

C412279

FC-00005221-9

R 791822



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**EFEITOS DE CAMPO MAGNÉTICO NAS  
PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO  
DE HETERO-ESTRUTURAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

*Márcio Luis Ximenes Feijão*

**Orientador: Dr. Valder Nogueira Freire**

**Dissertação apresentada ao Departamento  
de Física da Universidade Federal do  
Ceará como parte dos requisitos para a  
obtenção do título de Mestre em Ciências.**

**19 de Dezembro de 1997**

UFC/BU/BCF 05/05/1998



R791822  
C412279  
530

Efeitos de campo magnetico nas  
proprieda

F328e

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)

---

F328e Feijão, Márcio Luis Ximenes.

Efeitos de campo magnético nas propriedades de transmissão de hetero-estruturas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As / Márcio Luis Ximenes Feijão. – 1997.  
99 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1997.

Orientação: Prof. Dr. Valder Nogueira Freire.

1. Elétrons. 2. Schrodinger, Equação de. 3. Energia. I. Título.

CDD 530

---

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**Centro de Ciências, Departamento de Física**

**EFEITOS DE CAMPO MAGNÉTICO NAS  
PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO  
DE HETERO-ESTRUTURAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

*Márcio Luis Ximenes Feijão*

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

**COMISSÃO JULGADORA:**

**Dr. Valder Nogueira Freire, UFC (Orientador)**

**Dr. Gil de Aquino Farias, UFC**

**Dra. ~~Maria~~ Consuelo Alves Lima, UFMA**

**Aprovada em 19 de dezembro de 1997**

# AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Válder Nogueira Freire, pela inestimável colaboração e orientação no desenvolvimento deste trabalho.

Aos Professores Drs. Josué Mendes Filho e Gil de Aquino Farias, enquanto coordenadores do curso de Pós-Graduação em Física da Univesidade Federal do Ceará durante o período de desenvolvimento desta dissertação.

Aos Professores Drs. Ricardo Renan e Raimundo Nogueira Costa pela ajuda na elaboração deste texto.

Aos Professores Drs. Carlos Alberto, Newton Teófilo e Antônio José que tiveram participação direta na minha formação acadêmica.

Aos demais professores que tiveram participação na minha formação acadêmica.

Aos amigos Ascânio, Luiz Ozório, Márcio André, Alexandre Magno, José Filho e André Auto pelas horas de descontração vividas durante este período.

Enfim, à todos aqueles que, direta ou indiretamente contribuíram para o êxito desse trabalho.



# RESUMO

São investigados os efeitos de um campo magnético aplicado transversalmente à direção de crescimento de hetero-estruturas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (em particular, heterojunções, barreiras simples e duplas) nas propriedades de transmissão de elétrons, considerando-se interfaces abruptas e não-abruptas. As interfaces foram descritas por um modelo no qual o potencial e a massa efetiva dos portadores nas regiões interfaciais dependem simultaneamente da variação interfacial da fração molar de alumínio. Como a massa efetiva dos portadores tem dependência espacial nas interfaces, as propriedades de transmissão em heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As são calculadas através da solução numérica, via método multisteps, das equações de Schrödinger obtidas a partir do operador energia cinética  $\{\hat{p}[m(z)]^{-1}\hat{p}\}/2$  dependente da posição. Verificou-se que o campo magnético modifica consideravelmente as propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As deslocando as curvas de transmissão para regiões de altas energias. Os conhecidos efeitos de interfaces não-abruptas na ausência do campo são alterados pela presença do mesmo somente em heterojunções, barreiras simples GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Já em barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, a assimetria das barreiras quando o campo magnético é aplicado altera as propriedades de transmissão deslocando os picos de ressonância.

# ABSTRACT

In this work we investigate the effects of an applied transverse magnetic field in the growth direction of the GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterostructures (in particular heterojunctions, single and double barriers) in the transmission properties of electrons, considering both abrupt and non-abrupt interfaces. The interfaces were described by a model in which the potential and carriers effective mass depends on the interfacial variation of the aluminum molar fraction. The carriers effective mass have spatial dependence in the interfaces, therefore the transmission properties in heterojunctions, single barriers, and double barriers of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As are numerically calculated. We used the multisteps method, and the Schroedinger equations that merge from the position dependent energy kinetic operator  $\{\hat{p}[m(z)]^{-1}\hat{p}\}/2$ . We verified that the magnetic field shifts the transmissions curves to high energy regions for heterostructures GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As in the abrupt and nonabrupt interface abrupt. In addition, the well known nonabrupt interface effects are altered by magnetic field when we study heterojunctions and single barriers of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Considering double barriers of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, in the presence of a magnetic field, the assymetry of barriers is responsible for shifts in the resonances of the transmission coefficient.

# Í N D I C E

## CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO . . . . .	02
----------------------	----

## CAPÍTULO 2

MODELOS PARA HETEROJUNÇÕES, BARREIRAS SIMPLES E DUPLAS GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As NÃO-ABRUPTAS . . . . .	10
2.1. Heterojunções GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas . . . . .	12
2.2. Heterojunções GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Submetidas a um Campo Magnético . . . . .	17
2.3. Barreiras GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Simples . . . . .	20
2.4. Barreiras GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Simples Submetidas a um Campo Magnético . . . . .	24
2.5. Barreiras GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Duplas Não-Abruptas . . . . .	27
2.6. Barreiras GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Duplas Submetidas a um Campo Magnético . . . . .	31

## CAPÍTULO 3

PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO EM HETEROJUNÇÕES, BARREIRAS SIMPLES E DUPLAS GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As NÃO-ABRUPTAS SUBMETIDAS A UM CAMPO MAGNÉTICO . . . . .	35
3.1. Transmissão de Elétrons Através de Heterojunções GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Submetidas a um Campo Magnético . . . . .	41
3.2. Transmissão de Elétrons Através de Barreiras GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Simples Submetidas a um Campo Magnético . . . . .	52
3.3. Transmissão de Elétrons Através de Barreiras Duplas	

GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As Não-Abruptas Simples Submetidas a um Campo Magnético . . . . .	63
---	----

**CAPÍTULO 4**

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS . . . . .	73
-------------------------------------	----

REFERÊNCIAS . . . . .	79
-----------------------	----

APÊNDICE A . . . . .	89
----------------------	----



# CAPÍTULO 1

# INTRODUÇÃO

Em consequência das idéias pioneiras propostas por Esaki *et al.* [1-3], muitos pesquisadores têm se dedicado ao estudo das propriedades de transmissão de portadores em hetero-estruturas semicondutoras tais como barreiras simples e duplas, poços quânticos, super-redes, etc. Embora aplicações tecnológicas em dispositivos eletrônicos e fotoeletrônicos tenham sido implementadas, algumas dificuldades relacionadas às propriedades físicas dessas estruturas ainda não foram completamente elucidadas atualmente. Por exemplo, em barreiras duplas a superestimação teórica da razão pico-vale na corrente [4-6] e o conflito entre as descrições do tunelamento dos portadores como coerente ou sequencial [7,8] são problemas abertos na física de semicondutores de dimensionalidade reduzida. No tunelamento sequencial, mecanismos de espalhamento de portadores com portadores, fônons, impurezas e rugosidades interfaciais reduzem a razão pico-vale [9], mas não explicam a superestimação teórica da mesma. Já no tunelamento coerente, correções à fórmula de Tsu-Esaki [10], a variação espacial da massa efetiva dos portadores [11] e a rugosidade interfacial [12] são mecanismos que também reduzem a razão pico-vale, mas são ineficazes na explicação da superestimação teórica. Nestas duas representações de tunelamento existe sempre a problemática relacionada com efeitos de interfaces nas propriedades de transmissão de portadores em hetero-estruturas semicondutoras.

