

Transições Óticas em Lasers de Semicondutores de Estrutura Zinc-Blende, Submetidos a uma Tensão*

MARIA SALETE SARTÓRIO, PHILIPPE BROSSON

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, 13100 Campinas, SP

Recebido em 24 de outubro de 1979

In this paper, we study the modifications produced by stress in the valence band, near $\vec{k}=0$, in Zinc-Blende structure semiconductors and their influence on the radiative recombinations in GaAs lasers. The stress breaks the degeneracy in $\vec{k}=0$ owing to a symmetry reduction. The stress hamiltonian can be written in a similar form to that of $\vec{k}\cdot\vec{p}$ perturbation hamiltonian. Therefore, for small stress ($\vec{\sigma}$) and \vec{k} , we considered these hamiltonian as perturbations and we computed the perturbed eigenvalues and eigenfunctions for generic \vec{k} and $\vec{\sigma}$. The transition probabilities from conduction band to perturbed valence band were also computed. The general solution includes particular earlier published results. The Theoretical results for (111) uniaxial compression agree with spontaneous emission measurements in GaAs lasers. We can also explain, with this model, the observed double peak of the spontaneous emission for proton bombarded stripe contact lasers.

Este trabalho consiste de um estudo sobre as modificações causadas por uma tensão na banda de valência perto de $\vec{k}=0$ em semicondutores de estrutura tipo Zinc-Blende e sua influência nas recombinações radiativas em lasers de junção de GaAs. Uma tensão levanta a degenerescência em $\vec{k}=0$ devido a redução da simetria. A hamiltoniana de tensão pode ser escrita de uma forma análoga à hamiltoniana da perturbação $\vec{k}\cdot\vec{p}$. Portanto, para tensão ($\vec{\sigma}$) e \vec{k} pequenos, consideramos essas hamiltonianas como perturbação e calculamos seus autovalores e auto funções para \vec{k}

* Trabalho parcialmente financiado pela TELEBRAS, Brasil

e \vec{k} genéricos assim como as possibilidades de transição da banda de condução para a banda de valência perturbada. A solução geral obtida engloba resultados de casos particulares já publicados. Os resultados teóricos para uma compressão uniaxial na direção (111) foram confrontados satisfatoriamente com medidas de emissão espontânea em lasers de GaAs. O modelo permite também explicar a presença de um pico duplo de emissão espontânea em lasers de contato de faixa tipo implantação de prótons.

1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho faremos uma análise, por cálculo de perturbação, dos efeitos de uma tensão qualquer sobre as bandas de valência de um semiconductor de estrutura tipo Zinc-Blende, com o objetivo de obter informações sobre os mecanismos de recombinação radiativas em lasers de semiconductor. A solução geral obtida engloba resultados de casos particulares já publicados¹⁻⁵.

Semicondutores de estrutura tipo Zinc-Blende de simetria T_d^2 apresentam três bandas de valência. Com a ausência de tensão, a banda de condução e as bandas de valência v_1 (buracos pesados), v_2 (buracos leves) e v_3 estão representadas, para esses semicondutores, na Fig.1-a, onde Γ_6 , Γ_8 e Γ_1 são representações do grupo T_d^2 de dimensões 2, 4 e 2, respectivamente. A aplicação de uma tensão, reduz a simetria e levanta a degenerescência do ponto Γ_8 , desdobrando as bandas v_1 e v_2 em $\vec{k}=0$. Por exemplo, uma pressão uniaxial na direção (001) reduz a simetria de cúbica (grupo T_d^2) para tetragonal (grupo D_{2d}^2) e Γ_8 se reduz como $\Gamma_8 = \Gamma_6 + \Gamma_7$; como mostra a Fig.1-b.

Já foi construída uma hamiltoniana em $\vec{k}=0$ para tensões pequenas¹⁻³ e são conhecidos seus autovalores. Também é conhecida a hamiltoniana para perturbação $\$ \$$, no caso de bandas parabólicas e desprezando a interação entre a banda de condução e as bandas de valência. A idéia deste trabalho é tratar tanto a hamiltoniana da tensão como a do termo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de uma forma análoga, como já foi sugerido⁷, encontrando os autovalores e as autofunções da hamiltoniana perturbada pela tensão, pelo termo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ ou pelos dois.

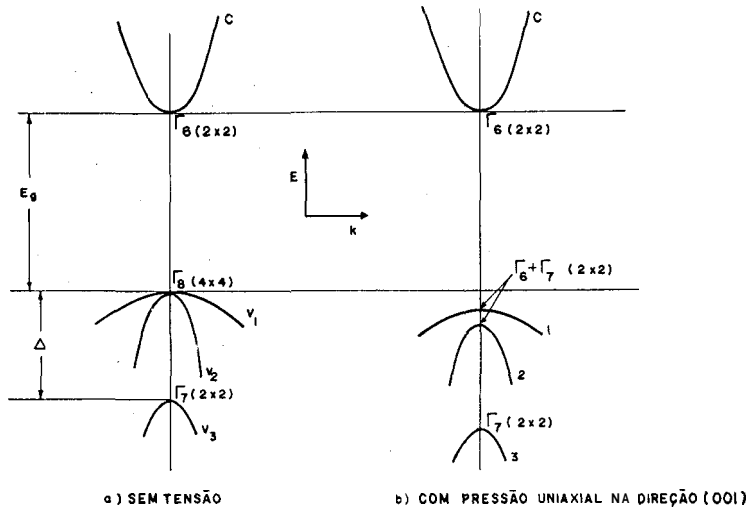


Fig. 1 - Diagrama de bandas de energia de um semiconductor tipo Zinco-Blende. A aplicação de uma pressão uniaxial na direção (001) reduz a simetria, de cúbica (grupo T_d^2), para tetragonal (grupo D_{2d}^2) e levanta a degenerescência em $k=0$. Γ_6 , Γ_7 e Γ_8 são representações do grupo T_d^2 , de dimensões 2, 2 e 4 respectivamente. Usamos a notação de Koster⁶.

Com o conhecimento dessas autofunções, poderemos calcular as probabilidades de transição entre estados da banda de conduções e das bandas de valência. Esse modelo possibilitará a determinação dos elementos de matriz das transições, que estão envolvidos nos cálculos de ganho em lasers de semicondutores. Essa análise dos efeitos de tensão sobre as recombinações radiativas fornece informações para a determinação dos estados que participam da emissão estimulada em lasers de semicondutores.

2. AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES DA HAMILTONIANA PERTURBADA

A equação de Schrödinger para um elétron de energia E movendo-se no potencial periódico do cristal $V(\vec{r})$ é:

$$\left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} |\vec{\nabla}V \times \vec{p}| \cdot \vec{\sigma} \right\} \Psi = E\Psi \quad (1)$$

onde o último termo representa a interação spin-órbita; \vec{p} e $\vec{\sigma}$ são, respectivamente, os operadores momento e de spin. Sabemos que as soluções dessa equação são funções de Bloch do tipo:

$$\Psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2)$$

onde $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ tem a periodicidade de $V(\vec{r})$, \vec{k} está na primeira zona de Brillouin e n é o índice da banda, estendendo-se sobre o conjunto completo de bandas.

Substituindo (2) em (1), obtemos:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma} \right\} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E'_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3)$$

onde:

$$E'_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4)$$

$$H_k = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (5)$$

$$H_k = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad \text{é a hamiltoniana } \vec{k} \cdot \vec{p} \quad (6)$$

$$H_{S0} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad \text{é a hamiltoniana da interação spin-órbita independente de } \vec{k} \quad (7)$$

$$H'_{S0} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} [\vec{\nabla}V \times \vec{k}] \cdot \vec{\sigma} \quad \text{é a hamiltoniana de interação spin-órbita dependente de } \vec{k} \quad (8)$$

A contribuição de H'_{S0} é muito pequena⁸ e vamos desprezá-la nos cálculos que seguem.

