

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRANSMISSÃO EM BARREIRAS NÃO-ABRUPTAS DE  
 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

*Ricardo Renan Landim de carvalho*

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação  
em Física da Universidade Federal do Ceará  
como parte dos requisitos para a obtenção do  
grau de mestre em Física

ORIENTADOR:

Gil de Aquino Farias

Fortaleza, fevereiro de 1993

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

C327t Carvalho, Ricardo Renan Landim de.  
Transmissão em barreiras não-abruptas de GaAs/AlxGa1-xAs / Ricardo Renan Landim de Carvalho. – 1993.  
91 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1993.  
Orientação: Prof. Dr. Gil de Aquino Farias.

1. Tunelamento (Física). I. Título.

CDD 530

---

TRANSMISSÃO EM BARREIRAS NÃO-ABRUPTAS DE  
 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

*Ricardo Renan Landim de carvalho*

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação  
em Física da Universidade Federal do Ceará  
como parte dos requisitos para a obtenção do  
grau de mestre em Física

Comissão Julgadora:

^Gil de Aquino Farias(UFC)  
Orientador

---

José Alzamir Pereira da Costa(UFRN)

Antônio José da Costa Sampaio (UFC)

Aprovada em 15 de fevereiro de 1993

Aos meus pais, e ao  
meu irmão Pedro Sérgio

## AGRADECIMENTOS

Aos professores Gil de Aquino Farias, Valder Nogueira Freire e Margarida Moreira Auto pelo interesse e apoio para a realização deste trabalho.

Aos professores Lindberg Lima Gonçalves e Antônio José da Costa Sampaio enquanto coordenadores do curso de Pós-Graduação.

Ao professor Francisco Alcides Germano, pelo incentivo ao meu ingresso no curso de Pós-Graduação.

Aos demais professores que contribuíram para minha formação profissional.

Aos colegas Milton e José filho pelos dias de trabalhos realizados no nosso grupo.

Aos colegas do curso de Pós-Graduação pelos bons momentos que passamos.

A todos os funcionários pelos serviços prestados para realização deste trabalho.

## RESUMO

Neste trabalho estudamos o efeito da interface não-abrupta entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  no coeficiente de transmissão dos elétrons em barreiras simples e duplas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , usando os métodos dos elementos finitos e dos "multisteps". Analisamos também o efeito do operador energia cinética com massa efetiva variável no coeficiente de transmissão em barreiras simples de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Estudamos ainda o efeito das regiões de transição no tunelamento ressonante de barreiras duplas. Além disto propomos um método analítico para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas, e o aplicamos a uma heterojunção não-abrupta de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Os resultados de WKB são obtidos como uma aproximação deste método.

## ABSTRACT

In the present work we study the effect of non-abrupt interface of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As in the transmission coefficient of electrons through single and double barriers. Both methods of finite element and multisteps have been successfully applied. Under the transmission coefficient of electrons on single barrier of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, we also analyse the effect of the kinetic energy operator by considering the effective mass varying with the position. It is also studied the effect of transition regions on the resonant tunneling on double barriers. We propose an analytical method to obtain the transmission coefficient on non-abrupt barrier, applying to an interface of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. It is shown that WKB results correspond to an approximation of this method.

# ÍNDICE

INTRODUÇÃO .....	1
CAPÍTULO 1 - BANDAS DE ENERGIA, MASSA EFETIVA DOS ELÉTRONS E HETEROESTRUTURAS DE GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As .....	4
1.1 - Bandas de-Energia e Massa Efetiva dos Elétrons no GaAs e Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	5
1.2 - Heteroestruturas de GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	8
CAPÍTULO 2 - COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS SIMPLES NÃO-ABRUPTAS DE GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As .....	11
2.1 - Modelo do Potencial e da Massa Efetiva dos Elétrons para a Barreira Simples não-abrupta de GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	12
2.2 - Operador Hamiltoniano para a Barreira Simples não-abrupta de GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	14
2.3 - Métodos para Obtenção do Coeficiente de Transmissão em Barreiras	16



2.3.1	- Massa Efetiva Constante na Região de Transição entre o GaAs e o $Al_xGa_{1-x}As$	19
2.3.2	- Método dos "Multisteps"	29
2.3.3	- Método dos Elementos Finitos	32
2.4	- Resultados	40
CAPÍTULO 3	- COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS DUPLAS SIMÉTRICAS NÃO-ABRUPTAS DE GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ ...	43
3.1	- Tunelamento Ressonante em Barreiras Duplas	43
3.2	- Potencial e Massa Efetiva em Barreiras Duplas de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$	44
3.3	- Resultados	46
CAPÍTULO 4	- MÉTODO ANALÍTICO PARA O COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS NÃO-ABRUPTAS .....	51
4.1	- Desenvolvimento do Método	51
4.2	- Aplicação do Método a uma Heterojunção não-abrupta de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$	60
4.3	- Resultados	61
CONCLUSÕES	.....	62
LEGENDA DAS FIGURAS	.....	64
FIGURAS	.....	69
REFERÊNCIAS	.....	87

## INTRODUÇÃO

Com o advento das técnicas de crescimento de cristais, MBE, MOCVD ou MOMBE<sup>1,2</sup>, tornou-se possível construir estruturas com GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , como heterojunções, barreiras, poços quânticos ou super-redes. Desde então surgiu grande interesse no cálculo do coeficiente de transmissão dos elétrons em barreiras simples ou duplas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , tendo em vista sua aplicação na microeletrônica.

Os estudos realizados sobre o coeficiente de transmissão em barreiras de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , consideram abrupta a interface entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ <sup>3-11</sup>. Entretanto, usando microscopia de tunelamento e espectroscopia, O. Albrechtsen et al<sup>12</sup> mostraram que a interface entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não é abrupta. Usando luminescência, C.A. Warwick et al<sup>13</sup> verificaram que a interface não é perfeitamente lisa podendo se estender por alguns parâmetros de rede do GaAs.

O efeito de uma interface não-abrupta em heteroestruturas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  no coeficiente de transmissão, foram analisados por Valder Freire et al<sup>14</sup>.

Devido à inexistência de trabalhos sobre o efeito da região de transição no coeficiente de transmissão em barreiras simples ou duplas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , neste trabalho estudaremos este efeito considerando que a teoria da massa efetiva seja válida para cristais heterogêneos.

No primeiro Capítulo descreveremos as propriedades

do GaAs e do  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , necessárias para o cálculo do coeficiente de transmissão, e faremos uma revisão da literatura em heteroestruturas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  .

No segundo Capítulo, iremos propôr um modelo para o potencial e massa efetiva dos elétrons de uma barreira simples não-abrupta de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , discutiremos a forma da equação de Schroedinger quando a massa efetiva varia com a posição, e usaremos três métodos para a obtenção do coeficiente de transmissão em barreiras simples não-abruptas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  : o método de Valder Freire et al<sup>14</sup>, o método dos "multisteps"<sup>15</sup> e o método dos elementos finitos<sup>16</sup>, mostrando resultados numéricos e comparando-os com os resultados obtidos quando se considera a barreira de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  abrupta.

No terceiro Capítulo aplicaremos o modelo da barreira simples não-abrupta de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  a uma barreira dupla de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , obteremos o coeficiente de transmissão usando o método dos "multisteps"<sup>15</sup>, e discutiremos o efeito das regiões de transição no tunelamento ressonante e no coeficiente de transmissão para elétrons incidentes com energia maior que a altura da barreira.

Em virtude de usarmos métodos numéricos para a obtenção do coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , e o método analítico WKB ser uma aproximação<sup>17</sup>, desenvolveremos no quarto Capítulo um método analítico para o cálculo do coeficiente de transmissão em

barreiras não-abruptas e o aplicaremos a uma heterojunção não-abrupta de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , comparando os resultados alcançados com os resultados de uma heterojunção abrupta.

Finalizando este trabalho, faremos uma conclusão geral dos resultados obtidos sobre o coeficiente de transmissão em barreiras simples, barreiras duplas e em heterojunções não-abruptas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

## CAPÍTULO 1

### BANDAS DE ENERGIA, MASSA EFETIVA DOS ELÉTRONS E HETEROESTRUTURAS DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

O GaAs e o Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As são semicondutores formados por elementos dos grupos III-V da tabela periódica e possuem uma estrutura zincoblenda. Devido ao avanço das técnicas de crescimento de cristais, entre as quais podemos citar MBE, MOCVD e MOMBE<sup>1,2</sup>, é possível obter heteroestruturas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, como poços quânticos, barreiras quânticas simples ou duplas, super-redes ou múltiplos poços quânticos. Na primeira seção deste capítulo mostraremos como são dispostas as bandas de energia e a massa efetiva dos elétrons para estes dois semicondutores, visto que nosso problema está diretamente relacionado com estas propriedades. Limitaremos nosso estudo a uma dimensão, uma vez que os elétrons podem ser considerados quase livres nas direções paralelas à interface do GaAs com o Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (dentro dos limites da Teoria da Massa Efetiva). Na seção seguinte faremos um resumo do desenvolvimento das heteroestruturas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

## 1.1 BANDAS DE ENERGIA E MASSA EFETIVA DOS ELÉTRONS NO GaAs E $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

O conceito de bandas de energia surgiu do trabalho de Kronig e Penney<sup>18</sup>, onde foi usado um modelo de barreiras abruptas de potenciais dispostos periodicamente. Resolvendo o problema de auto-valores mostra-se que as energias são dispostas em bandas de energia permitidas, separadas por regiões de energia proibidas.

Tanto o GaAs como  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  são cristais semicondutores. Um semicondutor é uma substância cristalina onde a banda de estados eletrônicos, na temperatura do zero absoluto, torna-se completamente ocupada por elétrons (banda de valência), separada de uma banda completamente vazia (banda de condução) por uma estreita região de energias proibidas conhecida por "gap" de energia (0.16 eV a 3.9 eV para a maioria dos semicondutores). Um modelo esquemático das bandas de energia de um semicondutor é mostrado na Figura 1. Como podemos ver, uma pequena excitação nos elétrons faz com que estes transitem da banda de valência para a banda de condução. Surgem também, na banda de valência, buracos (com carga elétrica positiva) em igual número. Um semicondutor deste tipo é um semicondutor intrínseco.

Para estruturas que apresentam característica periódica, o teorema de Bloch<sup>19</sup> estabelece que a solução da equação de Schroedinger é da forma:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad (1.1-1)$$

onde  $k$  é o módulo do vetor de onda do cristal, e  $u_k(x)$  é a função de Bloch com a periodicidade da estrutura. Para o caso de uma partícula livre, a solução é bem conhecida com energias dadas por

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m, \quad (1.1-2)$$

onde  $m$  é a massa da partícula e  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida. Como podemos ver, há uma relação parabólica entre  $E$  e  $k$ .

Para cristais reais a relação entre  $E$  e  $k$  geralmente não é parabólica. Na Figura 2 mostramos esta relação para o GaAs. Quando um mínimo da banda de condução e um máximo da banda de valência ocorrem em  $k=0$ , chamamos este ponto de ponto  $\Gamma$ . No nosso trabalho consideraremos as propriedades do GaAs e do  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  no ponto  $\Gamma$ . Mostramos abaixo valores obtidos experimentalmente do "gap" direto (diferença entre o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência no ponto  $\Gamma$ ) do GaAs e do  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ <sup>20</sup> na temperatura ambiente:

$$E_{\Gamma_g}^{\Gamma}(\text{GaAs}) = 1.425 \text{ eV}, \quad (1.1-3)$$

para o GaAs, e observa-se experimentalmente que o "gap" direto do  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  depende da fração molar de alumínio. Segundo

S.Adachi<sup>20</sup>, o "gap" direto do  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pode ser dado por (em eV):

$$E_{\Gamma_g}^{\Gamma}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = 1.425 + 1.155x + 0.37x^2, \quad (1.1-4)$$

expressão válida para  $x \leq 0.45$ , onde  $x$  é fração molar de alumínio.

Num cristal real a relação entre  $E$  e  $k$  não é parabólica. Expandindo  $E(k)$  em torno de  $k=0$  em série de Taylor:

$$E(k) = E(0) + k \frac{dE}{dk} + \frac{1}{2} k^2 \frac{d^2E}{d^2k} + \dots, \quad (1.1-5)$$

uma vez que no ponto  $\Gamma$ ,  $dE/dk = 0$ , temos

$$E(k) = E(0) + \frac{1}{2} k^2 \frac{d^2E}{d^2k} + \dots \quad (1.1-6)$$

Comparando as Eqs. (1.1-2) e (1.1-6), podemos definir a massa efetiva de um portador como:

$$m^* = \hbar^2 / (d^2E/d^2k). \quad (1.1-7)$$

Substituindo a Eq. (1.1-7) na Eq. (1.1-6) temos:

$$E(k) = E(0) + \hbar^2 k^2 / 2m^*. \quad (1.1-8)$$

Em temperatura ambiente, a massa efetiva dos



elétrons na banda de condução do GaAs no ponto  $\Gamma$  é<sup>20</sup>:

$$m^* = 0.067m_0, \quad (1.1-9)$$

onde  $m_0$  é a massa do elétron livre. Para o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , a massa efetiva na temperatura ambiente no ponto  $\Gamma$  depende da fração molar de alumínio, e é dada por<sup>20</sup>:

$$m^* = (0.067 + 0.083x)m_0, \quad (1.1-10)$$

onde  $x$  é a fração molar de alumínio.

## 1.2 HETEROESTRUTURAS DE GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Recentemente, devido às técnicas de crescimento de cristais, é possível fabricar cristais heterogêneos de alta qualidade. A técnica MBE é muito usada na fabricação de heteroestruturas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  como uma heterojunção, um poço quântico ou uma barreira. Usando esta técnica podemos construir um heterocristal com uma camada de GaAs seguida por outra de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , obtendo assim uma heterojunção. Devido às diferenças entre os "gaps" diretos do GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , surge na banda de condução e de valência uma barreira quântica para elétrons e buracos, respectivamente. Uma fração desta diferença, conhecida por "band offset", é a altura da barreira

na banda de condução ("band offset" de condução), e na banda de valência ("band offset" de valência). No nosso trabalho usaremos  $C=0.60$ , para o "band offset" de condução<sup>20</sup>. Para a formação de uma barreira de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , temos duas camadas longas de GaAs separadas por uma camada de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . A altura da barreira na banda de condução é dada por<sup>20</sup>:

$$v = C \Delta E_{\Gamma_g}^{\Gamma}, \quad (1.2-1)$$

onde  $C$  é o "band offset" de condução, e

$$\Delta E_{\Gamma_g}^{\Gamma} = E_{\Gamma_g}^{\Gamma}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) - E_{\Gamma_g}^{\Gamma}(\text{GaAs}). \quad (1.2-2)$$

Para obtenção de um poço quântico de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , forma-se um heterocristal com duas camadas longas de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  separadas por uma camada de GaAs. Na Figura 3 mostramos um modelo de um poço de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ <sup>21</sup>.

Devido à grande flexibilidade destas técnicas de crescimento de cristais, podemos construir ainda barreiras duplas, super-redes ou múltiplos poços quânticos. Quando nos vários poços quânticos não há probabilidade de transição de elétrons(ou buracos) entre dois poços adjacentes, temos uma estrutura de múltiplos poços quânticos. Quando esta probabilidade é diferente de zero e há uma disposição periódica dos poços, temos uma super-rede<sup>21</sup>.

O trabalho pioneiro no uso das técnicas de

crescimento de cristais em heteroestruturas usando GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , foi o trabalho de Tsu e Esaki<sup>3</sup>. Nele, foram calculadas a corrente de tunelamento e a condutividade de uma super-rede. Grandes interesses em heteroestruturas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  surgiram ultimamente<sup>6-11</sup>, e muitas são suas aplicações como fotodetectores, transistores dentre outras.

Em trabalhos sobre heteroestruturas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , os níveis de energia nos poços quânticos e o coeficiente de transmissão em barreiras são calculados, considerando-se a interface entre o GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , como abrupta<sup>3-11</sup>.

Recentemente usando microscopia de tunelamento e espectroscopia, O.Albrektsen et al<sup>12</sup> mostraram que a interface entre o GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não é abrupta, mas que há uma região de transição da ordem de um a dois parâmetros de rede do GaAs. Usando luminescência, C.A.Warwick et al<sup>13</sup> verificaram que a interface entre o GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não é perfeitamente lisa, mas apresenta uma região de transição.

Os efeitos nos níveis de energia e no coeficiente de transmissão, pelo fato da interface entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não ser abrupta em heteroestruturas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , foram analisados por J.N.Schulman<sup>22</sup> (nos níveis de energia de um poço), e por Valder Freire et al<sup>14</sup> (no coeficiente de transmissão em uma heterojunção). No nosso trabalho, estudaremos este efeito no coeficiente de transmissão em barreiras simples ou duplas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

## CAPÍTULO 2

### COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS SIMPLES NÃO-ABRUPTAS DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

No capítulo anterior, vimos que a interface entre o GaAs e o Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não é abrupta. Sabemos que para cristais homogêneos a teoria da massa efetiva está muito bem estabelecida pelo teorema de Wannier-Slater<sup>23,24</sup>. Supondo válida a teoria da massa efetiva para cristais heterogêneos, propomos um modelo para a massa efetiva dos elétrons e para a barreira de potencial na banda de condução. Devido à não-homogeneidade do GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, a massa efetiva dos elétrons, que depende da estrutura cristalina, varia espacialmente. Não podemos aplicar a forma usual da equação de Schroedinger, pois o operador Hamiltoniano neste caso não é Hermitiano. Apresentamos dois tipos de operadores Hamiltonianos para descrever o movimento dos elétrons no cristal<sup>25-30</sup>. Neste capítulo, calculamos o coeficiente de transmissão em barreiras simples não-abruptas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, usando três diferentes métodos.

## 2.1 MODELO DO POTENCIAL E DA MASSA EFETIVA DOS ELÉTRONS PARA A BARREIRA SIMPLES NÃO-ABRUPTA DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

O teorema de Wannier-Slater<sup>23,24</sup> para o movimento dos elétrons, é válido quando se utiliza cristais homogêneos. Para cristais heterogêneos onde a massa efetiva varia com a posição do elétron no cristal, a teoria da massa efetiva ainda não está bem estabelecida<sup>26</sup>. Vamos supor que a teoria da massa efetiva seja válida em cristais heterogêneos.

Vimos no capítulo anterior que a massa efetiva e o "gap" para o GaAs e o Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As no ponto  $\Gamma$  são dados por:

$$m^*(\text{GaAs}) = 0.067m_0, \quad (2.1-1)$$

$$m^*(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = (0.067+0.083x)m_0, \quad (2.1-2)$$

$$E_g^\Gamma(\text{GaAs}) = 1.425, \quad (2.1-3)$$

$$E_g^\Gamma(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = 1.425+1.155x+0.37x^2, \quad (2.1-4)$$

onde  $m_0$  é massa do elétron livre e  $x$  é a fração molar de alumínio. Considerando uma heteroestrutura de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As formada por duas camadas longas de GaAs, separadas por uma camada de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, vimos que a diferença entre os "gaps" do GaAs e Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As gera uma barreira de potencial na banda de condução da heteroestrutura dada por:

$$v = C(1.155x+0.37x^2), \quad (2.1-5)$$

onde  $C$  é o "band offset" de condução e  $v$  é dado em elétron-volt.

