espaço fisicamente relevante, por uma aproximação de dipolo, então, sob essas condições, a equação de Schrödinger de um elétron no calibre do momento é dada por

$$\left[ \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V_0(z) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.7)$$

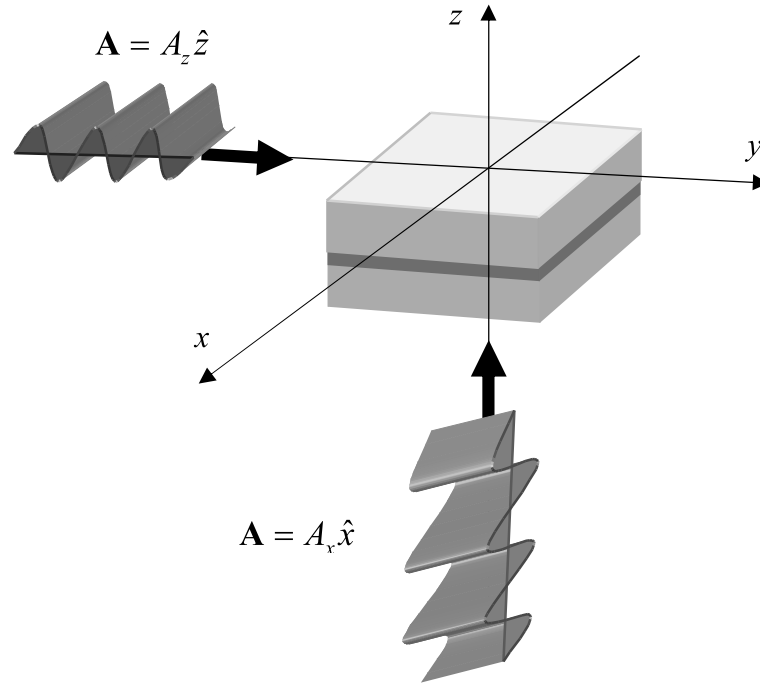


FIGURA 3 – Direção de propagação e de polarização dos feixes de laser e direção de crescimento da heteroestrutura.

onde  $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$  é o operador momento,  $e$  é a carga elementar e  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$  é o potencial vetor criado pela EMR. No presente estudo estamos interessados somente em radiações de campo de laser para as quais  $\mathbf{A}(t)$  é paralelo ao plano ou à direção de crescimento, isto implica em

$$\mathbf{A}(t) = A_x(t) \hat{\mathbf{x}} \quad (2.8)$$

ou

$$\mathbf{A}(t) = A_z(t) \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.9)$$

A dependência temporal de tais campos de laser é assumida como sendo dada por

$$A_j(t) = A_{0j} \text{sen}(\omega_j t) \quad (2.10)$$

$$A_{0j} = \frac{F_{0j}}{\omega_j} \quad \text{com } j = \{x, z\}, \quad (2.11)$$

onde  $F_{0j}$  e  $\omega_j$  representam, respectivamente, a intensidade e a frequência dos campos de laser. Como de costume, o potencial vetor está relacionado ao campo elétrico via

$$\mathbf{F} = -\partial \mathbf{A} / \partial t. \quad (2.12)$$

Note que a equação de Schrödinger, Eq. (2.7), está escrita para um referencial móvel conhecido como referencial de Kramers [40]. Na Figura 3 na página precedente indicamos a direção de crescimento (eixo  $z$ ) e a direção de polarização e propagação de cada feixe de laser. Observe que o feixe de laser que se propaga ao longo do eixo  $y$  está polarizado na direção do eixo  $z$  e o feixe que se propaga ao longo do eixo  $z$  está polarizado na direção  $x$ .

### 2.2.1 Laser Polarizado ao Longo de $z$

O efeito de uma EMR polarizada paralelamente ao eixo  $z$  nos estados eletrônicos pode ser obtido pela separação do potencial efetivo em duas partes, uma parte dependente do tempo (AC) e outra parte independente do tempo (DC). Os autovalores e as autofunções da parte DC constituem o espectro de energia do sistema, enquanto a parte AC pode ser tratada como uma perturbação. A separação da energia potencial advém de uma transformação unitária [30, 41] na qual

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \xrightarrow{\mathcal{U}} \phi(\mathbf{r}, t), \quad (2.13)$$

em que o operador unitário  $\mathcal{U}$  é dado por

$$\mathcal{U} \equiv \exp [i\boldsymbol{\alpha}(t) \cdot \nabla] \exp [i/\hbar g(t)], \quad (2.14)$$

onde  $\boldsymbol{\alpha}(t)$  é conhecido por *parâmetro de revestimento do laser* [28] e é dado por

$$\boldsymbol{\alpha}(t) \equiv -\frac{e}{m^*} \int_0^t A_z(t') \hat{\mathbf{z}} dt' = \alpha_{0z} \cos(\omega_z t) \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.15)$$

em que

$$\alpha_{0z} \equiv \frac{eA_{0z}}{m^* \omega_z} \quad (2.16)$$

e

$$g(t) \equiv -\frac{e^2}{2m^*} \int_0^t [A_z(t')]^2 dt'. \quad (2.17)$$

A aplicação desses operadores muda a Eq. (2.7) para

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V[z - \alpha(t)] \right\} \phi(z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(z, t), \quad (2.18)$$

na qual o potencial depende do tempo,

$$V[z - \alpha(t)] = V_0 \Theta \left[ |z - \alpha_{0z} \cos(\omega_z t)| - \frac{L}{2} \right], \quad (2.19)$$

é conhecido como *potencial revestido de laser* [26, 28, 42] e tem a mesma forma de um potencial comum, porém transladado no eixo  $z$  por uma quantidade  $\alpha(t)$ , dada por

$$\alpha(t) = -\frac{e}{m^*} \left[ \int_0^t A_z(t') dt' \right]. \quad (2.20)$$

A Eq. (2.18) revela que os estados eletrônicos podem ser descritos, alternativamente, por uma equação que corresponde ao movimento do elétron num QW cujo potencial depende do tempo e oscila em fase com o campo de laser externo. Note que as modificações induzidas no potencial do poço são altamente dependentes da frequência  $\omega_z$  por meio do parâmetro  $\alpha(t)$ . Se o período do laser é muito maior que o tempo de passagem  $\tau = 2L/\langle v \rangle$  dos elétrons pelo poço, onde  $\langle v \rangle$  é a velocidade média dos elétrons no QW, então dizemos que os elétrons se movem muito rápido e, portanto, não sofrem o efeito das modificações induzidas no potencial pelo campo de laser. Conseqüentemente, nesse limite de baixas frequências (ou limite adiabático), isto é, para  $\omega_z \tau \ll 1$ , podemos ignorar os efeitos de modulação produzidos pelo laser e a Eq. (2.18) é reduzida à forma padrão na qual o potencial não depende do tempo.

Por outro lado, no limite em que  $\omega_z \tau \gg 1$ , o movimento do elétron é dominado pela oscilação do potencial dependente do tempo sob influência do campo de laser e, conseqüentemente, ele “enxerga” o potencial revestido de laser, que é, naturalmente, diferente do potencial retangular observado na ausência de campos externos. Desse modo, os auto-estados do Hamiltoniano revestido de laser são dependentes tanto da frequência do laser quanto de sua intensidade. Como  $V[z - \alpha(t)]$  é uma função periódica para toda posição  $z$ , os auto-estados correspondentes ao limite de altas frequências podem ser encontrados considerando [43] o elétron como estando sujeito a um potencial médio  $\langle V[z - \alpha(t)] \rangle$ . Levando-se em consideração esse potencial médio, os auto-estados revestidos de laser são as soluções de

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V_{DC}(z) \right] \phi_m(z) = E_m \phi_m(z), \quad (2.21)$$



onde

$$V_{\text{DC}} = \sum_k V_k J_0(k\alpha_{0z}) e^{ikz} \quad (2.22)$$

é o termo dominante na expansão do potencial médio na série de Fourier

$$V[z - \alpha(t)] = \sum_k \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} (-i)^\nu V_k J_\nu(k\alpha_{0z}) e^{ikz} e^{-i\nu\omega_z t}, \quad (2.23)$$

visto que os termos de absorção (positivos) para os quais  $\nu \neq 0$ , que constituem o potencial dependente do tempo  $V_{\text{AC}}$ , oscilam muito rápido e são, portanto, relativamente pequenos e podem ser desprezados. Em conseqüência, o primeiro termo — o termo de ordem zero — é o termo dominante da expansão e resulta exatamente na Eq. (2.22), na qual  $J_\nu(x)$  é a função de Bessel de ordem  $\nu$  e  $V_k$  é dado por

$$V_k = V_0 \frac{e^{-ik\frac{l}{2}} - e^{ik\frac{l}{2}}}{ik}. \quad (2.24)$$

### 2.2.2 Laser Polarizado ao Longo de $x$

O efeito do ILF polarizado ao longo do eixo  $x$  nos estados eletrônicos pode ser obtido pela integração direta da Eq. (2.21) em  $t$ , da Eq. (2.10) sabemos que

$$\mathbf{A}(t) = A_{0x} \text{sen}(\omega_x t) \hat{\mathbf{x}}, \quad (2.25)$$

isso nos conduz à seguinte função de onda (exata) dependente do tempo:

$$\begin{aligned} \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = & \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, 0) \exp\{-i/\hbar [E_n(\mathbf{k}) + 2\gamma\hbar\omega_x] t\} \exp\{i\alpha_{0x} k_x [1 - \cos(\omega_x t)]\} \\ & \cdot \exp[i\gamma \text{sen}(2\omega_x t)], \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde  $2\gamma\hbar\omega_x$  é a energia do campo de laser e

$$\mathbf{r} = (\mathbf{r}_\perp, z) \quad (2.27)$$

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, 0) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\perp} \chi_n(z) \quad (2.28)$$

$$\alpha_{0x} \equiv \frac{eA_{0x}}{m^* \omega_x} \quad (2.29)$$

$$\gamma \equiv \frac{e^2 A_{0x}^2}{8m^* \hbar \omega_x}. \quad (2.30)$$

A função de onda representada pela Eq. (2.26) permite a separação da equação de Schrödinger dependente do tempo em uma equação diferencial ordinária independente do

tempo que descreve o movimento do elétron ao longo do eixo  $z$ ,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right] + V_0(z) \right\} \chi_n(z) = \varepsilon_n \chi_n(z). \quad (2.31)$$

A função de onda dependente do tempo na Eq. (2.26) está relacionada à amplitude de probabilidade de um processo no qual adiciona-se um elétron em um estado  $|n', \mathbf{k}'\rangle$  no tempo  $t'$  ao sistema e ele evolui para o estado  $|n, \mathbf{k}\rangle$  no tempo  $t$ . Essa probabilidade é dada por

$$\int d^3r \Psi_{n', \mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}, t') \Psi_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \delta_{n, n'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} h(n, \mathbf{k}; t, t'), \quad (2.32)$$

com

$$\begin{aligned} h(n, \mathbf{k}; t, t') &\equiv \exp \left\{ -i/\hbar [E_n(\mathbf{k}) + 2\gamma\hbar\omega_x] (t - t') \right\} \\ &\cdot \exp \left\{ -i\alpha_{0x} k_x [\cos(\omega_x t) - \cos(\omega_x t')] \right\} \\ &\cdot \exp \left\{ i\gamma [\sin(2\omega_x t) - \sin(2\omega_x t')] \right\}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Agora vamos introduzir o propagador retardado, ou função de Green retardada, no espaço  $(n, \mathbf{k}; t)$ , para elétrons não-interagentes [44]

$$G^+(n', \mathbf{k}'; n, \mathbf{k}; t > t') = \delta_{n, n'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G^+(n, \mathbf{k}; t > t'), \quad (2.34)$$

onde

$$G^+(n, \mathbf{k}; t > t') = -i/\hbar \Theta(t - t') h(n, \mathbf{k}; t, t'). \quad (2.35)$$

Essa é uma função de Green especial que é solução de

$$\left[ \varepsilon_n + \frac{(\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A})^2}{2m^*} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] G^+(n, \mathbf{k}; t > t') = \delta(t' - t) \quad (2.36)$$

no espaço  $(n, \mathbf{k}; t)$  e

$$\left[ \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m^*} + V_0(z) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] G^+(n, \mathbf{k}; t > t') \Psi_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, 0) = \delta(t' - t) \Psi_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, 0) \quad (2.37)$$

no espaço real, onde  $n$  e  $\mathbf{k}$  são números quânticos. Então  $G^+(n, \mathbf{k}; t > t')$  é a verdadeira função de Green no espaço  $(n, \mathbf{k}; t)$ . Convertendo as funções exponenciais do tipo  $\exp(ix \cos y)$  e  $\exp(ix \sin y)$ , presentes na Eq. (2.33), em funções de Bessel por meio da seguinte identidade,

$$\exp[(-i\lambda_i/\hbar\omega_i) \cos \omega_i t] = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (-i)^j J_j(\lambda_i/\hbar\omega_i) e^{-ij\hbar\omega_i t}, \quad (2.38)$$

a transformada de Fourier da função de Green retardada, definida como

$$G_{n,\mathbf{k}}^+(E, t') = \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \exp[i/\hbar (E + i\eta)(t-t')] G^+(n, \mathbf{k}; t > t'), \quad (2.39)$$

pode então ser simplificada para

$$G_{n,\mathbf{k}}^+(E, t') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{F}_m(k_x, t')}{E - E_n(\mathbf{k}) - 2\gamma\hbar\omega_x - m\hbar\omega_x + i\eta}, \quad (2.40)$$

na qual a quantidade infinitesimal  $i\eta$  foi introduzida a fim de evitar divergências. A função auxiliar na soma é dada por

$$\tilde{F}_m(k_x, t') = (-1)^m F_m(k_x) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n J_{m+n}(\alpha_{0x} k_x) \exp\{i[n\omega_x t' - \gamma \text{sen}(2\omega_x t')]\}, \quad (2.41)$$

onde  $J_m(x)$  é uma função de Bessel. A função  $F_m(k_x)$  pode também ser expressa em termos das funções de Bessel,

$$F_m(k_x) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{J_l(\gamma)}{1 + \delta_{l,0}} \left[ J_{2l-m}(\alpha_{0x} k_x) + (-1)^{m+l} J_{2l+m}(\alpha_{0x} k_x) \right]. \quad (2.42)$$

As propriedades do estado estacionário podem ser encontradas pela média das soluções sobre o tempo inicial  $t'$  e tomando a média de  $t'$  sobre a periodicidade do campo de radiação [23], isto é, resolvendo

$$\frac{\omega_x}{2\pi} \int_{-\pi/\omega_x}^{+\pi/\omega_x} dt' G_{n,\mathbf{k}}^+(E, t'), \quad (2.43)$$

obtemos a função de Green média, que é dada por

$$G_{n,\mathbf{k}}^*(E) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{F_m^2(k_x)}{E - E_n(\mathbf{k}) - 2\gamma\hbar\omega_x - m\hbar\omega_x + i\eta}. \quad (2.44)$$

É interessante notar que essa função complexa possui as seguintes propriedades:

$$\int dE \text{Re} \{G_{n,\mathbf{k}}^*(E)\} = 0$$

e

$$\int dE \text{Im} \{G_{n,\mathbf{k}}^*(E)\} = -\pi,$$

com

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} F_m^2(k_x) = 1.$$

A DOS induzida por laser para elétrons ocupando a  $n$ -ésima subbanda pode agora ser determinada por meio da parte imaginária da transformada de Fourier dessa função de

Green, isto é,

$$D_n(E) = -(g_s/\pi) \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} \{G_{n,\mathbf{k}}^*(E)\}.$$

Visto que  $\mathbf{k}$  é um vetor quase-contínuo, a habitual conversão do somatório em integral de volume no espaço  $\mathbf{k}$  se aplica, resultando na seguinte expressão para a DOS induzida por laser na  $n$ -ésima subbanda:

$$D_n(E) = \frac{2}{\pi} \rho_0 \sum_{m=0}^{\infty} \Theta(\bar{E}_{n\gamma m}) \int_0^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} F_m^2 \left( \xi \frac{\sqrt{2m^* \bar{E}_{n\gamma m}}}{\hbar} \right), \quad (2.45)$$

onde  $\bar{E}_{n\gamma m} \equiv E - \varepsilon_n - 2\gamma\hbar\omega_x - m\hbar\omega_x$ .

Como mostrado em outros trabalhos [36,35], o processo de absorção e emissão do fóton pode induzir grandes mudanças na DOS de sistemas eletrônicos quase-2D, principalmente para radiações de campo de laser de baixas frequências  $\omega_x$  e grande intensidade,  $F_{0x}$  grande. Existe, contudo, uma carência de investigação sistemática da ocorrência de tais mudanças no caso específico de campos de laser não-ressonantes, e achamos que isso pode ser devido à aparente contradição na indução de mudanças na DOS bidimensional — e portanto nas propriedades ópticas das heteroestruturas —, com fótons não-ressonantes. No entanto, isso não é verdade para um sistema cuja dimensionalidade pode ser reduzida pela aplicação de um ILF na estrutura do QW, conforme investigamos neste trabalho. No caso de um feixe de laser não-ressonante, se a frequência de radiação é tal que  $\omega_x \tau \gg 1$ , então a oscilação rápida das funções de Bessel anularão suas integrais e somente o termo correspondente a  $m = 0$  na Eq. (2.45) irá permanecer, reduzindo o somatório a apenas um único termo. Explicitamente, a DOS por unidade de área na  $n$ -ésima subbanda resulta em

$$D_n(E) = \frac{2}{\pi} \rho_0 \Theta(E - \varepsilon_n - 2\gamma\hbar\omega_x) \int_0^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} F_0^2 \left( \xi \frac{\sqrt{2m^* (E - \varepsilon_n - 2\gamma\hbar\omega_x)}}{\hbar} \right), \quad (2.46)$$

na qual

$$F_0(k_x) = J_0(\gamma) J_0(\alpha_{0x} k_x) + 2 \sum_{l>0, \text{par}} J_l(\gamma) J_{2l}(\alpha_{0x} k_x) \quad (2.47)$$

depende da intensidade e da frequência do laser. Note que a DOS total,  $D(E)$ , poder ser facilmente obtida da Eq. (2.46) acima para  $D_n(E)$  simplesmente fazendo

$$D(E) = \sum_n D_n(E). \quad (2.48)$$

No limite de baixos campos  $e/$ ou altas frequências, ambos os parâmetros do laser  $\gamma$  e  $\alpha_{0x}$  tendem a zero e assim  $F_0(k_x) \rightarrow 1$ , já que  $\lim_{x \rightarrow 0} J_n(x) = \delta_{n,0}$ . Nesse caso, a DOS recupera seu perfil escada usual na ausência de campos externos, como expresso pela Eq. (2.6).

## 2.3 RESULTADOS OBTIDOS

Como foi apontado por Jauho e Johnsen [23], a interação do campo de laser intenso com o 2DEG resulta em desvios para o azul em todos os níveis de energia ligados devido ao DFKE, tanto para campos de radiação ressonantes quanto para campos não-ressonantes com polarização no plano de crescimento. Contudo, a possibilidade de induzir tais desvios com ILF não-ressonante, polarizado perpendicularmente à camada de confinamento, ainda não havia sido investigada. Essa possibilidade foi analisada no presente estudo, onde desenvolvemos cálculos numéricos sistemáticos para elétrons em QWs simples de GaAs/AlGaAs sujeitos a um feixe de laser monocromático de CO<sub>2</sub>, polarizado ao longo do eixo  $z$  e propagando-se na direção do eixo  $y$  com frequência  $\omega_z = 1,78 \times 10^{14}$  Hz e amplitude  $F_{0z} = 180$  kV/cm. Com esses valores, uma amplitude de oscilação de  $\alpha_{0z} \sim 15$  Å foi obtida.

Para o QW de GaAs/AlGaAs utilizamos os parâmetros apresentados nas Tabelas 4 e 5 do Apêndice A na página 87. Além disso, consideramos uma descontinuidade de banda  $V_0(x) = 60\% \Delta E_g$ . Assumindo [45, 46] uma mobilidade eletrônica de  $\sim 5 \times 10^6$  cm<sup>2</sup>/Vs encontramos  $\omega_z \tau \sim 9535$  para uma fração molar  $x = 0,3$  ( $V_0 = 227,9$  meV), que garante a validade das aproximações assumidas no esquema do potencial revestido de laser, vide Eqs. (2.18) e (2.21). Para essa fração molar de alumínio, a condição de ressonância está garantida para larguras de poço equivalentes a  $L_{\max} = 190$  Å. Dentro dessa faixa, tomamos uma largura de poço igual a 150 Å e calculamos cada nível de energia ligado (na ausência de campos externos) em relação ao fundo do QW. Esses níveis de energia são representados pelas linhas tracejadas na Figura 4 na próxima página, juntamente com o perfil modulado da banda de condução e os níveis de energias modificados pelo laser (linhas horizontais sólidas).

Na presença do campo de laser polarizado na direção de crescimento  $z$ , o potencial efetivo é alterado nas proximidades das heterointerfaces, ou seja, próximo a  $z = -\frac{L}{2}$  e  $z = \frac{L}{2}$ , resultando em um QW com interfaces não-abruptas ou graduais. Além da energia potencial,

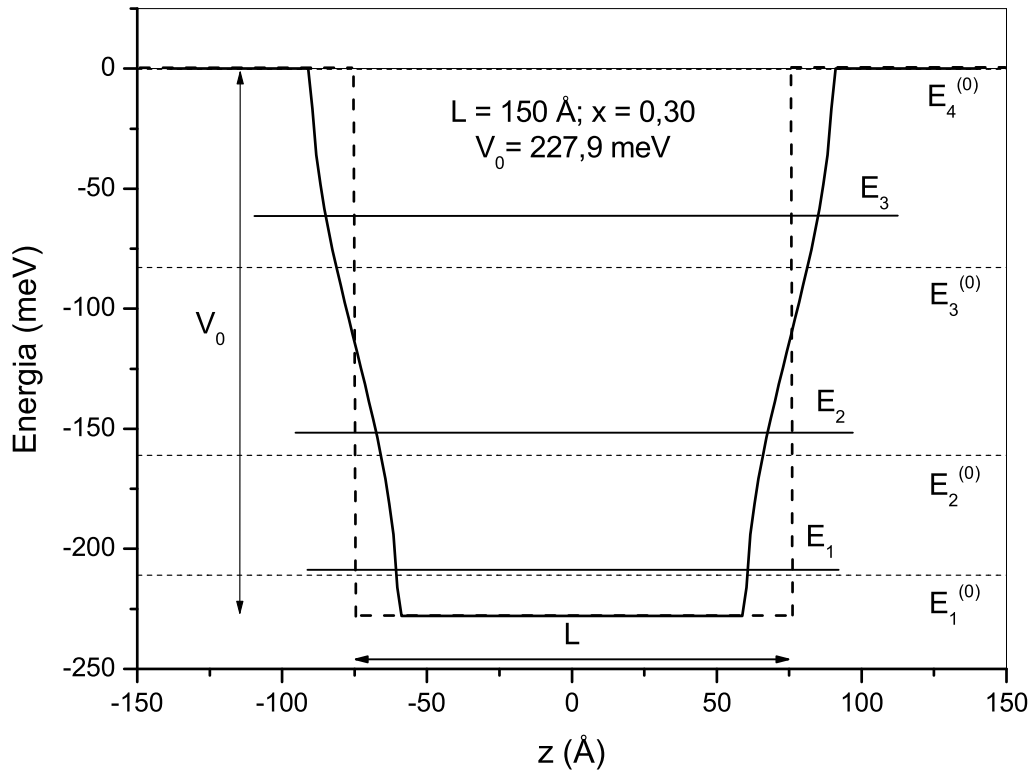


FIGURA 4 – Modificações no perfil da banda de condução e nos níveis de energia de um QW de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As de 150 Å induzidas por um ILF de CO<sub>2</sub> com polarização paralela ao eixo de crescimento  $z$ .

todos os autovalores de energia são afetados, sofrendo desvios para o azul. Os primeiros três níveis de energia são desviados de  $\Delta E_1 = 1,7$  meV,  $\Delta E_2 = 7,3$  meV e  $\Delta E_3 = 18,2$  meV, estes e outros valores relativos à Figura 4 estão sumariados na Tabela 2. O quarto nível de energia, estando inicialmente logo abaixo da borda da banda de condução das barreiras, se desliga do poço em consequência das mudanças provocadas pelo feixe de laser no potencial efetivo.

TABELA 2 – Níveis de energias calculados na ausência ( $E_i^{(0)}$ ) e presença ( $E_i$ ) dos campos de laser e desvios para o azul sofridos em decorrência da ILF polarizada ao longo do eixo  $z$ . Os valores são em relação ao fundo do QW.

| SUBBANDA | $E_i^{(0)}$ (meV) | $E_i$ (meV) | $\Delta E_i$ (meV) |
|----------|-------------------|-------------|--------------------|
| $i = 1$  | 15,9              | 17,6        | 1,7                |
| $i = 2$  | 63,4              | 70,7        | 7,3                |
| $i = 3$  | 140,7             | 158,9       | 18,2               |
| $i = 4$  | 227,8             | —           | —                  |

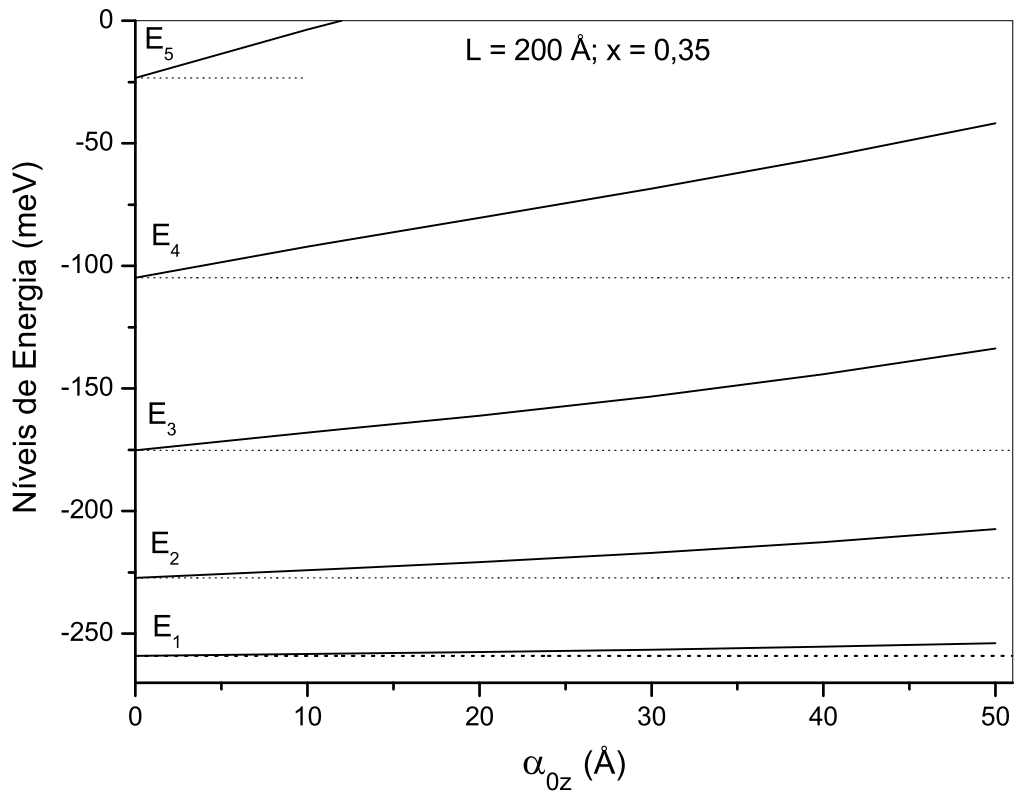


FIGURA 5 – Desvios provocados nos níveis de energia pelo laser intenso de  $\text{CO}_2$  num QW de GaAs/ $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$  de 200 Å em função da amplitude de oscilação ( $\alpha_{0z}$ ) do elétron no campo de laser.