A aplicação, sobre um cristal, de uma tensão qualquer representada pelo tensor \vec{X} , vai deformá-lo distorcendo seus eixos unitários \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} para novos eixos \hat{x}' , \hat{y}' , \hat{z}' , que podem ser escritos em termos dos originais como⁹:

$$\begin{aligned} \hat{x}' &= (1 + \epsilon_{xx}) \hat{x} + \epsilon_{xy} \hat{y} + \epsilon_{xz} \hat{z} \\ \hat{y}' &= \epsilon_{yx} \hat{x} + (1 + \epsilon_{yy}) \hat{y} + \epsilon_{yz} \hat{z} \\ \hat{z}' &= \epsilon_{zx} \hat{x} + \epsilon_{zy} \hat{y} + (1 + \epsilon_{zz}) \hat{z} \end{aligned} \quad (9)$$

O tensor $\vec{\epsilon}$ define a deformação e agora a hamiltoniana deve ser expressa em termos desses novos eixos deformados^{1,3} e as funções de onda devem obedecer a novas condições de contorno, tendo a periodicidade do cristal deformado.

Desprezando a variação com a tensão do termo H_{S0} de interação spin-órbita¹⁰, a hamiltoniana se escreve:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V(\vec{r}') + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} [\vec{\nabla} V \times \vec{p}] \cdot \vec{\sigma} \quad (10)$$

Se expressarmos H em função das coordenadas originais, podemos considerar a tensão como perturbação e expandir as funções de onda perturbadas em função das não perturbadas, satisfazendo às mesmas condições de contorno. A hamiltoniana será da forma:

$$H = H_0 + H_{S0} + H_k + H_\epsilon \quad (11)$$

onde H_0 , H_k , e H_{S0} são definidos, respectivamente, pelas relações (5), (6) e (7).

H_ϵ é a correção introduzida devido à deformação dos eixos produzida pela tensão,

As hamiltonianas H_k ^{4,5} e H_ϵ ^{2,3,7} são representadas em termos do operador momento angular L:

$$H_k = A(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - 3B \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) k_x^2 + p.c. \right] + 2\sqrt{3} D [L_x, L_y] k_x k_y + p.c. \quad (12)$$

$$H_\epsilon = -\alpha(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) - 3b \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) \epsilon_{xx} + p.c. \right] + 2\sqrt{3} d [L_x, L_y] \epsilon_{xy} + p.c. \quad (13)$$

onde A, B e C são constantes características do cristal definidas por Dresselhacs, Kip e Kittel⁴ com $D^2 = C^2 + 3B^2$; α é o potencial de deformação hidrostática, b e d são os potenciais de deformação uniaxial para

tensões de simetria tetragonal e trigonal, respectivamente; p.c. significa permutações cíclicas com relação a x, y, z ;

$$\{L_x, L_y\} \equiv \frac{1}{2} [L_x L_y + L_y L_x]$$

Pode-se escrever as perturbações H_k e H_e genericamente na forma:

$$H = A \operatorname{tr}(\tilde{\alpha}) - 3B \left[(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2) \alpha_{xx} + \text{p.c.} \right] + \\ - 2\sqrt{3} D [\{L_x, L_y\} \alpha_{xy} + \text{p.c.}] \quad (14)$$

onde α_{xy} representa $k_x k_y$, ϵ_{xy} ou a soma (analogamente para os outros componentes dos tensores).

A, B e V representam, respectivamente, A, B e D ou $-a, b$ e d ; $\operatorname{tr}(\tilde{\alpha})$ é o traço do tensor $\tilde{\alpha}$;

$$H \text{ será uma perturbação para } H_1 = H_0 + H_{s0} .$$

Para encontrar os autovalores da perturbação H , tomaremos como base as autofunções da hamiltoniana H_1 . Essa base será, então, constituída pelas autofunções do momento angular total $J = L + S$, $|j, m_j\rangle$, com $l=1$ e $s = \frac{1}{2}$ para as bandas de valência e são dadas a seguir¹¹:

$$\begin{aligned} |3/2, 1/2\rangle &= |v_{1+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |2Z+ - (X + iY)\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle &= |v_{1-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |2Z+ + (X - iY)\rangle \\ |3/2, 3/2\rangle &= |v_{2+}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |X + iY\rangle \\ |3/2, -3/2\rangle &= |v_{2-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |X - iY\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle &= |v_{3+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |-Z+ - (X + iY)\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle &= |v_{3-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |Z+ - (X - iY)\rangle \end{aligned} \quad (15)$$

onde $+$ e $-$ representam as duas direções de spin.

Nesta base, a hamiltoniana $H - A \text{tr}(\tilde{\alpha})$ se escreve:

$$[H - A \text{tr}(\tilde{\alpha})] = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} |v_{2+}\rangle & |v_{1+}\rangle & |v_{1-}\rangle & |v_{2-}\rangle & |v_{3+}\rangle & |v_{3-}\rangle \\ \hline -R & S & T & 0 & -\sqrt{1/2} S & -\sqrt{2} T \\ S^* & R & 0 & T & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S \\ T^* & 0 & R & -S & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R \\ 0 & T^* & -S^* & -R & \sqrt{2} T^* & -\sqrt{1/2} S^* \\ \hline -\sqrt{1/2} S^* & -\sqrt{2} R & \sqrt{3/2} S & \sqrt{2} T & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} T^* & \sqrt{3/2} S^* & \sqrt{2} R & -\sqrt{1/2} S & 0 & 0 \end{array} \\ (16) \end{array}$$

onde:

$$R = \frac{B}{2} (2\alpha_{zz} - \alpha_{xx} - \alpha_{yy}) \quad (17)$$

$$S = -D(\alpha_{xz} - i\alpha_{yz}) \quad (18)$$

$$T = -\frac{\sqrt{3}}{2} B(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}) + iD\alpha_{xy} \quad (19)$$

* indica complexo conjugado.

Os autovalores da hamiltoniana perturbada com origem de energia no topo da banda de valência não perturbada (em $\vec{k}=0$ e sem tensão) são obtidos por cálculo de perturbação de primeira ordem:

$$E_1 = A \text{tr}(\tilde{\alpha}) + E$$

$$E_2 = A \text{tr}(\tilde{\alpha}) - E \quad (20)$$

$$E_3 = -\Delta + A \text{tr}(\tilde{\alpha})$$

E é uma constante positiva definida por $E \equiv (R^2 + |S|^2 + |T|^2)^{1/2}$

E_1 corresponde ao deslocamento da banda 1 de buracos pesados, E_2 , ao deslocamento da banda 2 de buracos leves e E_3 ao da banda 3.

As autofunções da hamiltoniana perturbada, no caso geral em que $E \neq |R|$, são:

$$\begin{aligned}
 \vartheta_{1+} &= b_0 \left[\frac{S}{R+E} |v_{2+}\rangle + |v_{1+}\rangle + \frac{T^*}{R+E} |v_{2-}\rangle \right] + \gamma_{1+} |v_{3+}\rangle + \beta_{1+} |v_{3-}\rangle \\
 \vartheta_{1-} &= b_0 \left[\frac{T}{R+E} |v_{2+}\rangle + |v_{1-}\rangle - \frac{S^*}{R+E} |v_{2-}\rangle \right] + \gamma_{1-} |v_{3+}\rangle + \beta_{1-} |v_{3-}\rangle \\
 \vartheta_{2+} &= \alpha_0 \left[\frac{S}{R-E} |v_{2+}\rangle + |v_{1+}\rangle + \frac{T^*}{R-E} |v_{2-}\rangle \right] + \gamma_{2+} |v_{3+}\rangle + \beta_{2+} |v_{3-}\rangle \\
 \vartheta_{2-} &= \alpha_0 \left[\frac{T}{R-E} |v_{2+}\rangle + |v_{1-}\rangle - \frac{S^*}{R-E} |v_{2-}\rangle \right] + \gamma_{2-} |v_{3+}\rangle + \beta_{2-} |v_{3-}\rangle \\
 \vartheta_{3+} &= |v_{3+}\rangle + \frac{\sqrt{1/2}S}{\Delta} |v_{2+}\rangle + \frac{\sqrt{2}R}{\Delta} |v_{1+}\rangle - \frac{\sqrt{3/2}S}{\Delta} |v_{1-}\rangle - \frac{\sqrt{2}T^*}{\Delta} |v_{2-}\rangle \\
 \vartheta_{3-} &= |v_{3-}\rangle + \frac{\sqrt{2}T}{\Delta} |v_{2+}\rangle - \frac{\sqrt{3/2}S}{\Delta} |v_{1+}\rangle - \frac{\sqrt{2}R}{\Delta} |v_{1-}\rangle + \frac{\sqrt{1/2}S^*}{\Delta} |v_{2-}\rangle
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