Considerando a interface entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não-abrupta<sup>12</sup>, vamos supor que a variação da fração molar de alumínio seja linear<sup>14,22</sup>. Assim podemos escrever a fração molar de alumínio para uma barreira simples unidimensional de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  como:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq -(b+a), \\ x(z+a+b)/2a, & -(b+a) \leq z \leq -(b-a), \\ x, & -(b-a) \leq z \leq (b-c), \\ x(b+c-z)/2c, & (b-c) \leq z \leq (b+c), \\ 0, & z \geq (b+c), \end{cases} \quad (2.1-6)$$

onde  $2a$  e  $2c$  são as regiões de transição entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , levando em consideração uma possível assimetria nas interfaces;  $2b$  é a largura média da barreira, isto é, a distância entre os pontos médios das regiões de transição, e  $x$  é a fração molar de alumínio em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (Figura 4).

Como a massa efetiva dos elétrons no  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  depende explicitamente da fração molar de alumínio  $x$ , vamos supor que a dependência na região de transição seja da forma dada pela Eq.(2.1-2). Deste modo, podemos escrever a massa

efetiva dos elétrons em qualquer posição como:

$$m^*(z) = \mu_1 + \mu_2 \chi(z), \quad (2.1-7)$$

onde  $\mu_1 = 0.067m_0$  e  $\mu_2 = 0.083m_0$ .

Supondo válida a Eq.(2.1-5) nas regiões de transição, podemos escrever uma equação para a barreira de potencial da heteroestrutura como:

$$v(z) = C(\varepsilon_1 \chi(z) + \varepsilon_2 \chi(z)^2), \quad (2.1-8)$$

onde  $\varepsilon_1 = 1.155\text{eV}$  e  $\varepsilon_2 = 0.37\text{eV}$ . Nas Figuras 5a e 5b mostramos a variação da massa efetiva e do potencial para a barreira simples não-abrupta de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

## 2.2 OPERADOR HAMILTONIANO PARA A BARREIRA SIMPLES NÃO-ABRUPTA DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

Devido à variação espacial da massa efetiva dos elétrons Eq.(2.1-7), o operador energia cinética  $\hat{p}^2/2m$ , onde  $\hat{p}$  é o operador momentum, não é Hermitiano<sup>25</sup>. O maior problema da teoria da massa efetiva em heteroestruturas, se refere à forma do operador energia cinética para descrever o movimento dos elétrons no cristal. Apresentamos as formas de operadores Hermitianos propostos ultimamente para descrever o movimento dos elétrons num cristal heterogêneo:

$$\hat{T} = \left( \frac{1}{m} \hat{p}^2 + \hat{p}^2 \frac{1}{m} \right) / 4, \quad (2.2-1)$$

proposto por Gora e Williams<sup>26</sup>,

$$\hat{T} = \left( \hat{p} \frac{1}{m} \hat{p} \right) / 2, \quad (2.2-2)$$

por Von Ross<sup>25</sup>,

$$\hat{T} = \left( \frac{1}{\sqrt{m}} \hat{p}^2 \frac{1}{\sqrt{m}} \right), \quad (2.2-3)$$

por Zhu e Kroemer<sup>27</sup>, todos tendo a forma proposta por Von Ross<sup>25</sup>:

$$\hat{T} = \left( m^\alpha \hat{p} m^\beta \hat{p} m^\gamma + m^\gamma \hat{p} m^\beta \hat{p} m^\alpha \right) / 4, \quad (2.2-4)$$

onde  $\alpha + \gamma + \beta = -1$ .

Usualmente, quando a massa efetiva é constante, as condições de contorno impostas à função de onda exigem que esta seja contínua, bem como sua derivada. No caso de massa efetiva variável, as condições de contorno são que  $m^\alpha \psi$  e  $m^{\alpha+\beta} \psi'$  sejam contínuas com  $\alpha = \gamma$ <sup>28</sup>. Para  $\alpha \neq \gamma$  a abrupticidade leva a uma situação física inaceitável, pois impõe a existência de uma barreira abrupta infinita na interface<sup>28</sup>. Os valores mais aceitáveis para  $\alpha = \gamma$ , foram analisados por J.Thonsen et al<sup>29</sup> e por Ian Galbraith<sup>30</sup>, que em trabalhos independentes chegaram ao



resultado  $\alpha=\gamma=0$  e  $\beta=-1$  na Eq.(2.2-4). Usando as funções de Bloch, Richard A.Morrow<sup>31</sup> estimou  $\alpha=\gamma=-1/2$  e  $\beta=0$  como operador energia cinética na Eq.(2.2-4).

De acordo com os resultados de J.Thonsen<sup>29</sup> e Ian Galbraith<sup>30</sup>, usaremos  $\beta=-1$  para a obtenção do coeficiente de transmissão em barreiras simples de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, e para efeito de comparação, mostraremos alguns resultados para  $\beta=0$ .

### 2.3 MÉTODOS PARA OBTENÇÃO DO COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS

O coeficiente de transmissão em barreiras de potenciais é definido quânticamente como a razão entre a corrente de probabilidade da onda transmitida e a corrente de probabilidade da onda incidente<sup>32</sup>:

$$C_t = \frac{j_t}{j_i} , \quad (2.3-1)$$

onde a corrente de probabilidade  $j$  é dada por:

$$j = i\hbar/2m(\psi \frac{d\psi^*}{dz} - \psi^* \frac{d\psi}{dz}) , \quad (2.3-2)$$

em uma dimensão.

Quando a massa efetiva é constante, a equação de Schroedinger tem a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} + v(z)\psi = E\psi, \quad (2.3-3)$$

em uma dimensão. Para o caso de  $v(z)=0$ , a solução é dada por:

$$\psi(z) = A e^{ikz} + B e^{-ikz}, \quad (2.3-4)$$

onde  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  é o vetor de onda da partícula. Para o caso de uma barreira arbitrária, mostrada na Figura 6a, temos a solução da equação de Schrödinger com massa efetiva constante dada por:

$$\psi(z) = A_1 e^{ikz} + B_1 e^{-ikz}, \quad z < a, \quad (2.3-5)$$

onde  $k = \sqrt{2m(E-V_1)/\hbar^2}$ ,

$$\psi(z) = A_2 e^{i\alpha z} + B_2 e^{-i\alpha z}, \quad z > b, \quad (2.3-6)$$

com  $\alpha = \sqrt{2m(E-V_2)/\hbar^2}$ , e uma solução dependendo da forma do potencial na região  $a < z < b$ . Assim, o coeficiente de transmissão será dado por:

$$C_t = \frac{|A_2|^2 \hbar \alpha / m}{|A_1|^2 \hbar k / m} = \frac{|A_2|^2 \alpha}{|A_1|^2 k}. \quad (2.3-7)$$

Em alguns casos como potenciais lineares ou parabólicos, a solução da equação de Schroedinger com massa

efetiva constante é de fácil solução, e o coeficiente de transmissão pode ser obtido analiticamente. Quando levamos em consideração operadores dado pelas Eq.(2.2-2) ou Eq.(2.2-3), a equação de Schroedinger com massa efetiva dependente da posição tem a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m} \frac{d}{dz} \psi \right) + v(z)\psi = E\psi, \quad (2.3-8)$$

ou,

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{m}} \frac{d^2}{dz^2} \left( \frac{\psi}{\sqrt{m}} \right) + v(z)\psi = E\psi. \quad (2.3-9)$$

Como podemos observar, somente na região onde  $m(z)=cte$  e  $v(z)=cte$ , a solução é da forma dada pelas Eq.(2.3-5) ou Eq.(2.3-6). Mesmo para forma linear da massa efetiva, as Eqs.(2.3-8) e (2.3-9), são de difícil solução. Apresentaremos dois métodos numéricos para obtenção do coeficiente de transmissão em barreiras de potenciais arbitrários com massa efetiva dos elétrons variáveis com a posição, e aplicaremos estes dois métodos para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Antes porém faremos aproximações na massa efetiva e no potencial conforme sugerido por Valder Freire et al<sup>14</sup>, e resolveremos analiticamente o problema do coeficiente de transmissão em barreiras.

2.3.1 MASSA EFETIVA CONSTANTE NA REGIÃO DE TRANSIÇÃO ENTRE O GaAs E  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Para resolvermos a Eq.(2.3-8) usando a Eq.(2.1-7) para a massa efetiva do elétron na banda de condução, e a Eq.(2.1-8) para a barreira de potencial, podemos fazer algumas aproximações. Considerando a fração molar de alumínio constante nas regiões de transição, como sendo a metade da fração molar de alumínio em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , a massa efetiva assume a forma:

$$m(z) = \begin{cases} \mu_1, & z < -(b+a), \\ m_i, & -(b+a) < z < -(b-a), \\ m_x, & -(b-a) < z < (b-c), \\ m_i, & (b-c) < z < (b+c), \\ \mu_1, & z > (b+c), \end{cases} \quad (2.3-10)$$

onde  $m_i = \mu_1 + \mu_2 x/2$  e  $m_x = \mu_1 + \mu_2 x$ .

Substituído a Eq.(2.1-6) na Eq.(2.1-8), o potencial nas regiões de transição será dado por:

$$v(z) = C[\epsilon_1 x(z+b+a)/2a + \epsilon_2 (x/2a)^2 (z+b+a)^2], \quad (2.3-11)$$

para  $-(b+a) < z < -(b-a)$ , e

$$v(z) = C[\epsilon_1 x(c+b-z)/2c + \epsilon_2 (x/2c)^2 (c+b-z)^2], \quad (2.3-12)$$

para  $(b-c) < z < (b+c)$ . Desprezando os termos quadráticos em  $z+b$  na Eq.(2.3-11), e repetindo o procedimento em  $b-z$  em na Eq.(2.3-12) temos:

$$V(z) = C \begin{cases} 0, & z < -(b+a), \\ v_i + v_x(z+b)/2a, & -(b+a) < z < -(b-a), \\ v_x, & -(b-a) < z < (b-c), \\ v_i + v_x(b-z)/2c, & (b-c) < z < (b+c), \\ 0, & z > (b+c), \end{cases} \quad (2.3-13)$$

onde  $v_i = \varepsilon_1 x/2 + \varepsilon_2 x^2/4$  e  $v_x = \varepsilon_1 x + \varepsilon_2 x^2$ . Nas Figuras 7a e 7b, mostramos o modelo aproximado proposto por Valder et al<sup>14</sup>.

Para  $z < -(b+a)$ , a solução da equação de Schroedinger é:

$$\psi(z) = A_1 e^{ikz} + B_1 e^{-ikz}, \quad (2.3-14)$$

onde  $k = \sqrt{2\mu_1 E/\hbar^2}$ . Para  $-(b+a) < z < -(b-a)$ , a equação de Schroedinger pode ser escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2\psi}{dz^2} + [v_i + (z+b)v_x/2a]\psi = E\psi. \quad (2.3-15)$$

Tomando  $y = -\alpha(2m_i/\hbar^2)\{E - [v_i + (z+b)v_x/2a]\}$ , temos:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - Y\psi = 0, \quad (2.3-16)$$

com  $\alpha = (m_1 v_x / \hbar^2)^{2/3}$  e  $\frac{d}{dz} = (m_1 v_x / \hbar^2)^{1/3} \frac{d}{dy}$ .

As soluções da equação (2.3-16) são conhecidas como funções de Airy  $A_1$  e  $B_1$  e a solução para  $-(b+a) < z < -(b-a)$  será dada por:

$$\psi(z) = A_2 A_1(Y) + B_2 B_1(Y), \quad (2.3-17)$$

com  $Y = -\alpha(2m_1/\hbar^2)\{E - [v_1 + (z+b)v_x/2a]\}$ .

A solução da equação de Schroedinger para  $-(b-a) < z < (b-c)$ , onde  $v(z) = v_x$ , é dada por:

$$\psi(z) = A_3 e^{ik_x z} + B_3 e^{-ik_x z}, \quad (2.3-18)$$

onde  $k_x = \sqrt{2m_x(E - v_x)/\hbar^2}$ .

Analogamente à Eq.(2.3-15), para  $(b-c) < z < (b+c)$ , a equação de Schroedinger pode ser escrita como:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - x\psi = 0, \quad (2.3-19)$$

onde neste caso ,

$$x = -(8c^2 m_1 / v_x^2 \hbar^2)^{1/3} \{E - [v_1 + (z+b)v_x/2c]\}, \quad (2.3-20)$$

$$\frac{d}{dz} = (m_1 v_x / \hbar^2)^{1/3} \frac{d}{dx} , \quad (2.3-21)$$

com solução dada por:

$$\psi(z) = A_4 A_1(x) + B_4 B_1(x) . \quad (2.3-22)$$

Para  $z > (b+c)$  a solução da equação de Schroedinger é:

$$\psi(z) = A_5 e^{ikz} + B_5 e^{-ikz} , \quad (2.3-23)$$

com  $k$  dado pela Eq.(2.3-14).

Usando as condições de contorno,  $\psi$  e  $\psi'/m$  contínuas nos pontos  $z_1^+ = -(b+a)$ ,  $z_1^- = -(b-a)$ ,  $z_2^- = (b-c)$ ,  $z_2^+ = (b+c)$ , temos as relações entre os coeficientes nas regiões dadas por:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} , \quad (2.3-24)$$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} , \quad (2.3-25)$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_3 \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} , \quad (2.3-26)$$

$$\begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} = M_4 \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix}, \quad (2.3-27)$$

onde as matrizes  $M_i$  ( $i=1,2,3,4$ ), são chamadas de matrizes transferência. Para elétrons com energias menores que a altura máxima da barreira ( $E < v_x$ ), as matrizes  $M_i$  possuem a forma:

$$M_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-ikz_1^+} (A_{i1}^+ - i\gamma_1 A_{i1}^{\prime+}) & e^{-ikz_1^+} (B_{i1}^+ - i\gamma_1 B_{i1}^{\prime+}) \\ e^{ikz_1^+} (A_{i1}^+ + i\gamma_1 A_{i1}^{\prime+}) & e^{ikz_1^+} (B_{i1}^+ + i\gamma_1 B_{i1}^{\prime+}) \end{pmatrix}, \quad (2.3-28)$$

$$M_2 = \frac{1}{w} \begin{pmatrix} e^{k_x z_1^-} (B_{i1}^- - B_{i1}^{\prime-} / \gamma_2) & e^{-k_x z_1^-} (B_{i1}^- + B_{i1}^{\prime-} / \gamma_2) \\ e^{k_x z_1^-} (A_{i1}^- / \gamma_2 - A_{i1}^{\prime-}) & -e^{-k_x z_1^-} (A_{i1}^- / \gamma_2 + A_{i1}^{\prime-}) \end{pmatrix}, \quad (2.3-29)$$

$$M_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-k_x z_2^-} (A_{i2}^- - \gamma_2' A_{i2}^{\prime-}) & e^{-k_x z_2^-} (B_{i2}^- - \gamma_2' B_{i2}^{\prime-}) \\ e^{k_x z_2^-} (A_{i2}^- + \gamma_2' A_{i2}^{\prime-}) & e^{k_x z_2^-} (B_{i2}^- + \gamma_2' B_{i2}^{\prime-}) \end{pmatrix}, \quad (2.3-30)$$

$$M_4 = \frac{1}{w} \begin{pmatrix} e^{ikz_2^+} (B_{i2}^+ + iB_{i2}^{\prime+} / \gamma_1') & e^{-ikz_2^+} (B_{i2}^+ - iB_{i2}^{\prime+} / \gamma_1') \\ -e^{ikz_2^+} (A_{i2}^+ + iA_{i2}^{\prime+} / \gamma_1') & e^{-ikz_2^+} (iA_{i2}^+ / \gamma_1' - A_{i2}^{\prime+}) \end{pmatrix}, \quad (2.3-31)$$



onde

$$\gamma_1 = \frac{\mu_1}{m_i k} (m_i v_x / \hbar^2 a)^{1/3}, \quad (2.3-32a)$$

$$\gamma_2 = \frac{m_x}{m_i k_x} (m_i v_x / \hbar^2 a)^{1/3}, \quad (2.3-32b)$$

$$\gamma_1' = \frac{\mu_1}{m_i k} (m_i v_x / \hbar^2 c)^{1/3}, \quad (2.3-32c)$$

$$\gamma_2' = \frac{m_x}{m_i k_x} (m_i v_x / \hbar^2 c)^{1/3}, \quad (2.3-32d)$$

$$k = \sqrt{2\mu_1 E / \hbar^2}, \quad (2.3-32e)$$

$$k_x = \sqrt{2m_x (E - v_x) / \hbar^2}, \quad (2.3-32f)$$

sendo  $A_{ij}^\pm$ ,  $B_{ij}^\pm$  ( $j = 1, 2$ ) as funções de Airy e  $A'_{ij}^\pm$ ,  $B'_{ij}^\pm$  suas derivadas nos pontos:

$$Y_1^\pm = -(8a^2 m_i / v_x^2 \hbar^2)^{1/3} (E - v_i \pm v_x / 2), \quad (2.3-33)$$

$$Y_2^\pm = -(8c^2 m_i / v_x^2 \hbar^2)^{1/3} (E - v_i \mp v_x / 2), \quad (2.3-34)$$

respectivamente, e  $w$  é o Wronskiano da equação de Airy.