A existência de interfaces abruptas e livres de rugosidades na descrição de hetero-estruturas semicondutoras são quase sempre utilizadas, pois com tal hipótese os cálculos teóricos são simples e produzem em geral uma concordância qualitativa com os resultados experimentais [13,14]. Com os trabalhos de Stern *et al.* [15,16] sobre a influência de camadas interfaciais de transição nos níveis de energia de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, o interesse em investigar a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de hetero-estruturas semicondutoras ganhou grande força. O grande empecilho que retardava o avanço do estudo sobre o efeito de interfaces residia na limitação das técnicas experimentais. Com isto, como a consideração

da existência de interfaces abruptas e livres de rugosidades com larguras inferiores a 5 Å era ineficiente na explicação de certas discrepâncias teórico-experimentais, sugeriu-se outros processos para explicar estas discordâncias, tais como efeitos relacionados com polaritons, impurezas, e fenômenos de espalhamento fônons-portadores e portadores-portadores [9].

O grande avanço das técnicas de crescimento de hetero-estruturas semicondutoras proporcionou a formação de camadas semicondutoras bastante finas e com poucas imperfeições, com a caracterização das interfaces chegando a resoluções da ordem de uma a duas células unitárias do cristal semicondutor. Dentre essas técnicas destaca-se o crescimento por deposição epitaxial de materiais. As formas mais comuns de epitaxia são as chamadas LPE (Liquid Phase Epitaxy), VPE (Vapor Phase Epitaxy) e MBE (Molecular Beam Epitaxy). Em se tratando da MBE, que se destaca no crescimento de semicondutores, metais e dielétricos, suas bases foram lançadas por Günther [17] em 1958 com a finalidade de produzir filmes estequiométricos de semicondutores. A MBE consiste num processo de evaporação controlado termicamente numa câmara de vácuo super-elevado [18]. Compostos ou elementos químicos são aquecidos em cadinhos (conhecidos por células de Knudsen), com o intuito de criar feixes de átomos ou moléculas que são direcionados a um substrato aquecido na câmara de alto-vácuo. Sem colisões ou reações químicas, as partículas atingem o substrato. Durante o processo de crescimento por MBE, técnicas como RHEED (Reflection High-Energy Electron Diffraction) são capazes de monitorar a superfície da hetero-estrutura semicondutora em crescimento. Um exemplo esquemático da MBE é mostrado na Fig.1.1.

Na prática, hetero-estruturas semicondutoras são sistemas formados pela superposição de camadas com dimensões atômicas, constituídas por diferentes semicondutores. Esta alternância entre os materiais é responsável pela origem de poços, barreiras, super-redes e outros tipos de hetero-estruturas quânticas [19]. Em geral, os elementos químicos formadores destes dispositivos físicos estão localizados nos grupos

III e V da tabela periódica. Em sua grande maioria, tais sistemas são constituídos de dois, três ou quatro elementos químicos diferentes. Exemplo de um semicondutor é a liga  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , cujo gap de energia depende da fração molar de alumínio  $x$ .

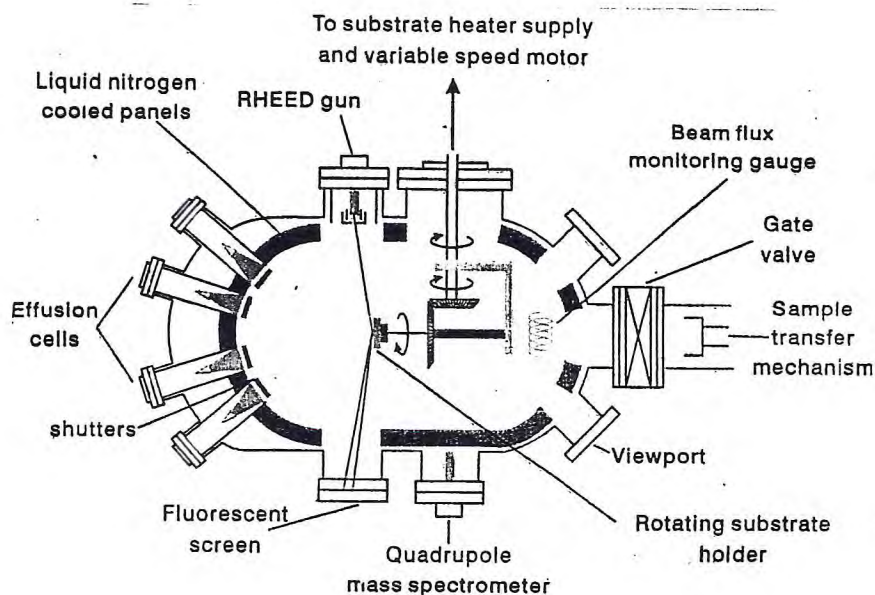


Figura 1.1. Ilustração esquemática dos processos básicos de evaporação para o crescimento por MBE de semicondutores III-V, realizado em condições de vácuo ultra-elevado que pode chegar a  $10^{-12}$  Torr.

Desde que as mais avançadas técnicas experimentais no crescimento de heteroestruturas semicondutoras são insuficientes na obtenção de interfaces abruptas, estudos teóricos pioneiros sobre a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de poços quânticos foram realizados [20,21]. Contudo, estes estudos não lograram êxito na explicação de certos resultados experimentais, tais como certas propriedades do espectro de fotoluminescência de poços quânticos semicondutores [21]. Schulman [22] mostrou que a energia do elétron no estado fundamental de um poço quântico



GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  decrescia consideravelmente quando interfaces não-abruptas eram propostas. Para um poço quântico GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  de largura 100 Å, Jiang e Lin [23] mostraram que interfaces não-abruptas (descritas por potenciais lineares) produzem deslocamentos relevantes nos níveis de energia do estado fundamental de elétrons e buracos. Proctor *et al.* [24] explicaram as transições de energia entre elétrons e buracos pesados em poços quânticos múltiplos GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  utilizando um perfil simétrico suave para o potencial interfacial que tinha sido proposto por Nelson *et al.* [25]. Recentemente Freire *et al.* [26] mostraram que efeitos interfaciais e de camadas de acumulação em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dopadas não-abruptas são importantes no caso de elevados níveis de dopagem e interfaces largas.

Do ponto de vista teórico, as propriedades de transmissão (portadores) através de heterojunções semicondutoras GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  mudam significativamente quando se propõe a existência de interfaces graduais (não-abruptas) com larguras da ordem de duas células unitárias do semicondutor GaAs [27,28]. Em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  foi mostrado que a dependência espacial da massa efetiva dos portadores [29] e os padrões de crescimento interfacial [30] alteram relevantemente as propriedades de transmissão. Trabalhando com barreiras simples e duplas, Renan *et al.* [31-33] obtiveram resultados que comprovaram a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de transmissão de portadores.

No lado experimental, o progresso das técnicas para obtenção de informações sobre interfaces semicondutoras como aquelas baseadas em fotoluminescência [21,34-39], espalhamento Raman [35], imagem química [40], espectroscopia e topografia de tunelamento quântico [41-45] tem mostrado que ainda hoje não foi possível produzir hetero-interfaces abruptas. Ourmazd *et al.* [40] e Albrektsen *et al.* [41] mostraram que as interfaces semicondutoras não são abruptas, tendo espessuras interfaciais de pelo menos duas células unitárias da rede cristalina do semicondutor. Já Kisielowski *et al.* [46] conseguiram obter informações sobre a variação do perfil composicional em interfaces semicondutoras AlAs/GaAs.

Na atualidade, levando em conta todos os resultados obtidos experimentalmente a respeito de não-abrupticidade em hetero-estruturas semicondutoras, pode se afirmar sobre interfaces semicondutoras que:

i) são graduais (não-abruptas), possuindo nos melhores casos larguras interfaciais de pelo menos duas células unitárias da rede cristalina dos cristais semicondutores;

ii) apresentam ilhas de diferentes tamanhos;

iii) possuem um certo grau de rugosidade, que depende da técnica de crescimento e do tratamento pós-crescimento realizado;

iv) são diferentes quanto a ordem de deposição de um semicondutor sobre o outro, ou seja, interfaces geradas pela deposição de um semicondutor A sobre um semicondutor B são distintas de interfaces obtidas pela deposição de B em A [47].