com R , S e T dados por (17), (18) e (19) e

$$\begin{aligned}
 \alpha_0 &= \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{R}{E} \right) \right]^{1/2} \\
 b_0 &= \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{R}{E} \right) \right]^{1/2}
 \end{aligned}
 \tag{22.a}$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_{1+} &= \frac{b_0}{\Delta} \left[-\frac{|S|^2}{\sqrt{2}(R+E)} - \sqrt{2}R + \frac{\sqrt{2}|T|^2}{R+E} \right] \\
 \beta_{1+} &= \frac{b_0}{\Delta} \left[-\frac{3ST^*}{\sqrt{2}(R+E)} + \sqrt{3/2} S^* \right]
 \end{aligned}
 \tag{22.b}$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_{2+} &= \frac{\alpha_0}{\Delta} \left[-\frac{|S|^2}{\sqrt{2}(R-E)} - \sqrt{2}R + \frac{\sqrt{2}|T|^2}{R-E} \right] \\
 \beta_{2+} &= \frac{\alpha_0}{\Delta} \left[-\frac{3ST^*}{\sqrt{2}(R-E)} + \sqrt{3/2} S^* \right]
 \end{aligned}$$

$$\gamma_{2-} = \beta_{2+}^* \quad \beta_{2-} = -\gamma_{2+} \quad \gamma_{1-} = \beta_{1+}^* \quad \beta_{1-} = -\gamma_{1+}$$

No caso particular onde $S = T = 0$ as autofunções são, para $E=R$:

$$\begin{aligned} \varphi_{1\pm} &= |v_{1\pm}\rangle \mp \frac{\sqrt{2}R}{\Delta} |v_{3\pm}\rangle && \text{buracos pesados} \\ \varphi_{2\pm} &= |v_{2\pm}\rangle && \text{buracos leves} \\ \varphi_{3\pm} &= |v_{3\pm}\rangle \pm \frac{\sqrt{2}R}{\Delta} |v_{1\pm}\rangle \end{aligned} \quad (23)$$

e, para $E=-R$:

$$\begin{aligned} \varphi_{1\pm} &= |v_{2\pm}\rangle \\ \varphi_{2\pm} &= |v_{1\pm}\rangle \mp \frac{\sqrt{2}R}{\Delta} |v_{3\pm}\rangle \\ \varphi_{3\pm} &= |v_{3\pm}\rangle \pm \frac{\sqrt{2}R}{\Delta} |v_{1\pm}\rangle \end{aligned} \quad (24)$$

Notamos que há uma troca das funções de onda associada às bandas 1 e 2.

2.a) Caso onde $\vec{k} \neq 0$, sem tensão aplicada ($\vec{X} = 0$)

A hamiltoniana é dada pela equação (14) com:

$$\begin{aligned} A &= A & B &= B & D &= D \\ \alpha_{xx} &= k_x^2 & \alpha_{xy} &= k_x k_y & \text{tr}(\vec{\alpha}) &= k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 \end{aligned}$$

Utilizando (17), (18) e (19), obtemos:

$$\begin{aligned} S &= -D(k_x k_z - i k_y k_z) \\ R &= \frac{B}{2} (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) \\ T &= -\sqrt{3/2} B(k_x^2 - k_y^2) + i D k_x k_y \end{aligned}$$

Substituindo R, S e T em (20), resulta:

$$E_1 = \frac{AK^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_{xy}^2k_y^2 + k_{xz}^2k_z^2 + k_{yz}^2k_z^2)]^{1/2}}{2} \quad (25)$$

$$E_3 = -A + AK^2$$

como obtido por Dresselhaus, Kip e Kittel⁴.

2.b) Caso onde é aplicada uma tensão ($\vec{\mathbf{X}} \neq 0$) e $\vec{\mathbf{k}} = 0$

Neste caso, a hamiltoniana \tilde{e} é dada pela equação (14) com:

$$A = -a \quad B = b \quad \mathcal{D} = d$$

$a_{xy} = \epsilon_{xy}$, analogamente para as outras componentes do tensor.

Pela Lei de Hooke, para pequenas deformações podemos escrever as componentes do tensor de deformações em termos do tensor de tensões como:

$$\tilde{\epsilon} = \tilde{S} \tilde{X} \quad (26)$$

onde \tilde{S} é o tensor das constantes elásticas e

$$\tilde{X} = \begin{pmatrix} X_{xx} & X_{xy} & X_{xz} \\ X_{yx} & X_{yy} & X_{yz} \\ X_{zx} & X_{zy} & X_{zz} \end{pmatrix}$$

Desde que $\tilde{\epsilon}$ e \tilde{X} são tensores simétricos, tomando o tensor \tilde{S} para cristais cúbicos⁵ podemos escrever a relação (26) numa forma matricial:

$$\{\epsilon\} = \{S\} \{X\} \quad (27.a)$$

onde:

$$\{\epsilon\} = \begin{Bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} \end{Bmatrix} \quad \{S\} = \begin{Bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{Bmatrix} \quad \{X\} = \begin{Bmatrix} X_{xx} \\ X_{yy} \\ X_{zz} \\ X_{yz} \\ X_{zx} \\ X_{xy} \end{Bmatrix} \quad (27.b)$$

Na notação usada para tensão, ou seja, força por unidade de área, a primeira letra do índice corresponde à direção da força e a segunda, à direção normal ao plano em que a força atua.

2.b.1) Tensão uniaxial na direção (001)

Neste caso temos somente a componente $X_{zz} \equiv X$ diferente de zero, com a convenção: X positivo para tensão e X negativo para compressão. De (27), obtemos:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} = S_{12} X \\ \epsilon_{zz} &= S_{11} X \\ \epsilon_{xy} &= \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0 \\ \text{tr}(\tilde{\epsilon}) &= (S_{11} + 2 S_{12})X \end{aligned} \quad (28)$$

Utilizando (17), (18) e (19), obtemos:

$$S = T = 0 \quad (29)$$

$$R = b(S_{11} - S_{12})X \quad (30)$$

Substituindo (29) e (30) em (20), obtemos:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \delta_H X - \frac{1}{2} \delta_{u_{001}} X \quad \text{buracos pesados} \\
 E_2 &= \delta_H X + \frac{1}{2} \delta_{u_{001}} X \quad \text{buracos leves} \quad (31) \\
 E_3 &= -\Delta + \delta_H X
 \end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned}
 \delta_H &\equiv -a(S_{11} + 2 S_{12}) \\
 \delta_{u_{001}} &\equiv -2b(S_{11} - S_{12})
 \end{aligned} \quad (32)$$

com δ_H e $\delta_{u_{001}}$ definidos positivos.

A degenerescência do ponto $\Gamma(\vec{k}=0)$ da banda de valência é levantada e a largura da banda proibida aumenta, com pressão, ou diminui, com tensão, de acordo com resultados já publicados^{12,2,7}.

Substituindo (29), (30) e (32) em (23), obtemos as funções de onda para compressão ($X < 0$):

$$\begin{aligned}
 \psi_{1\pm} &= |v_{1\pm}\rangle \pm \frac{\delta_{u_{001}} X}{\sqrt{2} \Delta} |v_{3\pm}\rangle \quad \text{buracos pesados} \\
 \psi_{2\pm} &= |v_{2\pm}\rangle \quad \text{buracos leves} \quad (33.a) \\
 \psi_{3\pm} &= |v_{3\pm}\rangle \mp \frac{\delta_{u_{001}} X}{\sqrt{2} \Delta} |v_{1\pm}\rangle
 \end{aligned}$$

e, para uma tensão ($X > 0$), obtemos de (24):

$$\begin{aligned}
 \psi_{1\pm} &= |v_{2\pm}\rangle \quad \text{buracos pesados} \\
 \psi_{2\pm} &= |v_{1\pm}\rangle \pm \frac{\delta_{u_{001}} X}{\sqrt{2} \Delta} |v_{3\pm}\rangle \quad \text{buracos leves} \quad (33.b) \\
 \psi_{3\pm} &= |v_{3\pm}\rangle \mp \frac{\delta_{u_{001}} X}{\sqrt{2} \Delta} |v_{1\pm}\rangle
 \end{aligned}$$

2.b.2) Tensão uniaxial na direção (111)