A relação entre os coeficientes das regiões 1 e 5 será dada por:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix}, \quad (2.3-35)$$

onde  $M = M_1 M_2 M_3 M_4$ . Considerando  $B_5=0$  (nenhum elétron vindo da região 5), o coeficiente de transmissão para uma barreira simples de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$  não-abrupta, para  $E < v_x$ , será dado por:

$$C_t = 1/|M_{11}|^2, \quad (2.3-36)$$

onde  $M_{11}$  é elemento da matriz  $M$  dada na Eq.(2.3-40). Efetuando-se os produtos das matrizes  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$  e  $M_4$  em  $M = M_1 M_2 M_3 M_4$ , e separando as partes reais e imaginárias, temos:

$$\begin{aligned} M_{11} = & \frac{\pi^2}{4} e^{ik(2b+a+c)} \{ [e^{-k_x(2b-a-c)} (j_{11}j_{21} - j_{12}j_{22}) + \\ & + e^{k_x(2b-a-c)} (j_{13}j_{23} - j_{14}j_{24})] + i [e^{-k_x(2b-a-c)} (j_{11}j_{22} + j_{21}j_{12}) + \\ & + e^{k_x(2b-a-c)} (j_{13}j_{24} + j_{14}j_{23})] \}, \quad (2.3-37) \end{aligned}$$

com,

$$j_{11} = A_{11}^+ (B_{11}^- - B_{11}^- / \gamma_2) + B_{11}^+ (-A_{11}^- + A_{11}^- / \gamma_2), \quad (2.3-38a)$$

$$j_{12} = -\gamma_1 A_{11}^{\prime+} (B_{11}^{\prime-} - B_{11}^- / \gamma_2) - \gamma_1 B_{11}^{\prime+} (-A_{11}^{\prime-} + A_{11}^- / \gamma_2) , \quad (2.3-38b)$$

$$j_{21} = B_{12}^{\prime+} (A_{12}^- - \gamma_2' A_{12}^{\prime-}) - A_{12}^{\prime+} (B_{12}^- - \gamma_2' B_{12}^{\prime-}) , \quad (2.3-38c)$$

$$j_{22} = B_{12}^{\prime+} (A_{12}^- - \gamma_2' A_{12}^{\prime-}) / \gamma_1' - A_{12}^{\prime+} (B_{12}^- - \gamma_2' B_{12}^{\prime-}) / \gamma_1' , \quad (2.3-38d)$$

$$j_{13} = A_{11}^{\prime+} (B_{11}^{\prime-} + B_{11}^- / \gamma_2) - B_{11}^{\prime+} (A_{11}^{\prime-} + A_{11}^- / \gamma_2) , \quad (2.3-38e)$$

$$j_{14} = -\gamma_1 A_{11}^{\prime+} (B_{11}^{\prime-} + B_{11}^- / \gamma_2) + \gamma_1 B_{11}^{\prime+} (A_{11}^{\prime-} + A_{11}^- / \gamma_2) , \quad (2.3-38f)$$

$$j_{23} = B_{12}^{\prime+} (A_{12}^- + \gamma_2' A_{12}^{\prime-}) - A_{12}^{\prime+} (B_{12}^- + \gamma_2' B_{12}^{\prime-}) , \quad (2.3-38g)$$

$$j_{24} = B_{12}^{\prime+} (A_{12}^- + \gamma_2' A_{12}^{\prime-}) / \gamma_1' - A_{12}^{\prime+} (B_{12}^- + \gamma_2' B_{12}^{\prime-}) / \gamma_1' . \quad (2.3-38h)$$

Para elétrons incidentes com energias maiores que a altura máxima da barreira ( $E > v_x$ ), as matrizes  $M_i$  possuem a forma:

$$M_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-ikz_1^+} (A_{11}^{\prime+} - i\gamma_1 A_{11}^{\prime-}) & e^{-ikz_1^+} (B_{11}^{\prime+} - i\gamma_1 B_{11}^{\prime-}) \\ e^{ikz_1^+} (A_{11}^{\prime+} + i\gamma_1 A_{11}^{\prime-}) & e^{ikz_1^+} (B_{11}^{\prime+} + i\gamma_1 B_{11}^{\prime-}) \end{pmatrix} , \quad (2.3-39)$$

$$M_2 = \frac{1}{w} \begin{pmatrix} e^{ik_x z_1^-} (B_{11}^{\prime-} - iB_{11}^- / \gamma_2) & e^{-ik_x z_1^-} (B_{11}^{\prime-} + iB_{11}^- / \gamma_2) \\ e^{ik_x z_1^-} (iA_{11}^- / \gamma_2 - A_{11}^{\prime-}) & -e^{-ik_x z_1^-} (iA_{11}^- / \gamma_2 + A_{11}^{\prime-}) \end{pmatrix} , \quad (2.3-40)$$

$$M_3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-ik_x z_2^-} (A_{12}^- + i\gamma_2' A_{12}'^-) & e^{-ik_x z_2^-} (B_{12}^- + i\gamma_2' B_{12}'^-) \\ e^{ik_x z_2^-} (A_{12}^- - i\gamma_2' A_{12}'^-) & e^{ik_x z_2^-} (B_{12}^- - i\gamma_2' B_{12}'^-) \end{bmatrix}, \quad (2.3-41)$$

$$M_4 = \frac{1}{w} \begin{bmatrix} e^{ikz_2^+} (B_{12}^+ + iB_{12}'^+/\gamma_1') & e^{-ikz_2^+} (B_{12}^+ - iB_{12}'^+/\gamma_1') \\ -e^{ikz_2^+} (A_{12}^+ + iA_{12}'^+/\gamma_1') & e^{-ikz_2^+} (iA_{12}^+/\gamma_1' - A_{12}'^+) \end{bmatrix}. \quad (2.3-42)$$

O coeficiente de transmissão para  $E > v_x$  será dado pela Eq.(2.3-31), neste caso,

$$M_{11} = \frac{\pi^2}{4} e^{ik(2b+a+c)} (p + iq), \quad (2.3-43)$$

com

$$p = \cos[k_x(2b-a-c)](j_{11}j_{21} - j_{12}j_{22} + j_{13}j_{23} - j_{14}j_{24}) + \\ + \text{sen}[k_x(2b-a-c)](j_{12}j_{21} + j_{22}j_{11} - j_{23}j_{14} - j_{13}j_{24}), \quad (2.3-44)$$

$$q = \cos[k_x(2b-a-c)](j_{12}j_{21} + j_{22}j_{11} + j_{23}j_{14} + j_{13}j_{24}) + \\ + \text{sen}[k_x(2b-a-c)](j_{13}j_{23} - j_{14}j_{24} - j_{11}j_{21} + j_{12}j_{22}). \quad (2.3-45)$$

Os valores dos termos  $j_{ik}$  que aparecem nas Eqs.(2.3-44) e (2.3-45) são dados por:

$$j_{11} = A_{11}^+ B_{11}'^+ - A_{11}'^+ B_{11}^- \gamma_1 / \gamma_2 - A_{11}^- B_{11}^+ + A_{11}^- B_{11}'^+ \gamma_1 / \gamma_2 , \quad (2.3-46a)$$

$$j_{12} = \gamma_1 A_{11}'^- B_{11}'^+ - A_{11}^+ B_{11}^- / \gamma_2 - \gamma_1 A_{11}'^+ B_{11}'^- + A_{11}^- B_{11}^+ / \gamma_2 , \quad (2.3-46b)$$

$$j_{21} = B_{12}'^+ A_{12}^- - B_{12}^+ A_{12}'^- \gamma_2' / \gamma_1' - B_{12}^- A_{12}'^+ + B_{12}'^- A_{12}^+ \gamma_2' / \gamma_1' , \quad (2.3-46c)$$

$$j_{22} = \gamma_2' B_{12}'^+ A_{12}'^- + B_{12}^+ A_{12}^- / \gamma_1' - \gamma_2' B_{12}'^- A_{12}'^+ - B_{12}^- A_{12}^+ / \gamma_1' , \quad (2.3-46d)$$

$$j_{13} = A_{11}^+ B_{11}'^+ + A_{11}'^+ B_{11}^- \gamma_1 / \gamma_2 - A_{11}'^- B_{11}^+ - A_{11}^- B_{11}'^+ \gamma_1 / \gamma_2 , \quad (2.3-46e)$$

$$j_{14} = \gamma_1 A_{11}'^- B_{11}'^+ + A_{11}^+ B_{11}^- / \gamma_2 - \gamma_1 A_{11}'^+ B_{11}'^- - A_{11}^- B_{11}^+ / \gamma_2 , \quad (2.3-46f)$$

$$j_{23} = B_{12}'^+ A_{12}^- + B_{12}^+ A_{12}'^- \gamma_2' / \gamma_1' - B_{12}'^- A_{12}'^+ - B_{12}'^- A_{12}^+ \gamma_2' / \gamma_1' , \quad (2.3-46g)$$

$$j_{24} = B_{12}^+ A_{12}^- / \gamma_1' - \gamma_2' B_{12}'^+ A_{12}'^- + \gamma_2' B_{12}'^- A_{12}'^+ - B_{12}^- A_{12}^+ / \gamma_1' . \quad (2.3-46h)$$

Vamos analisar a validade deste método. Consideremos a aproximação na região  $-(b+a) < z < -(b-a)$ . Na outra região o argumento usado será o mesmo, pois muda-se apenas a largura de transição.

Para a validade da aproximação deste método o termo quadrático que foi desprezado na expressão do potencial deve satisfazer a condição:

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(z+b)^2 x^2 / 4a^2 \ll \varepsilon_1 x(z+b) / 2a + \varepsilon_1 x / 2 + \varepsilon_2 x^2 / 4 + \\ + \varepsilon_2(z+b) x^2 / 2a . \end{aligned} \quad (2.3-47a)$$

Fazendo  $\eta = (z+b)/a$ , e substituindo na Eq.(2.3-47a), temos:

$$\varepsilon_2 \eta^2 x^2 / 4 \ll \varepsilon_1 \eta x / 2 + \varepsilon_1 x / 2 + \varepsilon_2 x^2 / 4 + \varepsilon_2 \eta x^2 / 2 . \quad (2.3-47b)$$

Como  $-(b+a) < z < -(b-a)$ , temos  $-1 < \eta < 1$ , e como  $\varepsilon_1=1.155$ ,  $\varepsilon_2=0.37$ , a Eq.(2.3-47b) será satisfeita para pequenas frações molares de alumínio. Para valores de  $\eta$  próximos de  $\eta = -1$ , a Eq.(2.3-47b) não é satisfeita pois em  $\eta = -1$ , o segundo membro da Eq.(2.3-47b) é igual a  $-\varepsilon_2 x^2 / 4$ . Entretanto, para pequenas frações molares o erro cometido pode ser desprezado e conseqüentemente o método só será válido para pequenas frações molares de alumínio. A aproximação feita para a massa efetiva é o mesmo que desprezarmos o termo linear em  $\eta$  na Eq.(2.1-7). Para que este procedimento seja válido devemos ter:

$$0.0415x\eta \ll 0.067 + 0.0415x. \quad (2.3-47c)$$

Para  $x \approx 0.20$  o membro esquerdo da Eq.(2.3-47c) é da ordem de dez vezes menor que o membro direito da Eq.(2.3-47c), e teremos bons resultados com frações molares abaixo deste valor.

### 2.3.2 MÉTODO DOS "MULTISTEPS"

Neste método, ao invés de resolvermos analiticamente a equação de Schroedinger (Eq.(2.3-8) ou Eq.(2.3-9)), e calcularmos o coeficiente de transmissão em barreiras de

potenciais arbitrários, decompos a barreira de potencial em barreiras de pequenas larguras e usamos o formalismo de matriz transferência<sup>15</sup>.

Consideramos a barreira de potencial e massa efetiva dos elétrons mostrada nas Figuras 8a e 8b, respectivamente. Dividimos a região ( $a < z < b$ ) em  $N$  intervalos de comprimentos  $l=(b-a)/N$ , onde no  $j$ -ésimo intervalo ( $z_{j-1}, z_j$ ), temos uma barreira de largura  $l$  e altura  $v(z)$ , e massa efetiva dos elétrons dada por:

$$v(z) = v_j = v(\bar{z}_j) , \quad (2.3-48a)$$

$$m(z) = m_j = m(\bar{z}_j) , \quad (2.3-48b)$$

onde  $\bar{z}_j = (z_{j-1} + z_j)/2$ . A solução da equação de Schroedinger (Eq. (2.3-8) ou Eq. (2.3-9)), no  $j$ -ésimo intervalo, será dada por:

$$\psi_j(z) = A_j e^{ik_j z} + B_j e^{-ik_j z} , \quad (2.3-49)$$

onde  $k_j = \sqrt{2m_j(E-v_j)/\hbar^2}$ . Usando a continuidade de  $m^\alpha \psi$  e  $m^{\alpha+\beta} \psi'$  em  $z = z_j$ , nós temos:

$$(m_j)^\alpha \psi_j(z_j) = (m_{j+1})^\alpha \psi_{j+1}(z_j) , \quad (2.3-50)$$

$$(m_j)^{\alpha+\beta} \psi'_j(z_j) = (m_{j+1})^{\alpha+\beta} \psi'_{j+1}(z_j) . \quad (2.3-51)$$

Resolvendo o sistema de equações dado pelas Eqs.(2.3-50) e (2.3-51), e expressando  $A_{j+1}$ ,  $B_{j+1}$  em termos de  $A_j$ ,  $B_j$  temos:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = M_j^\beta \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} , \quad (2.3-52)$$

onde

$$M_j^\beta = \frac{1}{2}(m_{j+1}/m_j)^{-\alpha} \begin{pmatrix} (1+s_j)e^{-i\Delta k_j z_j} & (1-s_j)e^{-i\Sigma k_j z_j} \\ (1-s_j)e^{i\Sigma k_j z_j} & (1+s_j)e^{i\Delta k_j z_j} \end{pmatrix} , \quad (2.3-53)$$

com  $s_j = \frac{k_j/m_j}{k_{j+1}/m_{j+1}}$  ,  $\Delta k_j = k_{j+1} - k_j$  e  $\Sigma k_j = k_{j+1} + k_j$  .

Usando a Eq.(2.3-52) em todos os intervalos, os coeficientes  $A_{N+1}$ ,  $B_{N+1}$  são relacionados com  $A_0$ ,  $B_0$  por:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = M^\beta \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} , \quad (2.3-54a)$$



onde

$$M^\beta = \begin{pmatrix} M_{11}^\beta & M_{12}^\beta \\ M_{21}^\beta & M_{22}^\beta \end{pmatrix} = M_N^\beta M_{N-1}^\beta \dots M_2^\beta M_1^\beta . \quad (2.3-54b)$$

O coeficiente de transmissão pode ser obtido, considerando  $A_0=1$  e  $B_{N+1}=0$  (nenhum elétron vindo da direita) na Eq.(2.3-54a), conseqüentemente:

$$A_{N+1} = (s_0/s_{N+1}) \frac{1}{M_{22}^\beta} , \quad (2.3-55)$$

e usando a definição do coeficiente de transmissão obtemos:

$$C_t = (s_{N+1}/s_0) |A_{N+1}|^2 . \quad (2.3-56)$$

### 2.3.3 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras de potenciais arbitrários e massa efetiva dos elétrons variável com a posição, este método utiliza o recurso dos elementos finitos<sup>16</sup>, baseado na solução de Galerkin<sup>33,34</sup>.

Este método é aplicado à semicondutores com condições de contorno mais gerais dados por uma matriz interface<sup>16</sup>. Como estamos interessados no coeficiente de transmissão em barreiras de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, usaremos a condição de contorno  $\psi$  e  $\psi'/m$  contínuos, e a Eq.(2.3-8) para descrever o movimento dos elétrons na banda de condução.

Consideremos uma barreira de potencial e massa efetiva mostrados nas Figuras 6a e 6b, respectivamente. Considerando a Eq.(2.3-8) e definindo  $z=(b-a)\eta+a$ ,  $v(z)=E_0u(z)$  e  $E=\epsilon E_0$ , com  $E_0=\hbar^2\pi^2/2m_0d^2$ , sendo  $m_0$  a massa do elétron livre e  $d=(b-a)$ , temos:

$$-\frac{d}{d\eta}\left(\frac{1}{m(\eta)}\frac{d\psi}{d\eta}\right) + \pi^2u(\eta)\psi = \pi^2\epsilon\psi, \quad (2.3-57)$$

onde

$$u(\eta) = \begin{cases} v_1/E_0=u_1, & \eta < 0, \\ v(z)/E_0, & 0 \leq \eta \leq 1, \\ v_2/E_0=u_2, & \eta > 1, \end{cases} \quad (2.3-58a)$$

e

$$m(\eta) = \begin{cases} M_1/m_0=m_1, & \eta < 0, \\ M(z)/m_0, & 0 \leq \eta \leq 1, \\ M_2/m_0=m_2, & \eta > 1, \end{cases} \quad (2.3-58b)$$

A função de onda no intervalo  $0 \leq \eta \leq 1$ , solução da Eq.(2.3-57), é mostrada na Figura 9. Dividindo a região  $0 \leq \eta \leq 1$  em  $N-1$  intervalos de comprimentos  $\Delta\eta = 1/(N-1)$ , podemos aproximar a função de onda no  $i$ -ésimo intervalo por um polinômio. Desde que as condições de contorno envolvem a função de onda e sua derivada, escreveremos  $\psi$  no intervalo  $[\eta_i, \eta_{i+1}]$  como<sup>33</sup>:

$$\psi(\eta) = \psi_i \alpha_i(\eta) + \psi_{i+1} \beta_{i+1}(\eta) + \psi_i' \gamma_i(\eta) + \psi_{i+1}' \delta_{i+1}(\eta) , \quad (2.3-59)$$

onde  $\alpha_j(\eta)$ ,  $\beta_j(\eta)$ ,  $\gamma_j(\eta)$  e  $\delta_j(\eta)$  são polinômios dados por<sup>34</sup>

$$\alpha_j(\eta) = (\eta_{j+1} - \eta)^2 [\eta_{j+1} - \eta_j + 2(\eta - \eta_j)] / (\eta_{j+1} - \eta_j)^3, \quad (2.3-60a)$$

$$\beta_j(\eta) = (\eta_j - \eta)^2 [\eta_j - \eta_{j-1} - 2(\eta - \eta_j)] / (\eta_j - \eta_{j-1})^3, \quad (2.3-60b)$$

$$\gamma_j(\eta) = (\eta - \eta_j) (\eta_{j+1} - \eta)^2 / (\eta_{j+1} - \eta_j)^2 , \quad (2.3-60c)$$

$$\delta_j(\eta) = (\eta - \eta_j) (\eta - \eta_{j-1})^2 / (\eta_j - \eta_{j-1})^2 . \quad (2.3-60d)$$

A função de onda  $\psi(\eta)$  no intervalo  $0 \leq \eta \leq 1$  pode ser escrita como:

$$\psi(\eta) = \sum_{i=1}^N N_i(\eta) \psi_i + N_i'(\eta) \psi_i' = \mathcal{N}^T(\eta) [ \psi ] , \quad (2.3-61)$$

onde

$$\mathcal{N}(\eta) = [N_1 \ N_2 \ \dots \ N_N \ N'_1 \ N'_2 \ \dots \ N'_N]^T, \quad (2.3-62a)$$

e

$$[\psi] = [\psi_1 \ \psi_2 \ \dots \ \psi_N \ \psi'_1 \ \psi'_2 \ \dots \ \psi'_N]^T, \quad (2.3-62b)$$

com

$$N_i(\eta) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \eta \leq \eta_{i-1} \\ \beta_i(\eta), & \eta_{i-1} \leq \eta \leq \eta_i \\ \alpha_i(\eta), & \eta_i \leq \eta \leq \eta_{i+1} \\ 0, & \eta_{i+1} \leq \eta \leq 1 \end{cases}, \quad (2.3-63a)$$

$$N'_i(\eta) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \eta \leq \eta_{i-1} \\ \delta_i(\eta), & \eta_{i-1} \leq \eta \leq \eta_i \\ \gamma_i(\eta), & \eta_i \leq \eta \leq \eta_{i+1} \\ 0, & \eta_{i+1} \leq \eta \leq 1 \end{cases}. \quad (2.3-63b)$$

No intervalo  $[\eta_i, \eta_{i+1}]$ , a Eq.(2.3-61) é idêntica a Eq.(2.3-59). Usando o método de Galerkin<sup>33</sup>, a solução da equação de Schroedinger é igual à da equação matricial integral:

$$\int_0^1 \mathcal{N}(\eta) (\hat{H} - \pi^2 \epsilon) \psi(\eta) d\eta = [0], \quad (2.3-64)$$

onde  $[0]$  é um vetor nulo de  $2N$  linhas e  $\hat{H}$  é o operador Hamiltoniano,

$$\hat{H} = -\frac{d}{d\eta} \left( \frac{1}{m(\eta)} \frac{d}{d\eta} \right) + \pi^2 u(\eta) , \quad (2.3-65)$$

e  $\psi(\eta)$  é obtida da Eq.(2.3-62b). Substituindo as Eqs.(2.3-62) e (2.3-65) na Eq.(2.3-64) temos:

$$\int_0^1 \mathfrak{R}(\eta) \left[ -\frac{d}{d\eta} \left( \frac{1}{m(\eta)} \frac{d\mathfrak{R}^T(\eta)}{d\eta} \right) + \pi^2 u(\eta) \mathfrak{R}^T(\eta) - \pi^2 \varepsilon \mathfrak{R}^T(\eta) \right] [\psi] d\eta = [0] . \quad (2.3-66)$$

Integrando o primeiro membro da equação acima por partes ficamos com uma equação matricial:

$$\int_0^1 \frac{d\mathfrak{R}(\eta)}{d\eta} \frac{d\mathfrak{R}^T(\eta)}{d\eta} \frac{1}{m(\eta)} [\psi] d\eta = \frac{\mathfrak{R}(\eta)}{m(\eta)} \frac{d\mathfrak{R}^T(\eta)}{d\eta} [\psi] \Big|_0^1 - \pi^2 \int_0^1 u(\eta) \mathfrak{R}(\eta) \mathfrak{R}^T(\eta) [\psi] d\eta + \pi^2 \varepsilon \int_0^1 \mathfrak{R}(\eta) \mathfrak{R}^T(\eta) [\psi] d\eta , \quad (2.3-67)$$

e substituindo as Eqs.(2.3-62) no termo integrado da Eq.(2.3-67), obtemos:

$$\frac{\mathfrak{R}(\eta)}{m(\eta)} \frac{d\mathfrak{R}^T(\eta)}{d\eta} [\psi] \Big|_0^1 = \mathbf{F} , \quad (2.3-68)$$

onde  $F$  é uma matriz coluna  $2N \times 1$  cujos elementos são dados por

$$F_{11} = - \frac{\psi_1'}{m(0)} \delta_{11} + \frac{\psi_N'}{m(1)} \delta_{1N}, \quad (2.3-69)$$

com  $\delta_{ij} = 1$  ou  $0$  se  $i=j$  ou  $i \neq j$ , respectivamente.