Fenômenos interessantes acontecem quando hetero-estruturas semicondutoras estão submetidas a um campo magnético transversal (no plano de crescimento), haja visto a quebra de simetria do problema causada pelo campo. Propriedades magneto-óticas e de magneto-tunelamento têm sido investigadas teórico-experimentalmente no sentido de interpretar fisicamente os efeitos reais provocados pela presença do campo [48-60].

Em heterojunções semicondutoras, Jónhson *et al.* [61] mostraram que interfaces (abruptas ou não-abruptas) imersas num campo magnético no plano geram uma estrutura complexa nos níveis de Landau, implicando em alterações no potencial interfacial e na transmissão de elétrons próximos às interfaces.

Utilizando o método de expansão com funções senoidais, Xia e Fan [50] calcularam os níveis de energia de super-redes GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As submetidas a um campo magnético perpendicular à direção de crescimento destas hetero-estruturas semicondutoras (o campo sendo aplicado em uma das outras direções que formam o



plano ortogonal à direção de formação da super-rede). Mostraram que ocorre uma grande dispersão dos níveis de energia em razão da interação do campo magnético com o momento linear associado aos portadores. Belle *et al.* [62] trabalhando experimentalmente em super-redes GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As observaram que os níveis de energia dependem, também, desta interação entre o campo e o momento linear.

Estudando barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples, Guéret [63] and Eaves *et al.* [64] mostraram modificações nos níveis de Landau quando um campo magnético transversal está confinado somente na região onde se situa a barreira simples. Além disso, observaram que o campo provoca um aumento na altura da barreira de potencial e uma diminuição na probabilidade de transmissão de portadores.

Já em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As duplas submetidas a um campo magnético no plano de crescimento, medidas experimentais foram feitas por Zaslavsky *et al.* [53] do tunelamento ressonante de elétrons que mostraram deslocamentos dos picos de ressonância na corrente de tunelamento. Hung *et al.* [65] trabalhando teoricamente com barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As duplas mostraram a dependência dos níveis de energia em função da interação do campo com o momento linear associado aos portadores, o deslocamento das curvas de transmissão para regiões de altas energias e uma redução na densidade de corrente de probabilidade quando um campo magnético transversal é aplicado na região da barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dupla.

O objetivo deste trabalho é investigar o efeito de um campo magnético transversal (perpendicular à direção de crescimento das interfaces) e a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. O modelo proposto por Freire *et al.* [27] é utilizado para a obtenção do potencial e da massa efetiva dos portadores nas regiões interfaciais. Em barreiras duplas, é levada em consideração a assimetria das barreiras.

Tendo em vista a variação espacial da massa efetiva dos elétrons nas interfaces, o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66] é utilizado para se obter as

equações de Schrödinger que descrevem as propriedades de transmissão de elétrons através de heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . As equações são solucionadas numericamente através do método proposto por Ando e Itoh [90].

Os modelos para heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  e as respectivas equações de Schrödinger que descrevem a dinâmica dos elétrons onde se considera a fração molar de alumínio variando linearmente nas interfaces, são apresentados no Capítulo 2.

Resultados numéricos para propriedades de transmissão de elétrons através de heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  submetidas a um campo magnético no plano são apresentados no Capítulo 3. Em todos os cálculos são utilizados os modelos descritos no Capítulo 2 deste trabalho.

Por fim, no Capítulo 4 são apresentadas as conclusões e perspectivas deste trabalho no que se refere a hetero-estruturas semicondutoras na presença de um campo magnético no plano de crescimento.



## CAPÍTULO 2

# MODELOS PARA HETEROJUNÇÕES, BARREIRAS SIMPLES E DUPLAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As NÃO-ABRUPTAS

Enquanto no modelo de interfaces abruptas de hetero-estruturas semicondutoras a transição de um tipo de semicondutor para outro ocorre em um único plano, nos modelos de interfaces não-abruptas existe uma região em que ocorre uma mudança gradativa de um tipo de semicondutor para outro. Esta mudança decorre, por exemplo, das ligações químicas mistas entre os átomos das interfaces e seus vizinhos mais próximos, que produzem regiões interfaciais de pelo menos meia a uma unidade da rede cristalina [13,15]. Processos de difusão de átomos constituintes de semicondutores que ocorrem através das interfaces [67-69] fazem com que as larguras interfaciais cheguem a ser de pelo menos duas unidades da rede cristalina nos melhores casos, como foi detectado experimentalmente [40,41].

Para descrever as hetero-interfaces semicondutoras não-abruptas, alguns modelos teóricos que têm sido utilizados não levam em consideração detalhes da variação interfacial da composição da liga semicondutora, mas fazem a hipótese de uma dependência espacial específica do potencial e da massa efetiva dos portadores na interface, sem haver nenhuma relação entre ambas [22-25]. Uma exceção à regra é o modelo proposto originalmente por Freire *et al.* [27,28] para interfaces GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, que permite a obtenção de ambas as variações interfaciais do potencial e da massa efetiva dos portadores a partir do perfil da variação da fração molar de alumínio na interface. Posteriormente, Freire [70] generalizou o modelo para qualquer tipo de hetero-estrutura.

Neste Capítulo é utilizado o esquema proposto por Freire *et al.* [27,28] para criação de um modelo de heterojunções e hetero-estruturas não-abruptas (em particular, barreiras simples e duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas) a partir da hipótese da existência de uma variação linear da fração molar de alumínio nas interfaces.

Na Seção 2.1 deste Capítulo, o modelo de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta é apresentado. A modificação da heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta devido a aplicação de um campo magnético é apresentada na Seção 2.2. Na Seção 2.3, o modelo de uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples é apresentado. A modificação da barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples devido a aplicação de um campo magnético é apresentada na Seção 2.4. Na Seção 2.5, o modelo de uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta dupla é apresentado. A modificação da barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta dupla devido a aplicação de um campo magnético é apresentada na Seção 2.6.

Na Seção 2.1 deste Capítulo, o modelo de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta é apresentado. A modificação da heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta devido a aplicação de um campo magnético é apresentada na Seção 2.2. Na Seção 2.3, o modelo de uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples é apresentado. A modificação da barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples devido a aplicação de um campo magnético é apresentada na Seção 2.4. Na Seção 2.5, o modelo de uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta dupla é apresentado. A modificação da barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta dupla devido a aplicação de um campo magnético é apresentada na Seção 2.6.



## 2.1. Heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abruptas

A composição interfacial variável na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As modifica tanto o potencial quanto a massa efetiva de maneira inter-relacionada. Fazendo a hipótese de que a fração molar de alumínio  $\chi(z)$  na direção de crescimento  $z$  varia linearmente na interface de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta, o conteúdo de alumínio que caracteriza a própria heterojunção é dado por:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ x(z - z_1)/(z_2 - z_1), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ x, & z \geq z_2 \end{cases} \quad (2.1)$$

onde os  $z_i$  ( $i = 1, 2$ ) especificam as bordas da interface, e  $x$  é a fração molar de alumínio da liga Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Uma representação gráfica da variação espacial da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  para uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta é apresentada na Fig. 2.1.