Neste caso, obtemos:

$$\begin{aligned}\epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = (S_{11} + 2 S_{12}) \frac{X}{3} \\ \epsilon_{xy} &= \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = \frac{1}{2} S_{44} \frac{X}{3} \\ \text{tr}(\tilde{\epsilon}) &= (S_{11} + 2 S_{12}) X\end{aligned}\quad (34)$$

Utilizando (17), (18) e (19), obtemos:

$$\begin{aligned}R &= 0 \\ S &= d(i-1) \frac{1}{2} S_{44} \frac{X}{3} = -\frac{(i-1)}{2\sqrt{3}} \delta_{u_{111}} X \\ T &= id \frac{1}{2} S_{44} \frac{X}{3} = -\frac{i}{2\sqrt{3}} \delta_{u_{111}} X \\ E &\equiv \frac{1}{2} \delta_{u_{111}} |X|\end{aligned}\quad (35)$$

Substituindo (34) e (35) em (20), resulta:

$$\begin{aligned}E_1 &= \delta_H X - \frac{1}{2} \delta_{u_{111}} X && \text{buracos pesados} \\ E_2 &= \delta_H X + \frac{1}{2} \delta_{u_{111}} X && \text{buracos leves} \\ E_3 &= -\Delta + \delta_H X\end{aligned}\quad (36)$$

onde:

$$\begin{aligned}\delta_H &\equiv -a(S_{11} + 2 S_{12}) \\ \delta_{u_{001}} &\equiv -\frac{d}{\sqrt{3}} S_{44}\end{aligned}\quad (37)$$

com δ_H e $\delta_{u_{111}}$ definidos positivos.

Os resultados de (36) também estão de acordo com os de Poljak e Cardona², I.N. Bandeira^{1,2} e F. Cerdeira⁷.

As funções de onda no caso de compressão uniaxial na direção (111) ($X < 0$), são obtidas a partir de (21) :

$$\begin{aligned}
 \varphi_{1+} &= -\frac{(1-i)}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1+}\rangle - \frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle + \frac{(1+i)}{2} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{3-}\rangle \\
 \varphi_{1-} &= \frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1-}\rangle + \frac{(1+i)}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle + \frac{(1-i)}{2} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{3+}\rangle \\
 \varphi_{2+} &= \frac{(1-i)}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1+}\rangle + \frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2-}\rangle \\
 \varphi_{2-} &= -\frac{i}{\sqrt{6}} |v_{2+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |v_{1-}\rangle - \frac{(1+i)}{6} |v_{2-}\rangle \\
 \varphi_{3+} &= |v_{3+}\rangle + \frac{(1-i)}{2\sqrt{6}} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{2+}\rangle - \frac{(1+i)}{2\sqrt{2}} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{1-}\rangle - \frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{2-}\rangle \\
 \varphi_{3-} &= |v_{3-}\rangle - \frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{2+}\rangle - \frac{(1-i)}{2\sqrt{2}} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{1+}\rangle + \frac{(1+i)}{2\sqrt{6}} \frac{\delta_{u_{111}}^X}{\Delta} |v_{2-}\rangle
 \end{aligned}
 \tag{38}$$

No caso de uma tensão ($X > 0$) na direção (111) também haverá uma troca de funções de onda, de modo que as funções de onda associadas à banda 1 para tensão passarão a ser $\varphi_{2\pm}$ e, para a banda 2, $\varphi_{1\pm}$, com $\varphi_{2\pm}$ e $\varphi_{1\pm}$ dadas em (38). As funções da banda 3 permanecem inalteradas.

2.b.3) Tensão de cisalhamento na direção (010) aplicada ao plano (001)

Temos, na nossa notação, apenas a componente X_{yx} do tensor de tensões. Utilizando (27), obtemos:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = 0$$

$$\epsilon_{yz} = \frac{S_{44}X}{2} \quad \epsilon_{zx} = \epsilon_{xy} = 0 \quad (39)$$

$$\text{tr}(\tilde{\epsilon}) = 0$$

Temos, então:.,

$$R = T = 0$$

$$S = -\frac{i\sqrt{3}}{2} \delta_{u_{111}} X \quad (40)$$

Obtemos, então, os autovalores:

$$E_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} \delta_{u_{111}} X$$

$$E_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} \delta_{u_{111}} X \quad (41)$$

$$E_3 = -A$$

Nesta caso, não há deslocamento do centro de gravidade das bandas de valência.

As autofunções são:

$$g_{1+} = \frac{1}{\sqrt{2}} [-i |v_{2+}\rangle + |v_{1+}\rangle] - \frac{\sqrt{3}}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3+}\rangle + \frac{3i}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3-}\rangle$$

$$g_{1-} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|v_{1-}\rangle - i |v_{2-}\rangle] - \frac{3i}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3+}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3-}\rangle$$

$$g_{2+} = \frac{1}{\sqrt{2}} [i |v_{2+}\rangle + |v_{1+}\rangle] + \frac{\sqrt{3}}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3+}\rangle + \frac{3i}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3-}\rangle \quad (42)$$

$$g_{2-} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|v_{1-}\rangle + i |v_{2-}\rangle] - \frac{3i}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3+}\rangle - \frac{\sqrt{3}}{4\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{3-}\rangle$$

$$g_{3+} = |v_{3+}\rangle - \frac{3i}{2\sqrt{2}\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{2+}\rangle - \frac{3i}{2\sqrt{2}\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{1-}\rangle$$

E _G (ev)	Δ (ev)	A		B	ICI	S ₁₁ (10 ⁻³ /Kbar)	S ₁₂ (10 ⁻³ /Kbar)	S ₄₄ (10 ⁻³ /Kbar)	a (ev)	b (ev)	d (ev)	δ _{u001} (10 ⁻³ ev/Kbar)	δ _{u111} (10 ⁻³ ev/Kbar)	δ _H (10 ⁻³ ev/Kbar)
		EM UNIDADE ħ ² / 2m												
1.43	0.33	-6.77	-4.55	6.12	1.176	-0.365	1.684	-9.0	-2.0	-6.0	6.2	5.8	4.0	
(12)	(13)	(14)			(15)					(2)				

Tabela 1 - Alguns parâmetros do GaAs a temperatura ambiente^{2,12-15}.

$$|v_{3-}\rangle = |v_{3-}\rangle + \frac{3i}{2\sqrt{2}\Delta} \delta_{u_{111}} X |v_{1+}\rangle + \frac{3i}{2\sqrt{2}} \delta_{u_{111}} X |v_{2-}\rangle$$

Na Tabela 1 temos os valores dos parâmetros envolvidos na perturbação \vec{k}, \vec{p} e na hamiltoniana de tensões para o GaAs^{2,13-16}.

3. PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO

3.a) Elementos de Matriz

Consideremos um laser como o da Fig. 2-a. O modo do laser é TE quando o campo elétrico é paralelo à junção e é TM quando o campo elétrico está na direção normal ao plano da junção.

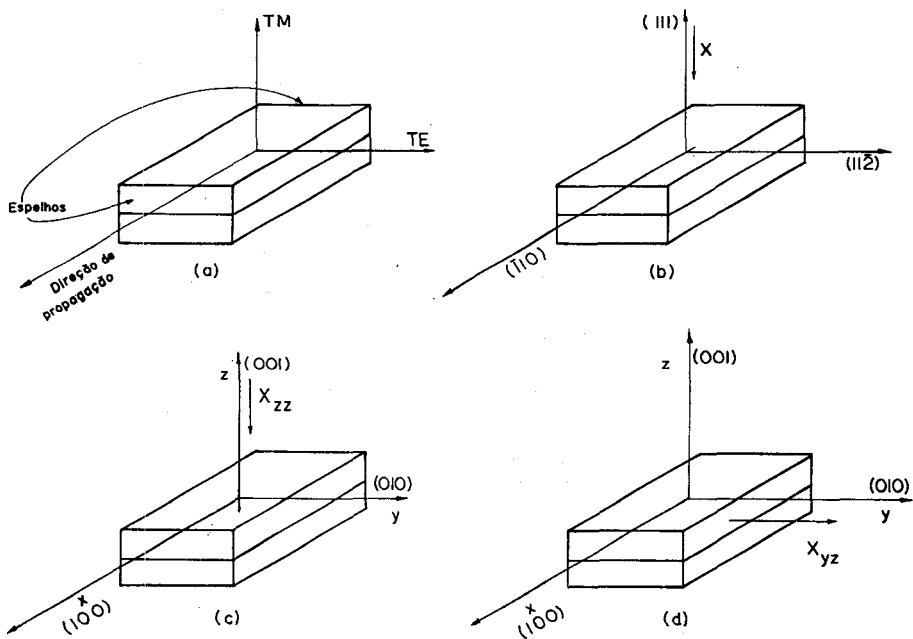


Fig. 2 - a) Modos TE e TM num laser semiconductor. O plano horizontal é o plano da junção. b) Laser de GaAs submetido a uma pressão uniaxial (111). O plano de junção é (111). c) Laser de GaAs submetido a uma pressão uniaxial (001). O plano da junção é (001). d) Laser de GaAs submetido a uma tensão de cisalhamento. O plano da junção é (001).