A solução numérica da Eq.(2.3-67), deve satisfazer as condições de contorno em  $\eta = 0$  e em  $\eta = 1$ . A solução analítica para  $\eta < 0$  e  $\eta > 1$  é dada por:

$$\psi_1(\eta) = e^{ik_1\eta} + A_1 e^{-ik_1\eta}, \quad \eta < 0, \quad (2.3-70a)$$

$$\psi_2(\eta) = A_2 e^{ik_2\eta}, \quad \eta > 1, \quad (2.3-70b)$$

onde

$$k_1 = \pi \sqrt{m_1(\varepsilon - u_1)}, \quad (2.3-71a)$$

$$k_2 = \pi \sqrt{m_2(\varepsilon - u_2)}. \quad (2.3-71b)$$

Podemos escrever das Eqs.(2.3-70a) e (2.3-70b):

$$\psi_1'(0) = ik_1(2 - \psi_1(0)), \quad (2.3-72a)$$

$$\psi_2'(1) = ik_2\psi_2(1). \quad (2.3-72b)$$

Usando as condições de contorno  $\psi$  e  $\psi'/m$  contínuas em  $\eta=0$  e em  $\eta=1$ , temos:

$$\psi_1(0) = \psi_1 , \quad (2.3-73a)$$

$$\frac{\psi_1'(0)}{m_1} = \frac{\psi_1'}{m(0)} , \quad (2.3-73b)$$

$$\psi_2(1) = \psi_N , \quad (2.3-74a)$$

$$\frac{\psi_2'(1)}{m_2} = \frac{\psi_N'}{m(1)} . \quad (2.3-74b)$$

Substituindo as Eqs.(2.3-72a) e (2.3-72b) nas Eqs.(2.3-73) e (2.3-74), respectivamente, temos:

$$\psi_1' = ik_1 m(0) (2 - \psi_1) / m_1 , \quad (2.3-75a)$$

$$\psi_N' = ik_2 m(1) \psi_N / m_2 , \quad (2.3-75b)$$

e Eqs.(2.3-75) na Eq.(2.3-69), a Eq.(2.3-67) toma a forma:

$$\mathbf{A} [\psi] = \mathbf{B} , \quad (2.3-76)$$

onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz  $2N \times 2N$  e  $\mathbf{B}$  uma matriz  $2N \times 1$ , cujos

elementos são

$$A_{ij} = \int_0^1 \left[ \frac{dM_i}{d\eta} \frac{dM_j}{d\eta} \frac{1}{m(\eta)} + \pi^2 u(\eta) M_i M_j - \pi^2 \varepsilon M_i M_j \right] d\eta - \\ - ik_1 \delta_{i1} / m_1 - ik_2 \delta_{iN} / m_2 , \quad (2.3-78a)$$

$$B_{i1} = -2ik_1 \delta_{i1} / m_1 , \quad (2.3-78b)$$

onde

$$M_i = \begin{cases} N_i , & \text{se } i \leq N , \\ N_{i-N}' , & \text{se } i > N , \end{cases} \quad (2.3-79)$$

com  $N_i$ ,  $N_{i-N}'$  dados pelas Eqs.(2.3-63a) e (2.3-63b), respectivamente.

Usando a Eq.(2.3-7), o coeficiente de transmissão será dado por:

$$C_t = |A_2|^2 k_2 / k_1 , \quad (2.3-80)$$

onde  $|A_2|^2 = |\psi_2(1)|^2 = |\psi_N|^2$ , com  $\psi_N$  dado pela solução da Eq.(2.3-76).

Para uma discussão entre os métodos das seções 2.3.2 e 2.3.3, consideremos em ambos o mesmo número de intervalos. Para  $N$  intervalos temos  $N+1$  matrizes transferência



$2 \times 2$  no método dos "multisteps", e  $2(N+1)$  incógnitas no método dos elementos finitos. Isto significa um produto de  $N+1$  matrizes  $2 \times 2$  no "multisteps", e a solução de um sistema de  $2(N+1)$  incógnitas, onde os elementos da matriz dos coeficientes são integrais (Eq.(2.3-79)). O tempo computacional verificado pelo método dos "multisteps", é bem menor que o dos elementos finitos. Quanto à convergência, o método dos elementos finitos convergiu com  $N=25$  numa barreira simples não-abrupta, enquanto que o método dos "multisteps" convergiu com  $N=30$  em cada região de transição. Usando ambos os métodos, obtivemos os mesmos resultados. Devido à simplicidade do método dos "multisteps", ele será usado para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras simples não-abruptas de  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , e compararemos os resultados com os de uma barreira abrupta e com os da seção 2.3.1 (massa efetiva constante nas regiões de transição ou MEC).

#### 2.4 RESULTADOS

Para estudarmos o efeito das regiões de transição no coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas de  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , atribuímos valores numéricos para a largura da barreira, regiões de transições e fração molar de alumínio. Para o potencial e massa efetiva dados pelas Eqs.(2.1-8) e (2.1-7), respectivamente, usaremos o método da seção 2.3.2.

Para observarmos o efeito das regiões de transição

no coeficiente de transmissão, variaremos primeiro a espessura desta, fixando a fração molar de alumínio e a largura das barreiras.

Usando os métodos das seções 2.3.1(MEC) e 2.3.2("multisteps"), mostramos nas Figuras 10a, 10b e 10c, o coeficiente de transmissão em função da energia incidente dos elétrons para uma barreira não-abrupta simétrica de largura  $2b=100\text{\AA}$ , fração molar de alumínio  $x=0.35$ , e regiões de transição  $2a=2.0, 4.0, 6.0PR$  (onde PR é um parâmetro de rede do GaAs( $5.653\text{\AA}$ )). Os resultados obtidos são comparados com os de uma barreira abrupta. Como podemos ver, a relação pico/vale(RPV) diminui com o aumento das regiões de transição e os picos se deslocam para altas energias. O método da seção 2.3.1(MEC) subestima a RPV.

Para analisarmos o efeito das regiões de transição no coeficiente de transmissão de uma barreira não-abrupta com de uma barreira abrupta, em relação à largura das barreiras, consideramos barreiras simétricas com larguras  $2b= 100, 200$  e  $300\text{\AA}$ , com regiões de transição  $2a=2.0$  e  $4.0PR$  e fração molar de alumínio  $x=0.45$  (Figs.11a, 11b e 11c, respectivamente). Notamos que há maiores discrepâncias entre o abrupto e o não-abrupto, para barreiras com pequenas larguras.

Nas Figuras 12a, 12b e 12c mostramos o coeficiente de transmissão de uma barreira não-abrupta simétrica e comparamos com os de uma abrupta, com larguras  $2b=100\text{\AA}$ , regiões de transição  $2a=4.0PR$  e frações molares de alumínio  $x=0.25$ ,

0.35 e 0.45, respectivamente. Há uma tendência do caso abrupto coincidir com o caso não-abrupto para baixas frações molares de alumínio. Portanto não podemos fazer comparações do caso abrupto com caso não-abrupto usando o método da seção 2.3.1(MEC), pois este é válido somente para baixas frações molares de alumínio.

O efeito assimétrico decorrente da diferença entre as regiões de transição, é mostrado na Figura 13a com  $2b=100\text{\AA}$ ,  $2a=2c=4.0PR$ (para a simétrica),  $2a=2.0PR$  e  $2c=6.0PR$ (para a não-simétrica), sendo a fração molar de alumínio  $x=0.35$ . Vemos que a RPV é maior na barreira simétrica do que na não-simétrica. O mesmo resultado é obtido se  $2c=2.0PR$  e  $2a=6.0PR$ , para a barreira não-simétrica, e  $2a=2c=4.0PR$  para a simétrica(Fig.13b).

Nas Figuras 14a,14b e 14c , mostramos o efeito do operador energia cinética no coeficiente de transmissão. Na Figura 14a consideramos uma barreira abrupta com largura  $2b=100\text{\AA}$ , e fração molar de alumínio  $x=0.35$ , e mostramos o coeficiente de transmissão em função da energia dos elétrons incidentes para operadores com  $\beta=0$  e  $-1$ (Eq.(2.1-4) sendo  $\alpha=\gamma$ ). A RPV é menor para  $\beta=0$ . Na Figura 14b, consideramos uma barreira não-abrupta simétrica com largura  $2b=100\text{\AA}$ , fração molar de alumínio  $x=0.35$  e regiões de transição  $2a=4.0PR$ , mostrando o coeficiente de transmissão para  $\beta=0$  e  $-1$ . Notamos que no caso da barreira não-abrupta o efeito do operador diminui.

## CAPÍTULO 3

### COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS DUPLAS SIMÉTRICAS NÃO-ABRUPTAS DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

Estudaremos o efeito da região de transição entre o GaAs e o Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As no coeficiente de transmissão em barreiras duplas simétricas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. No Capítulo anterior, calculamos o coeficiente de transmissão em barreiras simples não-abruptas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, e através dos resultados podemos ver que o coeficiente de transmissão é quase nulo para energias menores que a altura da barreira. Numa barreira dupla, mesmo para energias menores que as alturas das barreiras, o coeficiente de transmissão pode ser igual a um<sup>5,35</sup>. Usaremos o método da seção 2.3.2 para uma barreira dupla não-abrupta, e compararemos com os resultados de uma barreira dupla abrupta.

#### 3.1 TUNELAMENTO RESSONANTE EM BARREIRAS DUPLAS

Uma barreira dupla é formada por duas barreiras simples separadas por um poço quântico. Entretanto, os elétrons situados em um nível do poço podem tunelar para fora do poço (Fig.15). Quando a energia do elétron incidente é igual à energia de um dos níveis do poço na barreira dupla, o coeficiente de transmissão é igual a um, independente da

largura das barreiras. Este fenômeno conhecido como tunelamento ressonante foi previsto em 1969<sup>32</sup>, e foi primeiramente observado por L.Esaki, L.Chang e R.Tsu<sup>5</sup> usando uma heteroestrutura de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Subseqüentes trabalhos em barreiras duplas ou triplas<sup>9,11</sup> confirmaram o tunelamento ressonante. Este fenômeno é muito usado em componentes microeletrônicos.

Para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras duplas, os trabalhos não levam em consideração o efeito da região de transição<sup>7-11</sup>. O tunelamento ressonante deve sofrer algumas alterações se considerarmos que a interface entre o GaAs e o Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não é abrupta<sup>12</sup>. No Capítulo anterior, vimos que a dependência da massa efetiva com a posição transforma o operador Hamiltoniano em não-Hermitiano. Estudaremos os efeitos da região de transição no coeficiente de transmissão em barreiras duplas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, considerando o modelo proposto para a barreira simples.

### 3.2 POTENCIAL E MASSA EFETIVA EM BARREIRAS DUPLAS SIMÉTRICAS NÃO-ABRUPTAS DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

A fabricação de uma barreira dupla de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, pode ser feita através da técnica MBE com duas camadas de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As separando uma camada estreita de GaAs (da ordem de ângstrons), de duas camadas longas de GaAs. Devido a diferença entre os "gaps" diretos do GaAs e Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, vimos

que surge uma barreira de potencial para os elétrons na banda de condução dada por:

$$v = C (\varepsilon_1 x + \varepsilon_2 x^2) , \quad (3.2-1)$$

onde  $C=0.60$  é o "band offset",  $\varepsilon_1=1.155$ ,  $\varepsilon_2=0.37$ ,  $x$  é a fração molar de alumínio em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , e  $v$  dado em elétron-volt. A massa efetiva dos elétrons na banda de condução é dada por :

$$m(\text{GaAs}) = \mu_1 , \quad (3.2-2a)$$

$$m(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = \mu_1 + \mu_2 x , \quad (3.2-2b)$$

onde  $\mu_1=0.067m_0$  e  $\mu_2=0.083m_0$ , sendo  $m_0$  a massa do elétron livre.

Usando o mesmo procedimento do Capítulo anterior, vamos supor que a fração molar de alumínio varie linearmente em cada região (Fig.16a). Podemos escrever a fração molar de alumínio nas regiões de transição como:

$$\chi(z) = \begin{cases} x(z-z_1)/2a , & z_1 \leq z \leq z_2 , \\ x(z_4-z)/2c , & z_3 \leq z \leq z_4 , \\ x(z-z_5)/2c , & z_5 \leq z \leq z_6 , \\ x(z_8-z)/2a , & z_7 \leq z \leq z_8 , \end{cases} \quad (3.2-3)$$

onde  $2a, 2c$  são as larguras das regiões de transição,  $x$  é a fração molar de alumínio,  $z_1 = -d/2 - 2b - a$ ,  $z_2 = z_1 + 2a$ ,  $z_3 = -d/2 - c$ ,  $z_4 = -d/2 + c$ ,  $z_5 = -z_4$ ,  $z_6 = -z_3$ ,  $z_7 = -z_2$ ,  $z_8 = -z_1$ , sendo  $2b$  a largura média das barreiras e  $d$  a largura média do poço (Figs. 16b e 16c).

As Eqs. (3.2-1) e (3.2-2) podem ser generalizadas para toda região como:

$$m(z) = \mu_1 + \mu_2 \chi(z) , \quad (3.2-4a)$$

$$v(z) = C(\epsilon_1 \chi(z) + \epsilon_2 \chi(z)^2) . \quad (3.2-4b)$$

Para calcularmos o coeficiente de transmissão, usaremos o método da seção 2.3.2 com operador energia cinética dado pela Eq. (2.2-2). Não aplicaremos a aproximação da seção 2.3.1, uma vez que ela corresponde ao método da seção 2.3.2 para baixas frações molares de alumínio. Além disso, o cálculo é muito extenso pois envolve o produto de oito matrizes transferências.

### 3.3 RESULTADOS

Para observarmos o efeito da região de transição no coeficiente de transmissão em barreiras duplas simétricas não-abruptas de  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , devemos considerar o efeito das

regiões de transição situadas fora do poço e dentro do poço, para energias menores e maiores que a altura da barreira, visto que o fenômeno do tunelamento ressonante ocorre para energias menores que a altura da barreira.

a) EFEITO DAS REGIÕES DE TRANSIÇÃO SITUADAS FORA DO POÇO.

Para analisarmos este efeito, consideraremos elétrons incidentes com energias menores que a altura da barreira ( $E < v_x$ ), e elétrons com energia maiores que a altura da barreira ( $E > v_x$ ).

i)  $E < v_x$  :

Variando apenas as regiões de transição situadas fora do poço em  $2a=2.0, 4.0$  e  $6.0PR$ , e mantendo constantes as regiões de transição dentro do poço com  $2c=2.0PR$ , largura do poço  $d=100\text{Å}$ , fração molar de alumínio  $x=0.45$  e largura das barreiras  $2b=200\text{Å}$ , mostramos na Figura 17a o coeficiente de transmissão como função da energia dos elétrons incidentes. Como podemos ver, não há mudança significativa no coeficiente de transmissão para diferentes valores das regiões de transição situadas fora do poço.

Na Figura 17b, diminuimos a largura das barreiras para  $2b=100\text{Å}$ , mantendo a fração molar de alumínio com  $x=0.45$ , largura do poço  $d=100\text{Å}$ , regiões de transição dentro do poço



$2c=2.0PR$ , variando as regiões de transição situadas fora do poço em  $2a=2.0, 4.0$  e  $6.0PR$ . Podemos observar que, mesmo em barreiras não muito largas, a mudança nas localizações dos picos de ressonância quando variamos as regiões de transição situadas fora do poço, é desprezível.

Podemos concluir que para elétrons incidentes com energia menores que a altura da barreira, o efeito das regiões de transição no coeficiente de transmissão é insignificante.

ii)  $E > v_x$  :

Nas Figuras 18a, 18b e 18c, mostramos o coeficiente de transmissão dos elétrons em função de  $E/v_x$ , para barreiras duplas não-abruptas simétricas, com largura das barreiras de  $2b=100\text{Å}$ , largura do poço  $d=100\text{Å}$ , fração molar de alumínio  $x=0.45$ , regiões de transição dentro do poço  $2c=2.0PR$ , e variando as regiões de transição situadas fora do poço de  $2a=2.0, 4.0$  e  $6.0PR$ , respectivamente, comparando com o coeficiente de transmissão dos elétrons de uma barreira dupla abrupta com  $2b=100\text{Å}$ ,  $d=100\text{Å}$  e  $x=0.45$ . Neste caso, podemos observar uma mudança significativa no coeficiente de transmissão, quando aumentamos as regiões de transição situadas fora do poço. Os picos de ressonância tendem a diminuir.

b) EFEITO DAS REGIÕES DE TRANSIÇÃO SITUADAS DENTRO DO POÇO.

i)  $E < v_x$  :

Na Figura 19a, mostramos o coeficiente de transmissão dos elétrons em função da energia, para barreiras duplas simétricas não-abruptas, mantendo constante a fração molar de alumínio em  $x=0.45$ , regiões de transição situadas fora do poço em  $2a=2.0\text{Å}$ , largura do poço em  $d=100\text{Å}$ , largura das barreiras em  $2b=200\text{Å}$  e variando as regiões de transição situadas dentro do poço de  $2c=2.0, 4.0$  e  $6.0\text{PR}$ . Neste caso, podemos observar um deslocamento dos picos de ressonância para altas energias, quando aumentamos a largura das regiões de transição situadas dentro do poço.

Ao compararmos, na Figura 19b, o coeficiente de transmissão dos elétrons em uma barreira dupla simétrica abrupta, com largura das barreiras  $2b=100\text{Å}$ , largura do poço  $d=100\text{Å}$ , fração molar de alumínio  $x=0.45$ , com o coeficiente de transmissão dos elétrons em uma barreira dupla simétrica não-abrupta, de mesmas dimensões, com regiões de transição situadas fora do poço de  $2a=2.0\text{PR}$ , regiões de transição dentro do poço de  $2c=6.0\text{PR}$ , torna-se mais evidente o deslocamento dos picos de ressonância.

O efeito das regiões de transição situadas dentro do poço no coeficiente de transmissão é o deslocamento dos picos de ressonância para altas energias.

ii)  $E > v_x$  :

Mostramos nas Figuras 20a, 20b e 20c, o coeficiente de transmissão dos elétrons em função de  $E/v_x$ , para uma barreira dupla não-abrupta simétrica com largura das barreiras  $2b=100\text{\AA}$ , largura do poço  $d=100\text{\AA}$ , fração molar de alumínio  $x=0.45$ , regiões de transição situadas fora do poço  $2a=2.0PR$ , variando as regiões de transição situadas dentro do poço em  $2c=2.0, 4.0$  e  $6.0PR$ , respectivamente, comparando com o coeficiente de transmissão em uma barreira dupla abrupta de mesmas dimensões e mesma fração molar de alumínio. Podemos observar o aparecimento de picos de ressonância quando aumentamos as regiões de transição situadas dentro do poço.