O aumento do desvio para o azul em cada nível de energia ligado também foi investigado. Mudando os parâmetros do QW para  $x = 0,35$  e  $L = 200$  Å (para essa fração molar particular  $L_{\text{max}}$  aumenta para 215 Å), visando aumentar o número de estados ligados, encontramos uma situação na qual existem cinco estados ligados abaixo da borda da banda de condução da camada de AlGaAs na ausência de campos de laser (observe as linhas tracejadas de referência da Figura 5). Aumentando a intensidade do laser de  $\text{CO}_2$ , todos os níveis de energia são novamente afetados, apresentando um crescimento quase linear com a amplitude de oscilação do elétron no campo de laser  $\alpha_{0z}$ , conforme mostra as linhas sólidas da Figura 5. Note que os desvios são maiores para os níveis mais elevados e que o quinto nível, em particular, passa ao estado não-ligado para uma amplitude de oscilação de aproximadamente 11,5 Å.

Até agora, pelo que sabemos, as conseqüências de submeter os portadores a um ILF adicional numa configuração cruzada, como mostra a Figura 3 na página 29, não foi investigada. No presente estudo consideramos o campo de laser intenso adicional como sendo

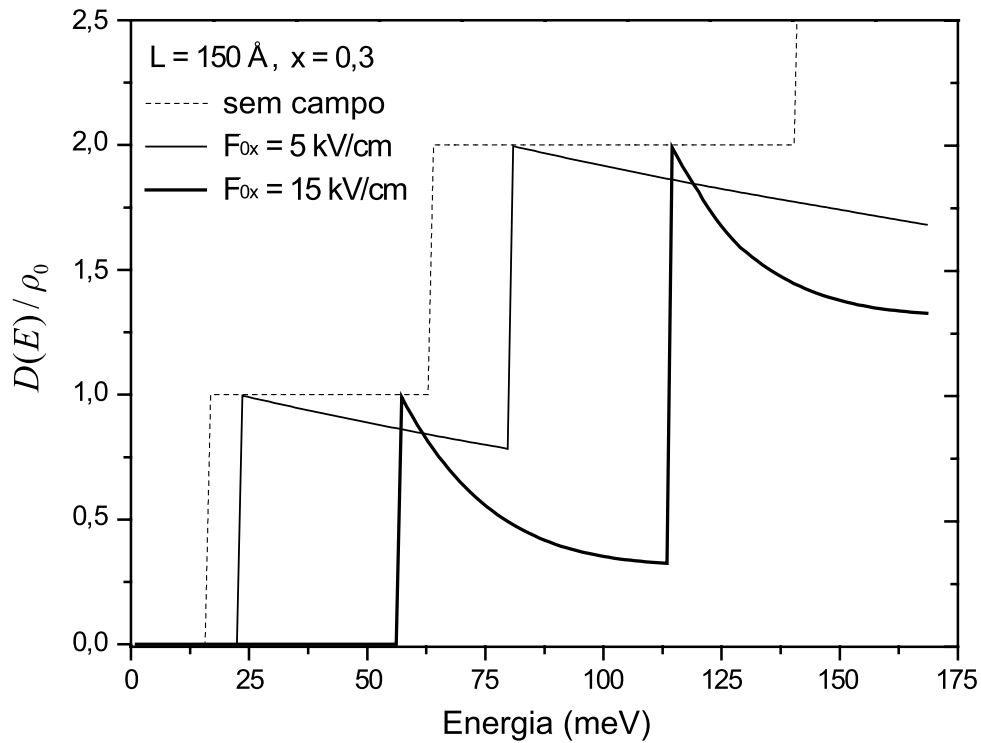


FIGURA 6 – Densidade de estados para elétrons confinados em um QW de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As de 150 Å sob ação de dois ILF em configuração cruzada.

um laser THz não-ressonante ( $\omega_x/2\pi = 1 \times 10^{12}$  Hz), polarizado ao longo do eixo  $x$  e se propagando ao longo do eixo  $z$ . De acordo com trabalhos anteriores [36, 35], o efeito de tal ILF na DOS bidimensional é perceptível no caso de fótons ressonantes onde o processo de absorção de fótons é o principal canal para ocorrer interações elétron-fônon. Essa característica resulta numa forma funcional para a densidade de estados em termos da intensidade e da frequência do laser, mas a existência de tal forma não foi confirmada para ILF não-ressonante. A inclusão dos efeitos do campo de laser THz não-ressonante em nosso modelo levou a uma característica adicional, qual seja o desvio para o azul (DFKE) da energia dos estados ligados, além disso, existe também uma diferença importante quando comparada com os resultados obtidos para o laser de CO<sub>2</sub> agindo sozinho [36, 35], na qual todos os níveis de energia são deslocados de uma mesma quantidade, que correspondente à energia do campo de EMR dada por  $2\gamma\hbar\omega_x$ . Para  $F_{0x} = 5 \text{ kV/cm}$ , encontramos desvios adicionais — devido à presença do ILF THz — de 4,15 meV, já para  $F_{0x} = 15 \text{ kV/cm}$  o desvio foi determinado em 37,02 meV, para todos os níveis de energia.

Voltando nossa atenção novamente para o poço de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As de largura igual a 150 Å (Figura 4 na página 37), investigamos as mudanças induzidas nos níveis de energia



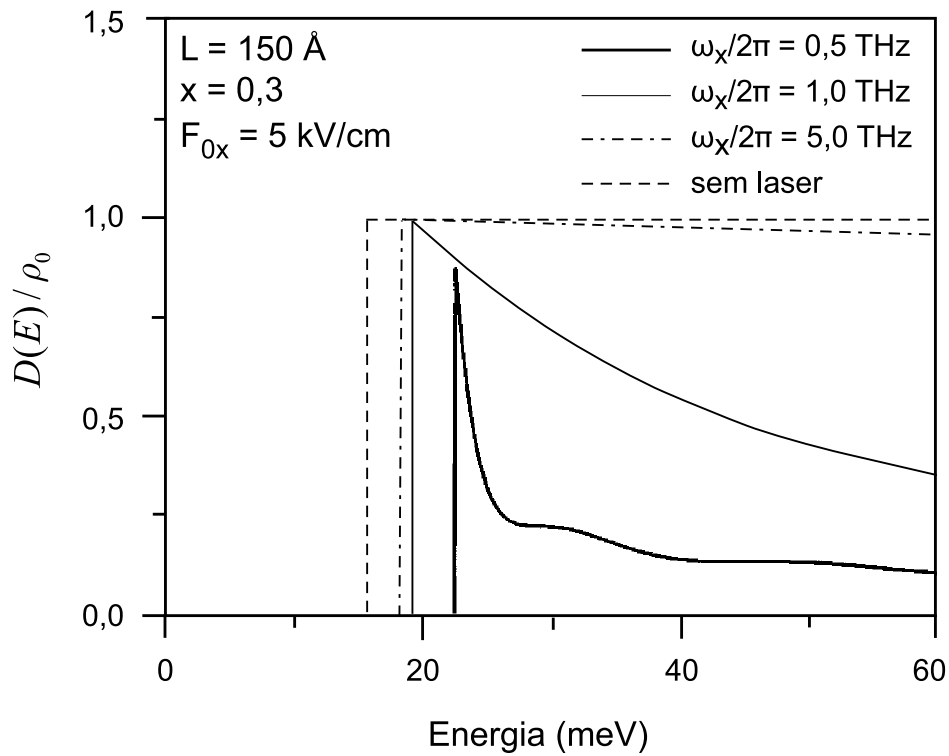


FIGURA 7 – Dependência da densidade de estados com a frequência do laser THz para elétrons confinados em um QW de GaAs/Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As de 150 Å sob ação de dois ILF em configuração cruzada.

e na DOS por duas radiações de ILF cruzados. As mudanças na DOS em relação ao perfil escada são mostradas na Figura 6. Fica claro a partir dessa figura que o efeito do campo de laser THz é o de reduzir a DOS em relação à DOS livre de campos, esta última representada na Figura 6 pela linha tracejada. Como podemos observar pela Figura 6, a DOS induzida por laser, linha sólida, depende do nível de energia e da intensidade do laser. A redução observada na DOS para  $F_{0x} = 5 \text{ kV/cm}$  é apenas moderada, mas ela se torna significativa para  $F_{0x} = 15 \text{ kV/cm}$ . De fato, verificamos que a redução da DOS devido ao ILF THz aumenta monotonicamente com a intensidade do laser e ela sugere um interessante mecanismo de ajuste para a dependência da DOS com a energia.

Foi detectada também uma dependência interessante para a DOS com a frequência do laser, conforme representa a Figura 7, na qual as curvas para um determinado laser de CO<sub>2</sub> e um campo de laser THz transversal adicional (com três frequências diferentes) são traçadas. Note que o desvio para o azul induzido pelos campos de laser THz no nível de energia do estado fundamental aumenta com a redução da frequência, como esperado. Além disso, o pico para a linha sólida mais grossa está claramente abaixo de 1,0, um fato fácil de entender

quando levamos em consideração o fator  $J_0^2(\gamma)$ , implícito na Eq. (2.46) para  $D_n(E)$ , com  $F_0(k_x) \cong J_0(\gamma)J_0(\alpha_{0x}k_x)$ , vide Eq. (2.47). Primeiro, nas descontinuidades da DOS temos  $E = E_n + 2\gamma\hbar\omega_x$ , assim o argumento da função  $F_0^2$  é nulo. Isso reduz a integral a apenas  $\int_0^1 d\xi/\sqrt{1-\xi^2}$ , cuja solução é  $\pi/2$ , isso faz com que a DOS na descontinuidade (em unidades de  $\rho_0$ ) seja proporcional a  $J_0^2(\gamma)$ . Visto que, para um dado  $F_{0x}$ ,  $\gamma$  aumenta com  $1/\omega_x^3$  para valores decrescentes de  $\omega_x$ ,  $J_0^2(\gamma)$  está logo abaixo de 1,0 para valores pequenos de  $\gamma$ , mas decresce rapidamente para  $\gamma > 0,5$  (por exemplo,  $J_0^2(0,5) \cong 0,88$  enquanto  $J_0^2(0,9) \cong 0,65$ ). Essa é a razão para que o pico da DOS esteja bem abaixo de 1,0 para baixas frequências.

A dependência da DOS com a frequência e a intensidade do laser que investigamos é importante já que a DOS reflete o maior número de portadores possíveis que podem ocupar estados com energia compreendidas entre  $E$  e  $E + dE$ , afetando intrinsecamente o cálculo do nível de Fermi [36, 35]. Como a densidade do 2DEG em MDQWs é altamente dependente da posição do nível de Fermi em relação aos níveis de energia, esse ajuste na DOS induzida por laser altera o processo de transferência de carga, como já foi apontado em outros trabalhos [31, 32, 36, 35].

Observamos ainda que a DOS induzida pelo laser THz obtida com fótons não-ressonantes é ligeiramente diferente daquela obtida previamente por Xu [35], na qual a emissão de fóton foi observada como um processo secundário em interações elétron-fóton. Primeiramente, o desvio para o azul obtido para um campo de laser THz com intensidade de 4 kV/cm é de somente  $\sim 2,5$  meV para todos os níveis de energia, enquanto aqueles que encontramos aqui são muito maiores e aumentam com o índice do nível de energia devido à presença do segundo ILF de CO<sub>2</sub>. Isso pode ser visto na Figura 6 na página 39 pela comparação das distâncias entre cada linha sólida vertical (descontinuidade em  $E = E_n$ ) e suas respectivas linhas tracejadas (descontinuidade em  $E = E_n^{(0)}$ ), que se referem aos níveis de energias dos estados ligados na ausência de campos externos. Para  $F_{0x} = 5$  kV/cm foram obtidos desvios de 6,35 meV e 13,25 meV, já para uma intensidade  $F_{0x} = 15$  kV/cm os desvios obtidos foram de 39,22 meV e 41,17 meV. Em segundo lugar, já que os lasers que simulamos neste trabalho foram considerados não-ressonantes com os estados de energia dos portadores, as oscilações obtidas na dependência da DOS com a energia com um laser THz ressonante [35] não foi observada, embora a redução do DOS para crescentes intensidades de laser seja praticamente a mesma [23, 35]. A falta de tais oscilações pode ser

explicada em termos da natureza da interação elétron-fóton para fótons não-ressonantes como se segue. Na presença de fótons ressonantes, a abertura de canais adicionais para absorção ( $m > 0$ ) e emissão ( $m < 0$ ) ópticas leva a uma  $D_n(E)$  não-nula para  $E - E_n < 0$  e um crescimento na DOS que pode tornar  $D_n(E)$  maior que  $\rho_0$  (veja por exemplo Xu [36]). Essas características não estão presentes em nossos resultados já que no caso de uma ILF não-ressonante a série (envolvendo funções de Bessel de diversas ordens) estabelecida para a função de Green média  $G_{n,k}^*(E)$  na Eq. (2.44), que é o núcleo da DOS na  $n$ -ésima subbanda dada pela Eq. (2.45), é reduzida a apenas um termo (ao termo correspondente a  $m = 0$ ) devido à ausência de fótons ressonantes ( $m \neq 0$ ). Desse modo, resta somente  $F_0(k_x)$ , que é uma série envolvendo funções de Bessel de ordem par. Verificamos que, para intensidades de laser THz abaixo de 20 kV/cm, o termo de ordem zero domina inteiramente o comportamento de tal maneira que  $F_0(k_x) \cong J_0(\gamma)J_0(\alpha_{0x}k_x)$ , vide Eq. (2.47), representa uma aproximação muito razoável. Verificamos isso pela computação da DOS com todas as séries truncadas no termo de ordem 16 para várias intensidades de laser THz e então comparando esses resultados precisos com aqueles obtidos com a aproximação de ordem zero. Não detectamos qualquer diferença significativa, quaisquer que sejam que torne claro que as oscilações na DOS são provocadas pelos termos com  $m \neq 0$  nas séries  $G_{n,k}^*(E)$  associadas aos fótons ressonantes, não considerados em nossas simulações atuais, e também não pela exclusão de termos de ordem mais alta no somatório para  $F_0(k_x)$ .

É interessante notar que a DOS reduzida pelo laser é fortemente dependente da intensidade do laser THz, o que sugere um mecanismo de ajuste óptico simples para tal quantidade. Ademais, os desvios para o azul são significativamente maiores como consequência de ambos os lasers, de CO<sub>2</sub> e THz, tornarem possível ajustar os níveis de energia dos estados ligados eficientemente pelo uso da presente configuração de lasers transversais.

É também importante ressaltar que analisamos os efeitos de lasers intensos somente em poços quânticos de GaAs/AlGaAs, mas não deve ser difícil estender os resultados a outros tipos de materiais com estrutura zinco-blenda, tais como outros compostos III-V, desde que os parâmetros usados aqui para os QWs de GaAs/AlGaAs sejam ajustados para esses materiais. Nesse caso, valores diferentes para  $L_{\max}$  surgirão e eles devem ser levados em consideração a fim de manter as aproximações assumidas aqui como válidas.

### 3 EFEITO DE DOPAGENS NÃO-ABRUPTAS E INTERFACES GRADUAIS

---

**A**PRESENTAMOS UM ESTUDO teórico da influência de perfis não-abruptos de dopagem na estrutura eletrônica de poços quânticos de GaAs/AlGaAs com dopagem modulada em uma das barreiras de AlGaAs. Interfaces graduais semelhantes àquelas obtidas no capítulo anterior são levadas em consideração na modelagem matemática do sistema quântico. Ênfase é dada na dependência da densidade superficial dos portadores com a largura do espaçador (*spacer*) e com o tamanho de difusão dos doadores. Propomos um método de discretização própria para resolver as equações acopladas de Schrödinger de Poisson em malhas não-uniformes, o qual permite obter resultados numéricos estáveis para a densidade superficial de elétrons mesmo quando perfis não-abruptos de dopagem e massa efetiva são utilizados.

#### 3.1 INTRODUÇÃO

Avanços nas técnicas de crescimento epitaxial, como a epitaxia por feixe molecular (MBE), tornaram possível o crescimento de heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade, cuja composição e dopagem podem ser ajustadas para uma enorme variedade de especificações desejáveis. Em particular, um 2DEG pode ser criado em um MDQW tipo  $n$  quando o comprimento médio do espalhamento excede a largura do poço. Tal sistema eletrônico tem algumas características interessantes como, por exemplo, a alta densidade de portadores no canal — que é praticamente independente da temperatura — e a alta mobilidade a baixas temperaturas. A alta mobilidade resulta principalmente do fato de que os portadores estão espacialmente separados dos doadores remotos por uma camada nominalmente não-dopada, conhecida como camada do espaçador ou simplesmente como espaçador (*spacer*) [47]. Desse modo, tanto a densidade superficial do 2DEG quanto a

mobilidade eletrônica a baixas temperaturas dependem do perfil de dopagem, para um dado par de concentração nominal de dopagem e espessura do espaçador. Teoricamente, melhores desempenhos devem ser observados com o uso de heteroestruturas com perfis de dopagem abruptos, um fato que fez da redução da interdifusão de impurezas um tópico importante na pesquisa em física de semicondutores [48, 49, 50]. Todavia, existem muitas evidências experimentais indicando que os perfis de dopagem reais não são abruptos [51, 52] e esse fato está relacionado às limitações no controle da implantação de impurezas durante o processo de crescimento, bem como à difusão e segregação de dopantes durante a deposição e posterior temperamento [48, 49, 50, 51, 52].

Os efeitos do perfil de dopagem na performance de vários dispositivos eletrônicos já foram identificados [53, 54]. Foi demonstrado, por exemplo, que HEMTs têm voltagens críticas altamente dependentes da composição e do perfil de dopagem ao longo da direção de crescimento [37], que, por sua vez, afeta também o desempenho de fotodetectores infravermelhos baseados em MDQWs [55]. Tudo isso aumentou o interesse na compreensão da influência de perfis de dopagem não-abruptos na densidade do 2DEG, um das principais quantidades físicas a serem controladas em dispositivos baseados em heteroestruturas com dopagem modulada.

Nesta etapa do trabalho apresentamos os resultados de um estudo teórico preciso dos efeitos de perfis de dopagem não-abruptos na densidade eletrônica para elétrons em um MDQW gradual de GaAs/AlGaAs a baixa temperatura (4,2 K). A estrutura eletrônica de subbanda foi determinada pela solução das equações acopladas de Schrödinger e Poisson de forma autoconsistente. Utilizando o método de diferenças finitas (MDF)<sup>1</sup>, essas equações foram propriamente discretizadas seguindo uma generalização da discretização proposta inicialmente por Li e Kuhn [56] para resolver a equação de Schrödinger unidimensional para QWs. Tal generalização permite uma discretização própria para malhas não-uniformes. Esse novo método generalizado foi aplicado também na resolução do problema de valor de contorno envolvendo a equação de Poisson unidimensional. Isso permitiu uma simulação precisa do processo de transferência de carga, que foi confirmado pela análise de estabilidade dos resultados numéricos, mesmo para perfis (de dopagem e de interfaces) não-abruptos. Nossos resultados mostram um aumento significativo na densidade do 2DEG

---

<sup>1</sup>Vide Apêndice B na página 92 para maiores detalhes sobre o MDF.

em comparação com aquela obtida por meio da idealização do sistema ao usar um perfil de dopagem abrupto. Além disso, mostramos que a densidade aumenta rapidamente com o comprimento de difusão dos doadores.

## 3.2 FORMALISMO

Levando-se em consideração que, em heteroestruturas semicondutoras reais, existem diferenças tanto na massa efetiva dos portadores quanto na constante dielétrica ao longo das diferentes camadas de materiais, ou seja, ao longo da direção de crescimento (eixo  $z$ ), o Hamiltoniano de BenDaniel-Duke para a equação de Schrödinger [56] e a equação de Poisson generalizada [57] devem ser utilizados, conforme discussão feita na Seção B.3 na página 106. Desse modo, as equações de Schrödinger e Poisson são dadas, respectivamente, por

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V(z) \right] \chi_j(z) = E_j \chi_j(z) \quad (3.1)$$

e

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_H(z) = \frac{e^2}{\epsilon_0} [N_D^+(z) - N_A^-(z) - n_e(z)], \quad (3.2)$$

em que as variáveis assumem o seguinte significado:

- $m^*(z)$  = massa efetiva do elétron;
- $V(z)$  = perfil da banda de condução;
- $\chi_j(z)$  = função de onda envelope da  $j$ -ésima subbanda;
- $E_j$  =  $j$ -ésimo nível de energia;
- $\epsilon(z)$  = constante dielétrica em função da posição;
- $V_H(z)$  = potencial de Hartree;
- $N_D^+(z)$  = concentração de doadores ionizados;
- $N_A^-(z)$  = concentração de aceitadores ionizados;
- $n_e(z)$  = concentração dos portadores de carga;

e, além disso, temos que  $V(z)$  é dado por

$$V(z) = V_0(z) + V_H(z) + V_{XC}(z), \quad (3.3)$$

sendo  $V_0(z)$  o perfil inicial da banda de condução (BC), isto é, antes da transferência de carga,  $V_H(z)$  o potencial de Hartree e  $V_{XC}(z)$  as correções de troca e correlação para  $V_H(z)$ , representadas por [58,59]

$$V_{XC}(z) = -0,6107 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon(z)} \left[ \frac{3n_e(z)}{4\pi} \right]^{1/3}, \quad (3.4)$$

na qual a concentração dos portadores de carga é dada por

$$n_e(z) = \sum_j N_{S_j} |\chi_j(z)|^2 \quad (3.5)$$

Voltando à equação de Poisson, Eq. (3.2), a densidade superficial  $N_{S_j}$  do 2DEG pode ser calculada por meio de

$$N_{S_j} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_j}{k_B T} \right) \right], \quad (3.6)$$

onde  $E_F$  é o nível de Fermi.

### 3.3 TRANSFERÊNCIA DE CARGA E PERFIL DE DOPAGEM NÃO-ABRUPTO

O processo de transferência de carga [38] é simulado por mudanças sucessivas no nível de quase-Fermi na barreira dopada e dentro do poço, até que a diferença entre eles seja reduzida abaixo de uma tolerância predeterminada, nessa situação dizemos que o equilíbrio termodinâmico foi atingido. Na aproximação de depleção é considerado que todas as impurezas são ionizadas dentro de uma camada de tamanho  $L_D$  [60, 61]. Note que os resultados de Wang, Farias e Freire [62] estão restritos a essa aproximação, que é superada em nossos cálculos com a inclusão da concentração de impurezas ionizadas dependente da posição  $z$  (ela é também função paramétrica da temperatura  $T$ ). Tal concentração de impurezas ionizadas está relacionada à concentração total (isto é, neutra e ionizada) de acordo com as seguintes expressões [63]:

$$N_D^+(z; T) = \frac{N_D(z)}{1 + g_D \exp \left[ \frac{E_F + E_D - V(z)}{k_B T} \right]}, \quad (3.7)$$

para doadores, e

$$N_A^-(z; T) = \frac{N_A(z)}{1 + g_A \exp\left[\frac{-E_F - E_A + V(z)}{k_B T}\right]}, \quad (3.8)$$

para aceitadores. Onde  $g_D = 2$  e  $g_A = 4$  representam os fatores de degenerescência da banda no ponto  $\Gamma$  para átomos de impurezas monovalentes.

A modelagem habitual para o perfil de dopagem de doadores  $N_D(z)$  é o abrupta, ou seja,

$$N_D(z) = \begin{cases} N_D^0 & \text{para } z < L_S, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.9)$$

onde  $N_D^0$  é a concentração nominal de dopantes e  $L_S$  é a largura do espaçador. Todavia, o perfil de dopagem mais realístico no qual estamos interessados neste trabalho deve incluir a interdifusão de doadores remotos, que é inerente ao processo de crescimento [48]. Utilizamos aqui então um perfil não-abrupto muito similar ao fenomenológico, adotado anteriormente por Wang, Farias e Freire [62]:

$$N_D(z) = \frac{N_D^0}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z + L_S}{2D_l}\right) \right], \quad (3.10)$$

onde  $\operatorname{erf}(z)$  representa a função erro normalizada e  $D_l$  é comprimento de difusão dos doadores. Para aceitadores residuais, um perfil uniforme  $N_A(z) = N_A^0$  foi assumido através de toda a heteroestrutura.

### 3.4 DISCRETIZAÇÃO EM MALHA NÃO-UNIFORME

Ao aplicar o MDF para resolver as Eqs. (3.1) e (3.2) para QWs, Li e Kuhn [56] mostraram que resultados numéricos estáveis e, principalmente, precisos são obtidos somente quando uma discretização própria da malha uniforme é adotada. Verificamos, no presente estudo, que tal discretização pode ser generalizada para malhas não-uniformes, de maneira semelhante à adotada em [64]. Para a equação de Schrödinger, isso resulta na seguinte equação de diferenças,

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[ a_i \chi_{i-1}^{(j)} - (a_i + b_i) \chi_i^{(j)} + b_i \chi_{i+1}^{(j)} \right] + V_i \chi_i^{(j)} = E_j \chi_i^{(j)}, \quad (3.11)$$



onde os valores auxiliares  $a_i$  e  $b_i$  são dados, respectivamente, por

$$a_i \equiv \left( m_{i-1/2}^* \Delta z_i \Delta z_{i+1/2} \right)^{-1} \quad (3.12)$$

e

$$b_i \equiv \left( m_{i+1/2}^* \Delta z_{i+1} \Delta z_{i+1/2} \right)^{-1}, \quad (3.13)$$

na qual a massa efetiva e o passo da malha num ponto intermediário são obtidos de

$$m_{i\pm 1/2}^* = \frac{m_i^* + m_{i\pm 1}^*}{2} \quad (3.14)$$

e

$$\Delta z_{i+1/2} = \frac{\Delta z_i + \Delta z_{i+1}}{2}. \quad (3.15)$$

Note que o índice  $i$  varia de 1 até  $n - 1$ , onde  $n$  é o número total de subintervalos, com o tamanho do  $i$ -ésimo subintervalo sendo determinado por  $\Delta z_i = z_i - z_{i-1}$ .

A discretização representada pela Eq. (3.11) leva à formação de uma matriz tridiagonal para o problema de autovalor<sup>2</sup>. Infelizmente essa matriz não é simétrica, mas existe uma transformação simples que fornece uma matriz simétrica com os mesmos autovalores [63]. Essa é uma característica importante do ponto de vista computacional, já que a não simetria da matriz implica necessariamente numa maior complexidade algorítmica do métodos de diagonalização.