A partir de trabalhos experimentais [71] foi determinado que as seguintes relações empíricas para a dependência da diferença do alumínio da banda de condução e da massa efetiva dos portadores em Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As na direção  $\Gamma$  são válidas:

$$E_G^\Gamma(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 x + \epsilon_2 x^2, \quad (2.2)$$

$$m_\alpha^\Gamma(x) = (\mu_{\alpha,1} + \mu_{\alpha,2}x)m^*, \quad (2.3)$$

onde  $\epsilon_0 = 1.425$  eV é o gap de energia do GaAs na direção  $\Gamma$ ,  $\epsilon_1 = 1.155$  eV,  $\epsilon_2 = 0.37$  eV;  $\alpha = e$  para elétrons, com  $\mu_{e,1} = 0.067$  e  $\mu_{e,2} = 0.083$  [71];  $\alpha = hh$  para buracos pesados, com  $\mu_{hh,1} = 0.62$  e  $\mu_{hh,2} = 0.14$ ;  $\alpha = hl$  para buracos leves, com  $\mu_{hl,1} = 0.087$  e  $\mu_{hl,2} = 0.063$  [71];  $m^*$  é a massa de repouso dos elétrons no vácuo.

A diferença entre os gaps de energia de GaAs e Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> na interface de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> produz uma barreira de potencial que limita o movimento dos portadores em uma dimensão (a direção de crescimento), ficando os mesmos livres para se moverem nos planos perpendiculares à direção de crescimento

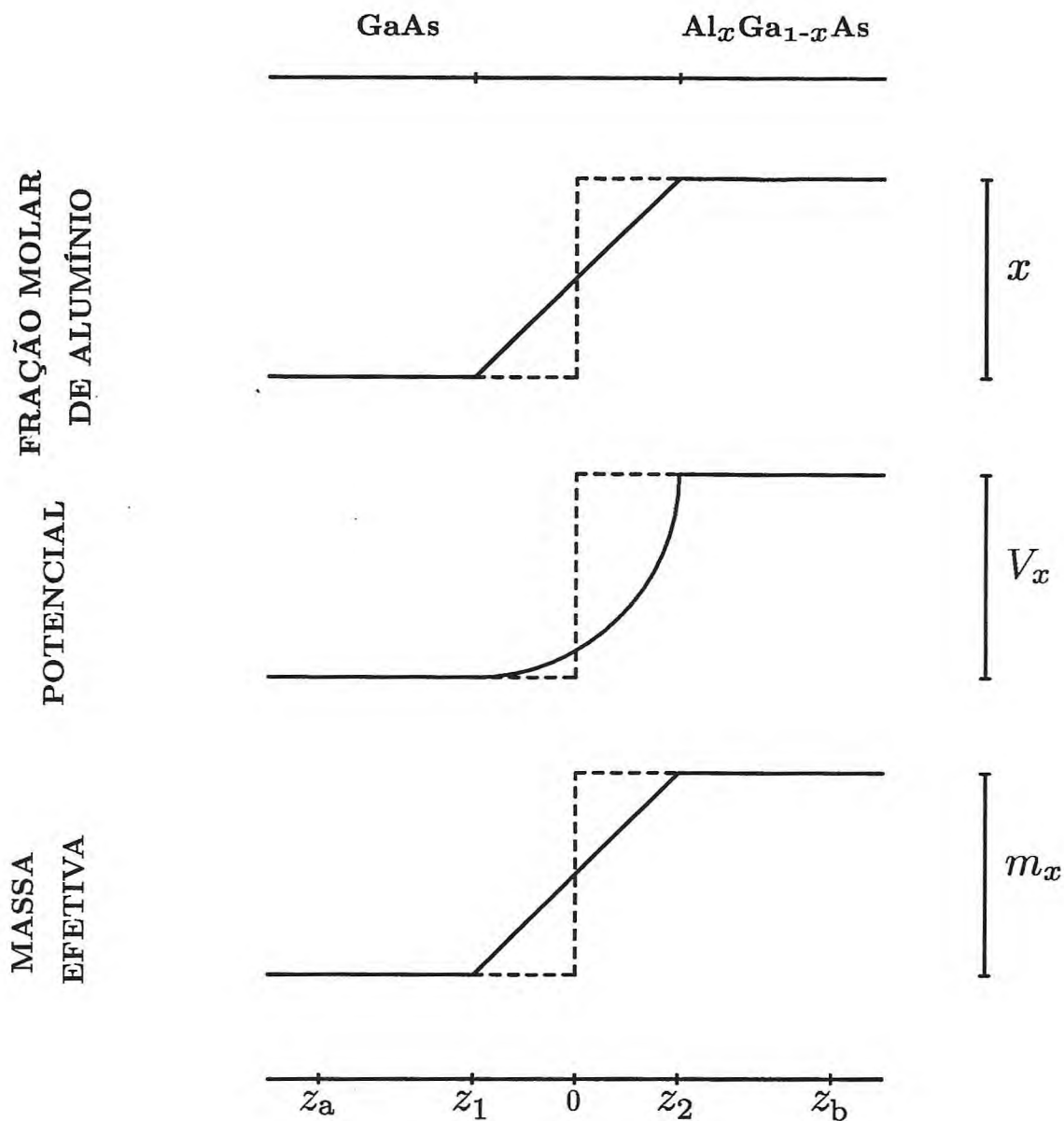


Figura 2.1. Topo: variação espacial da fração molar de alumínio numa heterojunção  $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial característica de uma heterojunção  $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Base: variação espacial da massa efetiva dos portadores característica de uma heterojunção  $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

$z$  da interface. Além do mais, esta diferença entre os gaps fica dividida para elétrons e buracos, o que dá origem ao band offset  $Q_\alpha$ , o qual determina a porcentagem desta divisão para cada tipo de portador [14]. Com isso, o potencial de uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$  não-abrupta tem a forma:

$$V_\alpha(z) = Q_\alpha \{ \epsilon_1 \chi(z) + \epsilon_2 [\chi(z)^2] \}. \quad (2.4)$$

Para se obter o potencial e a massa efetiva dos portadores na região interfacial a partir da variação da fração molar na mesma, supõe-se que as Eqs. (2.2, 2.3) são válidas para dimensões características da ordem de Angstrom. Com isto,  $x \rightarrow \chi(z)$ , e ao se fazer uso da hipótese da variação linear de alumínio na interface, obtém-se que o potencial e a massa efetiva dos portadores numa heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$  não-abrupta são dados por:

$$\frac{V_\alpha(z)}{Q_\alpha} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_0(z_1, z_2) + V_1(z_1, z_2)z + V_2(z_1, z_2)z^2, & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_x, & z \geq z_2 \end{cases} \quad (2.5)$$

$$m_\alpha(z) = \begin{cases} m_{1,\alpha}, & z \leq z_1 \\ m_{2,\alpha}(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ m_{x,\alpha}, & z \geq z_2 \end{cases} \quad (2.6)$$

onde nas Eqs. (2.5, 2.6) têm-se que:

$$V_0(z_1, z_2) = -\epsilon_1 z_1 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right) + \epsilon_2 z_1^2 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.7.1)$$

$$V_1(z_1, z_2) = \epsilon_1 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right) - 2\epsilon_2 z_1 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.7.2)$$

$$V_2(z_1, z_2) = \epsilon_2 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.7.3)$$

$$V_x = \epsilon_1 x + \epsilon_2 x^2; \quad (2.7.4)$$

$$\frac{m_{1,\alpha}}{m^*} = \mu_{1,\alpha}, \quad (2.8.1)$$

$$\frac{m_{2,\alpha}(z)}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha} x (z - z_1) / (z_2 - z_1), \quad (2.8.2)$$



$$\frac{m_{x,\alpha}}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha}x. \quad (2.8.3)$$

Uma representação gráfica da variação espacial do potencial  $V_\alpha(z)$  e da massa efetiva  $m_\alpha(z)$  dos portadores para uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta é apresentada na Fig. 2.1.

Enquanto no passado o valor de  $Q_\alpha$  era conhecido com bastante imprecisão ( para elétrons os valores utilizados variavam desde 0.5 até 0.85 ), atualmente é praticamente um consenso que  $Q_e = 0.6$  e  $Q_{hh} = Q_{hl} = 0.4$  [14].