## CAPÍTULO 4

### MÉTODO ANALÍTICO PARA O COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS NÃO-ABRUPTAS

Nos capítulos anteriores resolvemos o problema do coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As usando métodos numéricos. O método de WKB<sup>17</sup> não consegue explicar os fenômenos de ressonância em barreiras duplas, e falha quando se aplica à altas energias. Em alguns casos podemos resolver analiticamente a equação de Schroedinger, e calcular o coeficiente de transmissão. Quando consideramos a massa efetiva variável, a solução analítica para o coeficiente de transmissão torna-se muito difícil, o que nos leva a usar métodos numéricos<sup>36-38</sup>. Neste capítulo propomos um método analítico para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas e aplicamos a uma heterojunção não-abrupta de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

#### 4.1 DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO

O interesse pelo fenômeno de tunelamento ressonante vem crescendo ultimamente e vários métodos numéricos

foram propostos para obtenção do coeficiente de transmissão, como o método dos elementos finitos<sup>16</sup>, "multisteps"<sup>15</sup> e outros<sup>36-38</sup>. A aproximação WKB é um método analítico mas não consegue explicar os picos de ressonância, e falha o quando aplicamos a altas energias<sup>17</sup>. Para potenciais simples, do tipo linear ou parabólico, a equação de Schroedinger pode ser resolvida analiticamente em regiões onde a massa efetiva dos elétrons é constante. Usando o formalismo das matrizes transferência, podemos calcular analiticamente o coeficiente de transmissão (seção 2.3.1). Entretanto, é difícil analisar as expressões analíticas obtidas (ver Eq.(2.3-37)).

Propomos um método analítico para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras não-abruptas, a ser desenvolvido a seguir, e aplicaremos a uma heterojunção não-abrupta de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Neste método, usaremos o mesmo procedimento da seção (2.3.2).

Dividimos a região do potencial  $a \leq z \leq b$  em  $N$  intervalos de comprimentos  $\Delta z = (b-a)/N$  (Fig8a). Considerando que o potencial e a massa efetiva dos elétrons tenham variação contínua em toda região, no intervalo  $z_i \leq z \leq z_{i+1}$ , aproximaremos o potencial e a massa efetiva por:

$$v(z) = v_i = v(z_{i+1}) , \quad (4.1-1a)$$

e

$$m(z) = m_i = m(z_{i+1}) . \quad (4.1-1b)$$

A solução da equação de Schroedinger neste intervalo é dada por:

$$\psi_i(z) = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z} , \quad (4.1-2)$$

onde

$$k_i = \sqrt{2m_i(E-v_i)/\hbar^2} , \quad (4.1-3)$$

é o módulo do vetor de onda do elétron em uma dimensão.

Usando as condições de contorno,  $\psi$  e  $\psi'/m$  contínuos no ponto  $z=z_i$ , a relação entre os coeficientes  $A_{i-1}, B_{i-1}$  e  $A_i, B_i$  será dada por:

$$\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = M_i \begin{pmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{pmatrix} , \quad (4.1-4)$$

onde a matriz transferência  $M_i$  possui a forma

$$M_i = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1+s_i)e^{-i\Delta k_i z_i} & (1-s_i)e^{-i\Sigma k_i z_i} \\ (1-s_i)e^{i\Sigma k_i z_i} & (1+s_i)e^{i\Delta k_i z_i} \end{pmatrix} , \quad (4.1-5)$$

com  $s_i = \frac{k_{i-1}/m_{i-1}}{k_i/m_i}$  ,  $\Delta k_i = k_i - k_{i-1}$  e  $\Sigma k_i = k_i + k_{i-1}$  .

Para  $\Delta z \rightarrow 0$ , a matriz dada pela Eq.(4.1-5) tende para a matriz identidade. Usando este fato definimos uma matriz  $\Delta N_i$  como:

$$\Delta N_i = M_i^{-1} \mathbf{1} , \quad (4.1.5)$$

onde  $\mathbf{1}$  é a matriz identidade. Introduzimos uma função definida por  $f(z)=k(z)/m(z)$ , onde  $m(z)$  é a massa efetiva e  $k(z)$  é a função:

$$k(z) = \sqrt{2m(z)(E-v(z))}/\hbar^2 , \quad (4.1-6)$$

que corresponde a Eq.(4.1-3) com  $z=z_i$ .

Para calcularmos a diferencial  $dN$  em um ponto  $z$ , primeiro vamos considerar as seguintes relações:

$$s_i = \frac{k_{i-1}/m_{i-1}}{k_i/m_i} = \frac{f(z_i)}{f(z_{i+1})} = \frac{f}{f+\Delta f} , \quad (4.1-7)$$

$$e^{\pm i\Delta k_i z_i} = e^{\pm i\Delta k z} = 1 \pm i\Delta k z - \Delta k^2 z^2 / 2! + \dots , \quad (4.1-8)$$

onde  $\Delta f=f(z_{i+1})-f(z_i)=f(z+\Delta z)-f(z)$  e  $\Delta k=k(z_{i+1})-k(z_i)$  com  $z=z_i$ . Substituindo as Eqs.(4.1-7) e (4.1-8) na Eq.(4.1-5), os elementos da matriz  $\Delta N$  (ignorando o índice) podem ser escritos como:

$$\Delta N_{11} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{f}{f+\Delta f} \right) (1-i\Delta kz) - 1, \quad (4.1-9a)$$

$$\Delta N_{12} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{f}{f+\Delta f} \right) e^{-i\Sigma kz}, \quad (4.1-9b)$$

$$\Delta N_{21} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{f}{f+\Delta f} \right) e^{i\Sigma kz}, \quad (4.1-9c)$$

$$\Delta N_{22} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{f}{f+\Delta f} \right) (1+i\Delta kz) - 1, \quad (4.1-9d)$$

onde desprezamos os termos de segunda ordem em  $\Delta k$  e  $\Sigma k = k(z+\Delta z) + k(z)$ . Dividindo as Eqs.(4.1-9) por  $\Delta z$  e tomando o limite quando  $\Delta z \rightarrow 0$ , temos:

$$dN = \begin{pmatrix} -izdk - df/2f & e^{-2ikz} df/2f \\ e^{2ikz} df/2f & izdk - df/2f \end{pmatrix}. \quad (4.1-10)$$

Para o cálculo do coeficiente de transmissão, vamos considerar a Eq.(4.1-4) em todos os intervalos. A relação entre os coeficientes da região de incidência e da região de transmissão será dada por:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (4.1-11)$$

onde



$$M = M_N M_{N-1} \dots M_2 M_1 = \prod_{i=1}^N M_i . \quad (4.1-12)$$

Considerando o limite quando  $N \rightarrow \infty$  ( $\Delta z \rightarrow 0$ ), e levando-se em conta as identidades matriciais

$$\ln(AB) = \ln A + \ln B, \text{ se } [A, B] = 0 , \quad (4.1-13a)$$

e

$$\ln(1+A) = A - A^2/2 + A^3/3 - \dots, \quad (4.1-13b)$$

onde a Eq(4.1-13b) é válida se  $-1 < \lambda \leq 1$ , sendo  $\lambda$  auto-valor de  $A$ , podemos usar a Eq.(4.1-13b) para  $\ln(1+\Delta N_i)$ , pois as matrizes  $\Delta N_i$  dadas pela Eq.(4.1-5) são quase nulas e seus auto-valores são pequenos. Escrevendo a Eq.(4.1-12) como:

$$M = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^N M_i = \lim_{N \rightarrow \infty} e^{\ln(\prod M_i)} , \quad (4.1-14)$$

e observando que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} [(1+\Delta N_i), (1+\Delta N_j)] = \lim_{N \rightarrow \infty} [\Delta N_i, \Delta N_j] = 0 , \quad (4.1-15)$$

e que o comutador  $[\Delta N_i, \Delta N_j]$  é de 2ª ordem, e usando as Eq.(4.1-13), podemos escrever:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} [\ln(\prod M_i)] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum \ln(1 + \Delta N_i) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum \Delta N_i = \int_a^b dN = N(a, b) , \end{aligned} \quad (4.1-16)$$

onde  $dN$  é a matriz dada pela Eq.(4.1-10). Portanto, o limite do produtório(Eq.(4.1-14)) é dado por:

$$M = e^{N(a,b)} . \quad (4.1-17)$$

Para calcularmos o coeficiente de transmissão, substituímos a Eq.(4.1-17) na Eq.(4.1-11) e assumimos que  $A_0=1$ ,  $B_{N+1}=0$ , obtendo assim:

$$C_t = \frac{f(a)}{f(b)} (1/|M_{22}|^2) , \quad (4.1-18)$$

sendo  $M_{22}$  elemento da matriz  $M$  dada pela Eq.(4.1-17). Usando a fórmula de Silvester<sup>39</sup>,

$$e^N = \frac{(N - 1\lambda_2)}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{\lambda_1} + \frac{(N - 1\lambda_1)}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{\lambda_2} , \quad (4.1-19)$$

onde  $\lambda_1, \lambda_2$  são os auto-valores de  $N = N(a,b)$ , podemos escrever  $M_{22}$  como:

$$M_{22} = \frac{(N_{22} - \lambda_2)}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{\lambda_1} + \frac{(N_{22} - \lambda_1)}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{\lambda_2} . \quad (4.1-20)$$

Podemos obter o método de WKB como uma aproximação deste método. Consideremos os elementos da matriz N

$$N_{11} = \int_a^b -izdk - df/2f , \quad (4.1-21a)$$

$$N_{12} = \int_a^b e^{-2ikz} df/2f , \quad (4.1-21c)$$

$$N_{21} = \int_a^b e^{2ikz} df/2f , \quad (4.1-21c)$$

e

$$N_{22} = \int_a^b izdk - df/2f . \quad (4.1-21d)$$

Para massa efetiva constante  $df = dk/m$ , e se o potencial variar lentamente  $dk/dz \approx 0$ , assim podemos desprezar os termos  $df/f$  nas integrais acima, e integrando a Eq.(4.1-21d) por partes temos:

$$N_{22} \approx \int_a^b izdk = izk(z) \Big|_a^b - \int_a^b ik(z) dz . \quad (4.1-22)$$

Considerando energias menores que a barreira e  $k(b) = k(a) = 0$  ("turning points"), os auto-valores da matriz  $N$  serão:

$$\lambda_1 = N_{11} = - \int_a^b \alpha(z) dz , \quad (4.1-23a)$$

$$\lambda_2 = N_{22} = \int_a^b -\alpha(z) dz , \quad (4.1-23b)$$

onde  $\alpha(z) = \sqrt{2m(z)(v(z)-E)/\hbar^2}$ . Substituindo as Eqs.(4.1-23) na Eq.(4.1-20) temos:

$$M_{22} = \exp\left(\int_a^b \alpha(z) dz\right) , \quad (4.1-24)$$

e o coeficiente de transmissão será dado por

$$C_t = \exp\left(-2 \int_a^b \alpha(z) dz\right) , \quad (4.1-25)$$

que é o resultado obtido pela aproximação WKB.

## 4.2 APLICAÇÃO DO MÉTODO A UMA HETEROJUNÇÃO NÃO-ABRUPTA DE GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

Para estudarmos a validade deste método, vamos considerar uma heterojunção formada por uma camada de GaAs e outra de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, mostrada na Figura 21. Usando os mesmos procedimentos dos capítulos anteriores, escreveremos a massa efetiva dos elétrons e o potencial da heterojunção como:

$$m(z) = \mu_1 + \mu_2\chi(z), \quad (4.2-1)$$

e

$$v(z) = C(\epsilon_1\chi(z) + \epsilon_2\chi(z)^2), \quad (4.2-2)$$

onde  $C=0.60$  ("band offset" de condução),  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ,  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  são os mesmos parâmetros usados no Cap.2, e  $\chi(z)$  é a fração molar de alumínio na região de transição dada por

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq -a, \\ x(z+a)/2a, & -a \leq z \leq a, \\ x, & z \geq a, \end{cases} \quad (4.2-3)$$

sendo  $2a$  a região de transição, e  $x$  a fração molar de alumínio em Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

### 4.3 RESULTADOS

Para obtermos resultados numéricos deste método, mostramos nas Figuras 22a, 22b e 22c, o coeficiente de transmissão em função da energia dos elétrons incidentes, para uma heterojunção não-abrupta, mantendo a fração molar de alumínio constante em  $x=0.45$ , variando a região de transição de  $2a=2.0$ ,  $4.0$  e  $6.0PR$ , respectivamente, comparando com uma heterojunção abrupta com mesma fração molar de alumínio. Podemos observar que o coeficiente de transmissão aumenta quando aumentamos a região de transição.

Os resultados obtidos através desta abordagem, são os mesmos quando usamos o método dos "multisteps"<sup>15</sup> ou o dos elementos finitos<sup>16</sup>. A vantagem deste método está no fato de ser analítico, permitindo que sejam feitas algumas aproximações nas expressões, obtendo como uma primeira aproximação o método de WKB. Nossos resultados mostram, explicitamente, que as regiões onde não há variações do vetor de onda dos elétrons não contribuem para o coeficiente de transmissão.

## CONCLUSÕES

Para uma conclusão geral sobre os efeitos de uma interface não-abrupta entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  no coeficiente de transmissão, vamos analisar todos os resultados obtidos .

No caso de uma barreira simples, os resultados do segundo Capítulo, mostraram que o efeito das regiões de transição é reduzir a relação pico/vale e deslocar os picos para altas energias. Para baixas frações molares de alumínio esse efeito não é muito significativo, e podemos considerar a barreira como abrupta para o cálculo do coeficiente de transmissão. Entretanto, podemos observar que, para frações molares acima de 0.25, o efeito das regiões de transição é bastante visível, e deve ser considerado para o cálculo do coeficiente de transmissão. Observamos que, para barreiras com larguras abaixo de  $200\text{Å}$ , o efeito das regiões de transição deve ser considerado, sendo desprezado para larguras acima de  $200\text{Å}$ . A forma do operador energia cinética é importante apenas para barreiras com pequenas regiões de transição. Para grandes regiões de transição não foram verificadas grandes diferenças entre os operadores para o cálculo do coeficiente de transmissão.

Através dos resultados do terceiro Capítulo, concluímos que para elétrons incidentes com energias menores

que a altura da barreira, não há efeito das regiões de transição situadas fora do poço no coeficiente de transmissão em barreiras duplas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Ainda para uma barreira dupla, com energia dos elétrons menor que a altura da barreira, as regiões de transição situadas dentro do poço têm como efeito sobre o coeficiente de transmissão, o deslocamento dos picos de ressonância para altas energias. Considerando ainda uma barreira dupla, e elétrons incidentes com energia maior que a altura da barreira, o efeito das regiões de transição situadas fora do poço é diminuir tanto o número de picos de ressonância quanto a relação pico/vale. Ao contrário, as regiões de transição situadas dentro do poço aumentam o número de picos de ressonância.

Na heterojunção, o efeito da região de transição, é aumentar a transmissão dos elétrons, o que está de acordo os resultados obtidos por Valder et al<sup>14</sup>.

Finalmente concluímos que devemos considerar a interface entre o GaAs e o  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  como não-abrupta para o cálculo do coeficiente de transmissão em barreiras, quando a largura das barreiras for menor que  $200\text{\AA}$ , e quando a fração molar de alumínio for maior que 0.25.



## LEGENDA DE FIGURAS

FIGURA 1 - Esquema ilustrativo das bandas de energia de um semiconductor. (a) No zero absoluto, (b) Na temperatura ambiente, mostrando os elétrons e os buracos termicamente excitados.

FIGURA 2 - Bandas de energia do GaAs, em função do vetor de onda reduzido, mostrando o ponto  $\Gamma$ .

FIGURA 3 - Modelo esquemático de um poço quântico de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , mostrando o "band offset" de condução e de valência, e o "gap" de energia.

FIGURA 4 - Modelo proposto para a fração molar de alumínio de uma barreira simples não-abrupta de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . 2a e 2c são as larguras das regiões de transição, e 2b a largura média da barreira.

FIGURA 5 - Modelo para o potencial e massa efetiva de uma barreira simples de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . (a) potencial, (b) massa efetiva.

FIGURA 6 - Potencial e massa efetiva arbitrários. (a) potencial, (b) massa efetiva.

FIGURA 7 - Modelo aproximado proposto por Valder et al<sup>14</sup> para o potencial e massa efetiva de uma barreira simples de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. (a) potencial, (b) massa efetiva.

FIGURA 8 - Esquema ilustrativo mostrando o procedimento usado no método dos "multisteps". (a) potencial, (b) massa efetiva.

Figura 9 - Função de onda solução da Eq.(2.3-57), mostrando os pontos nodais usados para interpolação no método dos elementos finitos.

FIGURA 10 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$  (sendo  $E$  a energia dos elétrons incidentes e  $v_x$  a altura da barreira), para uma barreira simples de largura  $2b=100\text{\AA}$ , fração molar de alumínio  $x=0.45$ . (a)  $2a=2c=2.0\text{PR}$ , (b)  $2a=2c=4.0\text{PR}$  e (c)  $2a=2c=6.0\text{PR}$ . Abrupta(—), "multisteps"(- - -) e MEC(. . .).

FIGURA 11 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$ , para barreiras simples simétricas com fração molar de alumínio  $x=0.45$ . (a)  $2b=100\text{\AA}$ , (b)  $2b=200\text{\AA}$ , (c)  $2b=300\text{\AA}$ . Abrupta(—), não-abrupta (- - -) com  $2a=2c=2.0\text{PR}$  e (. . .) com  $2a=2c=4.0\text{PR}$ .

FIGURA 12 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$ , mostrando o efeito das regiões de transição quando variamos a fração molar de alumínio, para barreiras larguras  $2b=100\text{\AA}$ .

(a)  $x=0.25$ , (b)  $x=0.35$  e (c)  $x=0.45$ . Abrupta(—), não-abrupta(- - -) com  $2a=2c=4.0PR$ .

FIGURA 13 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$ , mostrando o efeito assimétrico, para uma barreira não-abrupta com largura  $2b=100\text{\AA}$ , fração molar de alumínio  $x=0.35$ .

(a) simétrica com  $2a=2c=4.0PR$ (—), não-simétrica com  $2a=2.0PR$ ,  $2c=6.0PR$ (- - -),

(b) simétrica com  $2a=2c=4.0PR$ (—), não-simétrica com  $2a=6.0PR$ ,  $2c=2.0PR$ (- - -).

FIGURA 14 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$ , mostrando a influência do operador  $\beta$ , para uma barreira de largura  $2b=100\text{\AA}$ , fração molar de alumínio  $x=0.35$ . (a) abrupta, (b) não-abrupta com  $2a=2c=4.0PR$ .  $\beta=-1$ (—) e  $\beta=0$ (- - -).

FIGURA 15 - Esquema ilustrativo de uma barreira dupla. II é o poço, I e III são as barreiras simples que formam a barreira dupla.

FIGURA 16 - Modelos para a fração molar de alumínio, potencial e massa efetiva de uma barreira dupla simétrica não-abrupta de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. (a) fração molar de alumínio. (b) potencial e (c) massa efetiva.