A equação de Poisson também pode ser resolvida numericamente usando a malha não-uniforme seguindo o mesmo procedimento utilizado para a equação de Schrödinger, sua forma discretizada em diferenças finitas é dada por

$$\frac{\epsilon_{i-1/2}}{\Delta z_i} V_{H_{i-1}} - \left( \frac{\epsilon_{i-1/2}}{\Delta z_i} + \frac{\epsilon_{i+1/2}}{\Delta z_{i+1}} \right) V_{H_i} + \frac{\epsilon_{i+1/2}}{\Delta z_{i+1}} V_{H_{i+1}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \Delta z_{i+1/2} \left( N_{D_i}^+ - N_{A_i}^- - n_{e_i} \right), \quad (3.16)$$

onde

$$\epsilon_{i\pm 1/2} = \frac{\epsilon_i + \epsilon_{i\pm 1}}{2}. \quad (3.17)$$

O esquema de alocação não-uniforme dos pontos da malha é uma modificação do método exposto por Press et al. [65] e inclui mais pontos em torno da região de ionização e também junto às heterointerfaces. Tal modificação é essencial para a precisão e estabilidade dos cálculos autoconsistentes.

<sup>2</sup>Vide Apêndice B, seção B.2 na página 102 para maiores detalhes.

As condições de contorno para  $\chi_j(z)$  e  $V_H(z)$  devem ser observadas e são dadas, respectivamente, por

$$\chi_0^{(j)} = \chi_n^{(j)} = 0 \quad (3.18)$$

$$V_{H_0} = E_F + E_D - V_0, \quad (3.19)$$

juntamente com a condição para a derivada de  $V_H$  no  $n$ -ésimo ponto:

$$DV_{H_n} = 0. \quad (3.20)$$

Observe que as condições de contorno nas heterointerfaces são automaticamente satisfeitas quando as Eqs. (3.11) e (3.16) são utilizadas [56].

### 3.5 RESULTADOS OBTIDOS

Apresentamos nesta seção os resultados da simulação autoconsistente do processo de transferência de carga em um MDQW de GaAs/ $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$ . Os cálculos foram realizados dentro da aproximação de massa efetiva e uma banda de condução parabólica foi assumida [37]. Os parâmetros do MDQW que investigamos são os mesmos encontrados em Lima et al. [46], com exceção da concentração nominal de doadores, que foi elevada para  $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  a fim de destacar os efeitos do perfil não-abrupto de dopagem no processo de transferência de carga e também na densidade eletrônica resultante. Incluímos uma pequena concentração de aceitadores residuais, equivalente a  $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , e consideramos uma

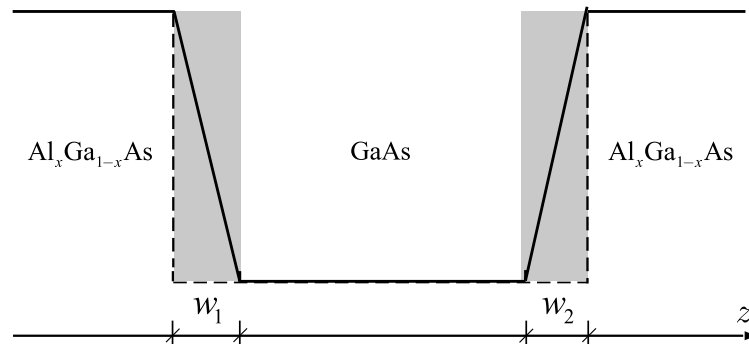


FIGURA 8 – Modelo de interface abrupta (linha tracejada) e de interface gradual (linha sólida) utilizado em nosso cálculo autoconsistente.

Fonte: adaptado de Ferreira et al. [66]

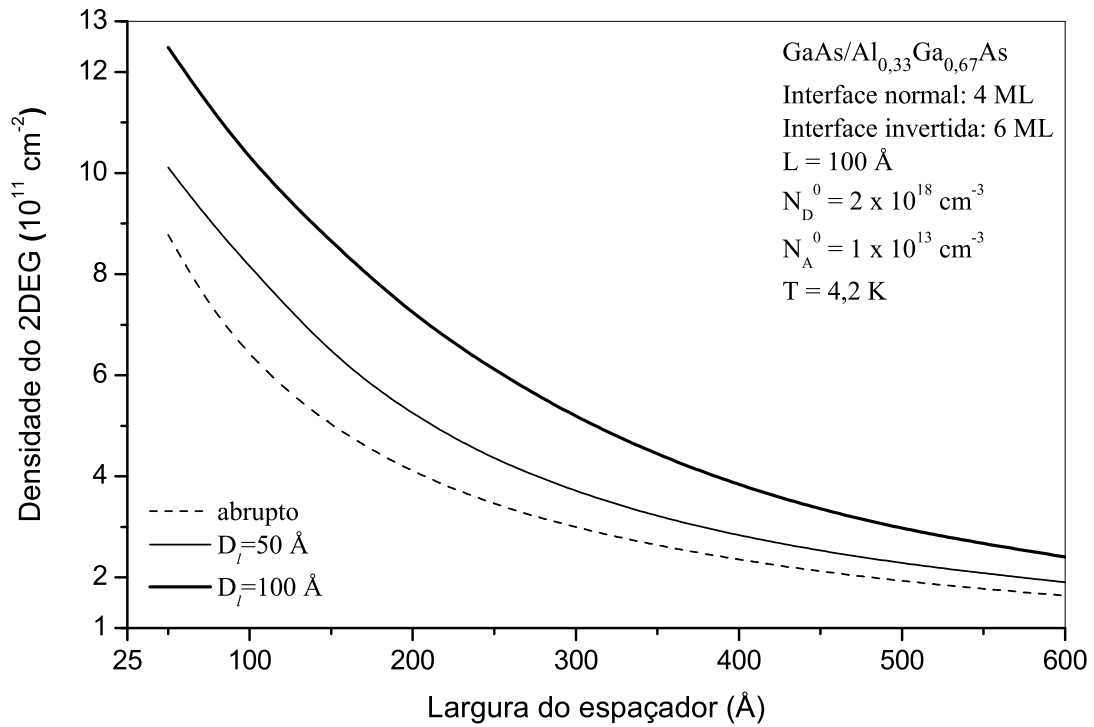


FIGURA 9 – Dependência da densidade superficial de elétrons com o tamanho do espaçador para um QW gradual de GaAs/AlGaAs. A linha tracejada refere-se ao perfil de dopagem abrupto, na aproximação de depleção, e as linhas sólidas representam os perfis não-abruptos simulados.

mudança (perfil) linear na fração molar de alumínio nas interfaces invertida e normal [66], conforme mostra a Figura 8. Como pode-se notar na Figura 8, levamos em consideração uma leve assimetria nas interfaces, com espessuras de  $w_1 = 4 \text{ ML}$  para a interface normal e  $w_2 = 6 \text{ ML}$  para a interface invertida ( $1 \text{ ML} = 2,83 \text{ Å}$ ), visto que resultados experimentais [67] comprovaram o fato de a interface invertida ser mais rugosa que a interface normal em poços quânticos de GaAs/AlGaAs.

Na Figura 9 mostramos a dependência da densidade dos portadores com o a largura do espaçador  $L_S$  para um perfil de dopagem abrupto dentro da aproximação de depleção (linha tracejada) e para perfis de dopagem não-abruptos (linhas sólidas) com  $D_i = 50 \text{ Å}$  e  $100 \text{ Å}$ .

Para todos os perfis, a densidade do 2DEG diminui rapidamente para  $L_S$  abaixo de  $300 \text{ Å}$ . Note que a densidade do gás de elétrons bidimensional aumenta significativamente com o aumento de  $D_i$  de 0 (abrupto) até  $100 \text{ Å}$ . O crescimento de  $L_S$  tende a tornar as curvas mais próximas devido à redução do efeito da dopagem não-abrupta na transferência de carga.

## 4 EFEITO DE CAMPOS DE POLARIZAÇÃO

---

**A** FIM DE INVESTIGAR os efeitos de interfaces graduais e dopagens não-abruptas nas energias de transição intersubbanda, no potencial de confinamento e na densidade superficial de elétrons em poços quânticos de GaN/AlGaN utilizamos, neste capítulo, o formalismo numérico desenvolvido no capítulo anterior. Incorporamos os efeitos dos campos elétricos de polarização — presentes predominantemente nos nitretos III–V com estrutura wurtzita — no potencial de confinamento do poço quântico, resultando numa expressão analítica para a energia potencial e, conseqüentemente, numa modificação do potencial efetivo análoga aquela obtida anteriormente no [Capítulo 2](#) para a modulação do potencial sob a influência de campos de laser. Assim como no [Capítulo 3](#), observamos que a densidade superficial de elétrons aumenta significativamente em função do comprimento de difusão dos doadores.

### 4.1 INTERESSE PELO GAN

O interesse da comunidade científica pelo GaN surgiu, principalmente, devido a seu *gap* grande e direto. Embora os diodos emissores de luz (LEDs) verdes já existissem antes do GaN, eles eram relativamente fracos quando comparados aos LEDs baseados em GaAs. Ademais, não havia fonte de luz baseada em estado sólido que emitisse no azul, um dos motivos pelos quais os LEDs até então existentes não podiam ser montados em displays inteiramente coloridos. Com o desenvolvimento da física do GaN, LEDs eficientes e duráveis, emitindo desde o verde até o ultravioleta, tornaram-se disponíveis para o mercado consumidor, complementando os emissores vermelhos de GaAs já existentes.

O primeiro grande marco na tecnologia do GaN ocorreu em 1971, quando [Pankove, Miller e Berkeyheiser](#) [68] apresentaram o primeiro diodo emissor de luz (LED) baseado em GaN, que emitia luz verde. Contudo esse era um emissor de baixa eficiência. O prin-

principal obstáculo em direção à fabricação de LEDs, baseados em GaN, de alta performance utilizando junções  $p-n$  foi primeiro a indisponibilidade de um material adequado que pudesse ser utilizado como substrato para o crescimento epitaxial de GaN, segundo, a falta de tecnologia para dopar GaN do tipo  $p$ . [Amano et al. \[69\]](#) demonstraram em 1986 que filmes de GaN com baixa densidade de deslocamentos podem ser crescidos em substratos de safira ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). Posteriormente, em 1995, S. Nakamura e colaboradores publicaram uma série de artigos [[70](#), [71](#), [72](#), [73](#)] demonstrando a existência de diodos altamente eficientes baseados em QWs de GaN que emitiam luz na faixa do azul, violeta, verde e amarelo.

O trabalho pioneiro de [Nakamura et al.](#) finalmente tornou o GaN disponível para aplicações comerciais. Em diversos lugares LEDs de nitretos estão sendo utilizados em painéis visuais, sinaleiros e indicadores ópticos em geral. Espera-se que os LEDs de GaN, juntamente com fontes de LEDs vermelhos, substituam eventualmente as lâmpadas convencionais de bulbo incandescente, visto que a eficiência do LED aumentou consideravelmente nos últimos anos, passando de 0,1 lm/W para mais de 40 lm/W, enquanto a eficiência de uma lâmpada típica é de apenas 15 lm/W. O potencial dos dispositivos ópticos baseados em GaN vem sendo testado visando o seu uso em detectores na faixa do ultravioleta, em leituras ópticas de alta densidade de dados e também em aplicações na telecomunicações e na medicina.

A utilidade do GaN não está limitada à optoeletrônica. Sua banda proibida larga, que o torna atraente para dispositivos ópticos, também o torna atrativo para a nanoeletrônica de alta potência. Uma banda proibida larga geralmente implica em uma grande voltagem de ruptura, que faz do GaN um dispositivo apropriado para transistores de alta potência. Uma maior velocidade de saturação e uma condutividade térmica superior em relação ao GaAs significa que o GaN possui potencial para superar o GaAs em performance na eletrônica de dispositivos semicondutores. Como o GaAs, o GaN pertence à família dos compostos III-V, já que o Ga pertence ao grupo III e ambos, N e As, pertencem ao grupo V da tabela periódica (vide Tabela 1 na página 21).

Apesar do tremendo progresso no desenvolvimento de dispositivos baseados em GaN, alguns problemas críticos ainda permanecem sem solução. Devido à falta de um substrato adequado, o GaN ainda é crescido em  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , que representa uma diferença, em termos do parâmetro de rede, de aproximadamente 13%. O crescimento de GaN tipo  $p$  altamente

dopado e a fabricação de contatos de baixa resistência para essas camadas ainda é um desafio. Quando esses e outros fatores forem resolvidos, o potencial pleno do GaN será concretizado.

## 4.2 CARACTERÍSTICAS DOS NITRETOS-III

A estrutura cristalina natural dos nitretos III-V (GaN, AlN, InN) é a wurtzita. Esses materiais são caracterizados por propriedades de polarização que diferem radicalmente daquelas apresentadas pelos compostos III-V GaAs, AlAs e InAs, por exemplo. Por meio de argumentos simples de simetria [74], pode ser mostrado que semicondutores na fase wurtzita (WZ) são caracterizados por uma polarização diferente de zero mesmo em sua geometria de equilíbrio, ou não-deformada, chamada de polarização espontânea ou, ocasionalmente, polarização piezoelétrica, fazendo referência à sua mudança com a temperatura. A polarização espontânea pode possibilitar novos graus de liberdade, sob a forma de campos eletrostáticos independentes de tensão, para realizar o ajuste fino nas características ópticas e de transporte de nanoestruturas de nitreto. A presença de polarização espontânea pode, por exemplo, ser explorada a fim de cancelar os campos piezoelétricos produzidos em heteroestruturas de nitreto típicas sob tensão.

Graças aos avanços recentes [8,9,75,10,11] em direção à moderna teoria quântica de polarização, foi possível determinar de maneira precisa, a partir de cálculos de primeiros princípios, os valores da polarização espontânea e, adicionalmente, as constantes dielétricas e piezoelétricas dos nitretos III-V [7,12,76]. Os resultados desses cálculos mostraram que os nitretos III-V têm propriedades importantes relacionadas à polarização que os diferenciam substancialmente dos semicondutores III-V de estrutura zinco-blenda padrões. Dentre essas propriedades distintas podemos citar (i) as constantes piezoelétricas enormes — muito maiores que a maioria de todos os outros compostos III-V e também oposta em sinal; (ii) a existência de polarização espontânea da mesma ordem de grandeza que a dos materiais ferroelétricos. A mais interessante delas talvez seja a presença de polarização espontânea, que implica na existência de campos elétricos internos mesmo na ausência de piezeletricidade, isto é, mesmo em sistemas crescidos com excelente casamento entre as constantes de rede. Além disso, diferentemente da polarização piezoelétrica, a polarização espontânea possui uma direção fixa no cristal que, na fase wurtzita, é a direção do eixo (0001), que é a direção

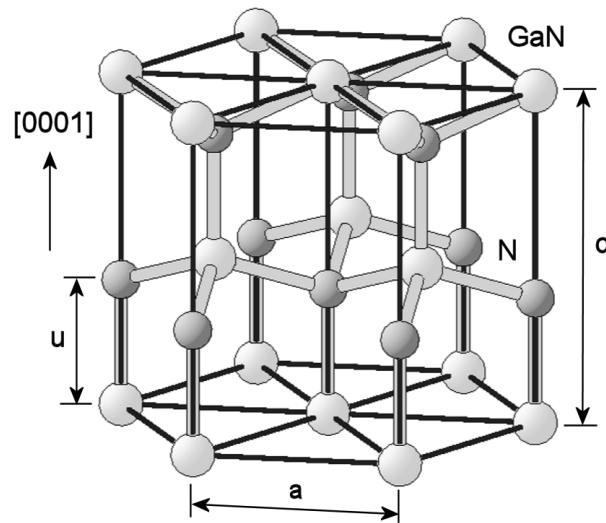


FIGURA 10 – Ilustração esquemática da estrutura wurtzita do GaN mostrando as constantes de rede  $a$  e  $c$  e o parâmetro interno  $u$ .

Fonte: Stampfl e Walle [80]

de crescimento preferida para a fabricação epitaxial de nitretos. Dessa maneira, o campo elétrico resultante da polarização espontânea irá apontar para a direção de crescimento, e isso maximiza os efeitos da polarização espontânea em tais sistemas e torna o problema efetivamente unidimensional.

#### 4.2.1 Propriedades Estruturais

A estrutura cristalina natural dos nitretos III–V, como o GaN, AlN e o InN, é a wurtzita (WZ), contudo alguns trabalhos recentes [77,78,79] reportaram sucesso no crescimento de amostras estabilizadas com estrutura zinco-blenda (ZB), principalmente quando crescidas em substratos de silício (Si) ou GaN. Em geral, a fase WZ dos nitretos-III apresenta uma polarização espontânea maior que àquela exibida na fase cúbica (ZB). Apesar dos semicondutores III–V GaAs, AlAs e InAs possuírem também uma estrutura cristalina cúbica, como o GaN na fase ZB, não há indícios de polarização espontânea em tais materiais. A geometria cúbica, mais simples, da fase ZB pode ser definida utilizando-se apenas uma constante de rede, a chamada constante de rede basal  $a$ , conforme mostra a Figura 11 na página seguinte.

A geometria hexagonal da fase WZ é definida por duas constantes de rede,  $a$  e  $c$ , e por um parâmetro interno  $u$ , conforme ilustra a Figura 10. Como é bem conhecido por

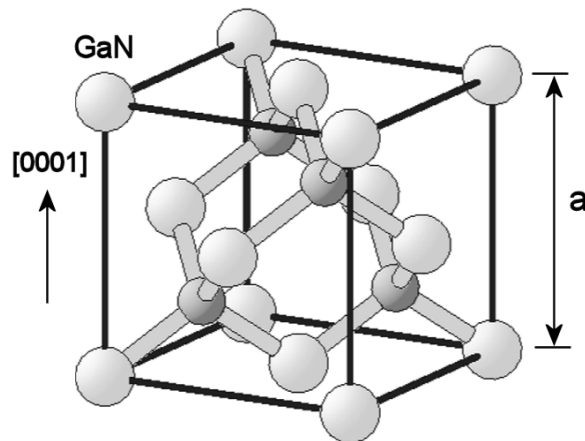


FIGURA 11 – Ilustração esquemática da estrutura cúbica (zínco-blenda) do GaN mostrando a constante de rede basal  $a$ .

Fonte: Stampfl e Walle [80]

meio de experimentos, e também por previsões teóricas, nem o parâmetro interno da célula  $u$  nem a razão  $c/a$  entre as constantes de redes são ideais nos compostos binários de nitretos do grupo III [81, 82, 83, 84]. Esse distanciamento dos valores ideais, quais sejam  $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$  e  $u = \frac{3}{8} = 0,375$ , é fundamental para a compreensão da polarização piezoelétrica identificada [7, 85, 13, 86, 87] nos nitretos-III com estrutura WZ.

Para as ligas  $A_xB_{1-x}N$  ( $Al_xGa_{1-x}N$ ,  $In_xGa_{1-x}N$  e  $Al_xIn_{1-x}N$ ) de nitretos do grupo III os parâmetros de rede  $a$  e  $c$  são funções da fração molar da liga e escrevemos então  $a = a(x)$  e  $c = c(x)$ . Tais constantes, na fase WZ, podem ser obtidas pela seguinte média ponderada entre as constantes dos compostos binários AN e BN (vide Tabela 6 na página 89), procedimento conhecido como lei de Vegard [88]:

$$a_{ABN}(x) = xa_{AN} + (1-x)a_{BN} \quad (4.1)$$

$$c_{ABN}(x) = xc_{AN} + (1-x)c_{BN} \quad (4.2)$$

Assim, levando-se em consideração os valores das constantes de rede mostrados na Tabela 6, obtemos para as ligas ternárias com estrutura cristalina WZ as seguintes expressões para as constantes de rede em ângströms (Å) em função da fração molar da liga (Al ou InN):

$$a_{AlGaN}(x) = 3,189 - 0,077x \quad (4.3)$$



$$a_{\text{InGaN}}(x) = 3,189 + 0,356x \quad (4.4)$$

$$a_{\text{AlInN}}(x) = 3,545 - 0,433x \quad (4.5)$$

$$c_{\text{AlGaN}}(x) = 5,185 - 0,203x \quad (4.6)$$

$$c_{\text{InGaN}}(x) = 5,185 + 0,518x \quad (4.7)$$

$$c_{\text{AlInN}}(x) = 5,703 - 0,721x. \quad (4.8)$$

### 4.2.2 Polarização Espontânea

A presença de polarização espontânea em materiais ferroelétricos já foi bastante estudada. Por outro lado, a sua existência em semicondutores com simetria cristalina relativamente baixa, como a estrutura wurtzita, era considerada como simples especulações teóricas, até que uma série de cálculos de primeiros princípios realizada por Bernardini e colaboradores [7, 12, 76, 85] mostrou que os semicondutores III-V contendo nitrogênio, altamente relevantes sob o ponto de vista tecnológico e cuja estrutura cristalina natural é de fato a WZ, possuem uma polarização espontânea muito grande, além de grandes constantes de acoplamento piezoelétrico. Enquanto as propriedades relacionadas à piezeletricidade são amplamente conhecidas, a polarização espontânea é, de certa forma, nova na física de semicondutores.

Motivados pela observação [89] de não-linearidades no parâmetro estrutural interno  $u$ , Ambacher et al. investigaram as propriedades piroelétricas das ligas de nitretos procurando por possíveis não-linearidades [88]. Os resultados da pesquisa mostraram que a polarização espontânea das ligas relaxadas para uma dada composição depende linearmente do valor médio do parâmetro  $u$ , indicando que diferenças de polarização espontânea entre ligas de mesma composição são devidas, principalmente, à variação do comprimento da ligação ânion-cátion. Devido à não-linearidade do parâmetro interno da célula, um comportamento não-linear da polarização espontânea em função de fração molar  $x$  é esperado. Assim, a polarização espontânea (em C/m<sup>2</sup>) das ligas ternárias de nitretos é dada por uma função quadrática em  $x$  [89],

$$P_{\text{ABN}}^{\text{sp}}(x) = P_{\text{AN}}^{\text{sp}}x + P_{\text{BN}}^{\text{sp}}(1-x) + bx(1-x), \quad (4.9)$$

na qual os primeiros dois termos representam a interpolação linear usual entre os compostos

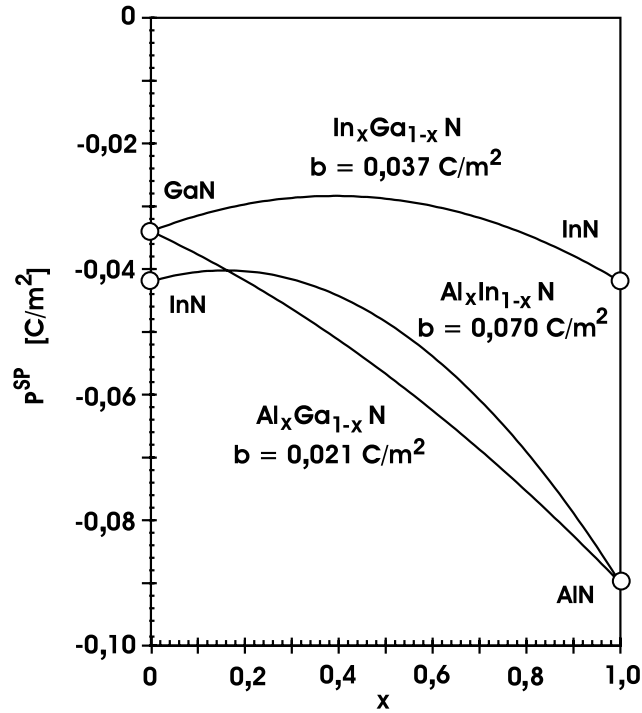


FIGURA 12 – Estimativa teórica da polarização espontânea não-linear para ligas ternárias de nitretos III-V com estrutura cristalina wurtzita.

Fonte: [Ambacher et al. \[89\]](#)

binários. O terceiro termo incorpora a não-linearidade em ordem quadrática (vide Figura 12) e geralmente é dado por [88]:

$$b = 4P_{ABN}^{SP}(x = 0,5) - 2(P_{AN}^{SP} + P_{BN}^{SP}). \quad (4.10)$$

Termos de ordem mais alta que a quadrática são geralmente negligenciados devido sua pequena influência na aproximação, estimada em menos de 10% [89]. Substituindo na Eq. (4.9) os valores fornecidos na Tabela 8 (Apêndice A, página 90), obtemos

$$P_{AlGaN}^{SP}(x) = -0,090x - 0,034(1-x) + 0,021x(1-x), \quad (4.11)$$

$$P_{InGaN}^{SP}(x) = -0,042x - 0,034(1-x) + 0,037x(1-x) \quad (4.12)$$

e

$$P_{AlInN}^{SP}(x) = -0,090x - 0,042(1-x) + 0,070x(1-x). \quad (4.13)$$

Somente o conhecimento sobre a polarização espontânea nas ligas ternárias de nitretos não é suficiente para estimar as cargas de polarização induzidas nas interfaces das hete-

roestruturas baseadas em GaN ou ainda calcular os campos internos de polarização. Tais heteroestruturas são geralmente crescidas pseudomorficamente e tensionadas em substratos com uma significativa falta de casamento entre as constantes de rede e coeficientes de expansão térmica. A tensão subsequente, causada na tentativa de manter a simetria, modifica a estrutura cristalina e dá origem à polarização piezoelétrica.

### 4.2.3 Polarização Piezoelétrica

A piezeletricidade é um conceito bem conhecido na física de semicondutores. Compostos binários de importância tecnológica estratégica, como os arsenetos e os fosfetos III-V, podem ser forçados a exibirem campos de polarização piezoelétrica pela imposição de tensão sobre esses materiais.