O esquema mais utilizado para o cálculo das propriedades de heterojunções e hetero-estruturas semicondutoras abruptas e não-abruptas é a teoria da massa efetiva (EMT). Já que a EMT é justificada somente quando variações suaves da composição da liga são consideradas, pode se questionar seu uso no caso de interfaces abruptas. Se interfaces não-abruptas são consideradas, a forma exata do operador energia cinética (KEO) com massa efetiva dependente da posição e a condição de continuidade da função de onda e de sua derivada nas bordas das interfaces ainda é um problema em aberto [72-75], embora considerável progresso tenha sido realizado por Burt [76-79] e Cavalcante *et al.* [80].

Após a proposição da EMT por Wannier [81], Slater [82] e Luttinger and Kohn [83], vários trabalhos tentaram extendê-la além do quadro da massa efetiva para estudar cristais com impurezas e composição gradual. Como a massa efetiva dos portadores varia espacialmente nas regiões interfaciais da heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta (ver Eq. (2.6)), as equações do tipo Schrödinger que devem descrever as heterojunções têm que ser obtidas a partir de um operador energia cinética dependente da posição. Várias formas foram propostas para o operador energia cinética com massa efetiva que varia espacialmente, incluindo aqueles de BenDaniel e Duke [66],  $K_{BDD} = p[m(z)]^{-1}p/2$ ; Zhu e Kroemer [84],  $K_{ZK} = [m(z)]^{-1/2}p^2[m(z)]^{-1/2}/2$ ; Gora e Williams [85] e/ou Bastard [86],  $K_{GW(B)} = \{p^2[m(z)]^{-1} + [m(z)]^{-1}p^2\}/4$ ; Li and Kuhn [87],  $K_{LK} = \{p[m(z)]^{-1}p[m(z)]^{-1} + [m(z)]^{-1}p[m(z)]^{-1}p\}/4$ . Vale destacar



que a forma mais geral do operador energia cinética foi proposta por von Roos [88], e é dada por  $K_{VR} = \{m(z)^\alpha p[m(z)]^\beta p[m(z)]^\gamma + [m(z)]^\gamma p[m(z)]^\beta p[m(z)]^\alpha\}/4$ , com  $\alpha + \beta + \gamma = -1$ . As condições de continuidade são impostas em  $m^\alpha \Psi(z)$  e  $m^{\alpha+\beta} \Psi'(z)$ .

Através de um limite relativístico do Hamiltoniano de Dirac e de uma transformação Foldy-Wouthuysen, Cavalcante *et al.* [80] mostraram recentemente que o operador energia cinética com massa efetiva variando espacialmente tem a forma proposta anteriormente por Li e Kuhn [87]. No entanto, as propriedades de transmissão de um elétron através de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As calculadas com esta forma e com a mais utilizada na literatura - que é aquela de BenDaniel e Duke [66], diferem no máximo por 1% se a existência de regiões interfaciais de espessura da ordem de duas células unitárias do GaAs é considerada. Por este motivo, o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66] será utilizado no restante deste trabalho para a obtenção das equações do tipo Schrödinger que descrevem as heterojunções e hetero-estruturas (barreiras simples e duplas) GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas.

Utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66], as equações do tipo Schrödinger que descrevem um portador numa heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não submetida a um campo magnético são:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z \leq z_1 \quad (2.9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_2(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + Q_\alpha [V_0 + V_1 z + V_2 z^2] \Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad (2.10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + Q_\alpha V_x \Psi(z) = E\Psi(z). \quad z \geq z_2 \quad (2.11)$$

As equações (2.9-2.11) serão resolvidas numericamente no Capítulo 3 considerando a dependência espacial da massa efetiva dos portadores.

## 2.2. Heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abruptas Submetidas a um Campo Magnético

Um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  aplicado transversalmente à direção de crescimento  $z$  da heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> pode ser descrito através de uma escolha conveniente do potencial vetor  $\vec{A}$ , que é definido por:

$$\vec{A} = \begin{cases} (0, 0, 0), & z \leq z_a \\ [0, -B(z - z_a), 0], & z_a \leq z \leq z_b \\ [0, -B(z_b - z_a), 0], & z \geq z_b \end{cases} \quad (2.12)$$

Tendo em vista a teoria da massa efetiva e utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66], o Hamiltoniano que descreve a dinâmica dos portadores na heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> é da forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} [\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{qB}{c}(z - z_a), \hat{p}_z] [m_\alpha(z)]^{-1} [\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{qB}{c}(z - z_a), \hat{p}_z] + V_\alpha(z). \quad (2.13)$$

onde  $q$  é a carga elementar dos portadores,  $c$  a velocidade da luz no vácuo,  $B$  a intensidade do campo magnético e  $V_\alpha(z)$  é dado pela Eq. (2.5).

A existência de uma invariância translacional ao longo das direções  $x$  e  $y$  sugere que se tenha soluções do tipo ondas planas no plano  $x, y$  como solução da equação de Schrödinger independente do tempo,  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , que caracteriza os portadores. Em outras palavras, as auto-funções  $\Psi(x, y, z)$  associadas ao Hamiltoniano da Eq. (2.13) podem ser escritas na forma:

$$\Psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \psi(z), \quad (2.14)$$

onde  $\psi(z)$  satisfaz a seguinte equação de autovalores:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_\alpha(z)]^{-1} \frac{d}{dz} \right\} + \frac{1}{2} m_\alpha(z) \omega_B^2 (z - z_0)^2 + V_\alpha(z) \right\} \psi(z) = E^* \psi(z), \quad (2.15)$$

com  $\omega_B = \frac{qB}{cm_\alpha(z)}$ ;  $z_0 = z_a + \frac{\hbar ck_y}{qB}$  e  $E^* = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_\alpha(z)}$ , onde  $k_x$  e  $k_y$  são números quânticos que caracterizam as auto-funções dos portadores.



Portanto, um campo magnético  $\vec{B}$  aplicado perpendicularmente à direção de crescimento  $z$  de uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> altera a configuração do potencial ao qual estão sujeitos os portadores pois o potencial devido ao campo magnético aplicado é dado por  $(1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2$ , como é visto na equação de autovalores (2.15). O termo  $(1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2$  é um potencial do tipo oscilador harmônico, sendo  $\omega_B$  e o parâmetro  $z_0$  denominados, respectivamente, frequência de ciclotron e coordenada do centro das órbitas clássicas de ciclotron. Como se vê na equação (2.15) o parâmetro  $z_0$  está relacionado com a intensidade do campo e autovalor  $k_y$  da componente  $\hat{p}_y$  do operador momento linear associado aos portadores, conseqüentemente a interação do campo  $\vec{B}$  com a componente  $\hat{p}_y$  do momento (ou seja, os valores de  $B$  e  $k_y$  que determinam o parâmetro  $z_0$ ) constitui a base física para se avaliar quantitativa e qualitativamente as alterações na transmissão de portadores em uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>.

As expressões para o potencial efetivo na heterojunção, que é a soma de uma parte devido ao campo magnético e de outra associada a variação composicional de alumínio, são dadas por:

$$V_{ef} = \begin{cases} 0, & z \leq z_a \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2, & z_a \leq z \leq z_1 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_x, & z_2 \leq z \leq z_b \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z_b - z_0)^2 + V_x, & z \geq z_b \end{cases} \quad (2.16)$$

onde  $V_\alpha(z)$ ,  $V_x$  e  $m_\alpha(z)$  são dados pelas Eqs. (2.5 e 2.6).

Uma representação gráfica de uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> submetida a um campo magnético é apresentada na Fig. 2.2.