O elemento de matriz para transição entre um estado I e um estado J, com o campo elétrico polarizado na direção \vec{e}_ϕ é dado por:

$$M_{IJ}^\phi = \langle I | \vec{e}_\phi \cdot \vec{p} | J \rangle \quad (43)$$

onde \vec{p} é o operador momento.

Desprezando mistura entre estados $|S\rangle$ na banda de condução e os estados da banda de valência, o elemento de matriz para transição de um estado $|S\rangle$ da banda de condução para um estado $\psi_{i\pm}$ da banda de valência perturbada, para o modo TE será dado por:

$$M_{C\uparrow\downarrow, \psi_{i\pm}}^{\text{TE}} = \langle S\uparrow\downarrow | \vec{e}_{\text{TE}} \cdot \vec{p} | \psi_{i\pm} \rangle \quad (44)$$

e, para o modo TM por:

$$M_{C\uparrow\downarrow, \psi_{i\pm}}^{\text{TM}} = \langle S\uparrow\downarrow | \vec{e}_{\text{TM}} \cdot \vec{p} | \psi_{i\pm} \rangle \quad (45)$$

Desde que as funções $\psi_{i\pm}$ são combinações lineares de $|v_{i+}\rangle$, vamos calcular os elementos de matriz entre a banda de condução e as bandas não perturbadas $|v_{i\pm}\rangle$ ($i=1,2,3$) definidas em (15) (para $\vec{k} = 0$ e $\vec{k} = 0$), para as três direções possíveis do campo elétrico \vec{e}_x , \vec{e}_y e \vec{e}_z , onde x , y e z correspondem às direções cristalográficas (100), (010) e (001), respectivamente.

Devido a considerações de simetria¹⁷, os únicos elementos de matriz diferentes de zero são:

$$\langle S | p_x | X \rangle = \langle S | p_y | Y \rangle = \langle S | p_z | Z \rangle = \frac{\hbar m}{\hbar} P \quad (46)$$

onde P é definido por Kane⁵.

Obtivemos assim os elementos de matriz normalizados $M_{C\uparrow\downarrow, v_{i\pm}}$ apresentados na Tabela 2.

Para, no caso de uma tensão qualquer, calcular os elementos de matriz da banda de condução para qualquer função ψ_{i+} da banda de valência, basta utilizar a Tabela 2, como exemplificamos a seguir.

	P _x	P _y	P _z
$m_{c\uparrow, v_{1+}}$	0	0	$\frac{2}{\sqrt{6}}$
$m_{c\downarrow, v_{1+}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	0
$m_{c\uparrow, v_{1-}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	0
$m_{c\downarrow, v_{1-}}$	0	0	$\frac{2}{\sqrt{6}}$
$m_{c\uparrow, v_{2+}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
$m_{c\downarrow, v_{2+}}$	0	0	0
$m_{c\uparrow, v_{2-}}$	0	0	0
$m_{c\downarrow, v_{2-}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
$m_{c\uparrow, v_{3+}}$	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$
$m_{c\downarrow, v_{3+}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0
$m_{c\uparrow, v_{3-}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0
$m_{c\downarrow, v_{3-}}$	0	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$

Tabela 2 - Elementos de matriz normalizados $m_{\sigma\uparrow\downarrow, v_{i\pm}} = \frac{1}{i \frac{m}{\hbar} P} \langle \sigma\uparrow\downarrow | p_x \begin{matrix} p_y \\ p_z \end{matrix} | v_{i\pm} \rangle$;

\vec{p} é o operador momento e é definido por Kane⁵; $|v_{i\pm}\rangle$ são funções de onda da Hamiltoniana não perturbada, definidas pelas relações (15).

3.a.1) Tensão uniaxial na direção (111) em $\vec{k} = 0$

Neste caso, o plano de junção do laser é (111), como mostra a Fig. 2.b. Desse modo, a pressão (ou tensão) é aplicada na direção (111) do cristal, que é a direção do campo elétrico do modo TM. Então temos $\vec{e}_{TM} = (1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3})$; os espelhos do laser coincidem com o plano $(\bar{1}, 1, 0)$ e, para o modo TE, o campo elétrico é paralelo à direção $(1, 1, \bar{2})$, ou seja, $\vec{e}_{TE} = (1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6}, -2/\sqrt{6})$.

Os elementos de matriz para o modo TE serão dados por:

$$M_{C\uparrow\downarrow, \sigma_{i\pm}}^{TE} = \frac{1}{\sqrt{6}} \langle S\uparrow\downarrow | p_x + p_y - 2p_z | \sigma_{i\pm} \rangle \quad (47)$$

e, para o modo TM, por:

$$M_{C\uparrow\downarrow, \sigma_{i\pm}}^{TM} = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle S\uparrow\downarrow | p_x + p_y + p_z | \sigma_{i\pm} \rangle \quad (48)$$

	PRESSÃO (X < 0)		TENSÃO (X > 0)	
	TE	TM	TE	TM
$M_C \uparrow, \Phi_{1+}$	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
$M_C \uparrow, \Phi_{1+}$	$-\frac{(1+i)}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$-\frac{(1+i)}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$	0	0
$M_C \uparrow, \Phi_{1-}$	$\frac{(1-i)}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{(1-i)}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$	0	0
$M_C \downarrow, \Phi_{1-}$	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
$M_C \downarrow, \Phi_{2+}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$
$M_C \downarrow, \Phi_{2+}$	0	0	$-\frac{1+i}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$-\frac{1+i}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$
$M_C \downarrow, \Phi_{2-}$	0	0	$\frac{1-i}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{1-i}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$
$M_C \downarrow, \Phi_{2-}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1+\frac{\delta_1}{2})$
$M_C \downarrow, \Phi_{3+}$	$\frac{2}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1}{3}(1-\delta_1)$	$\frac{2}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1}{3}(1-\delta_1)$
$M_C \downarrow, \Phi_{3+}$	$-\frac{1+i}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1+i}{3}(1-\delta_1)$	$-\frac{1+i}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1+i}{3}(1-\delta_1)$
$M_C \downarrow, \Phi_{3-}$	$-\frac{1-i}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1-i}{3}(1-\delta_1)$	$-\frac{1-i}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$-\frac{1-i}{3}(1-\delta_1)$
$M_C \downarrow, \Phi_{3-}$	$-\frac{2}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$\frac{1}{3}(1-\delta_1)$	$-\frac{2}{3\sqrt{2}}(1+\frac{\delta_1}{2})$	$\frac{1}{3}(1-\delta_1)$

Tabela 3 - Elementos de matriz normalizados $m_{\sigma\tau\mu\nu} = \frac{1}{\sigma_{cr}^2} \langle \sigma_{cr} \rangle \langle \tau \rangle \langle \mu \rangle \langle \nu \rangle$

para as duas polarizações TE e TM, no caso de uma tensão ou pressão na direção (111), em $X=0$. A junção do laser está no plano (111) como mostra a figura 2-b. $\delta_1 = -\delta_{411} \frac{X}{a}$.

Conhecendo as autofunções perturbadas pela pressão uniaxial na direção (111) dadas em (38), calculamos os elementos de matriz normalizado $M_{C^{\uparrow\downarrow}, \varphi_{i\pm}}^m = \left(\frac{im}{\hbar} P\right)^{-1} M_{C^{\uparrow\downarrow}, \varphi_{i\pm}^P}$ para pressão e tensão, que estão na Tabela 3.