De acordo com a lei de Hooke, em um sólido elástico a deformação  $\epsilon_{kl}$  é diretamente proporcional à tensão  $\sigma_{ij}$ , dada por:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \epsilon_{kl}, \quad (4.14)$$

onde  $C_{ijkl}$  são os componentes do tensor elástico. Devido à simetria espacial, esse tensor de posto 4 pode ser reduzido a uma matriz  $6 \times 6$  usando a notação de Voigt:  $xx \rightarrow 1$ ,  $yy \rightarrow 2$ ,  $zz \rightarrow 3$ ,  $yz, zy \rightarrow 4$ ,  $zx, xz \rightarrow 5$  e  $xy, yx \rightarrow 6$ . Os elementos do tensor elástico podem ser reescritos como  $C_{ijkl} = C_{mn}$ , onde  $i, j, k, l = x, y, z$  e  $m, n = 1, \dots, 6$ . Usando essa notação, a lei de Hooke é simplificada para

$$\sigma_i = \sum_j C_{ij} \epsilon_j. \quad (4.15)$$

A matriz  $6 \times 6$  das constantes elásticas  $C_{ij}$  para cristais com estrutura wurtzita (WZ) é dada por

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

Outra forma útil de descrever as propriedades mecânicas dos cristais é por meio das constantes de deformação elástica  $S_{ij}$ . Tais constantes são calculadas pela inversão da matriz  $C_{ij}$  e são dadas por

$$S_{11} = \frac{C_{11}C_{13} - C_{13}^2}{(C_{11} - C_{12}) [C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2]},$$

$$S_{12} = -\frac{C_{12}C_{33} - C_{13}^2}{(C_{11} - C_{12}) [C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2]},$$

$$S_{13} = -\frac{C_{13}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2},$$

$$S_{33} = -\frac{C_{11} + C_{12}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2}$$

e

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}}.$$

Um fato interessante nos nitretos binários com estrutura WZ é que sua rigidez elástica é isotrópica no plano da base [89]. Isso é importante por que a deformação nas camadas epitaxiais das heteroestruturas de nitretos do grupo III crescidas ao longo do eixo  $c$  (eixo [0001]) — geralmente causada pela falta de casamento entre as constantes de rede e/ou a falta de casamento entre os coeficientes de expansão térmica da camada e do substrato — é direcionada ao longo do plano da base (paralelo ao substrato). Nenhuma força é então aplicada na direção de crescimento, desse modo o cristal pode relaxar livremente nessa direção. A deformação biaxial resultante ( $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ ) causa tensões  $\sigma_1 = \sigma_2$ , enquanto  $\sigma_3$  tem que ser zero. Usando as Eqs. (4.15) e (4.16), podemos derivar uma relação entre a deformação ao longo do eixo  $c$  e a deformação ao longo do plano da base:

$$\varepsilon_3 = -2\frac{C_{13}}{C_{33}}\varepsilon_1, \quad (4.17)$$

onde

$$\nu(0001) = 2\frac{C_{13}}{C_{33}} \quad (4.18)$$

é a razão de Poisson e

$$\varepsilon_1 = \frac{a - a_0}{a_0} \quad (4.19)$$

e

$$\varepsilon_3 = \frac{c - c_0}{c_0} \quad (4.20)$$

são as mudanças relativas das constantes de rede  $a$  e  $c$  em relação às constantes de rede  $a_0$  e  $c_0$  do cristal relaxado. A tensão no plano da base causada pela falta de casamento entre as constantes de rede envolvidas pode ser calculada por meio de

$$\sigma_1 = \varepsilon_1 \left( C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{13}^2}{C_{33}} \right), \quad (4.21)$$

na qual

$$C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{13}^2}{C_{33}} > 0.$$

A polarização piezoelétrica para materiais hexagonais pertencentes ao grupo cristalográfico  $C_{6v}$  é dada por [74]

$$P_i^{\text{pz}} = \sum_l d_{il} \sigma_l \quad i = 1, 2, 3 \quad l = 1, \dots, 6 \quad (4.22)$$

onde  $P_i^{\text{pz}}$  são os componentes da polarização piezoelétrica e  $d_{il}$  são os módulos piezoelétricos (vide Tabela 8 na página 90). Usando as relações de simetria entre os módulos piezoelétricos,  $d_{31} = d_{32}$ ,  $d_{33} \neq 0$  e  $d_{15} = d_{24}$  (todas as outras componentes  $d_{il} = 0$ ), a Eq. (4.22) pode ser reduzida a um conjunto de apenas três equações:

$$P_1^{\text{pz}} = \frac{1}{2} d_{15} \sigma_5; \quad (4.23)$$

$$P_2^{\text{pz}} = \frac{1}{2} d_{15} \sigma_4; \quad (4.24)$$

$$P_3^{\text{pz}} = d_{31} (\sigma_1 + \sigma_2) + d_{33} \sigma_3. \quad (4.25)$$

Levando em consideração as solicitações biaxiais, como é de interesse, temos que  $\sigma_1 = \sigma_2$  e  $\sigma_3 = 0$ , além disso as tensões de cisalhamento são consideradas desprezíveis, assim  $\sigma_4 = \sigma_5 = 0$  e a polarização piezoelétrica resulta apenas num componente não-nulo, paralelo à direção de crescimento e dado por:

$$P_3^{\text{pz}} = 2d_{31} \sigma_1 = 2d_{31} \varepsilon_1 \left( C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{13}^2}{C_{33}} \right). \quad (4.26)$$

Ao invés dos módulos piezoelétricos, as constantes piezoelétricas  $e_{kl}$  são geralmente utilizadas para descrever as propriedades piezoelétricas dos nitretos do grupo III. Elas

podem ser calculadas por meio de

$$e_{kl} = \sum_j d_{kj} C_{jl} \quad k = 1, 2, 3 \quad l = 1, \dots, 6 \quad j = 1, \dots, 6. \quad (4.27)$$

Para cristais hexagonais a relação entre os módulos piezoelétricos e as constantes piezoelétricas podem ser reduzidas a

$$e_{31} = e_{32} = C_{11}d_{31} + C_{12}d_{32} + C_{13}d_{33} = (C_{11} + C_{12})d_{31} + C_{13}d_{33}, \quad (4.28)$$

$$e_{33} = 2C_{13}d_{31} + C_{33}d_{33}, \quad (4.29)$$

$$e_{15} = e_{24} = C_{44}d_{15} \quad (4.30)$$

e

$$e_{kl} = 0, \quad \text{para todos os outros componentes.} \quad (4.31)$$

A polarização piezoelétrica pode agora ser escrita como função da deformação usando as constantes piezoelétricas:

$$P_k^{Pz} = \sum_l e_{kl} \varepsilon_l, \quad (4.32)$$

onde  $k = 1, 2, 3$  e  $l = 1, \dots, 6$ . O componente não-nulo da polarização piezoelétrica causada pela deformação biaxial é

$$P_3^{Pz} = \varepsilon_1 e_{31} + \varepsilon_2 e_{32} + \varepsilon_3 e_{33} \quad (4.33)$$

$$= 2\varepsilon_1 e_{31} + \varepsilon_3 e_{33} \quad \text{com} \quad \varepsilon_3 = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \varepsilon_1 \quad (4.34)$$

$$= 2\varepsilon_1 \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right). \quad (4.35)$$

Daqui por diante vamos omitir o índice 3 e representar a polarização piezoelétrica das ligas de nitretos crescidas pseudomorficamente em camadas de *buffer* de GaN, AlN e InN simplesmente como  $P^{Pz}$ . Sob essas condições, a deformação pode ser calculada por

$$\varepsilon_1 = \frac{a_{\text{buffer}} - a(x)}{a(x)}. \quad (4.36)$$

Como primeira aproximação, as constantes de rede — vide Eqs. (4.3) a (4.8) —, piezoelétricas e elásticas das ligas são aproximadas por uma interpolação linear entre as constantes dos compostos binários relevantes e inseridas na Eq. (4.35). Nos cálculos seguin-

tes utilizamos os valores das propriedades físicas indicados na Tabela 9 na página 91. Como conseqüência da Eq. (4.35) e da interpolação linear das constantes elásticas e piezoelétricas, a polarização piezoelétrica nas ligas ternárias de nitreto pode ser aproximada, com precisão melhor que 1%, pelas seguintes expressões quadráticas (com  $P^{Pz}$  em  $C/m^2$ ):

$$P_{AlGaN/GaN}^{Pz}(x) = [-0,0525x + 0,0282x(1 - x)], \quad (4.37a)$$

$$P_{AlGaN/AlN}^{Pz}(x) = [0,026(1 - x) + 0,0248x(1 - x)] \quad (4.37b)$$

e

$$P_{AlGaN/InN}^{Pz}(x) = [-0,28x - 0,113(1 - x) + 0,042x(1 - x)]. \quad (4.37c)$$

Resultados semelhantes podem ser obtidos para as ligas AlInN e InGaN crescidas em substratos de GaN, AlN ou InN, para tanto basta usar as interpolações lineares adequadas para as constantes elásticas e piezoelétricas.

Para heteroestruturas com barreiras sob tensão moderada, o conjunto de Eqs. (4.37) pode, dependendo da implementação, ser utilizado como entrada de um processo autoconsistente baseado na teoria de massa efetiva, tanto diretamente como polarização, quanto indiretamente como densidade de carga interfacial.

A teoria convencional da polarização em sólidos assume tradicionalmente que a resposta de um material à tensão — que pode, por exemplo, ter sido gerada pela falta de casamento entre as constantes de rede dos materiais envolvidos no crescimento epitaxial de uma heteroestrutura — é essencialmente um efeito linear bem representado pela lei de Hooke, ou seja, podemos assumir que  $C_{ij}$  e  $e_{kl}$  são constantes para um dado cristal binário (ou ternário) e que a polarização piezoelétrica possui dependência linear em função da tensão aplicada. Esse modelo se mostrou preciso na descrição de diversas heteroestruturas semicondutoras [90,91,92,93,94]. Todavia, no início dos anos 90, alguns autores [95,96,97] demonstraram que determinados semicondutores piezoelétricos, como por exemplo o telureto de cádmio (CdTe), quando submetidos a forças ou pressões intensas, apresentavam resposta piezoelétrica não-linear. Posteriormente, Shimada et al. [98] previram, em seu trabalho teórico, que efeito similar podia ser esperado para os nitretos do grupo III. Recentemente, Ambacher e colaboradores [89] demonstraram que a piezeletricidade do GaN, InN e AlN, bem como a de suas ligas, não é linear em termos da deformação (vide Figura 13 na página seguinte). Além disso, os autores demonstraram também que os va-

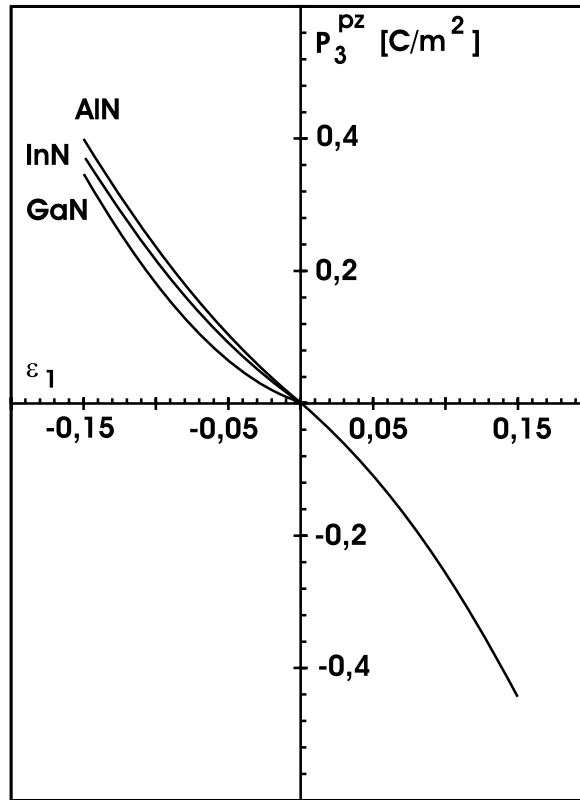


FIGURA 13 – Evidência de polarização piezoelétrica não-linear com relação à deformação nos nitretos binários com estrutura wurtzita.

Fonte: [Ambacher et al. \[89\]](#)

lores da polarização piezoelétrica, especialmente nos casos de grandes deformações, são subestimados quando utilizada a aproximação linear dada pela Eq. (4.35).

A piezeletricidade não-linear dos compostos binários de nitretos do grupo III pode ser descrita pelas seguintes relações [89], com  $P^{pz}$  em  $C/m^2$ :

$$P_{AlN}^{pz} = -1,808\varepsilon + 5,624\varepsilon^2 \quad \text{para } \varepsilon < 0 \quad (4.38a)$$

$$P_{AlN}^{pz} = -1,808\varepsilon - 7,888\varepsilon^2 \quad \text{para } \varepsilon > 0 \quad (4.38b)$$

$$P_{GaN}^{pz} = -0,918\varepsilon + 9,541\varepsilon^2 \quad (4.38c)$$

$$P_{InN}^{pz} = -1,373\varepsilon + 7,559\varepsilon^2. \quad (4.38d)$$

Desse modo o procedimento para o cálculo da polarização piezoelétrica de uma liga  $A_xB_{1-x}N$  para qualquer deformação se torna direto, bastando escolher um valor para  $x$ , calcular a deformação  $\varepsilon_1 = \varepsilon(x)$  a partir da lei de Vegard e depois a polarização piezoelétrica



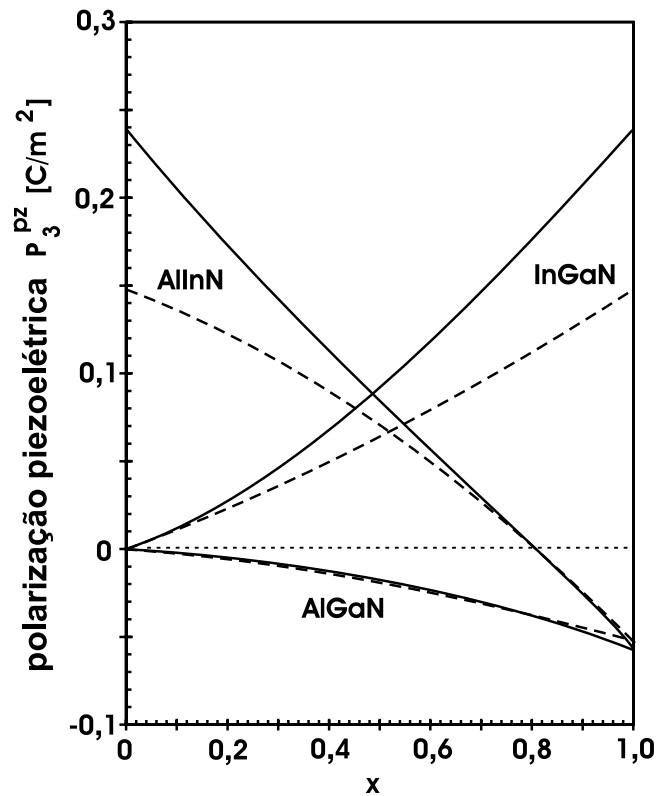


FIGURA 14 – Polarização piezoelétrica das ligas ternárias de nitreto em função da fração molar  $x$  usando a aproximação linear (linhas tracejadas) e não-linear (linhas sólidas).

Fonte: [Ambacher et al. \[89\]](#)

pela expressão

$$P_{ABN}^{Pz}(x) = xP_{AN}^{Pz}[\varepsilon(x)] + (1-x)P_{BN}^{Pz}[\varepsilon(x)], \quad (4.39)$$

onde  $P_{AN}^{Pz}$  e  $P_{BN}^{Pz}$  são as polarizações piezoelétricas dos compostos binários relevantes dadas pelo conjunto de Eqs. (4.38).

A polarização piezoelétrica de ligas ternárias AlGaN, InGaN e AlInN crescidas pseudomorficamente em *buffers* de GaN como função da fração molar da liga, isto é, Al ou InN, é mostrada na Figura 14. Observe que a polarização piezoelétrica não é linear em função de  $x$  e que, especialmente para ligas com alta concentração de In — que são, todavia, difíceis de se obter na prática —, o valor (absoluto) da polarização piezoelétrica excede o valor (absoluto) da polarização espontânea (compare com a Figura 12 na página 57).

É interessante notar na Figura 14 que, para heteroestruturas  $Al_{0,82}In_{0,18}N/GaN$ , está previsto o crescimento com excelente casamento entre as constantes de rede de modo

que a polarização piezoelétrica na liga tende a desaparecer. Uma comparação dos valores calculados por [Ambacher et al.](#) usando interpolação linear para as constantes elásticas e piezoelétricas ou levando-se em consideração a não-linearidade da polarização em relação à deformação mostra que a interpolação linear leva a uma subestimação da polarização piezoelétrica. Assim sendo, o esquema aprimorado, representado pelas Eqs. (4.38) e (4.39), é de grande interesse na modelagem de nanoestruturas sujeitas a grandes deformações, isto é, compostas por camadas com alta concentração de In, para o caso das ligas InGaN e AlInN.

#### 4.2.4 Cargas Induzidas por Polarização

A polarização total  $P$  é a soma das polarizações piezoelétrica e espontânea, isto é,

$$P_{\text{ABN}} = P_{\text{ABN}}^{\text{PZ}} + P_{\text{ABN}}^{\text{SP}}. \quad (4.40)$$

A densidade de carga induzida por polarização, por sua vez, está associada com o gradiente de polarização e é dada por:

$$\rho_P = -\nabla P. \quad (4.41)$$

Como caso especial, na superfície de uma camada  $A_xB_{1-x}N$  (deformada ou não), bem como nas interfaces de uma heteroestrutura  $A_xB_{1-x}N/\text{GaN}$ , a polarização total muda abruptamente, causando uma densidade de carga bidimensional  $\sigma$ , dada por

$$\sigma_{\text{ABN}} = P_{\text{ABN}} = P_{\text{ABN}}^{\text{PZ}} + P_{\text{ABN}}^{\text{SP}}, \quad (\text{para superfícies}) \quad (4.42)$$

$$\sigma_{\text{ABN}/\text{GaN}} = P_{\text{GaN}} - P_{\text{ABN}} \quad (4.43)$$

$$= (P_{\text{GaN}}^{\text{PZ}} + P_{\text{GaN}}^{\text{SP}}) - (P_{\text{ABN}}^{\text{PZ}} + P_{\text{ABN}}^{\text{SP}}). \quad (\text{para interfaces}) \quad (4.44)$$

Em heteroestruturas do tipo  $n$  deve-se levar em consideração que os elétrons livres irão acumular-se nas interfaces com cargas positivas, compensando  $+\sigma$ . Como consequência, um 2DEG com concentração de portadores próxima à concentração da densidade interfacial  $+\sigma/e$  pode se formar. Deve-se observar que esses 2DEGs são formados sem qualquer necessidade de uma barreira com dopagem modulada. Isso é de interesse especial para a fabricação de HEMTs de alta frequência e alta potência, visto que o crescimento e o processamento desses dispositivos torna-se bastante simplificado.

### 4.2.5 Campo e Potencial Elétricos Induzido por Polarização

Em um sistema finito, a existência de um campo de polarização insinua a presença de campos elétricos. Para o caso piezoelétrico, a magnitude do campo elétrico depende da tensão, das constantes de piezoelétricas e principalmente da geometria do dispositivo.

Em 1997, Bernardini e colaboradores [12, 76, 85] demonstraram que a polarização (piezoelétrica e espontânea) dos nitretos do grupo III realmente se manifesta como campos eletrostáticos, devidos às cargas induzidas por polarização resultantes, por sua vez, das descontinuidades da polarização nas heterointerfaces.

A primeira demonstração experimental da presença de campo elétrico induzido por polarização em heteroestruturas III-V de nitretos foi realizada por Bykhovski et al. [99] ao analisar as características corrente-tensão (I-V) de tais materiais. O efeito do campo elétrico intrínseco nas propriedades ópticas de heteroestruturas de nitretos-III foi investigado experimentalmente pela primeira vez por Takeuchi et al. [100]. O efeito da polarização espontânea sobre o campo elétrico intrínseco de QWs de GaN/AlGaIn foi objeto de pesquisa de Langer et al. [101]. Vários outros trabalhos experimentais [102, 103, 104, 105] importantes demonstraram a presença de campos elétricos intrínsecos intensos em nitretos do grupo III e abordaram o seu efeito em diversas propriedades físicas de interesse tecnológico.

Os campos elétricos no poço e na camada da barreira devido às polarizações espontânea e piezoelétrica podem ser determinados supondo que a diferença de potencial total em um período da estrutura deve ser igual a zero. Desse modo os campos elétricos na barreira e no poço devem ter sinais opostos. Essas condições podem ser expressas pela seguinte equação:

$$F_w L_w = F_b L_b = 0, \quad (4.45)$$

onde:

$F_w$  é a intensidade do campo elétrico no poço,

$F_b$  é a intensidade do campo elétrico na barreira,

$L_w$  representa a largura do poço e

$L_b$  representa a largura da barreira.

Isso implica que a distribuição do campo elétrico ao longo da heteroestrutura é propor-

cional à razão dos comprimentos das camadas. Conseqüentemente, a camada epitaxial mais fina terá um campo elétrico maior que a camada mais grossa. De acordo com essas condições expostas anteriormente, a intensidade dos campos de polarização no poço quântico pode ser calculada por meio das seguintes expressões:

$$F_w = \frac{(P_b - P_w)L_b}{\epsilon_w L_b + \epsilon_b L_w} \quad (4.46)$$

e

$$F_b = \frac{(P_w - P_b)L_w}{\epsilon_w L_b + \epsilon_b L_w}, \quad (4.47)$$

em que  $P_w$  é a polarização total no poço,  $P_b$  é a polarização total na barreira,  $\epsilon_w$  é a constante dielétrica do material do poço e  $\epsilon_b$  é a constante dielétrica do material da barreira. A polarização total no canal é dada por

$$P_w = P_{\text{GaN}}^{\text{SP}} + P_{\text{GaN}}^{\text{PZ}} \quad (4.48)$$

e

$$P_b = P_{\text{AlGaN}}^{\text{SP}} + P_{\text{AlGaN}}^{\text{PZ}}. \quad (4.49)$$

As constantes dielétricas  $\epsilon_b$  e  $\epsilon_w$  são obtidas pela interpolação linear (lei de Vegard) dos valores dos parâmetros dos compostos binários relevantes, que podem ser obtidos diretamente das Tabelas 6 e 7 na página 89.

Conforme investigamos no [Capítulo 2](#), a aplicação dos campos elétricos geralmente ocasiona uma alteração do perfil da banda de condução, propomos aqui uma forma linear por partes simples para o perfil da banda de condução de poço quântico de GaN/AlGaN crescido ao longo do eixo  $z$  e sob a influência dos campos internos de polarização conforme expressão abaixo:

$$V(z) = \begin{cases} eF_b z + V_0, & \text{para } z < 0 \\ eF_w z, & \text{para } 0 < z < L_w \\ eF_b z + eF_w L_w + V_0 & \text{para } z > L_w \end{cases} \quad (4.50)$$

Como veremos na seção seguinte, a expressão acima para o potencial efetivo é a responsável pelos fortes desvios para o azul obtidos quando levamos em consideração os campos internos de polarização.

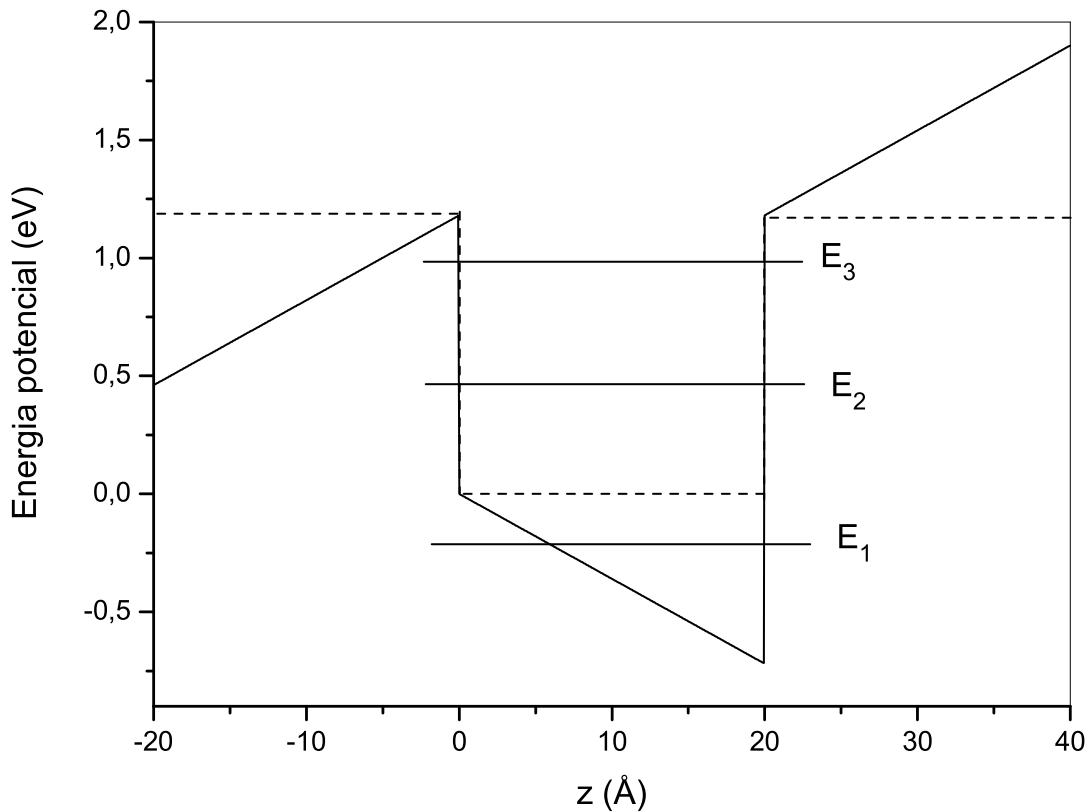


FIGURA 15 – Efeito dos campos intrínsecos de polarização no perfil da banda de condução e nos níveis de energias dos estados ligados em um QW não-dopado de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N de largura igual a 20 Å.

### 4.3 RESULTADOS OBTIDOS

Após a descrição, realizada nas seções anteriores, das peculiaridades existentes na modelagem de nanoestruturas baseadas em nitretos do grupo III, apresentamos nesta seção análise dos efeitos dos campos elétricos internos e das interfaces graduais nos níveis de energia do elétron, nas energias de transição intersubbanda e no perfil da banda de condução de QWs simples de GaN/AlGaN. O procedimento numérico adotado aqui segue o mesmo processo de discretização própria em malhas não-uniformes discutido no capítulo anterior (vide Seção 3.4 na página 47).

A Figura 15 apresenta as modificações introduzidas no perfil da BC, descritas pela Eq. (4.50), devido aos campos internos de polarização para um QW de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N de largura 20 Å com estrutura wurtzita. Os níveis de energia calculados estão indicados pelas linhas horizontais sólidas, as linhas tracejadas de referência representam o QW na ausência de campos de polarização. As energias encontradas para os estados ligados foram:

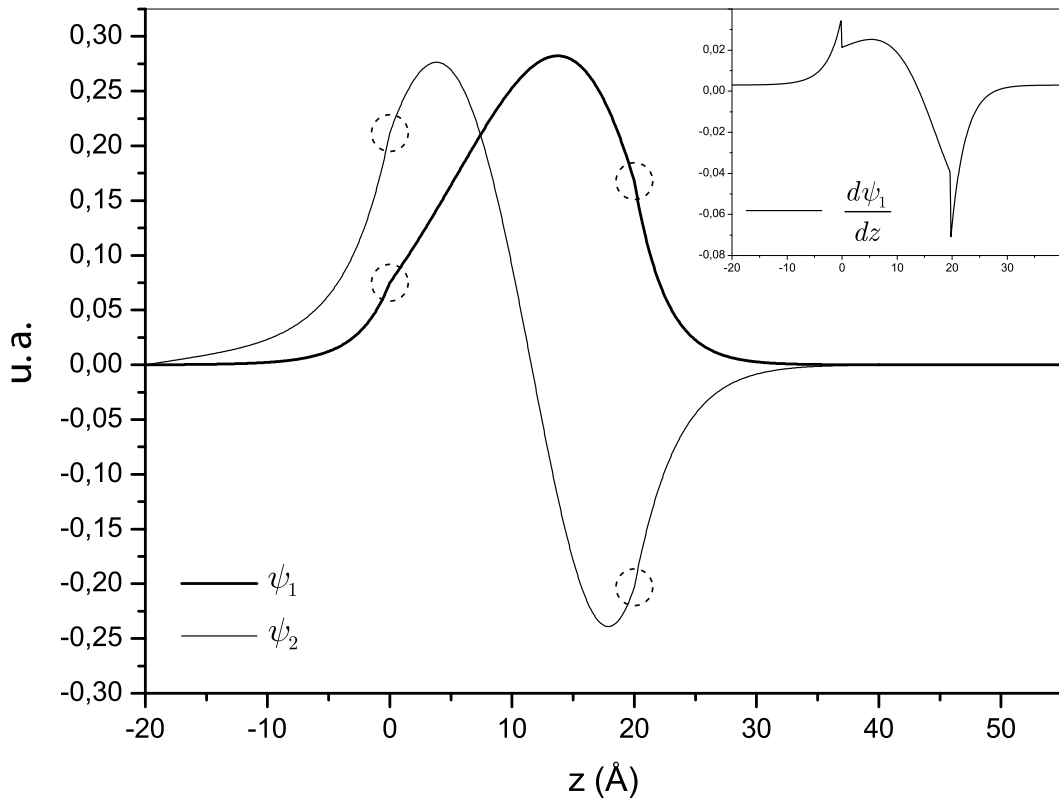


FIGURA 16 – Duas primeiras funções de onda normalizadas sob efeito dos campos intrínsecos de polarização em um QW de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N de largura igual a 20 Å. A inserção no canto superior direito da figura mostra o gráfico da derivada da primeira função de onda, note os dois pontos de descontinuidade localizados nas heterointerfaces.