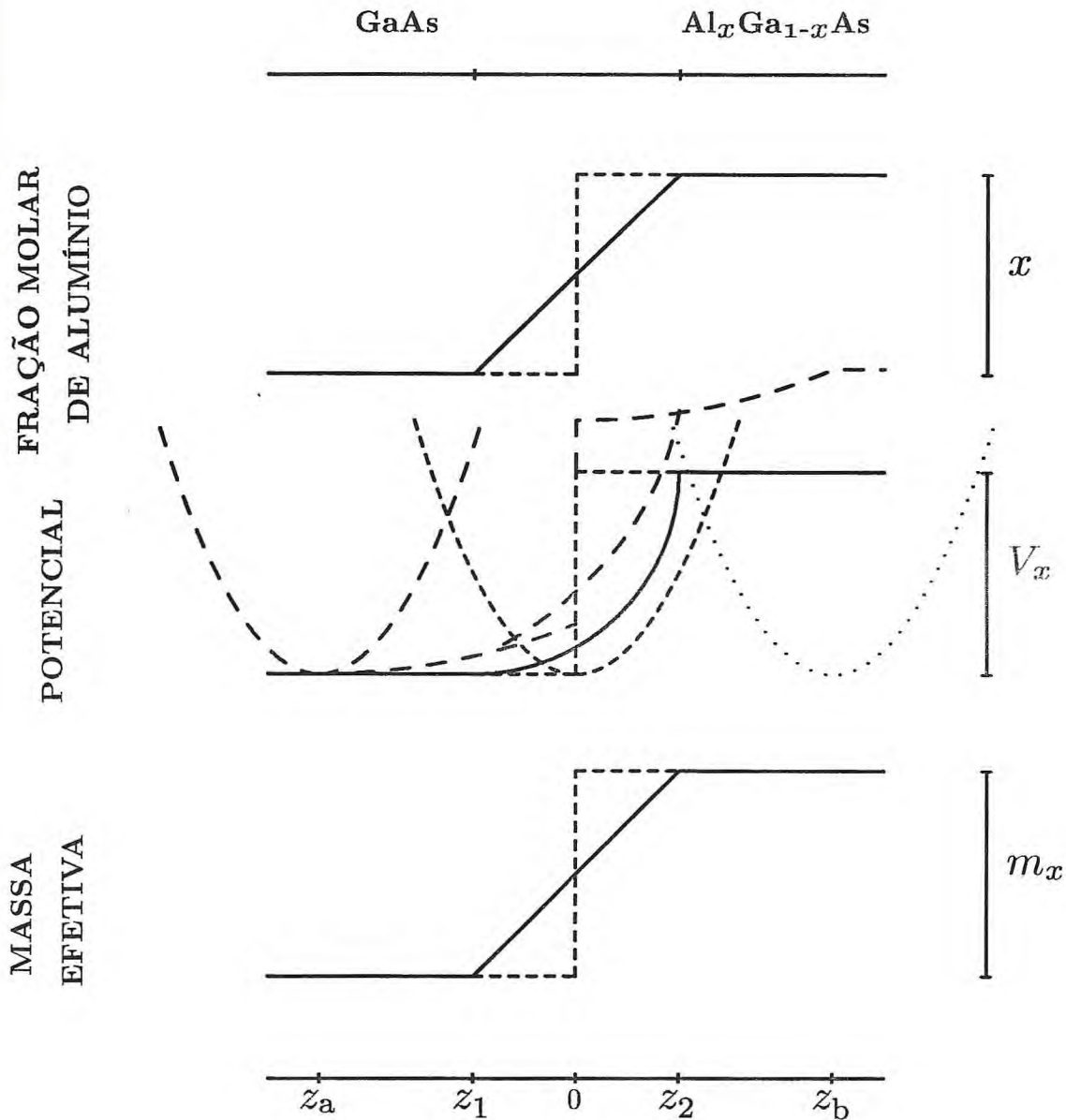


Figura 2.2. Topo: variação espacial da fração molar de alumínio em uma heterojunção  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial em uma heterojunção  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua) submetida a um campo magnético no plano. As parábolas representam o termo de potencial devido ao campo para valores específicos de  $z_0$ . Base: variação espacial da massa efetiva dos portadores em uma heterojunção  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).



### 2.3. Barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abruptas Simples

O potencial e a massa efetiva dos portadores numa barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples são obtidos de maneira análoga aqueles da heterojunção (ver Seção 2.1). Fazendo novamente a hipótese de que a fração molar de alumínio varia de forma linear nas interfaces, obtém-se que o conteúdo de alumínio que caracteriza a barreira simples é dado por:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ x(z - z_1)/(z_2 - z_1), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ x(z - z_4)/(z_3 - z_4), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.17)$$

onde os  $z_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) especificam as bordas das interfaces, e  $x$  é a fração molar de alumínio da liga Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>.

Uma representação gráfica da variação espacial da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  para uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples é apresentada na Fig. 2.3. Deve se observar que as bordas da barreira não-abrupta coincidem com aquelas da barreira abrupta, o que ocorre nos pontos  $z_i$ .

É oportuno dizer que os trabalhos já publicados sobre hetero-estruturas não-abruptas consideram geralmente que o centro de suas regiões interfaciais é que determina o posicionamento das interfaces das hetero-estruturas abruptas [22,23,25,87]. As propriedades das hetero-estruturas abruptas definidas desta maneira são então comparadas com aquelas das hetero-estruturas não-abruptas que lhes são associadas para se estimar o papel das interfaces semicondutoras não-abruptas. Na verdade, este tipo de definição das bordas de uma hetero-estrutura abrupta tem que ser considerado como a definição de uma hetero-estrutura abrupta equivalente, i.e., uma hetero-estrutura cujas propriedades são as mais próximas possíveis daquelas da hetero-estrutura não-abrupta que procura representar, e não deve ser utilizada para uma descrição de hetero-estruturas semicondutoras reais.

Por outro lado, já que uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As tem que começar quando a fração molar de alumínio  $\chi(z)$  tem valor nulo, a localização para as interfaces utilizadas aqui e por Proctor *et al.* [24] parece ser mais apropriada do que aquelas consideradas usualmente [22,23,25,87]. Neste caso, a largura da barreira abrupta do modelo está relacionada diretamente com a largura real da barreira semicondutora do cristal com o qual se realiza experimentos. Deve-se destacar que a utilização do posicionamento convencional das interfaces [22,23,25,87] é responsável por subestimações dos efeitos relacionados com a existência de interfaces em hetero-estruturas semicondutoras.

Para se obter o potencial e a massa efetiva dos portadores nas regiões interfaciais a partir da variação da fração molar nas mesmas, supõe-se que as Eqs. (2.2, 2.3) são válidas para dimensões características da ordem de Angstrom. Com isto,  $x \rightarrow \chi(z)$ , e ao se fazer uso da hipótese da variação linear de alumínio nas interfaces, obtêm-se que o potencial e a massa efetiva dos portadores numa barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples são dados por:

$$\frac{V_\alpha(z)}{Q_\alpha} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_0(z_1, z_2) + V_1(z_1, z_2)z + V_2(z_1, z_2)z^2, & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ V_0(z_3, z_4) + V_1(z_3, z_4)z + V_2(z_3, z_4)z^2, & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0; & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.18)$$

$$m_\alpha(z) = \begin{cases} m_{1,\alpha}, & z \leq z_1 \\ m_{2,\alpha}(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ m_{x,\alpha}, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ m_{3,\alpha}(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ m_{1,\alpha}, & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.19)$$

onde nas Eqs. (2.18, 2.19) têm-se que:

$$V_0(z_1, z_2) = -\epsilon_1 z_1 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right) + \epsilon_2 z_1^2 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.20.1)$$

$$V_0(z_3, z_4) = -\epsilon_1 z_4 \left( \frac{x}{z_3 - z_4} \right) + \epsilon_2 z_4^2 \left( \frac{x}{z_3 - z_4} \right)^2, \quad (2.20.2)$$