FIGURA 17 - Logarítmo do coeficiente de transmissão em função da energia dos elétrons incidentes em elétron-volt, para uma barreira dupla não-abrupta simétrica, com  $2c=2.0PR$ ,  $d=100\text{\AA}$  e  $x=0.45$ , variando apenas as regiões de transição situadas fora do poço e a larguras das barreiras. (a)  $2b=200\text{\AA}$ , (b)  $2b=100\text{\AA}$ .  $2a=2.0PR$ (—),  $2a=4.0PR$ (- - - -) e  $2a=6.0PR$ (. . . .).

FIGURA 18 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$ , para barreiras duplas simétricas com  $2b=100\text{\AA}$ ,  $d=100\text{\AA}$ ,  $x=0.45$  e regiões de transição situadas dentro do poço  $2c=2.0PR$ . (a)  $2a=2.0PR$ , (b)  $2a=4.0PR$  e (c)  $2a=6.0PR$ . Abrupta(—), não-abrupta(- - - -).

FIGURA 19 - Logarítmo do coeficiente de transmissão em função da energia dos elétrons incidentes, mostrando o efeito das regiões de transição situadas dentro do poço para barreiras duplas. (a)  $2b=200\text{\AA}$ ,  $d=100\text{\AA}$ ,  $x=0.45$ ,  $2a=2.0PR$ , com  $2c=2.0PR$ (—),  $2c=4.0PR$ (- - - -) e  $2c=6.0PR$ (. . . .). (b) Barreiras duplas abruptas e não-abruptas, com  $2b=100\text{\AA}$ ,  $d=50\text{\AA}$ ,  $x=0.45$ , sendo abrupta(—) e não-abrupta(- - - -).

FIGURA 20 - Coeficiente de transmissão em função de  $E/v_x$ , para barreiras duplas não-abruptas e abruptas com  $2b=100\text{\AA}$ ,  $2a=2.0\text{PR}$ ,  $d=100\text{\AA}$  e  $x=0.45$ , variando as regiões de transição situadas dentro do poço. (a)  $2c=2.0\text{PR}$ , (b)  $2c=4.0\text{PR}$ , (c)  $2c=6.0\text{PR}$ .  
Abrupta(—), não-abrupta(- - - -).

FIGURA 21 - Esquema ilustrativo de uma heterojunção de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , mostrando os "band offset" de condução e de valência.

FIGURA 22 - Coeficiente de transmissão em função da energia dos elétrons incidentes para heterojunções abruptas e não-abruptas, com fração molar de alumínio  $x=0.45$ .  
(a)  $2a=2.0\text{PR}$ , (b)  $2a=4.0\text{PR}$ , (c)  $2a=6.0\text{PR}$ .  
Abrupta(—) e não-abrupta(- - - -).