3.a.2) Tensão uniaxial na direção (001)

Vamos considerar um laser como o da Fig. 2.c. O plano da junção é (001) e a tensão uniaxial X_{zz} , indicada na figura, está na direção (001). Dessa forma, o campo elétrico do modo TE coincide com a direção (010) e o do modo TM, com a direção (001). Temos, então:

$$M_{C^{\uparrow\downarrow}, \varphi_{i\pm}}^{\text{TE}} = \langle S_{\uparrow\downarrow} | P_y | \varphi_{i\pm} \rangle \quad (49)$$

$$M_{C^{\uparrow\downarrow}, \varphi_{i\pm}}^{\text{TM}} = \langle S_{\uparrow\downarrow} | P_z | \varphi_{i\pm} \rangle \quad (50)$$

Utilizando $\varphi_{i\pm}$ dadas por (33.a) e (33.b) para pressão e tensão uniaxial obtivemos os elementos de matriz que foram utilizados para o cálculo das probabilidades de transição da Tabela 4.

3.a.3) Tensão de cisalhamento na direção (010) aplicada ao plano (001)

Na Fig. 2.d temos indicada a tensão X_{yz} na direção (010) aplicada ao plano (001) da junção do laser. Como no caso de tensão uniaxial na direção (001), o campo elétrico do modo TE está na direção (010) e do modo TM na direção (001). Portanto, os elementos de matriz são dados por (49) e (50), onde as funções $\varphi_{i\pm}$ são dadas por (42).

3.b) Probabilidade de Transição

A probabilidade de transição T_{IJ}^ϕ de um estado I para um estado J de energia mais baixa, com o campo elétrico na direção \vec{e}_λ^+ é proporcional¹⁸ ao quadrado do módulo do elemento de matriz $|M_{IJ}^\phi|$. Como para os três casos de tensão que consideramos conservamos ainda a degenerescência de spin, temos a probabilidade de transição total da banda de condução para uma banda φ_i da banda de valência, proporcional a:

	X (111)		X (001)		TENSÃO DE CISALHAMENTO X_{yz}
	PRESSÃO (X<0)	TENSÃO (X>0)	PRESSÃO (X<0)	TENSÃO (X>0)	
TE $\phi_{11}, \phi_{1\pm}$	$\frac{1}{3}(1-2\delta_1)$	1	$\frac{1}{3}(1-2\delta_0)$	0	$\frac{2}{3}(1-\frac{\sqrt{3}}{2}\delta_1)$
TE $\phi_{11}, \phi_{2\pm}$	1	$\frac{1}{3}(1-2\delta_1)$	1	$\frac{1}{3}(1-2\delta_0)$	$\frac{2}{3}(1+\frac{\sqrt{3}}{2}\delta_1)$
TE $\phi_{c1}, \phi_{3\pm}$	$\frac{2}{3}(1+\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1+\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1+\delta_0)$	$\frac{2}{3}(1+\delta_0)$	$\frac{2}{3}$
TM $\phi_{c1}, \phi_{1\pm}$	$\frac{4}{3}(1+\delta_1)$	0	$\frac{4}{3}(1+\delta_0)$	0	$\frac{2}{3}(1-\frac{\sqrt{3}}{2}\delta_1)$
TM $\phi_{c1}, \phi_{2\pm}$	0	$\frac{4}{3}(1+\delta_1)$	0	$\frac{4}{3}(1+\delta_0)$	$\frac{2}{3}(1+\frac{\sqrt{3}}{2}\delta_1)$
TM $\phi_{c1}, \phi_{3\pm}$	$\frac{2}{3}(1-2\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1-2\delta_1)$	$\frac{2}{3}(1-2\delta_0)$	$\frac{2}{3}(1-2\delta_0)$	$\frac{2}{3}$

Tabela 4 - Probabilidades de transição, em $\vec{k}=0$, para duas polarizações TE e TM, no caso de uma tensão ou pressão nas direções (001) e (111) e de uma tensão de cisalhamento; $\delta_1 = -\delta_{x11} \frac{x}{a}$; $\delta_0 = -\delta_{x001} \frac{x}{a}$. As expressões apresentadas são proporcionais às probabilidades de transição.

$$T_{C^{++}, \theta_{i\pm}}^{\phi} \propto |\langle S^{++} | \vec{e}_{\phi} \cdot \vec{p} | \theta_{i+} \rangle|^2 + |\langle S^{++} | \vec{e}_{\phi} \cdot \vec{p} | \theta_{i-} \rangle|^2 + \\ + |\langle S^{++} | \vec{e}_{\phi} \cdot \vec{p} | \theta_{i+} \rangle|^2 + |\langle S^{++} | \vec{e}_{\phi} \cdot \vec{p} | \theta_{i-} \rangle|^2 \quad (51)$$

Portanto, desprezando os termos em $(6 \mu_{111} X/\Delta)^2$ ou $(\delta_{u001} X/\Delta)^2$, temos as probabilidades de transição para pressão ou tensão uniaxial na direção (001) e na direção (111) e também para tensão de cisalhamento na direção (010) aplicada ao plano (001) para as duas polarizações do campo elétrico, TE e TM, que estão na Tabela 4, para $\vec{k}=0$.

Com os resultados teóricos da Tabela 4, podemos prever o comportamento da emissão espontânea de um laser quando se aplica pressão ou tensão uniaxial nas direções (001) e (111). Na Fig.3 mostramos a modificação com pressão e com tensão do diagrama de bandas de energia do GaAs, próximo de $\vec{k}=0$. As recombinações radiativas ocorrerão entre a banda de condução e as bandas 1 e 2. Em $\vec{k}=0$, a emissão TM será suportada somente pela banda 2, no caso de uma tensão, e pela banda 1, no caso de uma compressão, segundo os resultados da Tabela 4.

Desprezando as contribuições correspondentes a $\vec{k} \neq 0$, a energia da emissão espontânea TM será:

$$h\nu_{TM} = E_g - (\delta_H - \frac{1}{2} \delta_{u001}^{111})X \quad (52)$$

$$h\nu_{TM} = E_g - 1,1 X \quad \text{para tensão na direção (111)}$$

onde X é o valor da tensão ($X > 0$) ou da compressão ($X < 0$) expresso em Kbar e $h\nu$ em meV. Em primeira aproximação, podemos concluir a partir da Tabela 4 que a energia da emissão TE será:

$$h\nu_{TE} = E_g - (\delta_H + \frac{1}{2} \delta_{u001}^{111})X$$

$$h\nu_{TE} = E_g - 6,9 X \quad \text{para tensão na direção (111)}$$

A diferença $h\nu_{TM} - h\nu_{TE}$ será aproximadamente igual a $6 \mu_{001}^{111} X$