$$V_1(z_1, z_2) = \epsilon_1 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right) - 2\epsilon_2 z_1 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.20.3)$$



$$V_1(z_3, z_4) = \epsilon_1 \left( \frac{x}{z_3 - z_4} \right) - 2\epsilon_2 z_4 \left( \frac{x}{z_3 - z_4} \right)^2, \quad (2.20.4)$$

$$V_2(z_1, z_2) = \epsilon_2 \left( \frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.20.5)$$

$$V_2(z_3, z_4) = \epsilon_2 \left( \frac{x}{z_3 - z_4} \right)^2, \quad (2.20.6)$$

$$V_x = \epsilon_1 x + \epsilon_2 x^2; \quad (2.20.7)$$

$$\frac{m_{1,\alpha}}{m^*} = \mu_{1,\alpha}, \quad (2.21.1)$$

$$\frac{m_{2,\alpha}(z)}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha} x (z - z_1) / (z_2 - z_1), \quad (2.21.2)$$

$$\frac{m_{x,\alpha}}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha} x, \quad (2.21.3)$$

$$\frac{m_{3,\alpha}(z)}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha} x (z - z_4) / (z_3 - z_4). \quad (2.21.4)$$

Uma representação gráfica da variação espacial do potencial  $V_{\alpha,2}(z)$  e da massa efetiva  $m_\alpha(z)$  dos portadores para uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta simples é apresentada na Fig. 2.3.

Utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66], as equações do tipo Schrödinger que descrevem um portador numa barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples não submetida a um campo magnético são:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \Psi_\alpha(z)}{dz^2} = E \Psi_\alpha(z), \quad z \leq z_1 \quad (2.22)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_2(z)]^{-1} \frac{d \Psi_\alpha(z)}{dz} \right\} + Q_\alpha [V_0 + V_1 z + V_2 z^2] \Psi_\alpha(z) = E \Psi_\alpha(z), \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad (2.23)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2 \Psi_\alpha(z)}{dz^2} + Q_\alpha V_x \Psi_\alpha(z) = E \Psi_\alpha(z), \quad z_2 \leq z \leq z_3 \quad (2.24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_3(z)]^{-1} \frac{d \Psi_\alpha(z)}{dz} \right\} + Q_\alpha [V_0 + V_1 z + V_2 z^2] \Psi_\alpha(z) = E \Psi_\alpha(z), \quad z_3 \leq z \leq z_4 \quad (2.25)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \Psi_\alpha(z)}{dz^2} = E \Psi_\alpha(z). \quad z \geq z_4 \quad (2.26)$$

As equações (2.22-2.26) serão resolvidas numericamente no Capítulo 3 considerando a dependência espacial da massa efetiva dos portadores.

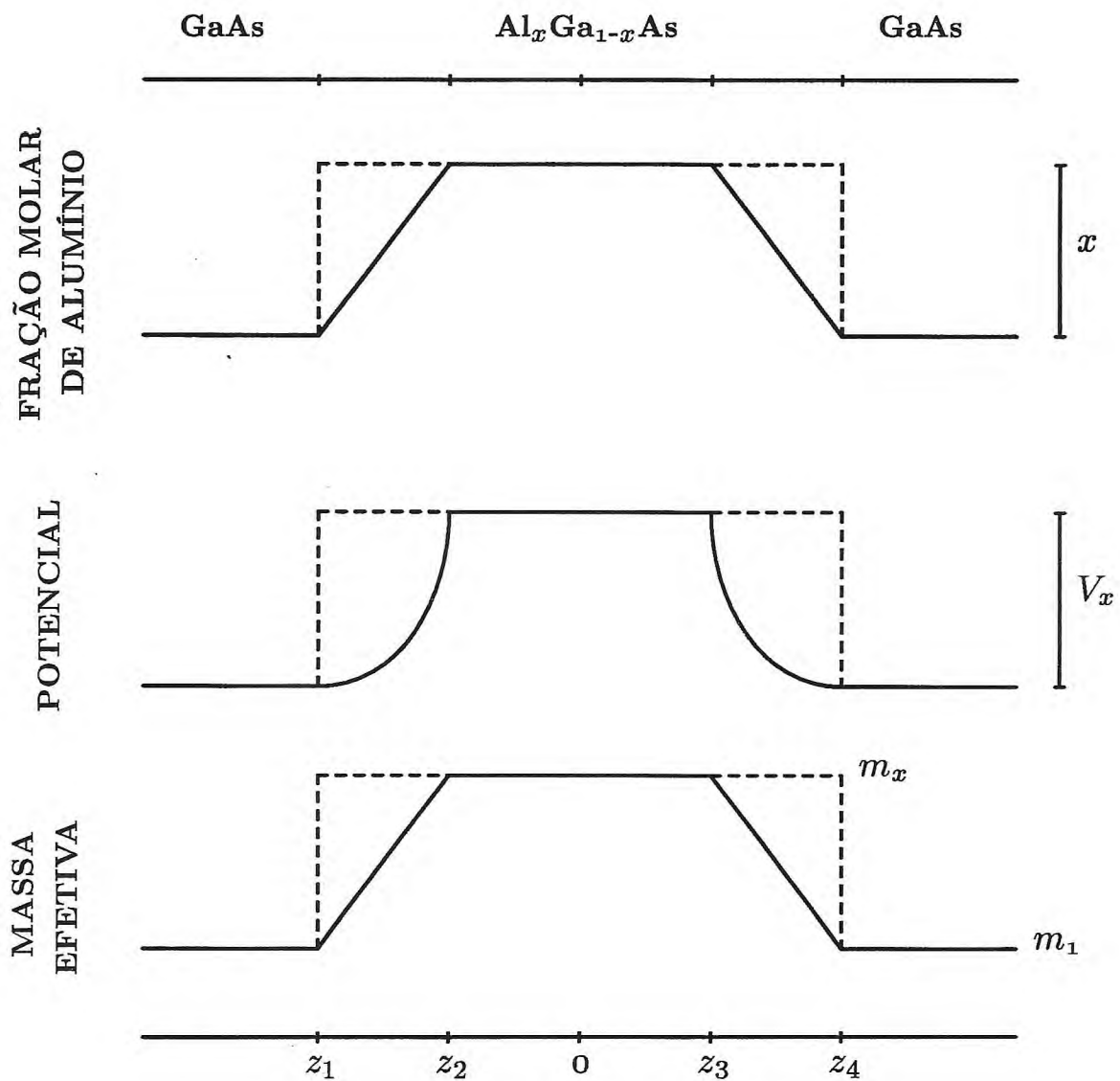


Figura 2.3. Topo: variação espacial da fração molar de alumínio em uma barreira  $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$  simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial característica de uma barreira  $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$  simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Base: variação espacial da massa efetiva dos portadores característica de uma barreira  $GaAs/Al_x Ga_{1-x} As$  simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).



## 2.4. Barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abruptas Simples Submetidas a um Campo Magnético

Um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  aplicado transversalmente à direção de crescimento  $z$  da barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> simples pode ser descrito através de uma escolha conveniente do potencial vetor  $\vec{A}$ , que é definido por:

$$\vec{A} = \begin{cases} (0, 0, 0), & z \leq z_1 \\ [0, -B(z - z_1), 0], & z_1 \leq z \leq z_4 \\ [0, -B(z_4 - z_1), 0], & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.27)$$

Tendo em vista a teoria da massa efetiva e utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66], o Hamiltoniano que descreve a dinâmica dos portadores numa barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> simples é da forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}[\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{qB}{c}(z - z_1), \hat{p}_z][m_\alpha(z)]^{-1}[\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{qB}{c}(z - z_1), \hat{p}_z] + V_\alpha(z). \quad (2.28)$$

onde  $q$  é a carga elementar dos portadores,  $c$  a velocidade da luz no vácuo,  $B$  a intensidade do campo magnético e  $V_\alpha(z)$  é dado pela Eq. (2.18).