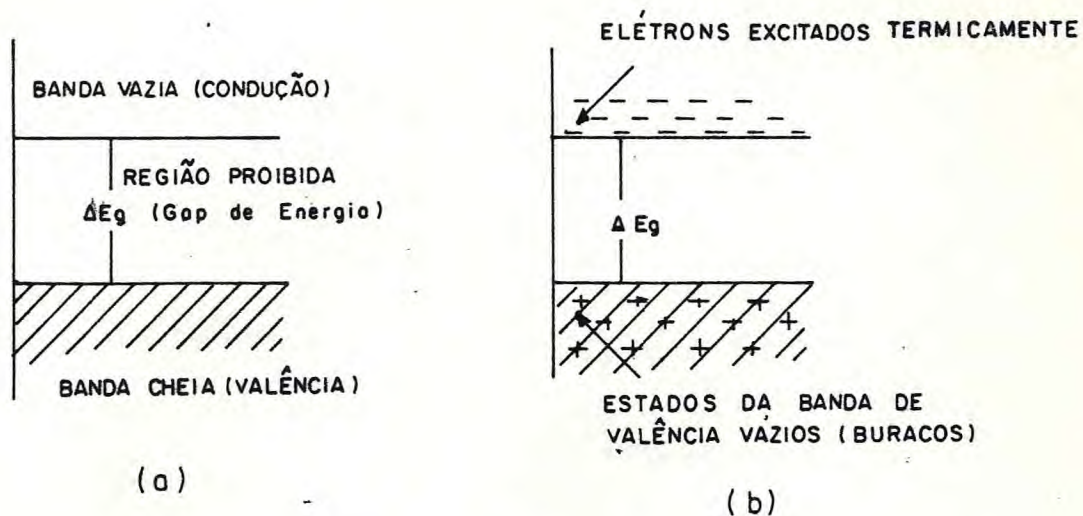


Figura 1

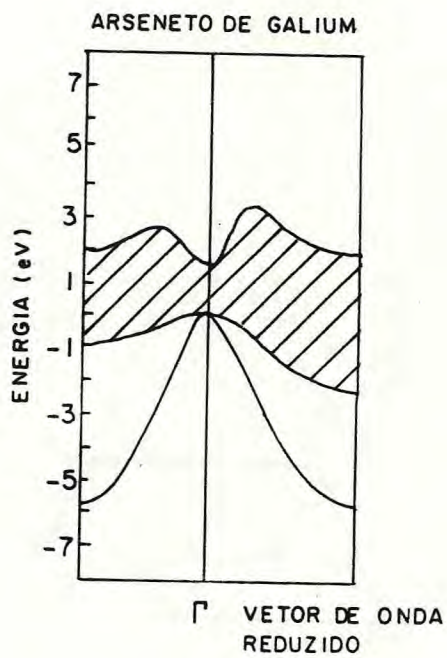


Figura 2

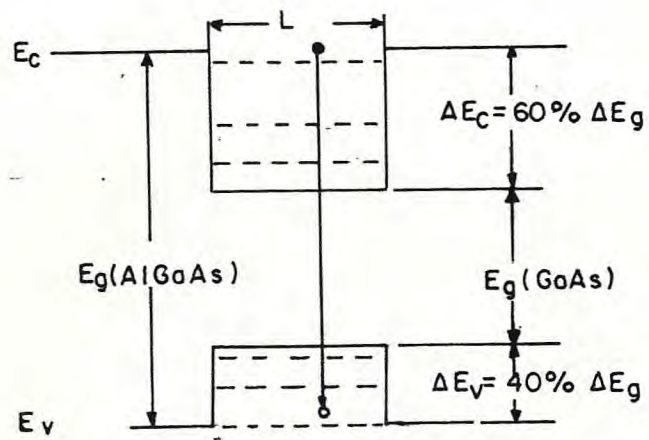


Figura 3

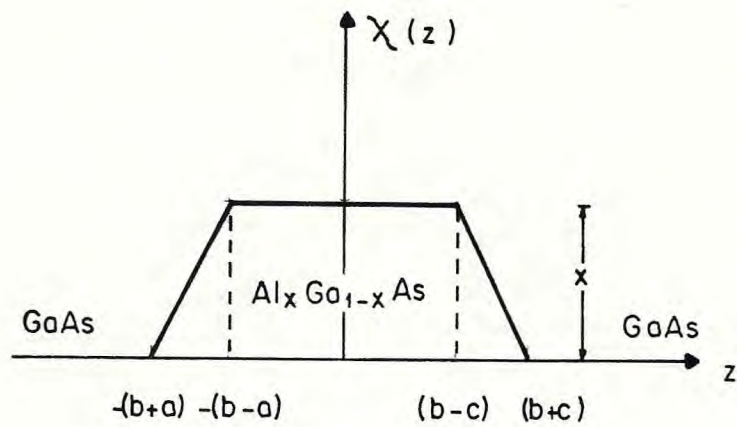


Figura 4

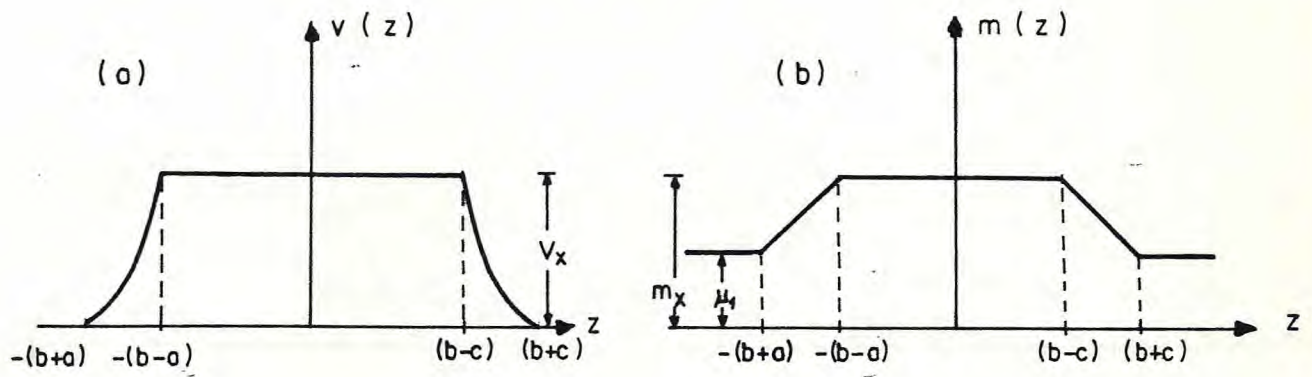


Figura 5

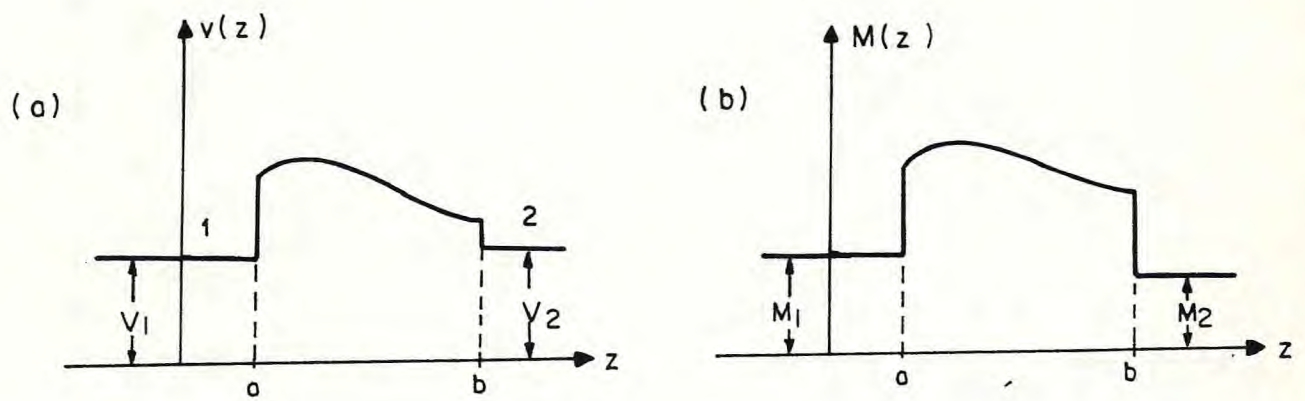


Figura 6



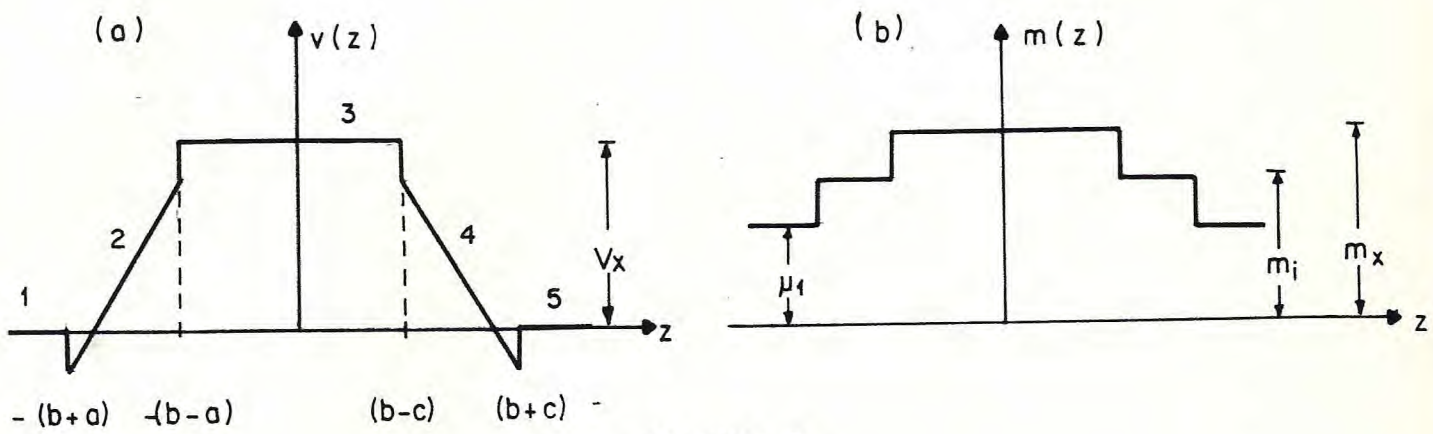


Figura 7

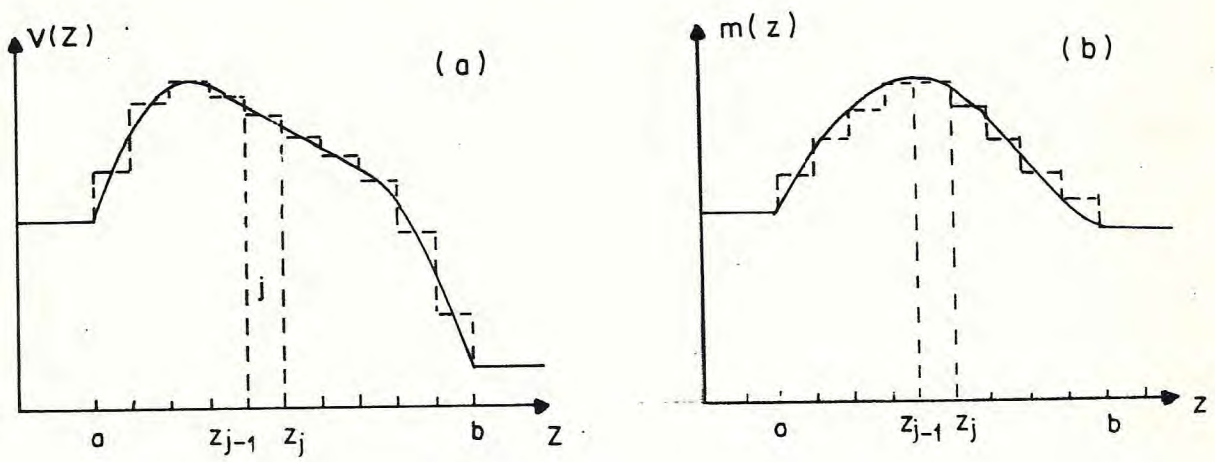


Figura 8

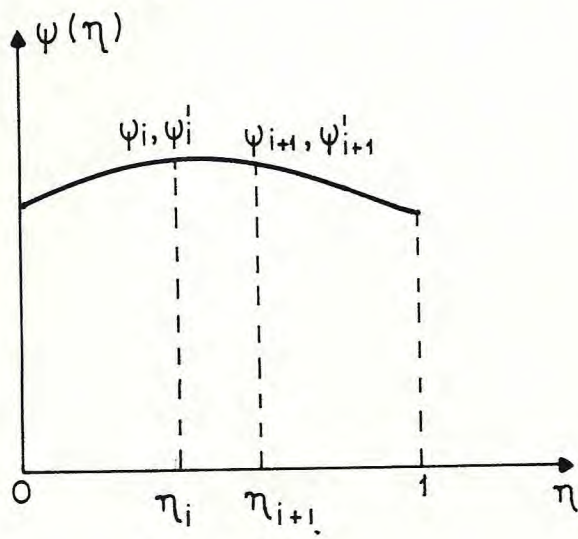


Figura 9

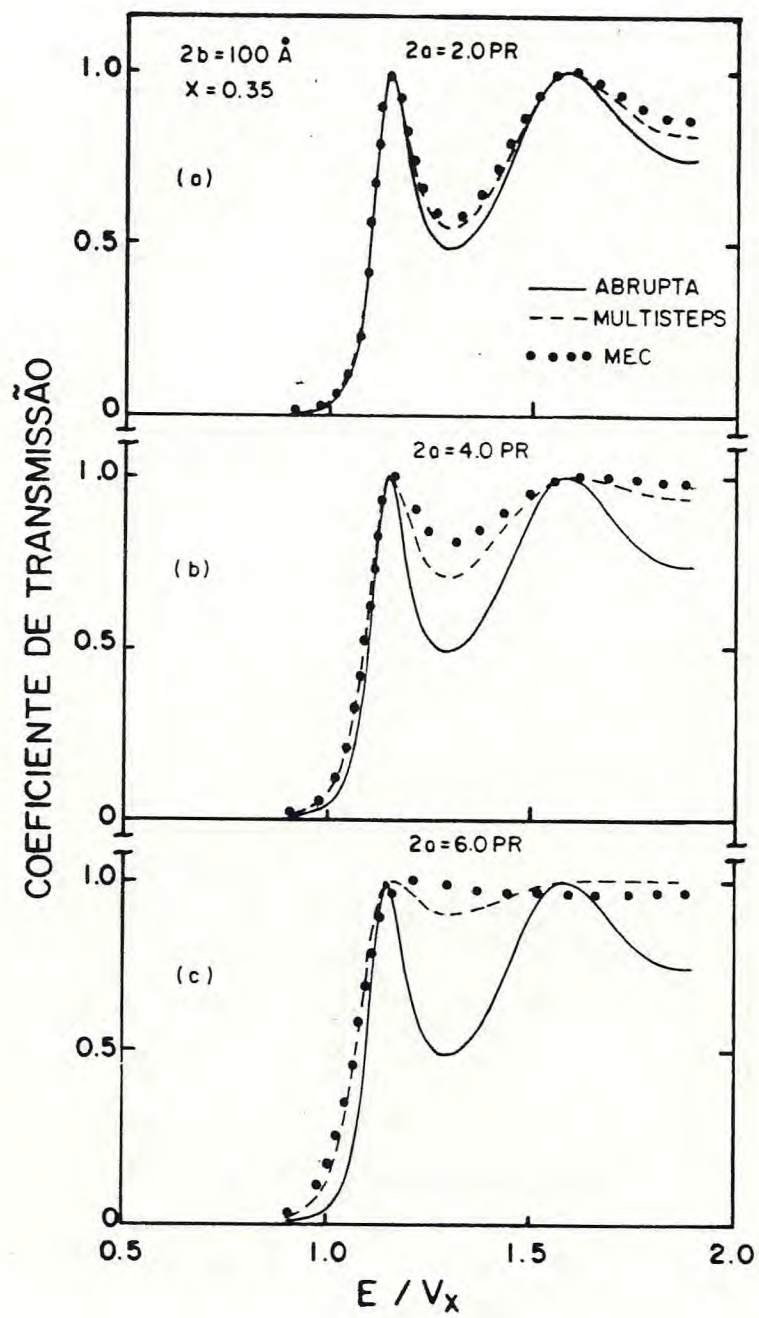


Figura 10

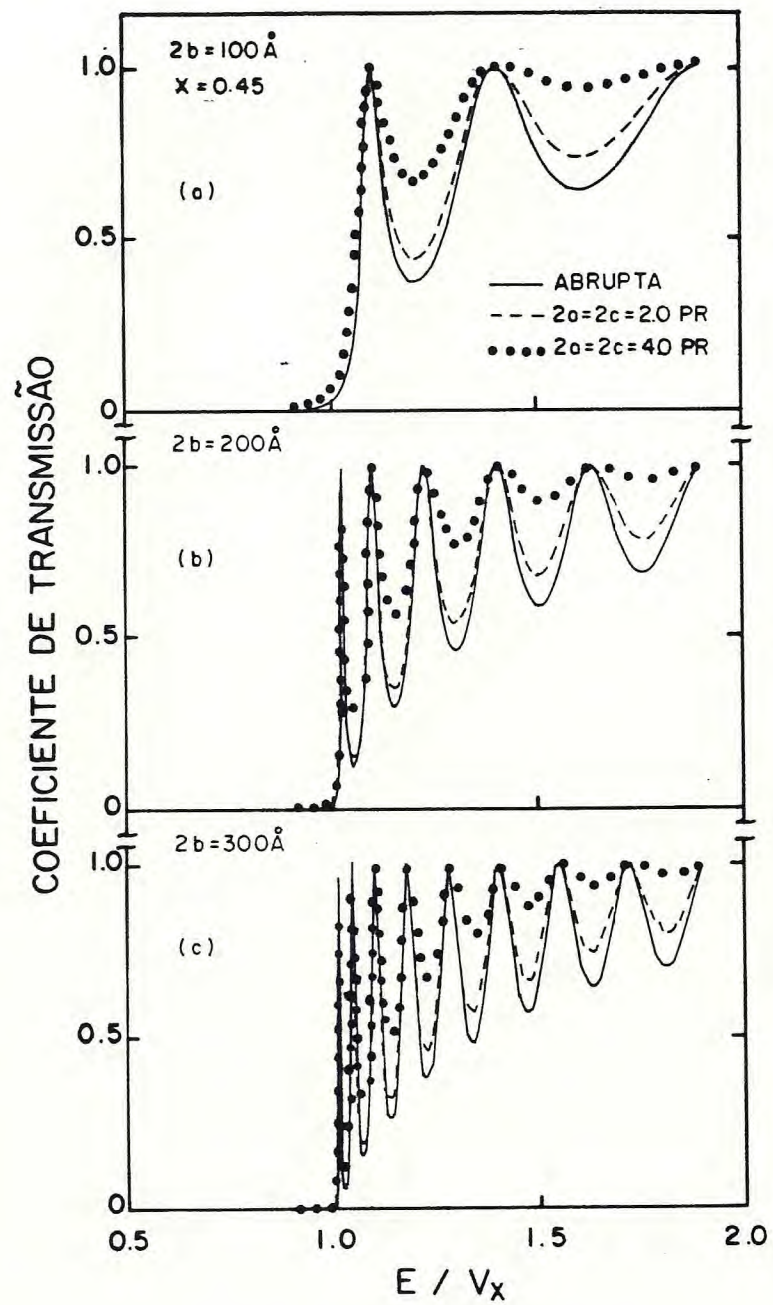


Figura 11

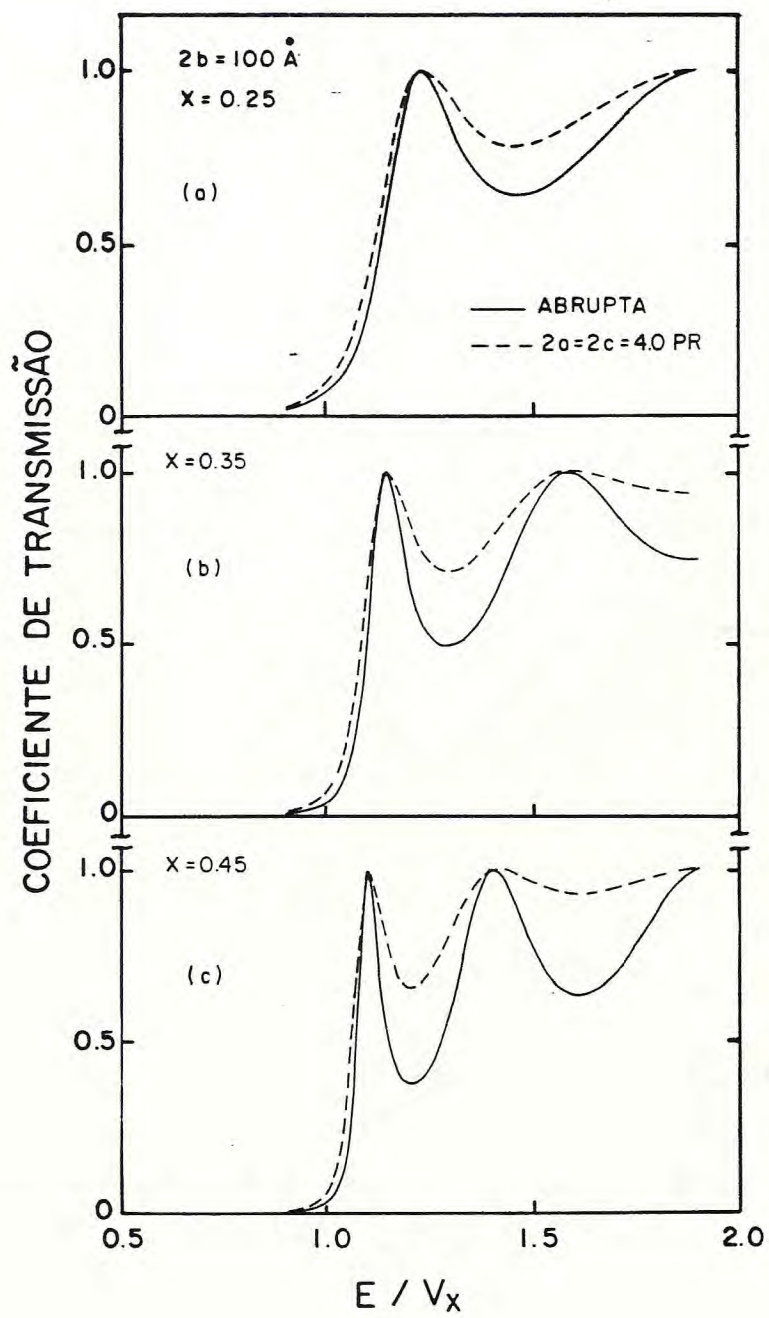


Figura 12

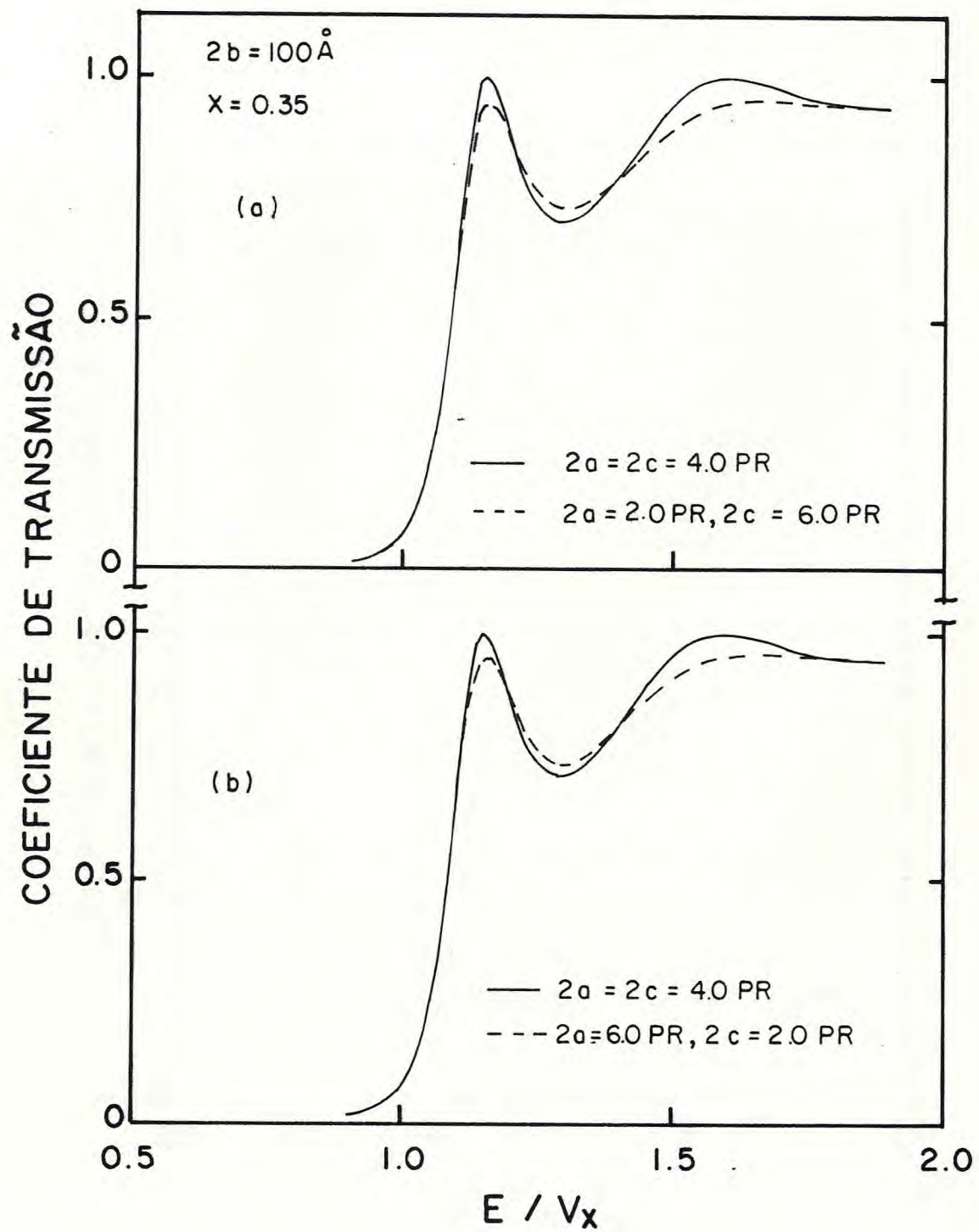


Figura 13

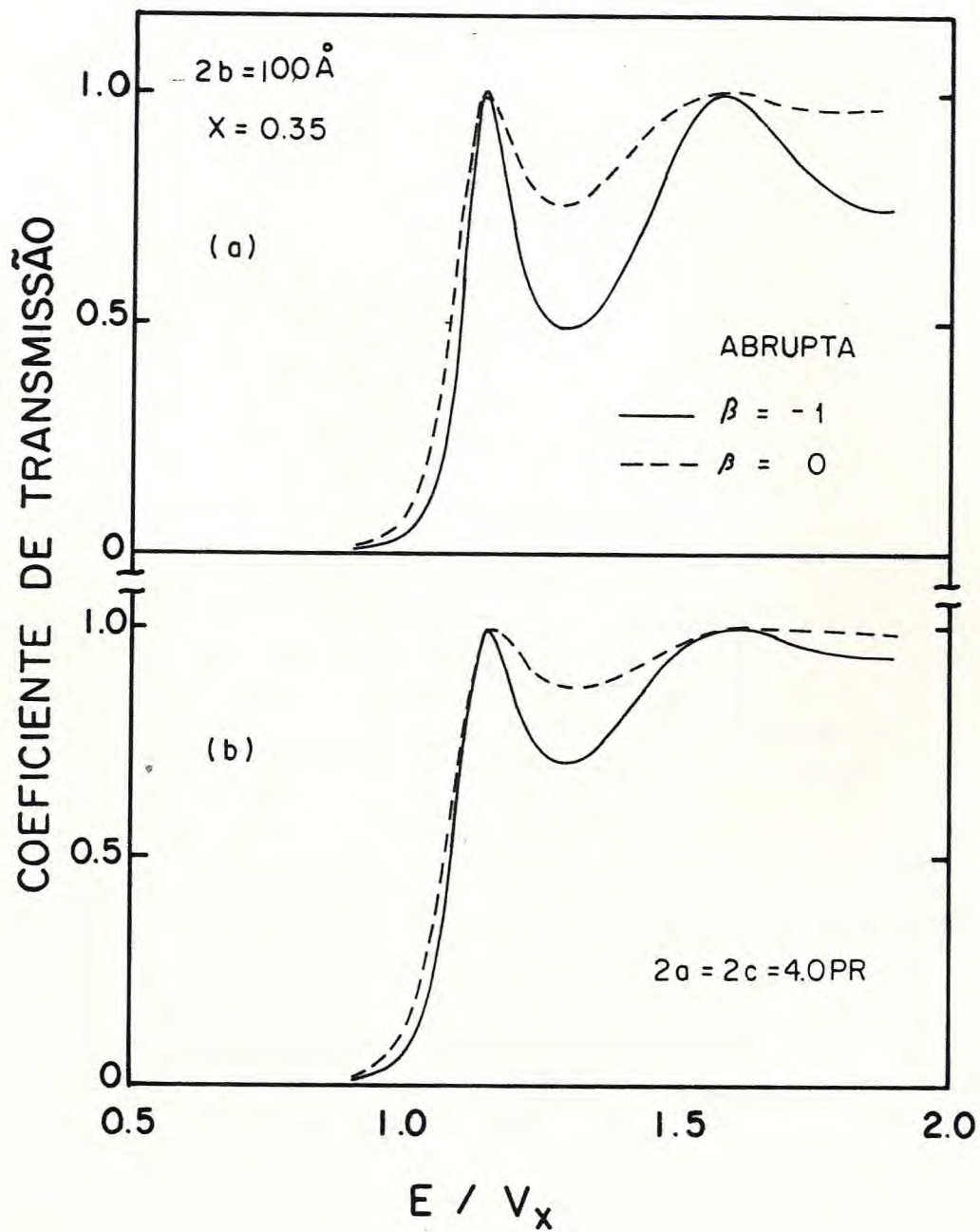


Figura 14

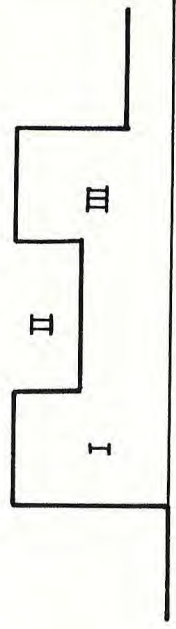


Figura 15



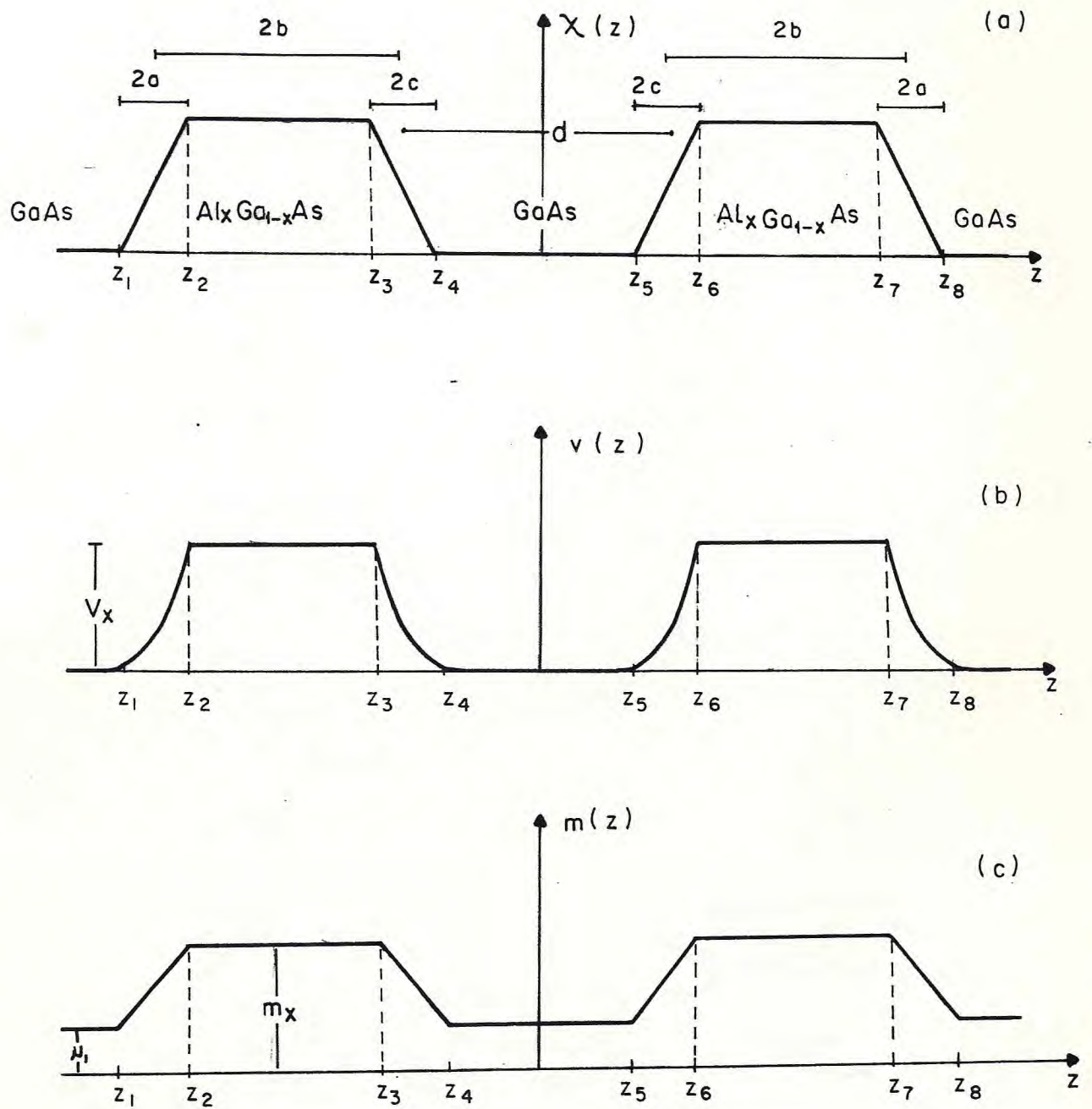


Figura 16

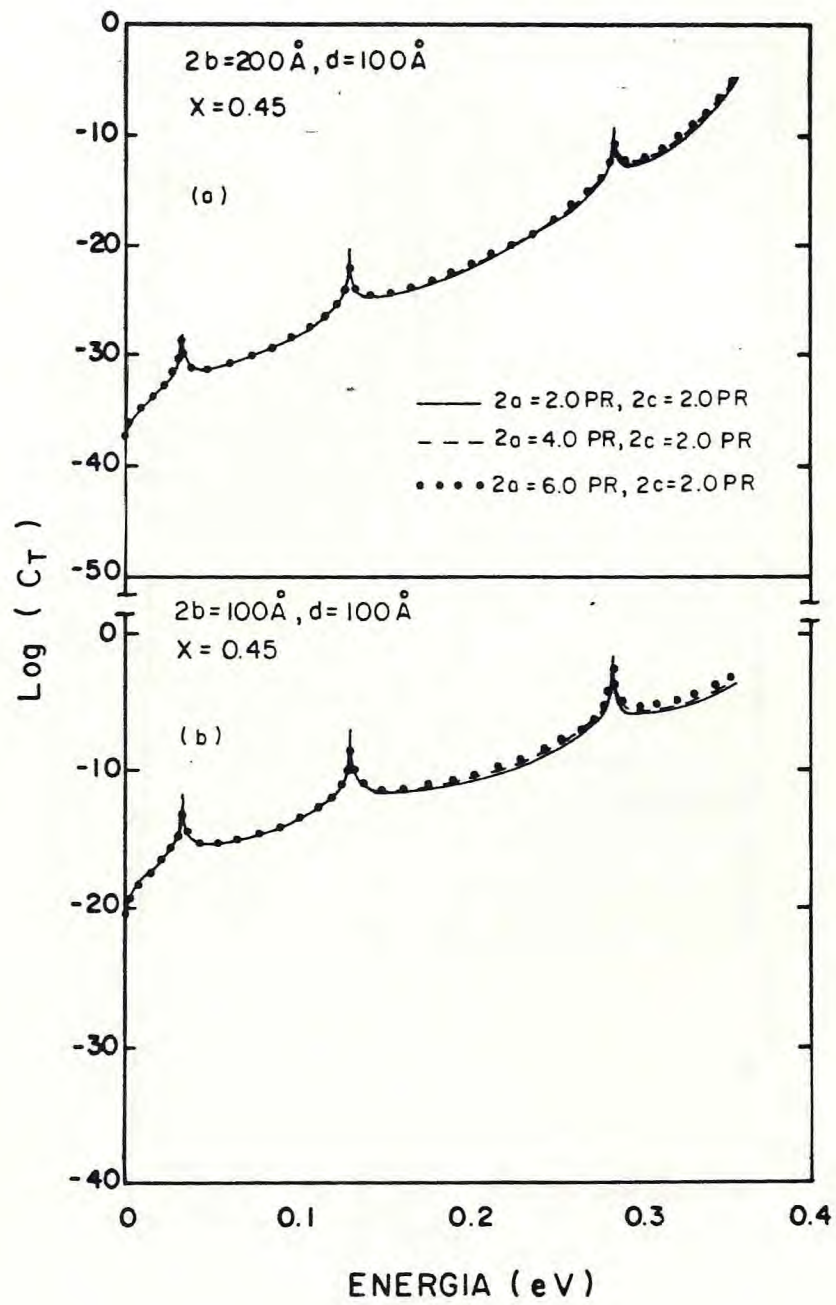


Figura 17

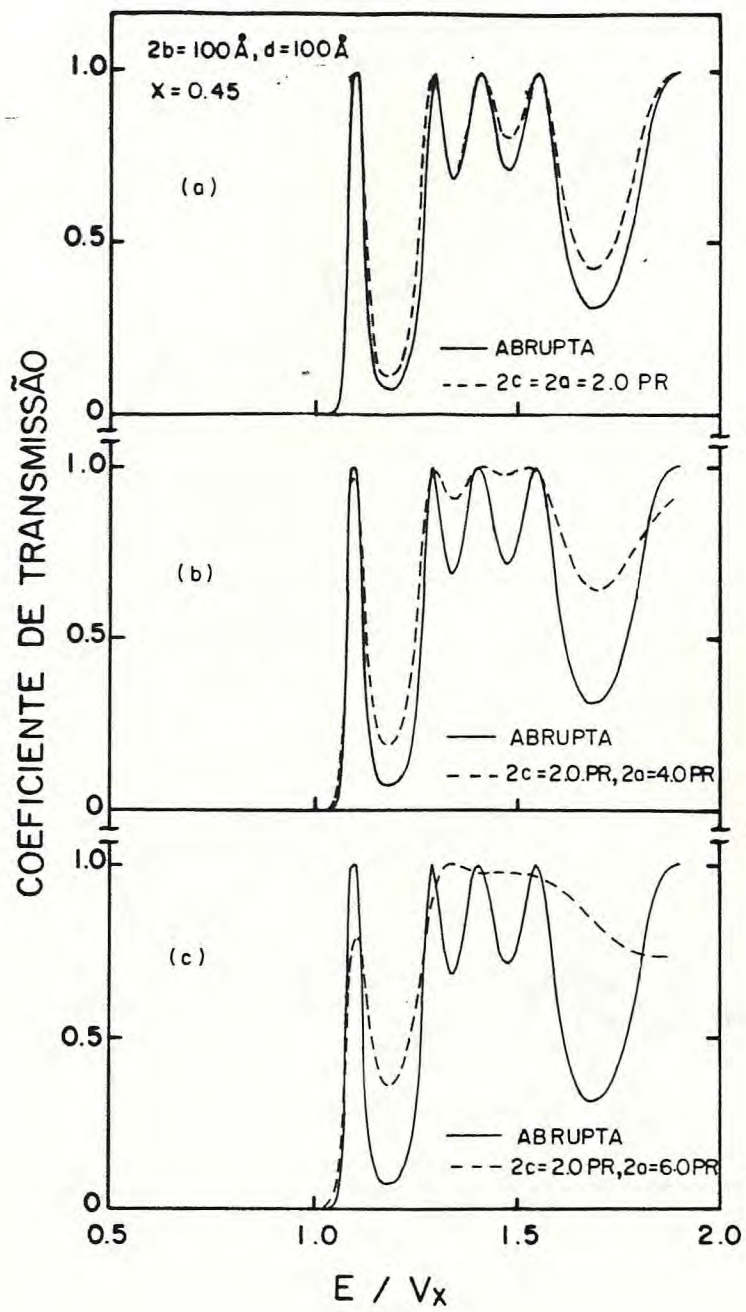


Figura 18

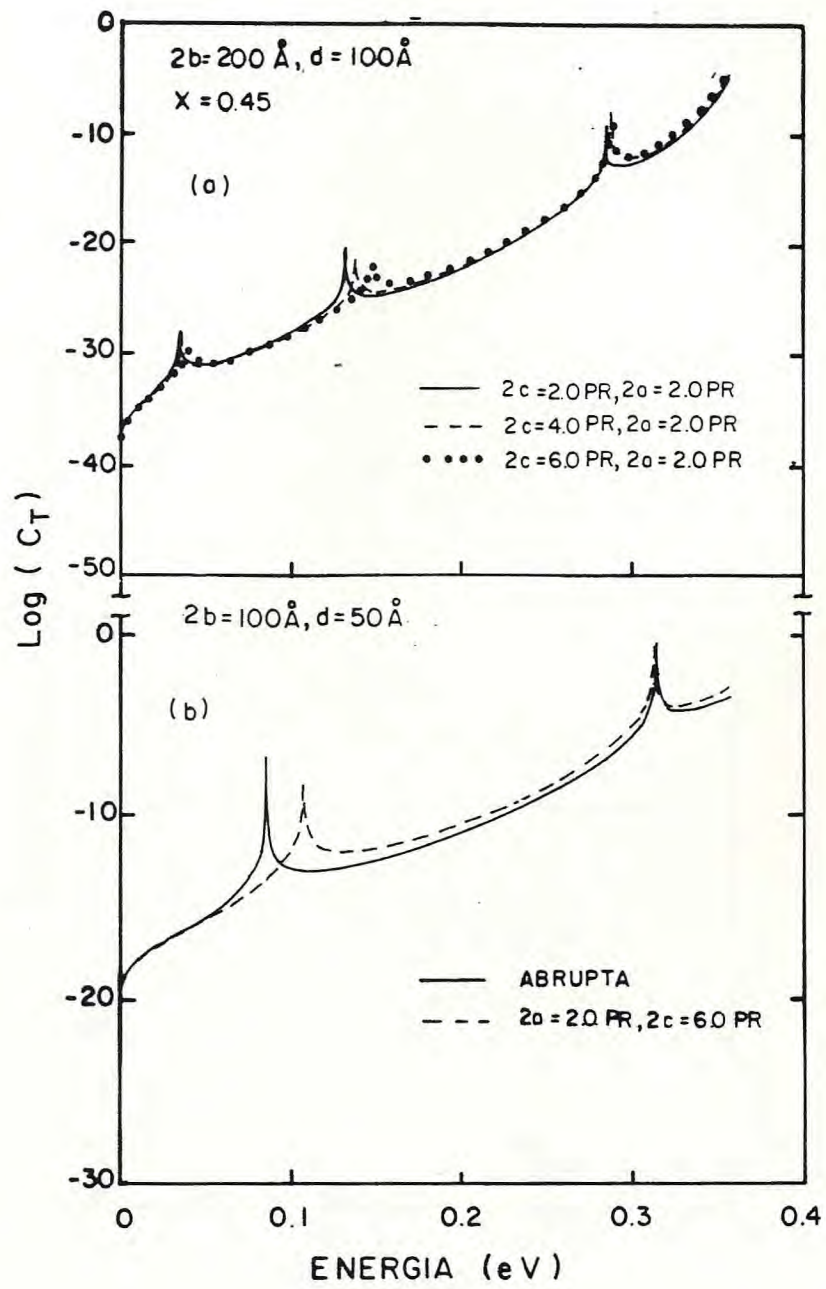


Figura 19

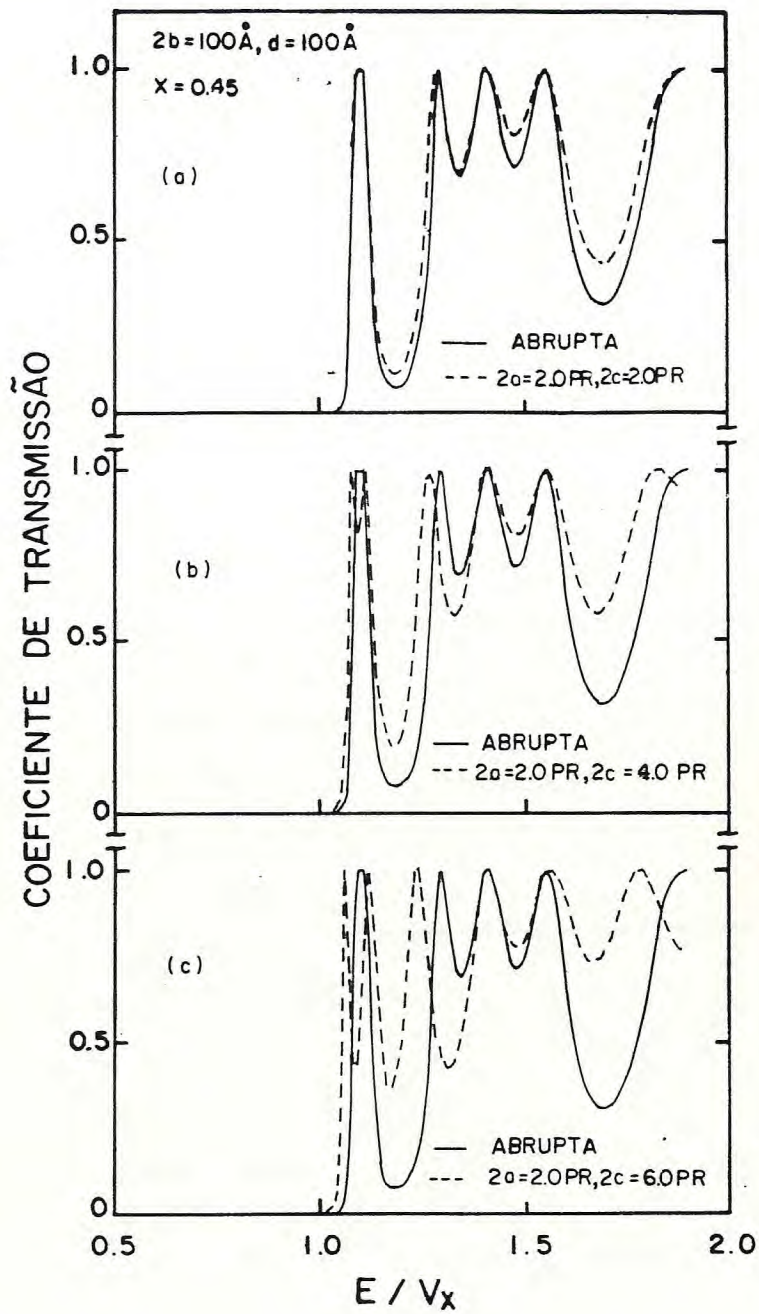


Figura 20

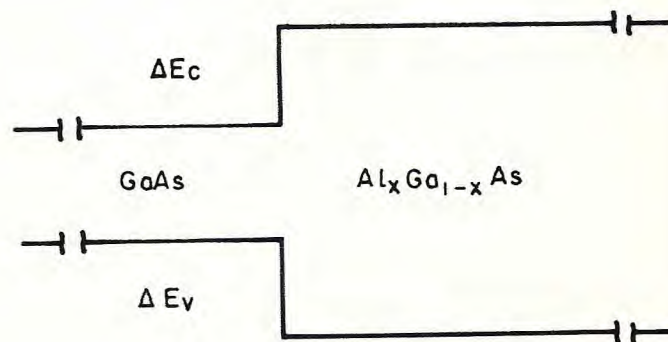


Figura 21

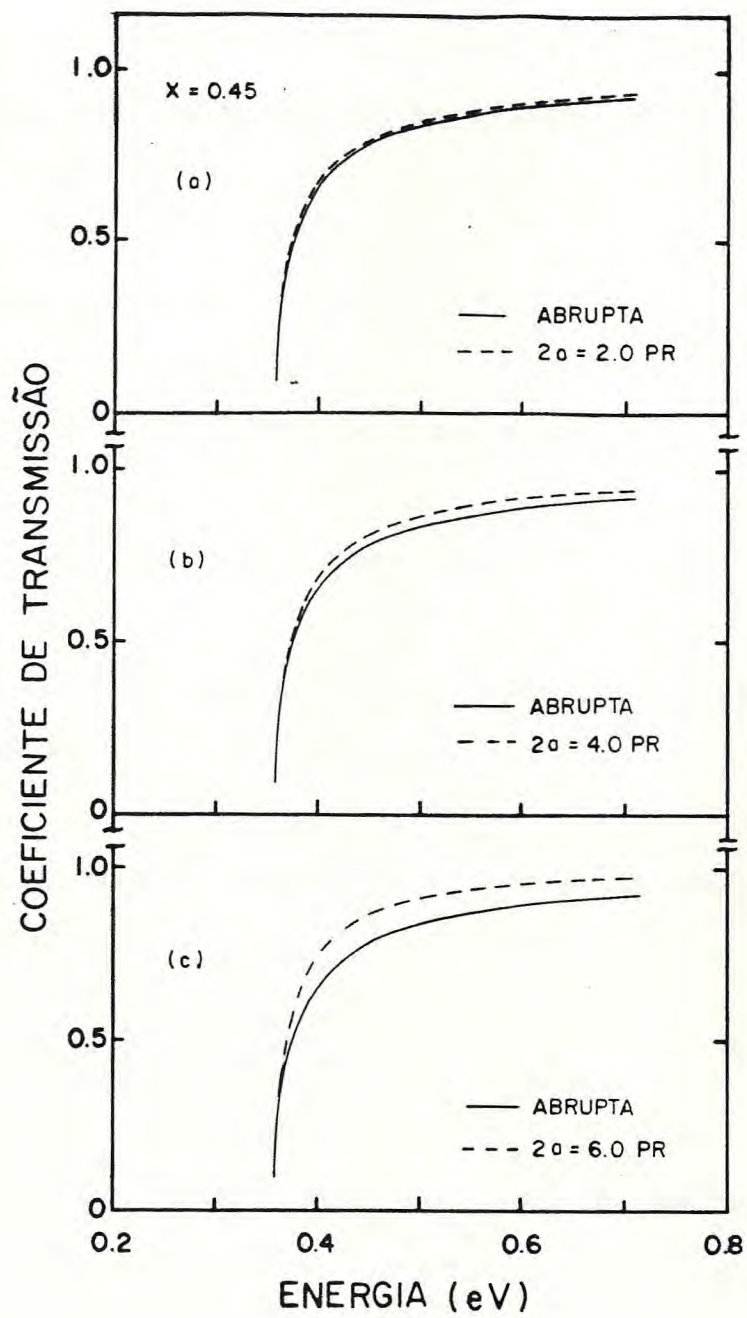


Figura 22

## REFERÊNCIAS

1. C.R.Albernathy, A.S.Jordan, S.J.Pearton, W.S.Hobson, D.A.Bohling, and G.T.Muhr, *App.Phys.Lett.* **56**, 2654(1990).
2. A.Y.Cho, *App.Phys.Lett.* **19**, 467(1971).
3. R.Tsu e L.Esaki, *IBM J.Res.Dev.* **14**, 61(1970).
4. R.Tsu e L.Esaki, *Appl.Phys.Lett.* **22**, 562(1973).
5. L.L.Chang, L.Esaki, and R.Tsu. *Appl.Phys.Lett.* **24**, 593(1974).
6. L.A.Cury e N.Studart, *SuperLat. Microstructures.* **3**, 175(1987).
7. K.F.Brennan, *J.Appl.Phys.* **62**, 2392(1987).
8. D.A.B.Miller, D.S.Chemla, T.C.Damen, A.C.Grossard, W.Wiegmann, T.H.Wood, and C.A.Burrus, *Phys.Rev.B.* **32**, 1043(1985).



9. C.Rossel, P.Gueret, and H.P.Meier, J.Appl.Phys. 67, 900(1990).
10. L.Esaki, IEEE J.Q.Elect. 22, 1611(1986).
11. D.X.Xu, G.D.Shen, M.Willander, and G.V.Hansson, J.Appl.Phys.71, 3859(1992).