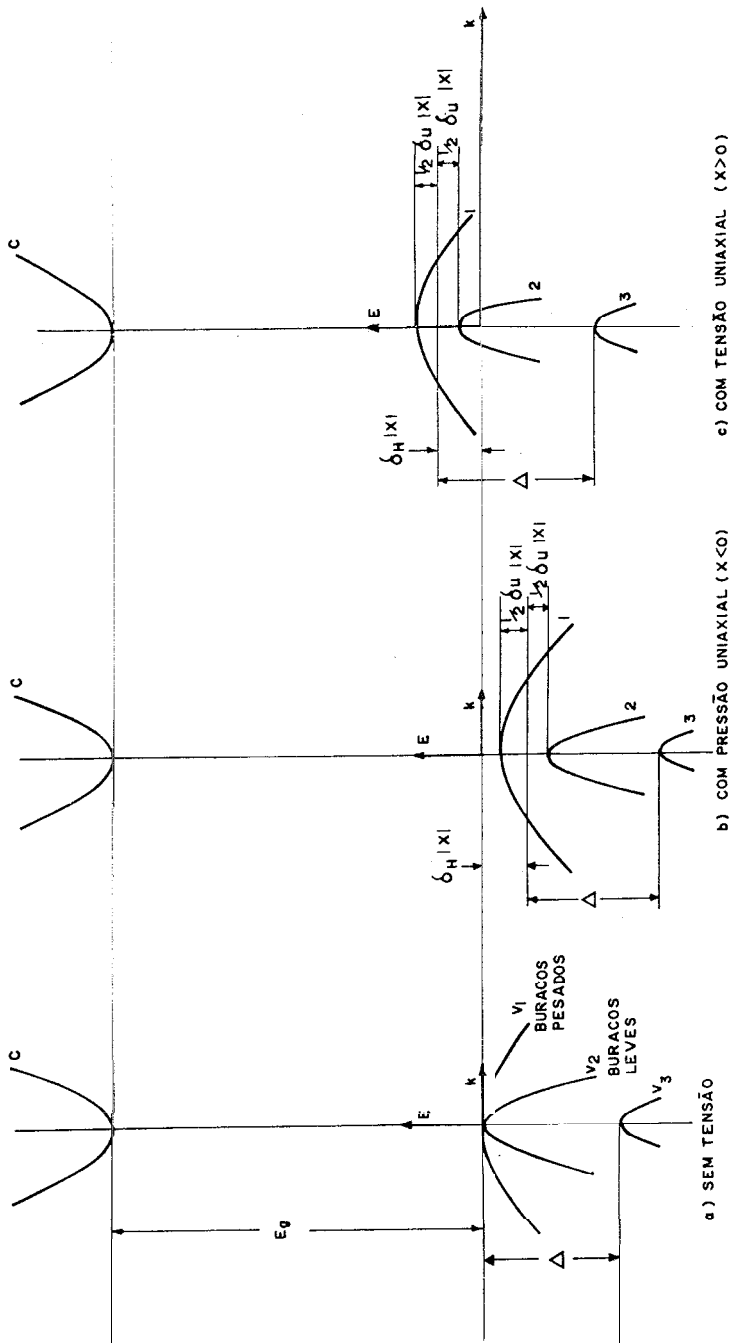


Fig. 3 - Diagrama de bandas de energia do GaAs submetido a uma tensão uniaxial X na direção (001) ou (111). E_0 é a largura da banda proibida; Δ é a separação entre as bandas v_1 , v_2 e a banda v_3 devido à interação spin-órbita.

Devido à contribuição da banda 2, no caso de uma tensão, ou da banda 1, no caso de uma compressão, a variação de $h\nu_{TE}$ deverá ser mais lenta que (53), tanto para tensão como para compressão.

Na Fig. 4 temos representada a variação de $h\nu_{TE}$ e $h\nu_{TM}$ com a tensão, de acordo com as relações (52) e (53), para facilitar a comparação com os resultados experimentais.

Esta análise prevê $h\nu_{TM} > h\nu_{TE}$ no caso de tensão uniaxial e $h\nu_{TM} < h\nu_{TE}$ no caso de pressão uniaxial. No caso de uma tensão de cisalhamento, não há variação da banda proibida, como era de se esperar, porque o traço do tensor de deformação é nulo. Também os modos TE e TM serão, em primeira aproximação, suportados igualmente pelas duas bandas, 1 e 2, como podemos ver na Tabela 4.

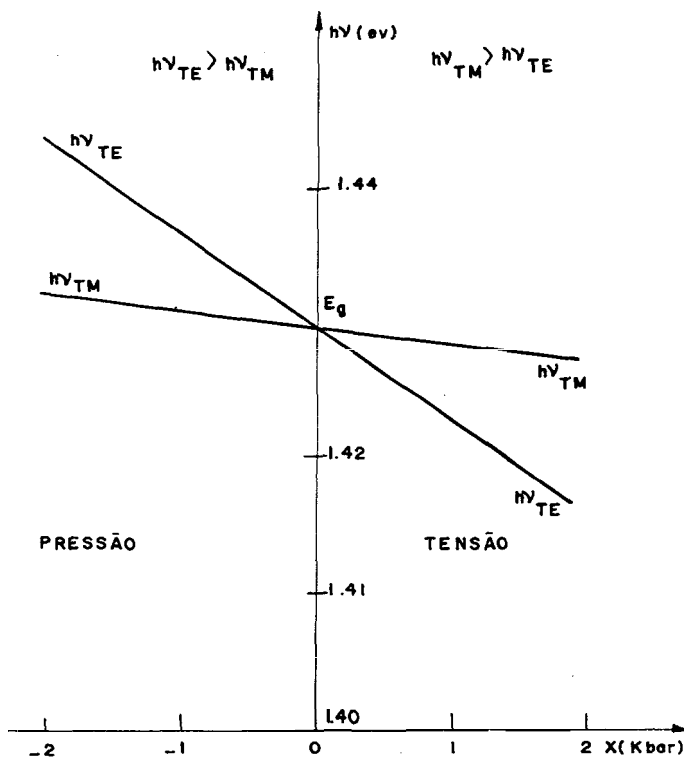


Fig.4 - Energia da emissão espontânea TE e TH em função da tensão uniaxial X na direção (111) segundo as relações (52) e (53). Foram desprezadas as contribuições correspondentes a $\bar{\epsilon}_{40}$.

4. RESULTADOS EXPERIMENTAIS

4.a) Pressão uniaxial na direção (111)

Aplicamos uma pressão uniaxial (111) em lasers de GaAs cujo plano de junção era (111), usando o dispositivo experimental descrito em trabalhos anteriores^{20,21,22}.

Na Fig.5 apresentamos os resultados típicos da variação do comprimento de onda λ dos máximos da emissão espontânea TE e TM em função da pressão para lasers de GaAs de homoestrutura. Na Tabela 5 temos os valores experimentais de $d(h\nu)/d|X|$ para as polarizações TE e TM.

Podemos notar um acordo qualitativo entre os resultados experimentais e as previsões da Fig.4. Também podemos ver que $h\nu_{TE} < h\nu_{TM}$ quando a pressão aplicada externamente é zero. Isto indica a existência de uma tensão uniaxial interna ($X > 0$) na região ativa do laser.

	$\frac{d(h\nu)}{d X }$ (meV/K bar) TE	$\frac{d(h\nu)}{d X }$ (meV/K bar) TM
L - 133- A	5,2	3,5
L - 137- C	5,8	4,0

Tabela 5 - Variação do pico de emissão espontânea TE e TM com pressão uniaxial na direção (111) para os lasers da figura 5.

4.b) Tensão de cisalhamento na direção (010) aplicada ao plano (001)

Consideremos o laser de heteroestrutura dupla da Fig.6. Com a finalidade de diminuir a corrente limiar, faz-se normalmente lasers com contato de faixa, reduzindo a área em que se injeta a corrente (em geral temos uma faixa de 13 μm).

Para fazer esse tipo de contato, podemos isolar a área fora da faixa central com SiO_2 ou fazer bombardeamento de prótons nessa área,

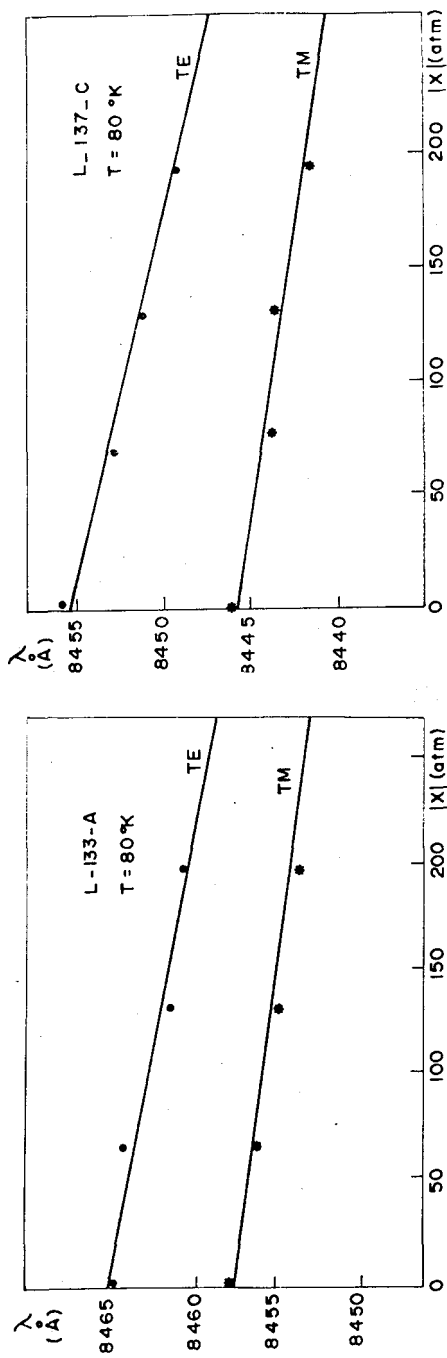


Fig. 5 - Variação do comprimento de onda do pico da emissão espontânea TE e TM com pressão uniaxial na direção (111) aplicada sobre lasers de homoestrutura de GaAs.

para torná-la isolante. No segundo caso, os íons se aprofundam até as proximidades da camada ativa (Fig. 6), aumentando o volume da região bombardeada²⁴. Isso pode provocar uma tensão tangencial ao plano da junção ($x-y$) na direção y , sujeitando a região ativa a uma tensão de cisalhamento X_{yz} na vizinhança região bombardeada. Essa tensão provoca um desdobramento das bandas 1 e 2 em $\vec{k}=0$, que ficam separadas de $\Delta E_{44} \approx 10 \text{ meV/Kbar}$.