$E_1 = 0,507$  eV,  $E_2 = 1,187$  eV e  $E_3 = 1,697$  eV, todos os valores tomados em relação ao fundo do QW.

As primeiras duas funções de onda normalizadas, relativas ao QW mostrado na Figura 15, estão representadas na Figura 16. Chama a atenção na Figura 16 a descontinuidade da derivada primeira da função de onda nas heterointerfaces, indicada na figura pelos círculos tracejados e melhor visualizada com o gráfico da derivada da primeira função de onda, que é mostrado na inserção realizada no canto superior direito da Figura 16. Tal descontinuidade surge devido à diferença, significativa para QWs de GaN/AlGaIn, de massa efetiva entre os materiais constituintes do QW e indica, além disso, que utilizamos o Hamiltoniano adequado, qual seja o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke, na discretização da equação de Schrödinger, de modo que a continuidade do produto da derivada primeira da

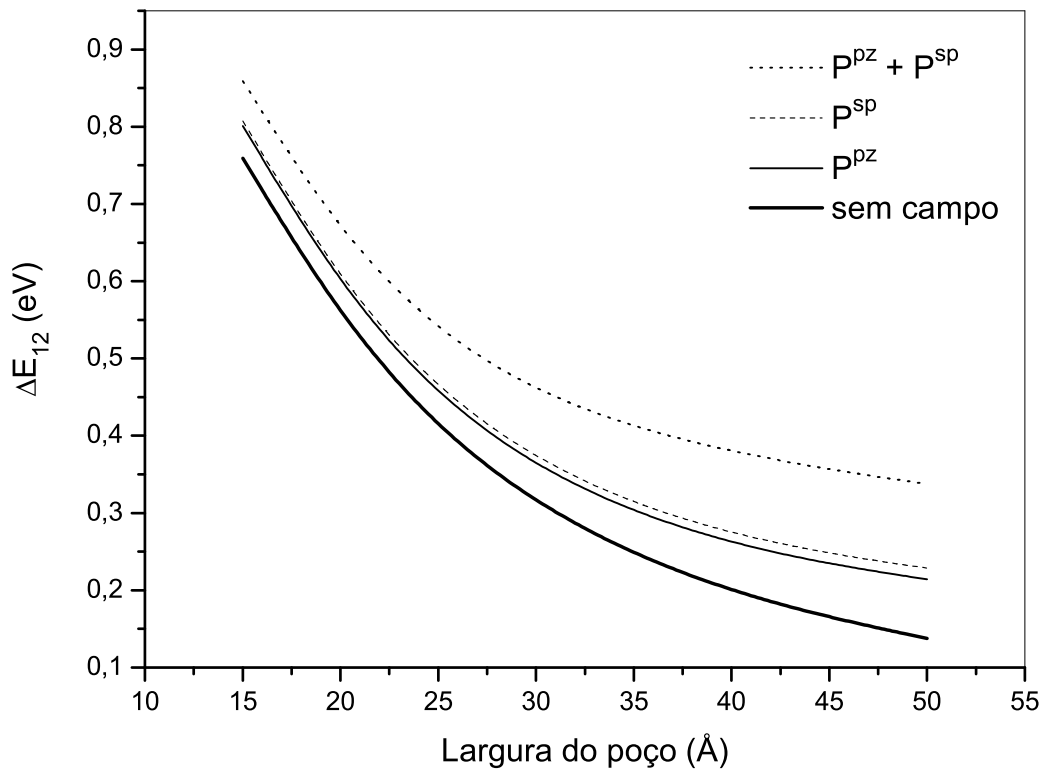


FIGURA 17 – Efeito dos campos internos de polarização nas energias de transição intersubbanda em QWs não-dopados de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N. A influência dos campos de polarização é maior para QWs mais largos.

função de onda com o inverso da massa efetiva é automaticamente satisfeita<sup>1</sup>.

A mudança no perfil da banda de condução provocada pelos campos de polarização piezoelétrica e espontânea tem grande influência nas energias de transição intersubbanda, conforme ilustra a Figura 17, na qual fazemos uma comparação entre as energias de transição das duas primeiras subbandas em QWs de GaN/AlGaN em função da largura do poço. Um aumento significativo (desvio para o azul) nas energias de transição intersubbanda na presença dos campos de polarização pode ser observado claramente a partir da Figura 17 e também foi verificado experimentalmente [106]. Note ainda que, neste caso, a polarização espontânea tem um efeito ligeiramente maior nas energias de transição intersubbanda em comparação com o desvio causado pela polarização piezoelétrica.

Existe evidência experimental de que as interfaces de poços quânticos de GaN/AlGaN sejam graduais. Kisielowski, Liliental-Weber e Nakamura [107] mapearam a distribuição da fração molar de In em escala atômica para QW de GaN/InGaN/AlGaN usando microscopia

<sup>1</sup>Veja Eq. (B.40) na página 107 do Apêndice B.

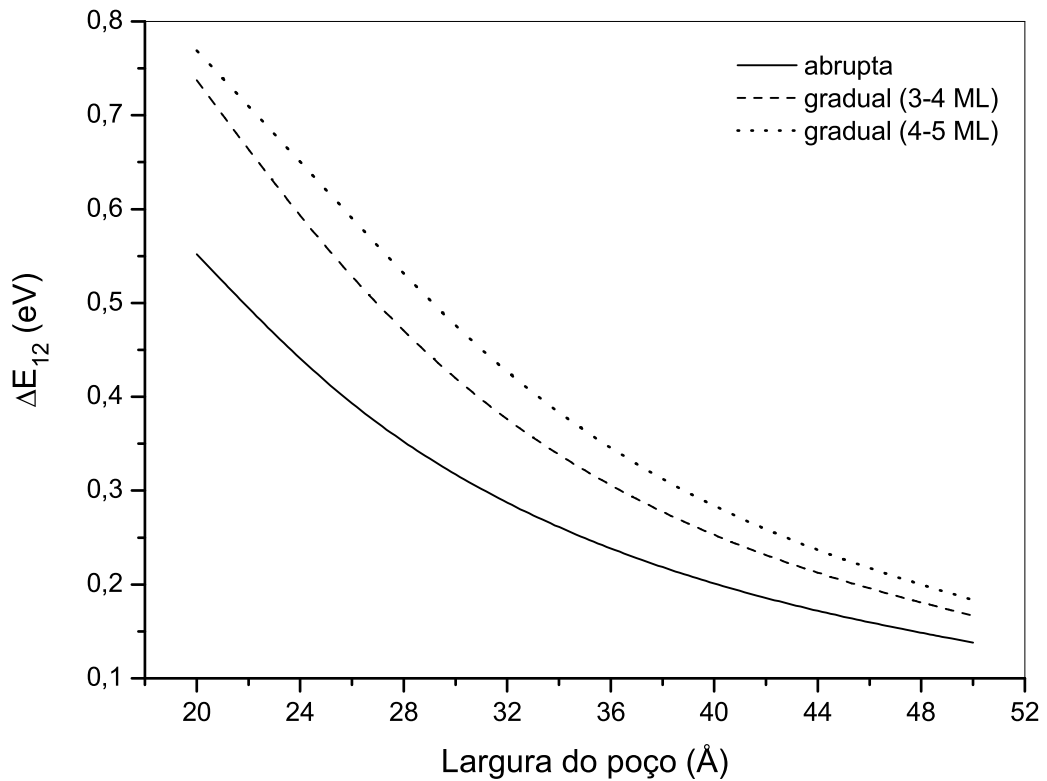


FIGURA 18 – Efeito das interfaces graduais nas energias de transição intersubbanda das duas primeiras subbandas em QWs não-dopados de GaN/Al<sub>0,70</sub>Ga<sub>0,30</sub>N sem campos internos de polarização. A influência das interfaces graduais é maior para QWs mais estreitos.

eletrônica de transmissão de alta resolução (HRTEM). Os resultados revelaram a existência de gradações nas heterointerfaces de até 25 Å de largura. Shirasawa et al. [108] encontraram rugosidades de interface em heteroestruturas de GaN/AlGaIn crescidas via epitaxia de fase vapor de metalorgânicos (MOVPE) numa faixa de 7 a 20 Å, que depende do tempo de interrupção do crescimento.

A Figura 18 ilustra a influência das interfaces graduais nas energias de transição intersubbanda para os dois primeiros níveis de energia. A fim de analisar exclusivamente o efeito das interfaces graduais nas energias de transição intersubbanda e também a fim de comparar a intensidade desse efeito com os desvios para a azul obtidos anteriormente devido aos campos elétricos de polarização, desconsideramos, neste momento, o efeito de tais campos intrínsecos de polarização. Os resultados apontam elevados desvios para o azul nos níveis de energia dos estados ligados quando interfaces não-abruptas são levadas em consideração, os desvios são mais acentuados para QWs com interfaces mais graduais, observe, na Figura 18, que os QWs que apresentam uma interface normal de 4 ML e uma interface invertida



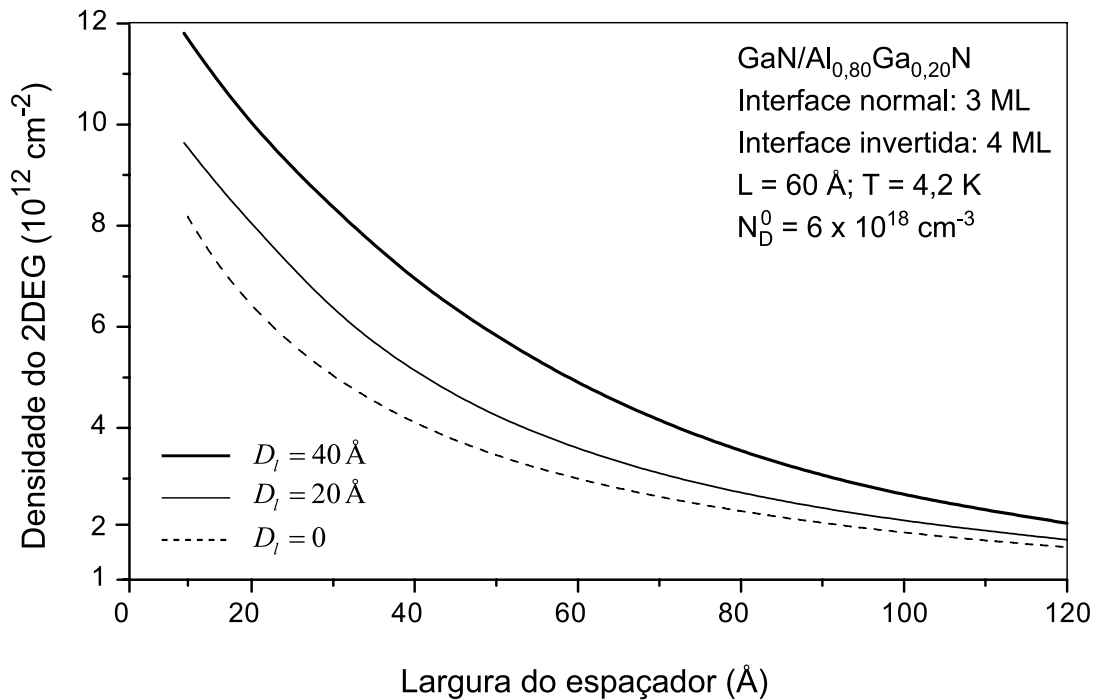


FIGURA 19 – Dependência da densidade superficial de elétrons com o tamanho do espaçador em um QW gradual de GaN/Al<sub>0,80</sub>Ga<sub>0,20</sub>N. A linha tracejada refere-se ao perfil de dopagem abrupto, na aproximação de depleção, e as linhas sólidas representam os perfis não-abruptos simulados.

de 5 ML (curva pontilhada) exibem maiores energias de transição intersubbanda quando comparados tanto às energias dos QWs com interface normal de 3 ML e interface invertida de 4 ML (curva tracejada) quanto às energias dos QWs abruptos (curva sólida).

Note, ainda na Figura 18, que o efeito produzido pelas interfaces graduais tem comportamento diferente daquele observado anteriormente devido aos campos internos de polarização (vide Figura 17), no qual a influência do campo é mais pronunciada para poços mais largos. Aqui a situação é oposta, ou seja, o efeito das interfaces graduais é mais acentuado para QWs mais estreitos, de modo que o efeito das interfaces graduais tende a se tornar cada vez mais importante em nanodispositivos semicondutores, visto que a melhoria no processo de crescimento das interfaces parece não acompanhar as necessidades de redução da dimensão de tais dispositivos.

Na Figura 19 mostramos a dependência da densidade dos portadores com o a largura do espaçador  $L_s$  para um perfil de dopagem abrupto dentro da aproximação de depleção (linha tracejada) e para perfis de dopagem não-abruptos (linhas sólidas) com comprimentos de difusão  $D_l$  de 20 Å e 40 Å. A densidade do 2DEG obtida aqui é pelo menos uma ordem

de grandeza superior àquela obtida anteriormente com QW de GaAs/AlGaAs.

Para todos os perfis, a densidade do 2DEG diminui rapidamente para  $L_S$  abaixo de 60 Å. Note que a densidade do gás de elétrons bidimensional aumenta significativamente com o aumento de  $D_I$  de 0 (abrupto) até 40 Å. O crescimento de  $L_S$  tende a tornar as curvas mais próximas devido à redução do efeito da dopagem não-abrupta na transferência de carga.

## 5 CONCLUSÕES

---

NESTE TRABALHO investigamos a influência de campos elétricos externos e internos, perfis de dopagem e interfaces graduais em algumas propriedades eletrônicas relevantes em poços quânticos de GaAs/AlGaAs e GaN/AlGaN.

Para o sistema composto de GaAs/AlGaAs submetido à radiação de dois campos de laser, nossos resultados mostram que o campo polarizado na direção de crescimento da heteroestrutura altera significativamente o perfil da banda de condução e induz desvios para o azul nos níveis de energia dos elétrons. Tais efeitos dependem da intensidade e da frequência do laser incidente e também de sua direção de polarização. Para o campo de laser intenso polarizado ao longo da direção de crescimento, a dependência dos desvios com a intensidade do laser é monotônica, sendo os desvios maiores para níveis de energia mais altos. As análises numéricas realizadas apontam que certos níveis de energia em estados excitados podem se tornar livres para determinada intensidade crítica do laser. A dependência com a polarização do laser foi investigada pela comparação do efeito do nosso campo de laser com um campo de laser THz, com polarização paralela ao plano das heterointerfaces, cujo desvio para o azul induzido é o mesmo para todos os níveis de energia, sendo igual à energia do campo de radiação eletromagnética. Em nosso caso, encontramos dependência linear dos desvios em função do parâmetro de revestimento do laser. Em relação à dependência da densidade de estados com a energia, na presença de um campo de laser THz, não-ressonante e linearmente polarizado, encontramos reduções que também dependem da intensidade e da frequência do laser THz. O aumento suave e monotônico de tal redução em função da intensidade do laser THz sugere um mecanismo de ajuste fino para a densidade de estados, o nível de Fermi e a densidade do 2DEG. Esse tipo de controle pode ser de grande interesse para os que trabalham com dispositivos optoeletrônicos baseados em poços quânticos ou sistemas de baixa dimensionalidade similares na presença de campos de laser intensos. Em particular, as mudanças na densidade de estados da sua forma escada usual para uma forma funcional lembra o perfil da densidade de estados do fio quântico.

Para poços quânticos simples de GaAs/AlGaAs com dopagem modulada em uma das barreiras, desenvolvemos cálculos autoconsistentes em que mostram a relação entre a densidade superficial dos portadores de carga e o perfil de dopagem. Propusemos um método de discretização própria para resolver as equações acopladas de Schrödinger de Poisson em malhas não-uniformes que permite obter resultados numéricos estáveis e bastante precisos para a densidade superficial de elétrons, mesmo quando perfis não-abruptos de dopagem e massa efetiva são utilizados na modelagem. Notamos que a densidade do 2DEG diminui rapidamente para uma largura do espaçador abaixo de 300 Å, independentemente do perfil de dopagem adotado, e que a densidade do gás de elétrons bidimensional aumenta significativamente com o aumento do tamanho de difusão dos doadores desde 0 (abrupto) até 100 Å. Além disso, verificamos que o crescimento do espaçador tende a tornar as curvas da densidade superficial de elétrons mais próximas devido à redução do efeito da dopagem não-abrupta na transferência de carga. Nossos resultados revelam que o perfil de dopagem é a provável causa para a subestimação na densidade do 2DEG verificada em trabalhos anteriores baseados em perfis de dopagem abruptos.

Utilizamos poços quânticos de GaN/AlGaN para dar continuidade ao estudo dos efeitos de campos intensos, das interfaces graduais e dopagens não-abruptas nas propriedades eletrônicas de semicondutores III–V, mais especificamente nas energias de transição intersubbanda, no perfil da banda de condução e na densidade do gás de elétrons bidimensional. Para tanto, utilizamos o procedimento numérico rigoroso desenvolvido anteriormente no [Capítulo 3](#), no qual estudamos as propriedades do gás de elétrons bidimensional formado pela modulação de dopagem. Contudo, devido às características distintas dos nitretos-III, foi necessária a inclusão detalhada, na modelagem computacional, dos campos elétricos de polarização e também dos novos parâmetros relacionados ao nitretos III–V, visando considerar suas não-linearidades. Uma vez mais obtivemos uma relação entre o perfil da banda de condução e a intensidade dos campos elétricos (conforme [Capítulo 2](#)) que nos conduziu, por sua vez, a uma análise das energias de transição intersubbanda e dos desvios para o azul, mostrando que o efeito das interfaces graduais nas energias de transição intersubbanda está em direção oposta ao efeito obtido com os campos de polarização, visto que este último efeito é mais pronunciado em poços quânticos mais largos enquanto o primeiro é mais acentuado em poços estreitos, indicando a importância das interfaces graduais na modelagem de dispositivos semicondutores de baixa dimensão. O cálculo autoconsistente

realizado em QWs de GaN/AlGa<sub>N</sub> revelou um comportamento para a densidade do 2DEG análogo aquele obtido em QWs de GaAs/AlGaAs, contudo, no primeiro caso, a densidade do 2DEG é pelo menos uma ordem de grandeza maior. Visto que o efeito na densidade do 2DEG é mensurável, resultados experimentais são esperados.

## 5.1 TRABALHOS FUTUROS

Pretendemos utilizar a modelagem computacional e a teoria desenvolvidas, apresentadas e publicadas ao longo de nosso doutoramento [109,110,111,112,113] para estender o estudo do efeito de campos de laser não-ressonantes e em configuração cruzada às heteroestruturas de nitretos do grupo III a fim de obter um controle óptico das propriedades eletrônicas semelhante aquele obtido neste trabalho com poços quânticos de GaAs/AlGaAs. Além disso, intencionamos realizar cálculo autoconsistente da mobilidade eletrônica em poços quânticos dopados de GaN/AlGa<sub>N</sub> incluindo os efeitos de polarização, tendo em vista que nosso grupo de pesquisa possui vasta experiência [114, 115, 112, 116, 46, 45] nesse tipo de cálculo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- 1 KROEMER, H. Nobel lecture: Quasielectric fields and band offsets: teaching electrons new tricks. *Rev. Mod. Phys.*, v. 73, n. 3, p. 783–793, 2001.
- 2 STRITE, S.; MORKOÇ, H. GaN, AlN, and InN: A review. *J. Vac. Sci. Technol. B*, v. 10, n. 4, p. 1237–1266, 1992.
- 3 TIEDE, E.; THIMANN, M.; SENSSE, K. Über phosphoreszenzfähiges, durch silicium aktiviertes aluminiumnitrid. *Chem. Berichte*, v. 61, n. 7, p. 1568–1573, 1928.
- 4 AKASAKI, I. et al. Photoluminescence of Mg-doped *p*-type GaN and electroluminescence of GaN *p-n*-junction LED. *J. Lumin.*, v. 48-9, p. 666–670, 1991.
- 5 NAKAMURA, S.; SENOH, M.; MUKAI, T. Highly *p*-typed Mg-doped GaN films grown with GaN buffer layers. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2*, v. 30, n. 10A, p. L1708–L1711, 1991.
- 6 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *J. Appl. Phys.*, v. 94, n. 6, p. 3675–3696, 2003.
- 7 BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V.; VANDERBILT, D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. *Phys. Rev. B*, v. 56, n. 16, p. R10024–R10027, 1997.
- 8 RESTA, R. Theory of the electric polarization in crystals. *Ferroelectrics*, v. 136, n. 1-4, p. 51–55, 1992.
- 9 RESTA, R. Macroscopic electric polarization as a geometric quantum phase. *Europhys. Lett.*, v. 22, n. 2, p. 133–138, 1993.
- 10 VANDERBILT, D.; KING-SMITH, R. D. Electric polarization as a bulk quantity and its relation to surface charge. *Phys. Rev. B*, v. 48, n. 7, p. 4442–4455, 1993.
- 11 KING-SMITH, R. D.; VANDERBILT, D. Theory of polarization of crystalline solids. *Phys. Rev. B*, v. 47, n. 3, p. 1651–1654, 1993.
- 12 BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V.; VANDERBILT, D. Polarization-based calculation of the dielectric tensor of polar crystals. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, n. 20, p. 3958–3961, 1997.
- 13 FIORENTINI, V. et al. Effects of macroscopic polarization in III–V nitride multiple quantum wells. *Phys. Rev. B*, v. 60, n. 12, p. 8849–8858, 1999.
- 14 GMACHL, C. et al. Intersubband absorption at  $\lambda \sim 1.55 \mu\text{m}$  in well- and modulation-doped GaN/AlGaIn multiple quantum wells with superlattice barriers. *Appl. Phys. Lett.*, v. 77, n. 23, p. 3722–3724, 2000.

- 15 AMBACHER, O. et al. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures. *J. Appl. Phys.*, v. 85, n. 6, p. 3222–3233, 1999.
- 16 MARKELZ, A. G. et al. Interband impact ionization by terahertz illumination of inas heterostructures. *Appl. Phys. Lett.*, v. 69, n. 26, p. 3975–3977, 1996.
- 17 VAUGHAN, T. A. et al. Direct observation of magnetophonon resonances in landau-level lifetimes of a semiconductor heterostructure. *Phys. Rev. B*, v. 53, n. 24, p. 16481–16484, 1996.
- 18 MURDIN, B. N. et al. Direct observation of the LO phonon bottleneck in wide GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells. *Phys. Rev. B*, v. 55, n. 8, p. 5171–5176, 1997.
- 19 ASMAR, N. G. et al. Resonant-energy relaxation of terahertz-driven 2-dimensional electron gases. *Phys. Rev. B*, v. 51, n. 24, p. 18041–18044, 1995.
- 20 ASMAR, N. G. et al. Temperature of quasi-two-dimensional electron gases under steady-state terahertz drive. *Appl. Phys. Lett.*, v. 68, n. 6, p. 829–831, 1996.
- 21 XU, W.; ZHANG, C. Magneto-photon-phonon resonances in two-dimensional semiconductor systems driven by terahertz electromagnetic fields. *Phys. Rev. B*, v. 54, n. 7, p. 4907–4912, 1996.
- 22 XU, W.; ZHANG, C. Nonlinear transport in steady-state terahertz-driven two-dimensional electron gases. *Phys. Rev. B*, v. 55, n. 8, p. 5259–5265, 1997.
- 23 JAUHO, A. P.; JOHNSEN, K. Dynamical Franz-Keldysh effect. *Phys. Rev. Lett.*, v. 76, n. 24, p. 4576–4579, 1996.
- 24 PIDGEON, C. R. Free electron laser study of the suppression of non-radiative scattering processes in semiconductors. *Infrared Phys. Technol.*, v. 40, n. 3, p. 231–238, 1999.
- 25 TOLK, N. H. et al. Free-electron laser wavelength-selective materials alteration and photoexcitation spectroscopy. *Appl. Surf. Sci.*, v. 106, p. 205–210, 1996.
- 26 GERCK, E.; MIRANDA, L. C. M. Quantum well lasers tunable by long wavelength radiation. *Appl. Phys. Lett.*, v. 44, n. 9, p. 837–839, 1984.
- 27 GALVAO, R. M. O.; MIRANDA, L. C. M. Laser-enhanced mobility in semiconducting layered structures. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, v. 17, n. 2, p. L41–L45, 1984.
- 28 QU, F. Y.; FONSECA, A. L. A.; NUNES, O. A. C. Laser-dressed binding energy of a hydrogen impurity in the GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As nanostructure in the presence of a static electric field. *Superlattices Microstruct.*, v. 23, n. 5, p. 1005–1014, 1998.
- 29 CAO, J. C.; LEI, X. L. Multiphoton-assisted absorption of terahertz radiation in InAs/AlSb heterojunctions. *Phys. Rev. B*, v. 67, n. 8, p. 085309, 2003.
- 30 ZHANG, C. Resonant tunneling and bistability in a double barrier structure under an intense terahertz laser. *Appl. Phys. Lett.*, v. 78, n. 26, p. 4187–4189, 2001.