12. O.Albrektsen, D.J.Arent, H.P.Meier, and H.W.M.Salemink, Appl.Phys.Lett. 57, 31(1990).
13. C.A.Warwick, W.Y.Jan, and A.Ourmazd , Appl.Phys.Lett. 56, 2666(1990).
14. V.N.Freire, M.M.Auto, and G.A.Farias, Superl.and Microestr. 11, 17(1992).
15. Y.Ando and T.Itoh, J.Appl.Phys. 61, 1497(1987).
16. K.Nakamura, A.Shimizu, M.Koshiha, And K.Hayata, IEEE J.Quantum Elect. 25, 1189(1991).
17. E.Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley, New york, 1961, pp.112-134.

18. R.H.Bube, *Electronic properties of crystalline solids*.  
Academic, New York, 1974.
19. John P.McKelvey, *Solid State and Semiconductor Physics*.  
R & K Publishing co, Malabar, 1966.
20. S.Adachi, *J.Appl.Phys.* 58, R1(1985).
21. R.M.Kolbas and N.Holonyac Jr, *Am.J.Phys.* 52, 431(1983).
22. J.N.Schulman, *J.Vac.Sc.Technol.* B1, 644(1983).
23. G.H.Wannier, *Phys.Review.* 52, 191(1937).
24. J.C.Slater, *Phys.Review.* 76, 1592(1949).
25. O.Von Ross, *Phys.Review B.* 27, 7547(1983).
26. T.Gora and F.Williams, *Phys.Review.* 177, 1179(1969).
27. Qi-Gao zhu and H.Kroemer, *Phys.Review B.* 27, 3519(1983).
28. R.A.Morrow and K.R.Brownstein, *Phys.Review B.* 30,  
678(1984).

29. J.Thonsen, G.T.Einevoll, and P.C.Hemmer, Phys.Review B. 39,12783(1989).
30. I.Galbraith and G.Duggan, Phys.Review B. 38, 10056(1988).
31. R.A.Morrow, Phys.Review B. 35, 8074(1987).
32. B.H.Duke, Tunneling in Solids, Academic, New York, 1969.
33. L.Lapidus and G.F.Pinder, Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering, John Wiley, USA, 1982, pp.49-107.
34. R.Wait and A.R.Mitchell, Finite Element Analysis and Applications, John Wiley, Great Britain, 1986, pp.1-26.
35. E.E.Mendez, L.Esaki, and W.U.Wang, Phys.Review B. 33, 2893(1985).
36. A.N.Khondker, M.RezWan Khan, J.Appl.Phys. 63, 5191(1988).
37. W.W.Lui and M.Fukuma, J.Appl.Phys. 60, 1555(1986).
38. D.Y.Kei and J.C.Inkson, Phys.Review B. 38, 9945(1988).

39. Carl-Erik Fröberg, Introduction to Numerical Analysis,  
Addison-Wesley Publishing co, Netherlands, 1965,p.61.