Esse desdobramento da banda de valência foi observado experimentalmente²⁴ através de medidas de emissão espontânea resolvida espacialmente, observando-se dois picos separados de aproximadamente 30 meV provenientes da região ativa vizinha, a zona bombardeada. Esse desdobramento de 30 meV corresponderia a uma deformação de $2,4 \times 10^{-3}$ com uma tensão de cisalhamento de 3 Kbar. Observou-se também que os dois picos não apresentaram uma dependência com a polarização, resultando consistente com as previsões teóricas.

- 1 CONTATO
- 2 p⁺ Ga As (Ge) - 1,5 μm
- 3 p Ga_{0,7}Al_{0,3}As (Ge) - 1 μm
- 4 p Ga As (Ge) - 0,2 μm (Região Ativa)
- 5 n Ga_{0,7}Al_{0,3}As (Te) - 1,5 μm
- 6 n Ga As (Si) - 100 μm

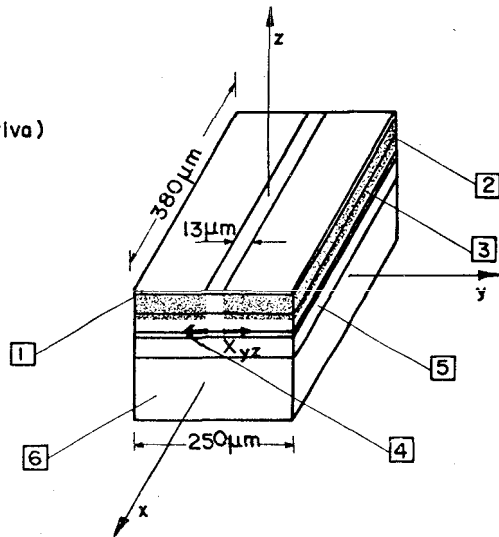


Fig. 6 - Laser de heteroestrutura dupla com contato de faixa por bombardeamento de prótons. A região bombardeada (pontilhada) induz²⁴ uma tensão de cisalhamento X_{yz} na região ativa, na vizinhança da região bombardeada.

5. CONCLUSÃO

Este cálculo das probabilidades de transição em semicondutores de estrutura tipo Zinc-Blende foi feito, assumindo bandas parabólicas, desprezando interação entre a banda de condução e as bandas de valência e assumindo recombinâncias banda a banda. Na realidade, as recombinâncias envolvem níveis aceitadores localizados perto da banda de valência. É provável que esses níveis sigam as bandas de valência quando é aplicada uma tensão, de maneira que as previsões teóricas concordem qualitativamente com os dados experimentais.

Calculamos por teoria de perturbação as funções de onda e as energias para as bandas de valência, para \vec{k} pequeno e uma tensão genérica pequena. Este cálculo engloba a aproximação $\vec{k} \cdot \vec{p}$ ^{4,5} e a aplicação de uma tensão no caso $\vec{k}=0$ ^{1,2,3,7}.

As funções de onda determinadas permitem também calcular as probabilidades de transição para \vec{k} dado, vizinho de zero, e uma pequena tensão. Casos particulares como tensão uniaxial e tensão de cisalhamento em $\vec{k}=0$ foram confrontados satisfatoriamente com resultados experimentais. O modelo permite também detectar tensões internas nos lasers de semicondutor e avaliar sua ordem de grandeza usando (52) e (53).

NOTAS E REFERÊNCIAS

1. G.E.Pikus, G.L.Bir - Sovietic Phys. Solide State, **1**, 1502 (1960).
2. F.H.Pollak, M.Cardona - Phys. Rev., **172**, 816 (1968).
3. W.H.Kleiner, L.M.Roth - Phys. Rev.Lett., **2**, 334 (1959).
4. G.Dresselhaus, A.F.Kip., C.Kittel - Phys.Rev., **98**, 368 (1955).
5. E.O.Kane - J.Phys.Chem.Solids, **1**, 249 (1957).
6. G.F.Koster, J.O.Dimmock, R.G.Wheeler, H.Statz, *Properties of Thirty Two Point Groups*, MIT Press, Cambridge Massachussets (1963).
7. F.Cerdeira, PhD Thesis - Brown University - cópia em microfilme: University Microfilms Ann Arbor. Michigan 48106 (1972) USA
8. G.Dresselhaus - Phys.Rev., **100**, 580 (1958).

9. J.F.Nye - *Physical Properties of Crystals*, Oxford University Press, London and New York, (1957).
10. L.D.Laude, F.H.Pollak, M.Cardona - *Phys.Rev.*, 3, B2623 (1971).
11. As funções X, Y e Z são definidas em termos das harmônicas esféricas Y_{10} , Y_{11} e $Y_{1,-1}$ como:
- $$Z = Y_{10} ; (X+iY)/\sqrt{2} = -Y_{11} ; (X-iY)/\sqrt{2} = Y_{1,-1}$$
12. I.N.Bandeira - Tese de Mestrado - Instituto de Física "Gleb Wataghin" Unicamp (não publicada)
13. M.B.Panish, H.C.Casey Jr., - *J.Appl.Phys.*, 40, 63 (1969).
14. O.Madelung - *Physics of III-V Compounds*, John Wiley E Sons.
15. I.Baslev - *Phys. Rev.* 177, 1173 (1969).
16. C.W.Garland, K.C.Park - *J.Appl.Phys.*, 33, 759 (1962).
17. R.K.Willardson, A.C.Beer - *Semiconductor and Semimetals*, vol.1 Physics of III-Compounds - Cap.III-Academic Press (1966).
18. Na realidade temos¹⁹:

$$T_{IJ} = \frac{4 e^2 \hbar \nu \eta}{m^2 \hbar^2 c^3} |M_{I,J}|^2 \begin{cases} (N_\nu + 1) & \text{emissão} \\ N_\nu & \text{absorção} \end{cases}$$

com $M_{IJ} = \langle J | e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \vec{e} \cdot \vec{p} | I \rangle$, η é o índice de refração.

Fizemos nossos cálculos a menos das constantes $4e^2 \hbar \nu \eta (P \frac{m}{\hbar})^2 / m^2 \hbar^2 c^3$, onde P é a constante que aparece no elemento de matriz da equação (46) e desprezamos o termo $e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}$, ou seja \vec{k}_f do fóton.

19. C.H. Gooch - *Gallium Arsenide Lasers*, John Willey (1969).
20. J.E.Ripper, N.B.Patel, P.Brosson - *Appl.Phys.Lett.*, 21, 124, aug 15, (1972).
21. J.E.Ripper, N.B.Patel, P.Brosson - *Proc.11th Int.Conf.Phys. of Semiconductors*, Warsaw, Poland (1972).
22. N.B.Patel, J.E.Ripper, P.Brosson - *IEEE Journal of Quantum Electronics* OE-9 n? 2.
23. Na realidade deveríamos obter uma reta graficando ν (ou $\hbar \nu$) x X mas, como $\nu = c/\lambda$, $d\nu/d|\lambda| = -\frac{c}{\lambda^2} \frac{d\lambda}{d|\lambda|}$, podemos considerar $d\nu/d|\lambda|$ proporcional a $d\nu/d|\lambda|$ com c/λ^2 constante, já que a variação em λ é da ordem de alguns angstroms em torno de 8500 Å. Graficamos λ ao invés de $\hbar \nu$ porque o nosso espectrômetro fornece diretamente comprimento de onda.
24. P.Brosson, R.Tsu, J.E.Ripper - *Solid Stated Comm.*, 28, 635 (1978).