- 31 VALADARES, E. C. et al. Tuning of the 2-dimensional electron-density in modulation-doped quantum-wells by longwavelength radiation. *Superlattices Microstruct.*, v. 8, n. 2, p. 201–204, 1990.
- 32 XU, W.; ZHANG, C. Electronic subband structure in two-dimensional electron gases under intense laser radiations. *Physica E*, v. 2, n. 1-4, p. 252–255, 1998.
- 33 XU, W. Elementary electronic excitation in three-dimensional electron gases under free-electron laser radiations. *Phys. Rev. B*, v. 57, n. 24, p. 15282–15292, 1998.
- 34 KONO, J. et al. Resonant terahertz optical sideband generation from confined magnetoexcitons. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, n. 9, p. 1758–1761, 1997.
- 35 XU, W. Self-consistent electronic subband structure in terahertz-driven two-dimensional electron gases. *Europhys. Lett.*, v. 40, n. 4, p. 411–416, 1997.
- 36 XU, W. Electron density of states in terahertz driven two-dimensional electron gases. *Semicond. Sci. Technol.*, v. 12, n. 12, p. 1559–1564, 1997.
- 37 MITIN, V. V.; KOHELAP, V. A.; STROSCIO, M. A. *Quantum heterostructures : microelectronics and optoelectronics*. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 1999. 642 p.
- 38 BASTARD, G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. New York: Les Editions de Physique, 1988. 357 p.
- 39 DAVIES, J. H. *The physics of low-dimensional semiconductors : an introduction*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 438 p.
- 40 GAVRILA, M.; KAMIŃSKI, J. Z. Free-free transitions in intense high-frequency laser fields. *Phys. Rev. Lett.*, v. 52, n. 8, p. 613–616, 1984.
- 41 FUJITA, M. et al. Induced charge-density oscillation under a quantizing magnetic field and intense terahertz radiation. *Phys. Rev. B*, v. 67, n. 7, p. 075105, 2003.
- 42 FANYAO, Q.; FONSECA, A. L. A.; NUNES, O. A. C. Hydrogenic impurities in a quantum well wire in intense, high-frequency laser fields. *Phys. Rev. B*, v. 54, n. 23, p. 16405–16408, 1996.
- 43 HENNEBERGER, W. C. Perturbation method for atoms in intense light beams. *Phys. Rev. Lett.*, v. 21, n. 12, p. 838–8, 1968.
- 44 MATTUCK, R. D. *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. 2nd. ed. New York: Dover Publications, 1992. 429 p.
- 45 LIMA, F. M. S. et al. Electron mobility in one (two)-side modulation-doped GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As asymmetric quantum wells. *Phys. Status Solidi B*, v. 225, n. 1, p. 43–61, 2001.
- 46 LIMA, F. M. S. et al. Electric field effects on electron mobility in n-AlGaAs/GaAs/AlGaAs single asymmetric quantum wells. *J. Appl. Phys.*, v. 92, n. 9, p. 5296–5303, 2002.



- 47 STORMER, H. L. et al. Influence of an undoped (AlGa)As spacer on mobility enhancement in GaAs-(AlGa)As super-lattices. *Appl. Phys. Lett.*, v. 38, n. 9, p. 691–693, 1981.
- 48 KARETNIKOVA, I. R.; NEFEDOV, I. M.; SHASHKIN, V. I. The accuracy of reconstructing the semiconductor doping profile from capacitance-voltage characteristics measured during electrochemical etching. *Semiconductors*, v. 35, n. 7, p. 766–772, 2001.
- 49 SUNDQVIST, P. A. et al. Self-consistent drift-diffusion model of nanoscale impurity profiles in semiconductor layers, quantum wires, and quantum dots. *Phys. Rev. B*, v. 67, n. 16, p. 165330, 2003.
- 50 SONG, J. S. et al. Suppression of impurity interdiffusion in heteroepitaxy by inserting a low-temperature buffer layer in between the epilayer and the substrate. *J. Cryst. Growth*, v. 261, n. 1, p. 159–163, 2004.
- 51 KOHNKE, G. E. et al. Beryllium diffusion in GaAs/AlGaAs single-quantum-well separate-confinement heterostructure laser active regions. *Appl. Phys. Lett.*, v. 66, n. 21, p. 2786–2788, 1995.
- 52 HUANG, Y.; WILLIAMS, C. C.; SLINKMAN, J. Quantitative 2-dimensional dopant profile measurement and inverse modeling by scanning capacitance microscopy. *Appl. Phys. Lett.*, v. 66, n. 3, p. 344–346, 1995.
- 53 PARK, Y. M. et al. Effects of doping profile on characteristics of InAs quantum dots. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, v. 41, n. 6B, p. 4375–4377, 2002.
- 54 MIL'SHTEIN, S. Semiconductor devices “from inside”. *SCANNING*, v. 22, n. 4, p. 227–233, 2000.
- 55 LUNA, E. et al. Growth and characterization of modulation-doped double barrier quantum well infrared photodetectors. *J. Vac. Sci. Technol. B*, v. 21, n. 2, p. 883–887, 2003.
- 56 LI, T. L.; KUHN, K. J. Effects of mass discontinuity on the numerical-solutions to quantum-wells using the effective-mass equation. *J. Comput. Phys.*, v. 110, n. 2, p. 292–300, 1994.
- 57 BOUZAIENE, L. et al. Improvement of the electron density in the channel of an AlGaAs/GaAs heterojunction by introducing Si  $\delta$  doping in the quantum well. *J. Appl. Phys.*, v. 85, n. 12, p. 8223–8227, 1999.
- 58 HEDIN, L.; LUNDQVIST, B. I. Explicit local exchange-correlation potentials. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, v. 4, n. 14, p. 2064–8, 1971.
- 59 RUDEN, P.; DOHLER, G. H. Electronic-structure of semiconductors with doping super-lattices. *Phys. Rev. B*, v. 27, n. 6, p. 3538–3546, 1983.
- 60 KRANTZ, R. J.; BLOSS, W. L. The role of unintentional acceptor concentration on the threshold voltage of modulation-doped field-effect transistors. *IEEE Trans. Electron Devices*, v. 36, n. 2, p. 451–453, 1989.

- 61 KRANTZ, R. J.; BLOSS, W. L. Subthreshold-I-V characteristics of AlGaAs GaAs MODFETs — the role of unintentional acceptors. *IEEE Trans. Electron Devices*, v. 36, n. 11, p. 2593–2595, 1989.
- 62 WANG, H.; FARIAS, G. A.; FREIRE, V. N. Doping profile effects on modulation-doped single nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells. *Superlattices Microstruct.*, v. 25, n. 1–2, p. 307–311, 1999.
- 63 FANYAO, Q.; FONSECA, A. L. A.; NUNES, O. A. C. Stokes shift in one-side modulation-n-doped-strained Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As/InP asymmetric quantum well. *Superlattices Microstruct.*, v. 26, n. 6, p. 377–394, 1999.
- 64 TAN, I. H. et al. A self-consistent solution of Schrodinger-Poisson equations using a nonuniform mesh. *J. Appl. Phys.*, v. 68, n. 8, p. 4071–4076, 1990.
- 65 PRESS, W. H. et al. *Numerical recipes in FORTRAN: the art of scientific computing*. 2. ed. Cambridge England ; New York, NY: Cambridge University Press, 1992. 963 p.
- 66 FERREIRA, E. C. et al. Interface-related effects on confined excitons in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As single quantum wells. *Appl. Surf. Sci.*, v. 190, n. 1–4, p. 191–194, 2002.
- 67 DRUMMOND, T. J. et al. Influence of substrate-temperature on electron-mobility in normal and inverted single period modulation doped Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs heterojunctions. *J. Vac. Sci. Technol.*, v. 21, n. 2, p. 684–688, 1982.
- 68 PANKOVE, J. I.; MILLER, E. A.; BERKEYHEISER, J. E. GaN electroluminescent diodes. *RCA Review*, v. 32, n. 3, p. 383–&, 1971.
- 69 AMANO, H. et al. Metalorganic vapor-phase epitaxial-growth of a high-quality GaN film using an AlN buffer layer. *Appl. Phys. Lett.*, v. 48, n. 5, p. 353–355, 1986.
- 70 NAKAMURA, S. et al. High-brightness InGaN blue, green and yellow light-emitting-diodes with quantum-well structures. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2*, v. 34, n. 7A, p. L797–L799, 1995.
- 71 NAKAMURA, S. et al. Superbright green InGaN single-quantum-well-structure light-emitting-diodes. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2*, v. 34, n. 10B, p. L1332–L1335, 1995.
- 72 NAKAMURA, S. et al. High-power InGaN single-quantum-well-structure blue and violet light-emitting-diodes. *Appl. Phys. Lett.*, v. 67, n. 13, p. 1868–1870, 1995.
- 73 NAKAMURA, S. et al. InGaN-based multi-quantum-well-structure laser diodes. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2*, v. 35, n. 1B, p. L74–L76, 1996.
- 74 NYE, J. F. *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices*. Oxford Oxfordshire: Clarendon Press, 1985. 329 p.
- 75 RESTA, R. Macroscopic polarization in crystalline dielectrics — the geometric phase approach. *Rev. Mod. Phys.*, v. 66, n. 3, p. 899–915, 1994.
- 76 BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V. Electronic dielectric constants of insulators calculated by the polarization method. *Phys. Rev. B*, v. 58, n. 23, p. 15292–15295, 1998.

- 77 YANG, H. et al. Cubic-phase GaN light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.*, v. 74, n. 17, p. 2498–2500, 1999.
- 78 OKUMURA, H. et al. Growth of cubic III-nitrides by gas source MBE using atomic nitrogen plasma: GaN, AlGa<sub>x</sub>N and AlN. *J. Cryst. Growth*, v. 190, p. 390–394, 1998.
- 79 BRANDT, O. et al. Surface reconstructions of zinc-blende GaN/GaAs(001) in plasma-assisted molecular-beam epitaxy. *Phys. Rev. B*, v. 52, n. 4, p. R2253, 1995.
- 80 STAMPFL, C.; WALLE, C. G. Van de. Density-functional calculations for III-V nitrides using the local-density approximation and the generalized gradient approximation. *Phys. Rev. B*, v. 59, n. 8, p. 5521, 1999.
- 81 ZORODDU, A. et al. First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory. *Phys. Rev. B*, v. 64, n. 4, p. 045208, 2001.
- 82 GÖÖRGENS, L. et al. Characterization of InGa<sub>x</sub>N thin films using high-resolution x-ray diffraction. *Appl. Phys. Lett.*, v. 76, n. 5, p. 577–579, 2000.
- 83 ANGERER, H. et al. Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N films. *Appl. Phys. Lett.*, v. 71, n. 11, p. 1504–1506, 1997.
- 84 PENG, T. et al. Band gap bowing and refractive index spectra of polycrystalline Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N films deposited by sputtering. *Appl. Phys. Lett.*, v. 71, n. 17, p. 2439–2441, 1997.
- 85 BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V. Macroscopic polarization and band offsets at nitride heterojunctions. *Phys. Rev. B*, v. 57, n. 16, p. R9427–R9430, 1998.
- 86 SALA, F. D. et al. Free-carrier screening of polarization fields in wurtzite GaN/InGa<sub>x</sub>N laser structures. *Appl. Phys. Lett.*, v. 74, n. 14, p. 2002–2004, 1999.
- 87 CARLO, A. D. et al. Doping screening of polarization fields in nitride heterostructures. *Appl. Phys. Lett.*, v. 76, n. 26, p. 3950–3952, 2000.
- 88 BERNARDINI, F.; FIORENTINI, V. Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys. *Phys. Rev. B*, v. 64, n. 8, p. 085207, 2001.
- 89 AMBACHER, O. et al. Pyroelectric properties of Al(In)Ga<sub>x</sub>N/GaN hetero- and quantum well structures. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 14, n. 13, p. 3399–3434, 2002.
- 90 SMITH, D. L.; MAILHIOT, C. Piezoelectric effects in strained-layer superlattices. *J. Appl. Phys.*, v. 63, n. 8, p. 2717–2719, 1988.
- 91 MAILHIOT, C.; SMITH, D. L. Effects of external stress on the electronic-structure and optical-properties of [001]-growth-axis and [111]-growth-axis semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B*, v. 38, n. 8, p. 5520–5529, 1988.
- 92 CARIDI, E. A. et al. Direct demonstration of a misfit strain-generated electric-field in a [111] growth axis zincblende heterostructure. *Appl. Phys. Lett.*, v. 56, n. 7, p. 659–661, 1990.

- 93 HALSALL, M. P. et al. CdS/CdSe intrinsic stark superlattices. *J. Appl. Phys.*, v. 71, n. 2, p. 907–915, 1992.
- 94 TOBER, R. L.; BAHDER, T. B. Determining the electric-field in [111] strained-layer quantum-wells. *Appl. Phys. Lett.*, v. 63, n. 17, p. 2369–2371, 1993.
- 95 ANDRÉ, R. et al. Optical studies of the piezoelectric effect in (111)-oriented CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te strained quantum-wells. *Phys. Rev. B*, v. 42, n. 17, p. 11392–11395, 1990.
- 96 CIBERT, J. et al. Piezoelectric fields in cdte-based heterostructures. *J. Cryst. Growth*, v. 117, n. 1-4, p. 424–431, 1992.
- 97 ROTTER, M. et al. Nonlinear acoustoelectric interactions in GaAs/LiNbO<sub>3</sub> structures. *Appl. Phys. Lett.*, v. 75, n. 7, p. 965–967, 1999.
- 98 SHIMADA, K. et al. First-principles study on piezoelectric constants in strained BN, AlN, and GaN. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2*, v. 37, n. 12A, p. L1421–L1423, 1998.
- 99 BYKHOVSKI, A. et al. Current-voltage characteristics of strained piezoelectric structures. *J. Appl. Phys.*, v. 77, n. 4, p. 1616–1620, 1995.
- 100 TAKEUCHI, T. et al. Quantum-confined stark effect due to piezoelectric fields in GaInN strained quantum wells. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2*, v. 36, n. 4A, p. L382–L385, 1997.
- 101 LANGER, R. et al. Giant electric fields in unstrained GaN single quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, v. 74, n. 25, p. 3827–3829, 1999.
- 102 WETZEL, C.; AMANO, H.; AKASAKI, I. Piezoelectric polarization in GaInN/GaN heterostructures and some consequences for device design. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, v. 39, n. 4B, p. 2425–2427, 2000.
- 103 WETZEL, C. et al. Piezoelectric Franz-Keldysh effect in strained GaInN/GaN heterostructures. *J. Appl. Phys.*, v. 85, n. 7, p. 3786–3791, 1999.
- 104 CHERNS, D.; BARNARD, J.; PONCE, F. A. Measurement of the piezoelectric field across strained InGaN GaN layers by electron holography. *Solid State Commun.*, v. 111, n. 5, p. 281–285, 1999.
- 105 IM, J. S. et al. Reduction of oscillator strength due to piezoelectric fields in GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N quantum wells. *Phys. Rev. B*, v. 57, n. 16, p. R9435–R9438, 1998.
- 106 GMACHL, C.; NG, H. M.; CHO, A. Y. Intersubband absorption in GaN/AlGaN multiple quantum wells in the wavelength range of  $\lambda \sim 1.75 - 4.2 \mu\text{m}$ . *Appl. Phys. Lett.*, v. 77, n. 3, p. 334–336, 2000.
- 107 KISIELOWSKI, C.; LILIENTAL-WEBER, Z.; NAKAMURA, S. Atomic scale indium distribution in a GaN/In<sub>0.43</sub>Ga<sub>0.57</sub>N/Al<sub>0.1</sub>Ga<sub>0.9</sub>N quantum well structure. *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, v. 36, n. 11, p. 6932–6936, 1997.
- 108 SHIRASAWA, T. et al. Interface control of GaN/AlGaN quantum well structures in MOVPE growth. *J. Cryst. Growth*, v. 190, p. 124–127, 1998.

- 109 ENDERS, B. G. et al. Electronic properties of a quasi-two-dimensional electron gas in semiconductor quantum wells under intense laser fields. *Phys. Rev. B*, v. 70, n. 3, p. 035307, 2004.
- 110 LIMA F. M. S.; ENDERS, B. G. Effect of non-abrupt doping profiles on the carrier sheet density in one-side modulation-doped GaAs/AlGaAs quantum wells. *Phys. Status Solidi C*, v. 1, n. S2, p. S215–S218, 2004.
- 111 ENDERS, B. G. et al. Effect of non-abrupt heterointerfaces and doping profiles on the electronic subband structure of modulation-doped GaAs/AlGaAs quantum wells. In: THE INTERNATIONAL CONFERENCE ON SUPERLATTICES, NANO-STRUCTURES AND NANO-DEVICES, 2004, Cancún, México. *Proceedings...* Cancún: ICSNN, 2004. p. 76.
- 112 ENDERS, B. G. et al. Effect of non-abrupt interfaces on the low-temperature mobility in modulation-doped GaAs/AlGaAs single quantum wells. In: FIRST INTERNATIONAL MEETING ON APPLIED PHYSICS, 1., 2003, Badajoz, Spain. *Proceedings...* Badajoz: APHYS, 2003. p. 631.
- 113 ENDERS, B. G. et al. Effect of non-abrupt doping and interfacial profiles on the carrier sheet density in one-side modulation-doped GaN/AlGaN quantum wells. *Braz. J. Phys.*, 2007. *submetido*.
- 114 LIMA, F. M. S. et al. Limitation of electron mobility in modulation-doped  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$  quantum wells at low temperatures. *Braz. J. Phys.*, v. 36, n. 2A, p. 365–368, 2006.
- 115 LIMA, F. M. S. et al. Variational results for electron mobility in modulation-doped  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$  single symmetric quantum wells. *Microelectron. J.*, v. 36, n. 11, p. 1016–1019, 2005.
- 116 LIMA, F. M. S. et al. Effect of residual acceptors on electron mobility in single asymmetric quantum wells. *Physica E*, v. 17, n. 1-4, p. 322–323, 2003.
- 117 MOHR, P. J.; TAYLOR, B. N. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2002. *Rev. Mod. Phys.*, v. 77, n. 1, p. 1–107, 2005.
- 118 LI, H. E. Material parameters of InGaAsP and InAlGaAs systems for use in quantum well structures at low and room temperatures. *Physica E*, v. 5, n. 4, p. 215–273, 2000.
- 119 MADELUNG, O. *Semiconductors: data handbook*. 3. ed. New York: Springer, 2004. 691 p.
- 120 JAIN, S. C. et al. III-nitrides: Growth, characterization, and properties. *J. Appl. Phys.*, v. 87, n. 3, p. 965–1006, 2000.
- 121 PANKOVE, J. I.; MOUSTAKAS, T. D. (Ed.). *Gallium nitride (GaN) II*. San Diego: Academic Press, 1999. 489 p. (Semiconductors and Semimetals, v. 57).
- 122 GIL, B. (Ed.). *Group III nitride semiconductor compounds: physics and applications*. New York: Clarendon Press, 1998. 470 p. (Semiconductor Science and Technology, v. 6).

- 123 EDGAR, J. H. (Ed.). *Properties of group-III nitrides*. London: IEE, INSPEC, 1994. 302 p. (EMIS datareviews series; no. 11).
- 124 WRIGHT, A. F. Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN. *J. Appl. Phys.*, v. 82, n. 6, p. 2833–2839, 1997.
- 125 O’CLOCK, G. D.; DUFFY, M. T. Acoustic surface-wave properties of epitaxially grown aluminum nitride and gallium nitride on sapphire. *Appl. Phys. Lett.*, v. 23, n. 2, p. 55–56, 1973.
- 126 RIVAS, E. K. d. On the use of nonuniform grids in finite-difference equations. *J. Comput. Phys.*, v. 10, n. 2, p. 202–210, 1972.
- 127 LAUX, S. E.; STERN, F. Electron-states in narrow gate-induced channels in Si. *Appl. Phys. Lett.*, v. 49, n. 2, p. 91–93, 1986.
- 128 LAUX, S. E.; FRANK, D. J.; STERN, F. Quasi-one-dimensional electron-states in a split-gate GaAs/AlGaAs heterostructure. *Surf. Sci.*, v. 196, n. 1-3, p. 101–106, 1988.
- 129 SNIDER, G. L.; TAN, I. H.; HU, E. L. Electron-states in mesa-etched one-dimensional quantum-well wires. *J. Appl. Phys.*, v. 68, n. 6, p. 2849–2853, 1990.
- 130 BROWN, H. K.; WHITTAKER, A. G.; ROLLINS, N. T. A numerical-analysis of the resonant states of quantum-well and superlattice devices. *Solid-State Electron.*, v. 33, n. 3, p. 333–337, 1990.
- 131 SERRA, A. M. C.; SANTOS, H. A. A one-dimensional, self-consistent numerical-solution of Schrodinger and Poisson equations. *J. Appl. Phys.*, v. 70, n. 5, p. 2734–2738, 1991.
- 132 ABOU-ELNOUR, A.; SCHUENEMANN, K. A comparison between different numerical-methods used to solve Poisson’s and Schroedinger’s equations in semiconductor heterostructures. *J. Appl. Phys.*, v. 74, n. 5, p. 3273–3276, 1993.
- 133 KILLINGBECK, J. P.; JOLICARD, G. Two simple eigenvalue shooting algorithms. *Phys. Lett. A*, v. 172, n. 5, p. 313–315, 1993.
- 134 WEINERT, C. M.; AGRAWAL, N. Self-consistent finite-difference method for simulation and optimization of quantum-well electron-transfer structures. *J. Appl. Phys.*, v. 76, n. 12, p. 7947–7956, 1994.
- 135 BENHAM, S. P.; THIJSSSEN, J. M.; INGLESFIELD, J. E. Self-consistent finite-difference electronic structure calculations for large systems. *Computational Materials Science*, v. 17, n. 2-4, p. 160–163, 2000.
- 136 BENHAM, S. P.; THIJSSSEN, J. M.; INGLESFIELD, J. E. Self-consistent finite-difference electronic structure calculations. *Comput. Phys. Commun.*, v. 136, n. 1-2, p. 64–76, 2001.
- 137 WANG, Y. et al. Optimization of two-dimensional electron gases and I-V characteristics for AlGaIn/GaN HEMT devices. *Superlattices Microstruct.*, v. 36, n. 4-6, p. 869–875, 2004.

- 138 LI, J. M. et al. Theoretical investigation of intersubband transition in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$  step quantum well. *Physica E*, v. 28, n. 4, p. 453–461, 2005.
- 139 BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Análise Numérica*. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003. 736 p.
- 140 ANDERSON, E. et al. *LAPACK users' guide*. 3. ed. Philadelphia: SIAM, 1999. 407 p.
- 141 QUINTANA-ORTÍ, G.; GEIJN, R. V. D. Improving the performance of reduction to hessenberg form. *ACM Trans. Math. Softw.*, v. 32, n. 2, p. 180–194, 2006.
- 142 KAUFMAN, L. An observation on bisection software for the symmetric tridiagonal eigenvalue problem. *ACM Trans. Math. Softw.*, v. 26, n. 4, p. 520–526, 2000.
- 143 MATSEKH, A. M. The Godunov-inverse iteration: A fast and accurate solution to the symmetric tridiagonal eigenvalue problem. *Appl. Numer. Math.*, v. 54, n. 2, p. 208–221, 2005.
- 144 ZHU, Q. G.; KROEMER, H. Interface connection rules for effective-mass wave-functions at an abrupt heterojunction between 2 different semiconductors. *Phys. Rev. B*, v. 27, n. 6, p. 3519–3527, 1983.
- 145 BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. Space-charge effects on electron tunneling. *Physical Review*, v. 152, n. 2, p. 683–&, 1966.
- 146 GORA, T.; WILLIAMS, F. Theory of electronic states and transport in graded mixed semiconductors. *Physical Review*, v. 177, n. 3, p. 1179–&, 1969.
- 147 BASTARD, G.; FURDYNA, J. K.; MYCIELSKI, J. Landau-levels and cyclotron-resonance in graded mixed semiconductors. *Phys. Rev. B*, v. 12, n. 10, p. 4356–4359, 1975.
- 148 SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics*. 1. ed. revisited. Reading, Mass.: Addison-Wesley Pub. Co., 1994. 500 p.
- 149 BASTARD, G. Super-lattice band-structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, v. 24, n. 10, p. 5693–5697, 1981.
- 150 JUANG, C.; KUHN, K. J.; DARLING, R. B. Stark shift and field-induced tunneling in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, v. 41, n. 17, p. 12047–12053, 1990.
- 151 IKONIC, Z.; MILANOVIC, V.; TJAPKIN, D. Quantum-well electroabsorption in a strong electric-field—a continuum spectrum approach. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, v. 20, n. 8, p. 1147–1160, 1987.

# APÊNDICE A – PROPRIEDADES FUNDAMENTAIS DOS MATERIAIS INVESTIGADOS

---

ESTE APÊNDICE traz os valores atualmente recomendados para alguns parâmetros físicos fundamentais utilizados em nossa modelagem de nanoestruturas semicondutoras baseadas nos compostos binários GaAs e GaN e em suas ligas. Tomamos o cuidado de compilar os valores mais atuais e, possivelmente, os mais precisos disponíveis na literatura especializada. Incluímos também os valores das constantes físicas fundamentais, conforme a última revisão do *committee on data for science and technology* (CODATA), necessárias ao cálculo da estrutura eletrônica de sistemas semicondutores.

## A.1 CONSTANTES FÍSICAS FUNDAMENTAIS

Os valores mais atuais das constantes físicas fundamentais, recomendados e publicados [117] pelo CODATA, foram utilizados em todos os nossos cálculos autoconsistentes e são apresentados na Tabela 3 abaixo.

TABELA 3 – Valores recomendados pelo CODATA para algumas constantes físicas fundamentais utilizadas neste trabalho.

| SÍMBOLO      | VALOR                        | UNIDADE          | DESCRIÇÃO                   |
|--------------|------------------------------|------------------|-----------------------------|
| $c$          | $2,99792458 \times 10^8$     | m/s              | velocidade da luz no vácuo  |
| $e$          | $1,60217653 \times 10^{-19}$ | C                | carga elementar             |
| $\epsilon_0$ | $1/(\mu_0 c^2)$              | F/m              | constante dielétrica        |
| $h$          | $6,6260693 \times 10^{-34}$  | J s              | constante de Plank          |
| $\hbar$      | $1,05457168 \times 10^{-34}$ | J s              | constante reduzida de Plank |
| $k_B$        | $1,3806505 \times 10^{-23}$  | J/K              | constante de Boltzmann      |
| $m_0$        | $9,1093826 \times 10^{-31}$  | kg               | massa de repouso do elétron |
| $\mu_0$      | $4\pi \times 10^{-7}$        | N/A <sup>2</sup> | permeabilidade do vácuo     |

Fonte: [Mohr e Taylor \[117\]](#)

Disponível em: <http://www.physics.nist.gov/cuu/Constants/>



## A.2 PARÂMETROS DO GaAs E DE SUAS LIGAS

Os valores dos parâmetros físicos para os compostos binários GaAs, AlAs e InAs apresentados na Tabela 4 foram utilizados em nossos cálculos autoconsistentes e correspondem aos valores, a baixas temperaturas, recomendados por Li [118].

TABELA 4 – Valores dos parâmetros básicos utilizados neste trabalho para os compostos binários GaAs, AlAs e InAs a baixas temperaturas.

| SÍMBOLO    | GaAs   | AlAs   | InAs   | UNID.        | DESCRIÇÃO                       |
|------------|--------|--------|--------|--------------|---------------------------------|
| $a$        | 5,6525 | 5,645  | 6,0583 | Å            | parâmetro de rede               |
| $E_g$      | 1,5194 | 3,0994 | 0,417  | eV           | largura da banda proibida       |
| $m^*$      | 0,0665 | 0,1808 | 0,026  | $m_0$        | massa efetiva do elétron        |
| $\epsilon$ | 12,4   | 10,6   | 15,15  | $\epsilon_0$ | constante dielétrica (estática) |

Fonte: Li [118]

Em geral os parâmetros das ligas ternárias de semicondutores III–V podem ser determinados a partir da interpolação linear dos valores dos parâmetros dos compostos binários relevantes, tal procedimento é conhecido como lei de Vegard. Contudo, aproximações de ordem quadrática, ou mesmo cúbica, podem também ser utilizadas a fim de obter uma concordância maior com experimentos mais recentes. Para a liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  procuramos utilizar os dados mais precisos e atuais disponíveis na literatura e optamos por adotar também — de modo a manter a consistência entre os parâmetros dos compostos binários e das ligas ternárias — aqueles propostos por Li [118], visto ainda que foram determinados especificamente no contexto de heteroestruturas do tipo poço quântico, a mesma que utilizamos ao longo deste trabalho. Tais parâmetros são sumariados na Tabela 5.

TABELA 5 – Valores dos parâmetros básicos utilizados neste trabalho para a liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  a baixas temperaturas.

| SÍMB.      | $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ | UNID.        | DESCRIÇÃO                       |
|------------|---------------------------------------|--------------|---------------------------------|
| $a$        | $5,6525 + 0,0075x$                    | Å            | parâmetro de rede               |
| $E_g$      | $1,5194 + 1,36x + 0,22x^2$            | eV           | largura da banda proibida       |
| $m^*$      | $0,0665 + 0,1006x + 0,0137x^2$        | $m_0$        | massa efetiva do elétron        |
| $\epsilon$ | $12,40 - 1,8x$                        | $\epsilon_0$ | constante dielétrica (estática) |

Fonte: Li [118]

TABELA 6 – Valores recomendados para alguns parâmetros básicos dos compostos binários de nitreto com estrutura wurtzita.

| SÍMB.      | GaN                | AlN                | InN                | UNID.        | DESCRIÇÃO                       |
|------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------|---------------------------------|
| $a$        | 3,189              | 3,112              | 3,545              | Å            | parâmetro de rede basal         |
| $c$        | 5,185              | 4,982              | 5,703              | Å            | parâmetro de rede axial         |
| $E_g$      | 3,510              | 6,25               | 0,78               | eV           | largura da banda proibida       |
| $m^*$      | 0,20               | 0,32               | 0,07               | $m_0$        | massa efetiva do elétron        |
| $\epsilon$ | 10,28 <sup>a</sup> | 10,31 <sup>a</sup> | 14,61 <sup>a</sup> | $\epsilon_0$ | constante dielétrica (estática) |

Fonte: [Vurgaftman e Meyer \[6\]](#) e <sup>a</sup>[Bernardini, Fiorentini e Vanderbilt \[12\]](#)

### A.3 PARÂMETROS DO GaN E DE SUAS LIGAS

Devido ao grande interesse comercial e científico em semicondutores III–V contendo nitrogênio, diversos trabalhos foram publicados recentemente revisando as propriedades físicas de tais materiais [119, 120, 121, 122, 123]. Na utilização dos valores recomendados para os parâmetros dos nitretos do grupo III deve-se levar em consideração que ainda há certa discordância entre os dados reportados por diferentes pesquisadores para determinadas propriedades, não sendo possível, ainda, saber qual dado é mais preciso. A Tabela 6 lista alguns parâmetros básicos dos compostos binários de nitreto de acordo com as recomendações de [Vurgaftman e Meyer \[6\]](#) e [Bernardini, Fiorentini e Vanderbilt \[12\]](#).

A fim de obter as constantes de rede, a massa efetiva e a constante dielétrica da liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , utilizamos uma interpolação linear (lei de Vegard) dada por:

$$Y_{\text{ABN}}(x) = xY_{\text{AN}} + (1 - x)Y_{\text{BN}}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $Y$  representa o parâmetro (grandeza física) de interesse.

Já para a dependência da largura da banda proibida com a composição  $x$ , assumimos

TABELA 7 – Valores recomendados para alguns parâmetros básicos da liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  com estrutura wurtzita.

| SÍMBOLO    | $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ | UNID.        | DESCRIÇÃO                       |
|------------|--------------------------------------|--------------|---------------------------------|
| $a$        | $3,189 - 0,077x$                     | Å            | parâmetro de rede basal         |
| $c$        | $5,185 - 0,203x$                     | Å            | parâmetro de rede axial         |
| $E_g$      | $3,510 + 2,04x + 0,7x^2$             | eV           | largura da banda proibida       |
| $m^*$      | $0,20 + 0,12x$                       | $m_0$        | massa efetiva do elétron        |
| $\epsilon$ | $10,28 + 0,03x$                      | $\epsilon_0$ | constante dielétrica (estática) |

TABELA 8 – Valores recomendados para a polarização espontânea e para algumas propriedades elásticas dos compostos binários de nitreto com estrutura wurtzita.

| PARÂMETRO | GaN                 | AlN                 | InN                 | UNIDADE                               |
|-----------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------------------------|
| $P^{sp}$  | -0,034              | -0,090              | -0,042              | C/m <sup>2</sup>                      |
| $C_{11}$  | 367                 | 396                 | 223                 | GPa                                   |
| $C_{12}$  | 135                 | 137                 | 115                 | GPa                                   |
| $C_{13}$  | 103                 | 108                 | 92                  | GPa                                   |
| $C_{33}$  | 405                 | 373                 | 224                 | GPa                                   |
| $C_{44}$  | 95                  | 116                 | 48                  | GPa                                   |
| $S_{11}$  | 3,267               | 2,993               | 6,535               | 10 <sup>-12</sup> N/m <sup>2</sup>    |
| $S_{12}$  | -1,043              | -0,868              | -2,724              | 10 <sup>-12</sup> N/m <sup>2</sup>    |
| $S_{13}$  | -0,566              | -0,615              | -1,565              | 10 <sup>-12</sup> N/m <sup>2</sup>    |
| $S_{33}$  | 2,757               | 3,037               | 5,750               | 10 <sup>-12</sup> N/m <sup>2</sup>    |
| $S_{44}$  | 10,53               | 8,621               | 20,83               | 10 <sup>-12</sup> N/m <sup>2</sup>    |
| $e_{31}$  | -0,34 <sup>a</sup>  | -0,53 <sup>a</sup>  | -0,41 <sup>a</sup>  | C/m <sup>2</sup>                      |
| $e_{33}$  | 0,67 <sup>a</sup>   | 1,50 <sup>a</sup>   | 0,81 <sup>a</sup>   | C/m <sup>2</sup>                      |
| $e_{15}$  | -0,30 <sup>b</sup>  | -0,48               | —                   | C/m <sup>2</sup>                      |
| $d_{31}$  | -1,253 <sup>a</sup> | -2,298 <sup>a</sup> | -3,147 <sup>a</sup> | 10 <sup>-12</sup> Pa C/m <sup>2</sup> |
| $d_{33}$  | 2,291 <sup>a</sup>  | 5,352 <sup>a</sup>  | 6,201 <sup>a</sup>  | 10 <sup>-12</sup> Pa C/m <sup>2</sup> |
| $d_{15}$  | -1,579 <sup>a</sup> | -2,069 <sup>a</sup> | -2,292 <sup>a</sup> | 10 <sup>-12</sup> Pa C/m <sup>2</sup> |

Fonte: Wright [124], <sup>a</sup>Zoroddu et al. [81] e Bernardini, Fiorentini e Vanderbilt [7], <sup>b</sup>O'clock e Duffy [125]

uma aproximação quadrática simples da seguinte forma

$$E_{ABN}^g(x) = xE_{AN}^g + (1-x)E_{BN}^g - bx(1-x), \quad (\text{A.2})$$

na qual o parâmetro  $b$ , conhecido como parâmetro de encurvamento (*bowing parameter*), é o responsável pelo distanciamento da aproximação linear. Tomando o valor de  $b = 0,7$  eV, recomendado por Vurgaftman e Meyer [6], e levando-se em consideração as Eqs. (A.1) e (A.2) e também os valores exibidos na Tabela 6, obtemos os parâmetros do AlGaIn exibidos na Tabela 7.

A Tabela 8 apresenta os valores atualmente mais utilizados da: (i) polarização espontânea, (ii) constantes elásticas, (iii) constantes de deformação, (iv) constantes piezoelétricas e (v) módulos piezoelétricos dos compostos binários GaN, AlN e InN.

As interpolações lineares entre as propriedades elásticas dos compostos binários GaN e

TABELA 9 – Valores das constantes elásticas e constantes piezoelétricas para a liga ternária  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  com estrutura wurtzita.

| PARÂMETRO | $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ | UNIDADE          |
|-----------|--------------------------------------|------------------|
| $C_{13}$  | $103 + 5x$                           | GPa              |
| $C_{33}$  | $405 - 32x$                          | GPa              |
| $e_{31}$  | $-0,34 - 0,19x$                      | C/m <sup>2</sup> |
| $e_{33}$  | $0,67 + 0,83x$                       | C/m <sup>2</sup> |

AlN utilizadas a fim de obter as constantes piezoelétricas e elásticas da liga ternária AlGaIn são mostradas na Tabela 9.

## APÊNDICE B – MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

---

O MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS (MDF) tem sido bastante utilizado na resolução autoconsistente das equações acopladas de Schrödinger e Poisson em heteroestruturas semicondutoras [63, 126, 127, 128, 129, 64, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 110, 137, 138] devido, principalmente, à sua simplicidade e excelente estabilidade. No MDF, as derivadas da equação diferencial original são substituídas por equações de diferenças adequadas. Tais equações de diferenças são escolhidas de acordo com a precisão desejada ou requerida. Neste apêndice apresentamos os principais conceitos relativos à discretização de equações diferenciais por diferenças finitas e obtemos equações de diferenças discretas, de primeira e segunda ordem, como aproximações dos operadores diferenciais contínuos presentes nas equações diferenciais originais. Uma breve discussão a respeito da predominância circunstancial dos erros de arredondamento sobre os erros de truncamento é apresentada. Finalmente, mostramos a importância de uma discretização própria ao lidar com heteroestruturas nas quais ocorre mudança abrupta da massa efetiva.

### B.1 APROXIMAÇÕES POR DIFERENÇAS FINITAS

A solução de uma equação diferencial (ED) implica na determinação dos valores da variável dependente em cada ponto do intervalo de interesse. Computacionalmente, podemos lidar apenas com uma região contínua se for possível determinar uma expressão analítica para a solução da equação diferencial. Nesse caso, o computador pode ser utilizado para calcular a solução em qualquer ponto desejado da região, com o uso da solução analítica. Contudo, no caso de técnicas numéricas de solução, não é possível tratar a região de interesse como contínua, já que, em geral, os métodos numéricos obtêm a solução do problema em pontos preestabelecidos. O processo de transformação do domínio contínuo em domínio discreto é chamado de *discretização*, onde o conjunto de pontos discretos escolhidos para

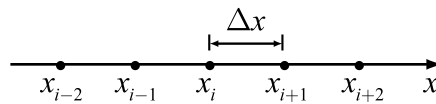


FIGURA 20 – Malha de pontos uniformemente espaçados.

representar o domínio de interesse é chamado de *malha*. A Figura 20 mostra uma malha de pontos uniformemente espaçados, o passo da malha é definido como sendo a distância entre dois pontos adjacentes e é dado por  $\Delta x = x_i - x_{i-1}$ .

Para que seja possível tratar numericamente as equações diferenciais, elas devem ser expressas sob a forma de operações aritméticas que o computador possa executar. Essencialmente, devemos representar os operadores diferenciais (contínuos) presentes na ED por expressões algébricas (discretas), ou seja, devemos discretizar a ED. Portanto, antes de resolver a ED numericamente é preciso encontrar, para os termos que nela aparecem, as respectivas expressões escritas em função dos pontos (finitos) da malha. Essas expressões são denominadas *aproximações por diferenças finitas*. O resultado final desse processo é uma equação algébrica denominada equação de diferenças finitas (EDF). A EDF é escrita para cada ponto da região discretizada em que se deseja calcular a solução do problema. Resolvendo-se as EDFs, encontra-se a solução aproximada do problema. Tal solução não é exata devido a (i) erros inerentes ao processo de discretização das equação, (ii) erros de arredondamento nos cálculos feitos pelo computador e (iii) erros na aproximação numérica das condições auxiliares.

Pode-se obter uma aproximação de diferenças finitas diretamente da definição de derivada de uma função  $f$  contínua,

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \quad (\text{B.1})$$

Para tanto, basta que  $\Delta x$  assuma um valor fixo (não-nulo), ao invés de tender a zero, para que o lado direito da Eq. (B.1) represente uma aproximação (avançada) de diferenças finitas:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \quad (\text{B.2})$$

Desse modo, utilizando-se dois valores de  $f$  separados por uma distância (finita)  $\Delta x$ , a expressão (B.2) representa uma aproximação algébrica para a primeira derivada de  $f$ . Essa

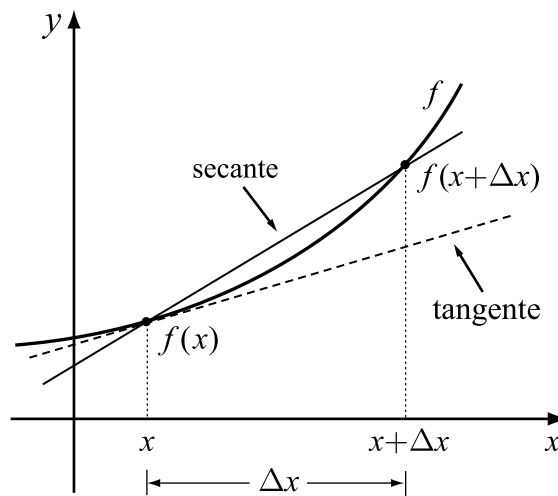


FIGURA 21 – Aproximação da derivada primeira da função genérica  $f$  no ponto  $x$  por uma reta secante.

situação está ilustrada na Figura 21, onde os dois pontos,  $x$  e  $x + \Delta x$ , afastados entre si por uma distância  $\Delta x$ , formam a reta secante cuja declividade serve de aproximação para a derivada da função  $f$  no ponto  $x$ . Quando a separação  $\Delta x$  diminui, a reta secante se aproxima da reta tangente (derivada real), melhorando assim o valor estimado para a derivada.

Aproximações de diferenças finitas, como a mostrada anteriormente, podem ser obtidas de várias formas. As técnicas mais comuns são a expansão em série de Taylor e a interpolação polinomial. O método da expansão em série de Taylor será utilizado na obtenção de aproximações de diferenças finitas de primeira e segunda ordem para as derivadas primeira, segunda e mista de uma função  $f$ . A técnica de interpolação é geralmente utilizada no contexto em que se faz necessário o uso de malhas cujo espaçamento não é uniforme.

### B.1.1 Aproximações para a Derivada Primeira

As aproximações de diferenças finitas têm como base a expansão em série de Taylor de uma função  $f$ . Supondo que  $f$  seja contínua no intervalo  $[a, b]$  de interesse e que possua derivadas até ordem  $N$  contínuas nesse intervalo, o teorema de Taylor nos permite escrever, para todo ponto  $x \in [a, b]$ ,

$$f(x) = f(x_0) + (\Delta x) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{d^3f}{dx^3} \right|_{x_0} + \dots + R_N, \quad (\text{B.3})$$

em que  $\Delta x = x - x_0$  e  $R_N$  é o resto (de Lagrange), definido como

$$R_N = \frac{(\Delta x)^N}{N!} \left. \frac{d^N f}{dx^N} \right|_{\xi}, \quad \xi \in [a, b]. \quad (\text{B.4})$$

Para aproximar a derivada primeira de uma função  $f$  no ponto  $x_i$  vamos expandir  $f(x_i + \Delta x)$  em série de Taylor em torno do ponto  $x_i$ ,

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + (\Delta x) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_i} + \dots, \quad (\text{B.5})$$

onde as reticências indicam os termos restantes da série de Taylor até o resto  $R_N$ . Após isolar a primeira derivada, podemos escrever

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} + \left[ -\frac{(\Delta x)}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_i} - \dots \right]. \quad (\text{B.6})$$

Note que, para isolar a primeira derivada, todos os termos da série de Taylor foram divididos pelo espaçamento  $\Delta x$ . Podemos então dizer que a primeira derivada é igual ao quociente

$$\frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x}, \quad (\text{B.7})$$

mais o erro local de truncamento (ELT), dado por:

$$\left[ -\frac{(\Delta x)}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_i} - \dots \right]. \quad (\text{B.8})$$

O ELT aparece naturalmente devido à utilização de um número finito de termos na série de Taylor. Como não podemos tratar os infinitos termos dessa série na aproximação numérica para a derivada de  $f$ , a série foi truncada a partir da derivada de segunda ordem inclusive. O ELT fornece uma medida da diferença entre o valor exato da derivada e sua aproximação numérica, indicando também que essa diferença varia linearmente com a redução do espaçamento  $\Delta x$ , isto é, com o refinamento da malha. Assim, para reduzirmos o erro por quatro, por exemplo, devemos utilizar um espaçamento  $1/4$  do original e portanto, quatro vezes mais pontos na malha. Dessa forma, os termos do ELT serão representados por  $O(\Delta x)$ . Deve-se notar que uma expressão do tipo  $O(\Delta x)$  só indica como ELT varia com o refinamento da malha, e não o valor do erro.

Podemos simplificar a notação se escrevendo  $f_i$  para  $f(x_i)$  ou, em geral,  $f_{i \pm k}$  para



$f(x_i \pm k\Delta x)$ . Com isso a Eq. (B.6) se torna

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (\text{B.9})$$

que é uma equação de diferenças finitas que representa uma aproximação de primeira ordem para a primeira derivada de  $f$ , utilizando diferença avançada, visto que no cálculo da derivada no ponto  $x_i$  foi utilizado um ponto adiante de  $x_i$ , no caso,  $x_{i+1}$ . A declividade (primeira derivada) de  $f$  em  $x_i$  é aproximada pela declividade da reta secante formada pelos pontos  $(x_i, f_i)$  e  $(x_{i+1}, f_{i+1})$ , conforme mostra a Figura 22.

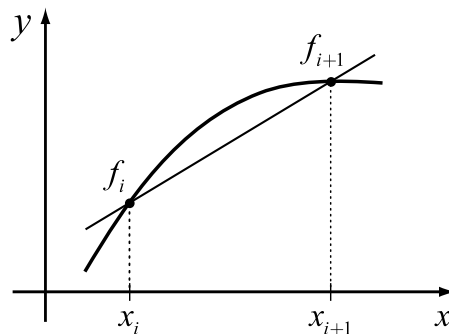


FIGURA 22 – Pontos utilizados na aproximação para a primeira derivada de  $f$  por diferença avançada.

Uma segunda aproximação de diferenças finitas pode ser obtida a partir da expansão de  $f(x_i - \Delta x)$  em série de Taylor em torno do ponto  $x_i$ :

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - (\Delta x) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x_i} + O(\Delta x)^3. \quad (\text{B.10})$$

Isolando a primeira derivada, temos

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (\text{B.11})$$

que é outra aproximação de primeira ordem para a primeira derivada de  $f$ . Diferentemente da Eq. (B.9), na qual utiliza-se um ponto adiante de  $x_i$ , a Eq. (B.11) utiliza o ponto  $x_{i-1}$ , ponto este anterior a  $x_i$ . Por essa razão, essa equação de diferenças é chamada de aproximação por diferenças atrasadas. A Figura 23 na página seguinte mostra os pontos utilizados nessa aproximação. A declividade da função  $f$  no ponto  $x_i$  é aproximada pela declividade da reta secante aos pontos  $(x_{i-1}, f_{i-1})$  e  $(x_i, f_i)$ .

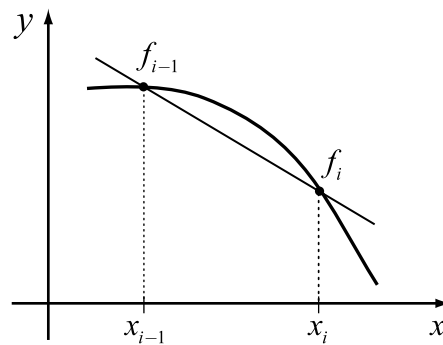


FIGURA 23 – Pontos utilizados na aproximação para a primeira derivada de  $f$  por diferença atrasada.

Até agora obtivemos somente aproximações de primeira ordem para a derivada primeira de  $f$ , uma aproximação de  $O(\Delta x)^2$  ainda para a primeira derivada pode ser obtida ao subtrairmos as expansões em série de Taylor representadas pelas Eqs. (B.5) e (B.10):

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2(\Delta x) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + O(\Delta x)^3, \quad (\text{B.12})$$

ou, isolando a derivada,

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2. \quad (\text{B.13})$$

Note que a aproximação dada pela Eq. (B.13) utiliza os pontos  $x_{i-1}$  e  $x_{i+1}$  para o cálculo da primeira derivada de  $f$  no ponto central  $x_i$ . Por essa razão, ela é denominada aproximação por diferenças centrais. Neste caso, conforme mostra a Figura 24 na próxima página, a derivada de  $f$  em  $x_i$  é aproximada pela declividade da reta secante que passa pelos pontos  $(x_{i-1}, f_{i-1})$  e  $(x_{i+1}, f_{i+1})$ .

No caso de aproximações de segunda ordem, reduções sucessivas no passo  $\Delta x$  da malha provocam uma redução quadrática no erro da aproximação da primeira derivada de  $f$  pela Eq. (B.13). Ao dividirmos o passo por dois, por exemplo, o erro é dividido por quatro, sem precisarmos de quatro vezes mais pontos, como nas expressões de primeira ordem. Isso é uma propriedade extremamente útil, já que, com menor número de pontos e, portanto, menor esforço computacional, podemos conseguir uma aproximação melhor que aquelas fornecidas pelas Eqs. (B.9) e (B.11).

Em resumo, as três fórmulas para a primeira derivada de  $f$  deduzidas anteriormente, a

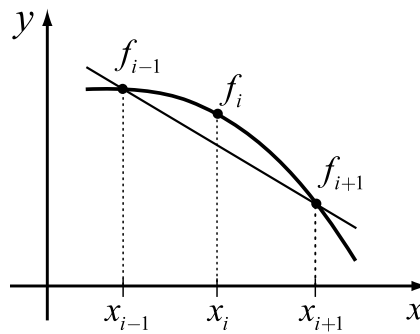


FIGURA 24 – Pontos utilizados na aproximação de segunda ordem para a primeira derivada de  $f$  por diferença central.

partir da expansão em série de Taylor, são:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}, \quad (\text{fórmula avançada})$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} \quad (\text{fórmula atrasada})$$

e

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}. \quad (\text{fórmula central})$$

### B.1.2 Aproximações para a Derivada Segunda

Expressões para derivadas de ordem superior podem ser obtidas com o mesmo procedimento com o qual obtivemos as fórmulas para a derivada primeira, isto é, por meio de manipulações adequadas da série de Taylor. Como exemplo, vamos determinar uma aproximação de diferenças centrais de segunda ordem para a segunda derivada de  $f$ . Para tal vamos utilizar ainda as Eqs. (B.5) e (B.10). Queremos combiná-las para que a primeira derivada de  $f$  seja eliminada, pois estamos interessados na segunda derivada. Por sua vez, as derivadas de ordem superior a dois que permanecerem na expansão farão parte do ELT. Assim,

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2f(x_i) + (\Delta x)^2 \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} + O(\Delta x)^4. \quad (\text{B.14})$$

Rearranjando os termos, obtemos

$$\left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2, \quad (\text{B.15})$$

que é a fórmula de diferenças finitas centrais de segunda ordem para derivadas segundas. A Eq. (B.15) é a aproximação mais comum encontrada na literatura para derivadas de segunda ordem.

Aproximações de diferenças avançadas e atrasadas de  $O(\Delta x)$  para a segunda derivada podem ser obtidas manipulando-se convenientemente as expansões de  $f(x_i \pm \Delta x)$  e  $f(x_i \pm 2\Delta x)$ , nesse caso toma-se os sinais positivos para a aproximação avançada e os negativos para a atrasada. Aproximações avançadas e atrasadas de ordem superior podem também ser obtidas pelas expansões em série de Taylor, simplesmente utilizando mais termos dessa série.

Nos casos em que o problema é dependente do tempo devemos considerar a expansão em série de Taylor de uma função de duas variáveis independentes, supondo que  $f = f(x, t)$ , a expansão em torno do ponto  $x_i$  fornece:

$$f(x_i + \Delta x, t) = f(x_i, t) + (\Delta x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_i} + \dots, \quad (\text{B.16})$$

da mesma forma,

$$f(x_i - \Delta x, t) = f(x_i, t) - (\Delta x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_i} + \dots. \quad (\text{B.17})$$

Assim, podemos gerar aproximações de primeira ou segunda ordem para as derivadas parciais, como por exemplo:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x, t) - f(x_i, t)}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (\text{avançada}) \quad (\text{B.18})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i, t) - f(x_i - \Delta x, t)}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (\text{atrasada}) \quad (\text{B.19})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x, t) - f(x_i - \Delta x, t)}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2 \quad (\text{central}) \quad (\text{B.20})$$

e

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x, t) - 2f(x_i, t) + f(x_i - \Delta x, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x)^2. \quad (\text{central}) \quad (\text{B.21})$$

É fácil mostrar que existem expressões equivalentes para o tempo, ou seja,

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_i} = \frac{f(x, t_i + \Delta t) - f(x, t_i)}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (\text{avançada}) \quad (\text{B.22})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_i} = \frac{f(x, t_i) - f(x, t_i - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (\text{atrasada}) \quad (\text{B.23})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_i} = \frac{f(x, t_i + \Delta t) - f(x, t_i - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t)^2 \quad (\text{central}) \quad (\text{B.24})$$

e

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_{t_i} = \frac{f(x, t_i + \Delta t) - 2f(x, t_i) + f(x, t_i - \Delta t)}{\Delta t^2} + O(\Delta t)^2. \quad (\text{central}) \quad (\text{B.25})$$

Com as expansões em série de Taylor de  $f(x, y)$  em torno do ponto  $(x_i, y_j)$ —em que o índice  $j$  está associado à coordenada  $y$ —, podemos também determinar expressões envolvendo derivadas parciais mistas com outras variáveis espaciais, isto é, do tipo  $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ .

Como estamos interessados agora em obter uma expressão que relacione a variação de  $f$  com incrementos em  $x$  e  $y$ , simultaneamente, devemos utilizar a expansão em série de Taylor de funções de duas variáveis, dada por:

$$\begin{aligned} f(x_i + \Delta x, y_j + \Delta y) = & f(x_i, y_j) + (\Delta x) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i, y_j} + (\Delta y) \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x_i, y_j} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_i, y_j} \\ & + 2 \frac{(\Delta x)(\Delta y)}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x_i, y_j} + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{x_i, y_j} + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Após algumas manipulações algébricas, a combinação adequada das expansões de  $f(x_i \pm \Delta x, y_j - \Delta y)$  e  $f(x_i \pm \Delta x, y_j + \Delta y)$  até termos de segunda ordem fornece

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i+1, j+1} - f_{i+1, j-1} - f_{i-1, j+1} + f_{i-1, j-1}}{4(\Delta x)(\Delta y)} + O[(\Delta x)^2(\Delta y)^2]. \quad (\text{B.27})$$

### B.1.3 Erros de Arredondamento

Apesar das equações de diferenças finitas obtidas anteriormente sugerirem que a redução do passo  $\Delta x$  melhora a qualidade da aproximação para a derivada, isso só é verdade até certo ponto, na prática a redução do espaçamento da malha é limitada pelos erros de arredondamento. Erros de arredondamento estão presentes na solução numérica de um

TABELA 10 – Erro relativo percentual em função de  $\Delta x$  na aproximação da derivada primeira de  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  por diferenças finitas centrais.

| $\Delta x$   | $f'(2)$       | ERRO RELATIVO |
|--------------|---------------|---------------|
| 0.1250000000 | 22.2634852466 | 0.4345027228  |
| 0.0625000000 | 22.1912277915 | 0.1085366179  |
| 0.0312500000 | 22.1731819371 | 0.0271285905  |
| 0.0156250000 | 22.1686716298 | 0.0067817999  |
| 0.0078125000 | 22.1675441252 | 0.0016954283  |
| 0.0039062500 | 22.1672622536 | 0.0004238557  |
| 0.0019531250 | 22.1671917860 | 0.0001059638  |
| 0.0009765625 | 22.1671741691 | 0.0000264910  |
| 0.0004882812 | 22.1671697649 | 0.0000066227  |
| 0.0002441406 | 22.1671686638 | 0.0000016557  |

problema devido à aritmética de precisão finita utilizada pelos computadores. No MDF, se o passo da malha for demasiadamente pequeno, os erros de arredondamento nos cálculos passam a dominar o erro local de truncamento das expressões de diferenças finitas, e o erro relativo percentual efetivamente aumenta. Para ilustrar esse fato vamos calcular numericamente a derivada primeira da função  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  utilizando a equação de diferenças centrais de segunda ordem, Eq. (B.13) na página 97. Sabemos que a derivada dessa função é  $f'(x) = (x + 1)e^x$ , vamos utilizar o valor exato de  $f'(2)$  para calcular o erro relativo das aproximações realizadas com os diferentes  $\Delta x$ . Conforme podemos verificar na Tabela 10, o erro relativo percentual, dado por

$$E_{\text{rel}} = \left| \frac{\text{valor exato} - \text{valor aproximado}}{\text{valor exato}} \right| \cdot 100, \quad (\text{B.28})$$

diminui quadráticamente cada vez que  $\Delta x$  é reduzido pela metade.

A Figura 25 na página seguinte mostra o gráfico do erro relativo percentual  $E_{\text{rel}}$  em função do espaçamento  $\Delta x$ , para o cálculo de  $f'(2)$  por diferenças centrais de segunda ordem. Como se pode observar, o erro relativo diminui até que os erros de arredondamento se tornem grandes, comparados com os erros locais de truncamento, e passem a dominar o erro da solução numérica. Além de o erro ser oscilatório, seu valor depende não só do espaçamento  $\Delta x$ , mas também do valor da função no ponto. A princípio, não há como evitar problemas desse tipo, mas seu efeito pode ser amenizado se realizarmos as operações aritméticas de ponto flutuante em precisão dupla ou quádrupla (quando disponível). No exemplo

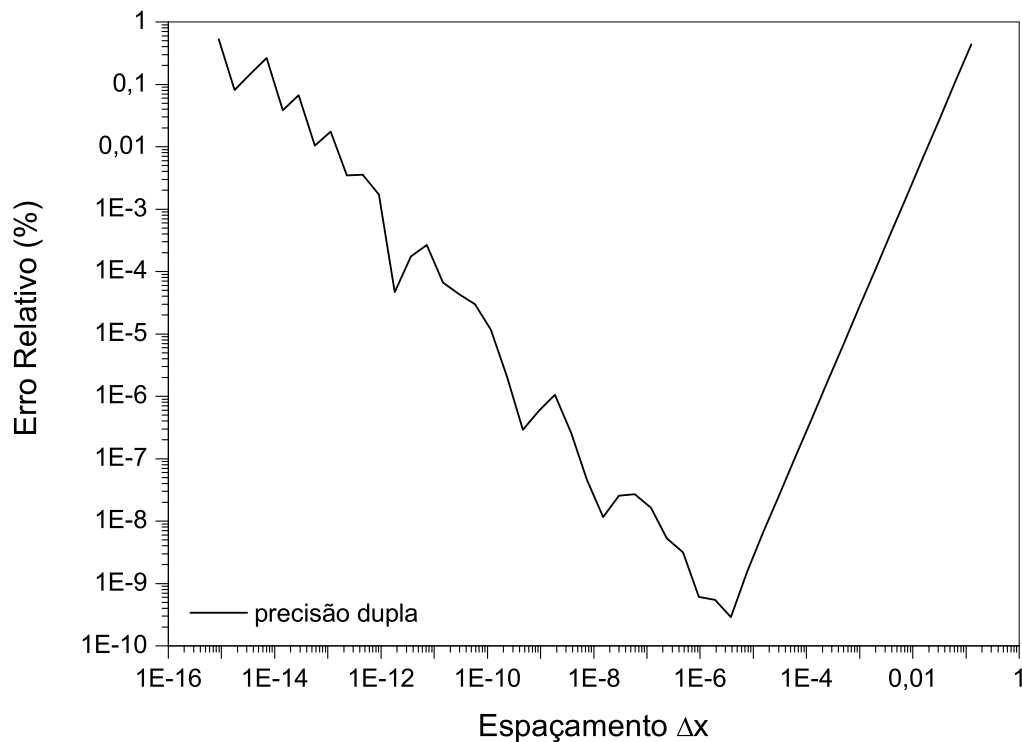


FIGURA 25 – Erro relativo percentual em função do espaçamento  $\Delta x$  na aproximação da derivada de  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  utilizando precisão dupla.

da Figura 25, os cálculos realizados com precisão dupla indicam que um espaçamento  $\Delta x$  adequado deve ser da ordem de  $10^{-5}$ . A vantagem de se utilizar maior precisão pode ser percebida com a ajuda da Figura 26 na próxima página, onde efetuamos o mesmo cálculo de  $f'(2)$ , só que agora utilizando aritmética de ponto flutuante com precisão quádrupla (128 bits). Nesse caso, um valor apropriado para  $\Delta x$  é da ordem de  $10^{-11}$ , com erros relativos percentuais da ordem de  $10^{-21}$ , bem melhor que o valor  $10^{-9}$  obtido com a utilização de precisão dupla nos cálculos.

## B.2 DETERMINAÇÃO DOS AUTOVALORES E AUTOVETORES

De posse das aproximações algébricas obtidas anteriormente podemos resolver numericamente grande parte das equações diferenciais parciais ou ordinárias resultante da modelagem matemática do problema físico de interesse. Para exemplificar o procedimento numérico que pode ser adotado na resolução das equações diferenciais, e também para tornar mais clara a compreensão do MDF, vamos tomar por exemplo a equação de Schrödinger

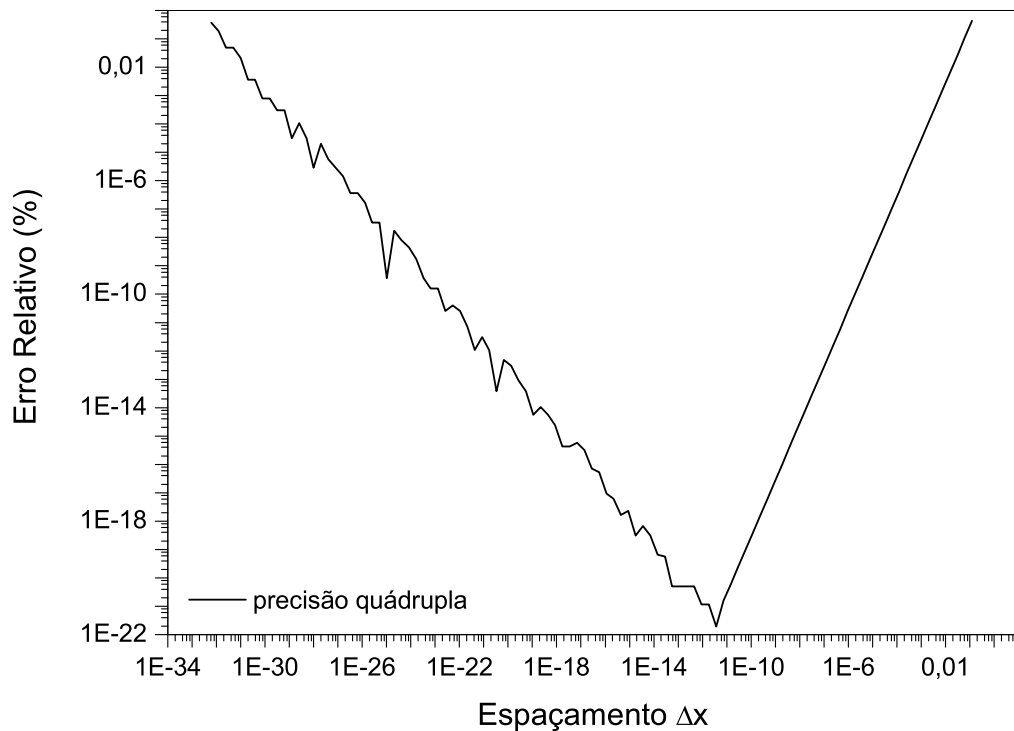


FIGURA 26 – Erro relativo percentual em função do espaçamento  $\Delta x$  na aproximação da derivada de  $f(x) = xe^x$  no ponto  $x = 2$  utilizando precisão quádrupla.

unidimensional independente do tempo para uma partícula de massa  $m^*$  se movendo num potencial  $V(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{B.29})$$

onde  $\hbar = h/2\pi$  é a constante reduzida de Plank. Como sabemos esta é uma equação de autovalor, na qual  $\psi$  representa as autofunções e  $E$  os autovalores de energia. Vamos impor as seguintes condições de contorno à Eq. (B.29):

$$\psi(-\infty) = 0 \quad \text{e} \quad \psi(\infty) = 0. \quad (\text{B.30})$$

O primeiro passo na resolução do problema é impor uma malha no domínio de solução e obter a equação de diferenças finitas apropriada. Iremos então procurar a solução da equação de diferenças nos pontos da malha. Visto que estamos substituindo uma equação diferencial contínua por uma equação de diferenças finitas discreta, devemos procurar a solução em uma malha finita. Esperamos, é claro, que a solução desse problema seja (aproximadamente) a solução do problema original. Nesse exemplo iremos tomar a malha associada a um certo espaçamento  $\Delta x$  e obter soluções para os pontos interiores—as soluções



para  $x = -\infty$  e  $x = \infty$  estão fixadas pelas condições de contorno e, portanto, não estão sujeitas à alterações. Substituindo os operadores diferenciais na equação diferencial original, Eq. (B.29), pelas aproximações dadas pelas Eqs. (B.13) e (B.15), obtemos a seguinte equação de diferenças finitas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \right] + V_i \psi_i = E_i \psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (\text{B.31})$$

onde  $\Delta x = x_i - x_{i-1}$  é o passo da malha e  $n$  é quantidade de intervalos da malha ( $n+1$  pontos). As Eqs. (B.31) formam um sistema linear com  $n-1$  equações a  $n-1$  incógnitas  $\psi_1, \dots, \psi_{n-1}$ . Tal sistema pode ainda ser escrito na forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \psi_{i-1} + \left[ \frac{\hbar^2}{m^*} + (\Delta x)^2 V_i \right] \psi_i - \frac{\hbar^2}{2m^*} \psi_{i+1} = (\Delta x)^2 E_i \psi_i, \quad (\text{B.32})$$

que, por sua vez, pode ser escrito na forma matricial  $\mathbf{A}\psi = \lambda\psi$ , ou seja:

$$\begin{bmatrix} d_1 & e_1 & 0 & \cdots & 0 \\ e_1 & d_2 & e_2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & e_{n-1} & d_{n-2} & e_{n-2} \\ 0 & \cdots & 0 & e_{n-2} & d_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-2} \\ \psi_{n-1} \end{bmatrix} = (\Delta x)^2 E_i \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-2} \\ \psi_{n-1} \end{bmatrix},$$

onde os elementos da diagonal principal e os elementos não-nulos fora da diagonal principal são dados, respectivamente, por

$$d_i = \frac{\hbar^2}{m^*} + (\Delta x)^2 V_i$$

e

$$e_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*} = \text{constante},$$

em que seus autovalores são dados por  $\lambda = (\Delta x)^2 E_i$ . A matriz obtida com esse exemplo é dita esparsa por possuir muitos elementos nulos e também pode ser classificada ainda como real, tridiagonal e simétrica.

Para obter os autovalores e autovetores da matriz  $\mathbf{A}$  devemos resolver o sistema de equações lineares representado pela Eq. (B.32). Existem duas classes de métodos numéricos que podem ser utilizados para este fim, numa classe encontram-se os métodos diretos, na outra os indiretos ou iterativos. Com os métodos diretos, a solução é computada pela execução de um número finito de operações aritméticas, muitas vezes esse número de

operações é conhecido *a priori*. Já com os métodos iterativos, partindo de uma tentativa inicial de solução, uma seqüência de aproximações é gerada com o propósito de convergir para a solução do problema.

Métodos iterativos não são, em geral, superiores aos métodos diretos quando aplicados a equações diferenciais ordinárias. Entretanto, em muitas situações físicas de interesse o problema se torna multidimensional e requer a solução de equações diferenciais parciais, resultando em uma matriz de ordem muito elevada. Nessas circunstâncias o mérito relativo é invertido, tornando os métodos iterativos superiores aos métodos diretos, já que, nos métodos diretos, o erro tende a se propagar a cada operação aritmética. Na método direto de eliminação Gaussiana, por exemplo, o processo de retrosubstituição propaga qualquer erro que possa existir em uma componente para todas as demais componentes. Em contrapartida, os métodos iterativos consideram igualmente todas as componentes e distribuem o erro de forma uniforme.

Os métodos diretos mais conhecidos são: eliminação Gaussiana, eliminação de Gauss-Jordan, decomposição LU, decomposição QR, decomposição de Cholesky, decomposição em valor singular e algoritmo de Thomas. Como métodos iterativos podemos citar: método de Jacobi, método de Gauss-Seidel, método de relaxação sucessiva (SOR) e método do gradiente conjugado (CGM), para citar apenas alguns. Uma descrição detalhada desses métodos numéricos pode ser encontrada na referências [139, 65].

### B.2.1 Bibliotecas Numéricas

Existem várias bibliotecas numéricas que implementam, em diversas linguagens de programação, os métodos diretos ou iterativos citados na seção anterior. Algumas bibliotecas são comerciais enquanto outras são livremente distribuídas. Dentre as comerciais destacamos as bibliotecas NAG e IMSL. Diversas bibliotecas numéricas estão disponíveis gratuitamente no repositório Netlib<sup>1</sup>, dentre elas recomendamos uma biblioteca amplamente utilizada em álgebra linear numérica, qual seja a *linear algebra package* (LAPACK) [140], que possui rotinas como a DSTEVD ou DSTEVR, que implementam métodos diretos na computação dos autovalores e autovetores de matrizes reais, tridiagonais e simétricas que podem, portanto, ser utilizadas na resolução autoconsistente da equação de Schrödinger

---

<sup>1</sup>Disponível em <http://www.netlib.org>

discretizada pelo método de diferenças finitas. Para equação de Poisson, a rotina DPTTRS pode resolver o sistema tridiagonal de equações lineares resultante do processo de discretização. Alguns métodos mais otimizados [141, 142, 143] foram recentemente desenvolvidos baseados nos métodos utilizados por estas e outras rotinas da LAPACK e constituem também uma ótima opção para a solução numérica autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson.

### B.3 DISCRETIZAÇÃO PRÓPRIA

A discretização da equação de Schrödinger unidimensional obtida na seção anterior não levou em consideração a descontinuidade da massa efetiva existente em certos sistemas nanométricos, como é o caso dos QWs. Somente incluindo a mudança da massa efetiva ao longo da heteroestrutura é possível realizar simulações numéricas mais fideis, isto é, mais próximas da realidade experimental. Ao levar em consideração a descontinuidade da massa no modelo matemático, os padrões de discretização passam a exercer um papel fundamental na precisão da solução numérica [56].

Devido à dependência espacial da massa efetiva, existente em diversos sistemas quânticos, não há uma forma única [144, 145, 146, 147] para o operador Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  presente na equação de Schrödinger, ou equação de massa efetiva,  $\mathcal{H}\psi = E\psi$ . Os Hamiltonianos mais comumente empregados em cálculos de estrutura eletrônica em QWs são: o Hamiltoniano convencional, o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke e o Hamiltoniano de Bastard. Para o Hamiltoniano convencional, a equação de massa efetiva toma a seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{B.33})$$

Já com o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke a equação fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} \right] + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{B.34})$$

E, finalmente, com o Hamiltoniano de Bastard temos a seguinte equação:

$$-\frac{\hbar^2}{4} \left[ \frac{1}{m^*(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{d^2}{dx^2} \frac{\psi(x)}{m^*(x)} \right] + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{B.35})$$

Para os níveis de energia dos estados ligados do elétron, as condições de contorno geralmente são

$$\psi(x = \pm\infty) = 0. \quad (\text{B.36})$$

Essas condições de contorno abrangem um domínio infinito e isso não é realizável para técnicas numéricas que fazem uso de um número finito de malhas finitas, como é o caso do MDF. Geralmente essas condições são substituídas pelas condições de contorno aproximadas,

$$\psi(x_{\text{esq}}) = \psi(x_{\text{dir}}) = 0, \quad (\text{B.37})$$

onde  $x_{\text{esq}}$  e  $x_{\text{dir}}$  são posições nas quais as funções envelope são suficientemente pequenas. Inspeccionando ambos os lados das Eqs. (B.33) e (B.34), conclui-se que tanto o Hamiltoniano convencional quanto o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke satisfazem a continuidade da função de onda envelope em um ponto  $x_0$  de descontinuidade de massa, dada por

$$\psi(x_0^-) = \psi(x_0^+). \quad (\text{B.38})$$

Integrando ambos os lados das Eqs. (B.33) e (B.34), o Hamiltoniano convencional fornece

$$\frac{d\psi(x_0^-)}{dx} = \frac{d\psi(x_0^+)}{dx}, \quad (\text{B.39})$$

mas o Hamiltoniano de BenDaniel, por sua vez, fornece

$$\frac{1}{m^*(x_0^-)} \frac{d\psi(x_0^-)}{dx} = \frac{1}{m^*(x_0^+)} \frac{d\psi(x_0^+)}{dx}. \quad (\text{B.40})$$

A Eq. (B.40) é normalmente interpretada como a continuidade do fluxo de probabilidade [148]. Como as Eqs. (B.38) a (B.40) resultam diretamente das Eqs. (B.33) e (B.34), elas são consideradas como condições *naturais* de interface.

Segundo Bastard [149], as condições de interface dadas pelas Eqs. (B.38) e (B.40) podem ser obtidas diretamente da Eq. (B.35) pela integração do Hamiltoniano ao longo da interface, ou seja, elas foram tratadas como condições naturais para o Hamiltoniano de Bastard. Contudo, essa afirmação não é verdadeira e pode levar a resultados (no mínimo) imprecisos quando o Hamiltoniano de Bastard é utilizado na solução numérica da equação de massa efetiva [150]. Li e Kuhn [56] mostraram que as funções envelope presentes no Ha-

Hamiltoniano de Bastard não obedecem às condições de contorno nas heterojunções a menos que condições de interface sejam necessariamente impostas. Em outras palavras, quando o Hamiltoniano de Bastard é aplicado a uma estrutura com mudança abrupta de massa efetiva, as funções de onda não possuem as propriedades de continuidade (necessárias) dadas pelas Eqs. (B.38), (B.39) e (B.40). Desse modo, as condições de interface presentes nas Eqs. (B.38) e (B.40) não são condições naturais.

As soluções para os Hamiltonianos convencional, de BenDaniel e Duke e de Bastard são idênticas dentro de um intervalo no qual a massa efetiva e o potencial sejam constantes pois, neste caso, todos os Hamiltonianos se reduzem à mesma forma diferencial. Se as condições de interface dadas pelas Eqs. (B.38) e (B.40) forem impostas ao Hamiltoniano de Bastard, as soluções obtidas com este Hamiltoniano serão as mesmas que as obtidas com o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke [151].

Utilizando as aproximações de diferenças centrais de segunda ordem previamente obtidas, a equação de diferenças finitas para o Hamiltoniano convencional no domínio de solução  $[x_{\text{esq}}, x_{\text{dir}}]$  pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2(\Delta x)^2} \frac{1}{m_i} \psi_{i-1} + \left[ \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} \frac{1}{m_i} + V_i \right] \psi_i - \frac{\hbar^2}{2(\Delta x)^2} \frac{1}{m_i} \psi_{i+1} = E \psi_i, \quad (\text{B.41})$$

onde a notação  $m_i = m^*(x_i)$ ,  $V_i = V(x_i)$  e  $\psi_i = \psi(x_i)$  foi empregada e as condições de contorno expressas pela Eq. (B.37) são representadas por  $\psi_0 = \psi_n = 0$ , onde  $n$  é o número de intervalos da malha de pontos  $x_i = x_{\text{esq}} + i\Delta x$ . A Eq. (B.41) representa uma matriz tridiagonal assimétrica.

O termo diferencial,  $\frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} \right]$ , presente no Hamiltoniano de BenDaniel e Duke, Eq. (B.34), é matematicamente indefinido nas discontinuidades da massa. Essa indefinição dos valores da função em determinados pontos introduz uma ambigüidade no esquema numérico. Para contornar esse problema, vamos aproximar o valor da massa em um ponto intermediário da malha, localizado entre os pontos convencionais  $x_i$  e  $x_{i+1}$ , por

$$(m_{i+1/2})^\theta = \frac{1}{2} [(m_i)^\theta + (m_{i+1})^\theta], \quad (\text{B.42})$$

onde  $\theta$  é um número real. Se  $\theta = 1$ , a Eq. (B.42) resulta na média direta dos valores nodais da massa. Se  $\theta = -1$ , a Eq. (B.42) representa a média harmônica. As equações de diferenças finitas para o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke obtidas para valores de  $\theta$  iguais a 1

e  $-1$  são chamadas de equação de diferenças direta e equação de diferenças harmônica, respectivamente, e são dadas por

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_{i-1} + m_i} \right) \psi_{i-1} + \left[ \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_{i-1} + m_i} + \frac{1}{m_i + m_{i+1}} \right) + V_i \right] \psi_i \\ - \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_i + m_{i+1}} \right) \psi_{i+1} = E\psi_i \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

e

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_{i-1}} + \frac{1}{m_i} \right) \psi_{i-1} + \left[ \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_{i-1}} + \frac{2}{m_i} + \frac{1}{m_{i+1}} \right) + V_i \right] \psi_i \\ - \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_{i+1}} \right) \psi_{i+1} = E\psi_i, \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

para os pontos exteriores  $i = 1, 2, \dots, n-1$ . Tanto a equação de diferenças harmônica quanto a direta são tridiagonais e simétricas.

A equação de diferenças para o Hamiltoniano de Bastard é

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{(2\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_{i-1}} + \frac{1}{m_i} \right) \psi_{i-1} + \left[ \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_i} \right) + V_i \right] \psi_i \\ - \frac{\hbar^2}{(2\Delta x)^2} \left( \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_{i+1}} \right) \psi_{i+1} = E\psi_i, \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

que também é tridiagonal e simétrica.

[Li e Kuhn \[56\]](#) mostraram que a equação de diferenças direta para o Hamiltoniano de BenDaniel fornece resultados mais precisos e mais bem comportados que a equação de diferenças harmônica, Eq. (B.44). Quando comparados aos resultados obtidos com o Hamiltoniano convencional, os cálculos utilizando o Hamiltoniano de BenDaniel e Duke apresentaram menor erro relativo, além de menor custo computacional, visto que a matriz do Hamiltoniano convencional não é simétrica. Além disso, conforme previsto pelos autores, as autofunções calculadas com o Hamiltoniano de Bastard apresentam falhas nas heterointerfaces e os autovalores de energia flutuam demasiadamente em função do número de pontos da malha, mesmo utilizando uma discretização própria.

Além da escolha do Hamiltoniano adequado, a posição dos pontos de descontinuidade da massa e do potencial é um outro fator que influencia fortemente na precisão e estabilidade dos resultados obtidos por meio do MDF. Se os pontos de descontinuidade forem

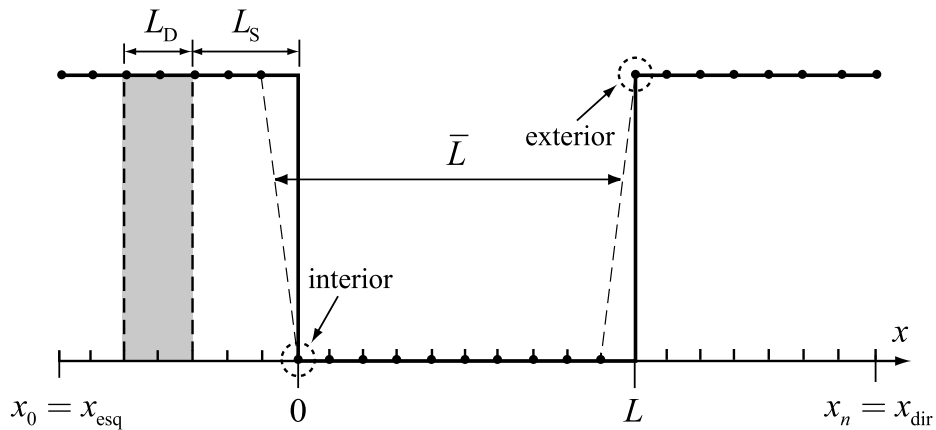


FIGURA 27 – Exemplo de discretização própria de um poço de potencial retangular. Note que a descontinuidade de massa coincide com um ponto nodal e que apenas uma das descontinuidades é tratada como interior ao poço.

colocados aleatoriamente na malha, o erro relativo em função da número de intervalos oscila desordenadamente. Por outro lado, se os pontos de descontinuidade forem colocados em lugares fixos na malha, obedecendo a uma discretização própria, o erro relativo da solução decresce monotonicamente com o aumento do número de pontos da malha.

Uma discretização própria para o esquema de diferenças finitas, segundo os autores, deve satisfazer as seguintes condições:

- (i) a descontinuidade da massa coincide com um ponto nodal;
- (ii) apenas uma das duas descontinuidades de massa pode ser tratada como interior ao poço.

A segunda condição é imposta de modo a preservar a largura média do poço ( $\bar{L}$ ) em sua representação discretizada, vide Figura 27, que mostra exatamente um exemplo de discretização própria para um poço de potencial retangular, onde estão indicadas também as larguras do poço ( $L$ ), do espaçador ( $L_S$ ) e da região de depleção ( $L_D$ ).