A existência de uma invariância translacional ao longo das direções  $x$  e  $y$  sugere que se tenha soluções do tipo ondas planas no plano  $x, y$  como solução da equação de Schrödinger independente do tempo,  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , que caracteriza os portadores. Em outras palavras, as auto-funções  $\Psi(x, y, z)$  associadas ao Hamiltoniano da Eq. (2.28) podem ser escritas na forma:

$$\Psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \phi(z), \quad (2.29)$$

onde  $\phi(z)$  satisfaz a seguinte equação de autovalores:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_\alpha(z)]^{-1} \frac{d}{dz} \} + \frac{1}{2} m_\alpha(z) \omega_B^2 (z - z_0)^2 + V_\alpha(z) \right\} \phi(z) = E^* \phi(z), \quad (2.30)$$

com  $\omega_B = \frac{qB}{cm_\alpha(z)}$ ;  $z_0 = z_1 + \frac{\hbar ck_y}{qB}$  e  $E^* = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_\alpha(z)}$ , onde  $k_x$  e  $k_y$  são números quânticos que caracterizam as auto-funções dos portadores.

Portanto, um campo magnético  $\vec{B}$  aplicado perpendicularmente à direção de crescimento  $z$  de uma barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> simples altera a configuração do potencial ao qual estão sujeitos os portadores pois o potencial devido ao campo magnético aplicado é dado por  $(1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2$ , como é visto na Eq. (2.30). O termo  $(1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2$  é um potencial do tipo oscilador harmônico, sendo  $\omega_B$  e o parâmetro  $z_0$  denominados, respectivamente, frequência de ciclotron e coordenada do centro das órbitas clássicas de ciclotron. Como se vê na equação (2.30) o parâmetro  $z_0$  está relacionado com a intensidade do campo e autovalor  $k_y$  da componente  $\hat{p}_y$  do operador momento linear associado aos portadores, conseqüentemente a interação do campo  $\vec{B}$  com a componente  $\hat{p}_y$  do momento (ou seja, os valores de  $B$  e  $k_y$  que determinam o parâmetro  $z_0$ ) constitui a base física para se avaliar quantitativa e qualitativamente as alterações na transmissão de portadores em uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> simples.

As expressões para o potencial efetivo da barreira, que é a soma de uma parte devido ao campo magnético e de outra associada a variação composicional de alumínio, são dadas por:

$$V_{ef} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z_4 - z_0)^2, & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.31)$$

onde  $V_\alpha(z)$ ,  $V_x$  e  $m_\alpha(z)$  são dados pelas Eqs. (2.18, 2.19).

Uma representação gráfica de uma barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> simples submetida a um campo magnético é apresentada na Fig. 2.4.

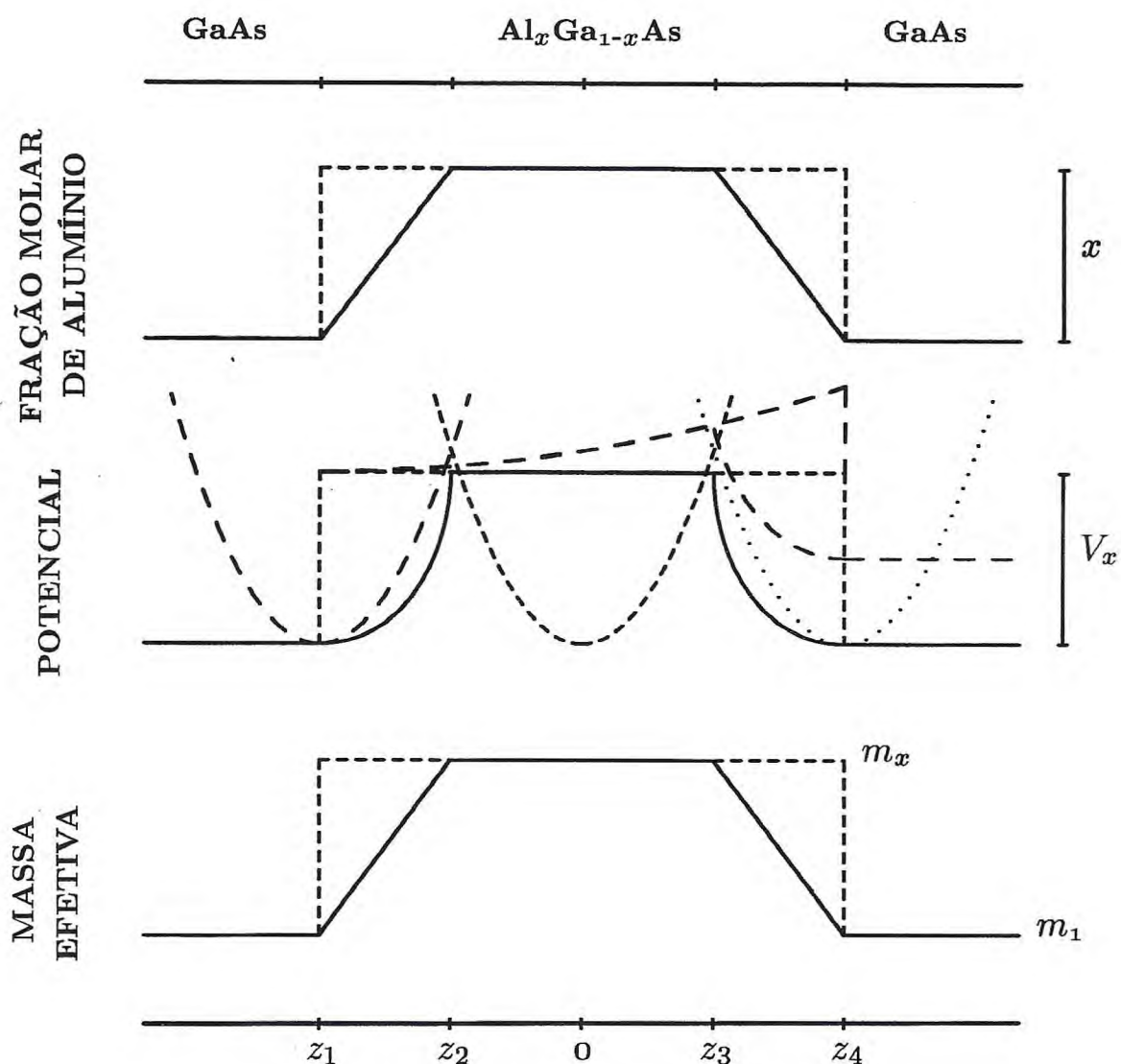


Figura 2.4. Topo: variação espacial da fração molar de alumínio em uma barreira simples  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial em uma barreira simples  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua) submetida a um campo magnético no plano. As parábolas representam o termo de potencial devido ao campo para valores específicos de  $z_0$ . Base: variação espacial da massa efetiva dos portadores em uma barreira simples  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).



## 2.5. Barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Duplas Não-Abruptas

O potencial e a massa efetiva dos portadores numa barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dupla são obtidos de maneira análoga aqueles da heterojunção e da barreira simples (ver Seção 2.1 e 2.3). Fazendo novamente a hipótese de que a fração molar de alumínio varia linearmente nas interfaces, obtêm-se que o conteúdo de alumínio que caracteriza a barreira dupla é dado por:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ x(z - z_1)/(z_2 - z_1), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ x(z - z_4)/(z_3 - z_4), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ x(z - z_5)/(z_6 - z_5), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ x(z - z_8)/(z_7 - z_8), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ 0, & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.32)$$

onde  $z_j$  ( $j = 1, \dots, 8$ ) especificam as bordas das interfaces, e  $x$  é a fração molar de alumínio na liga Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>.

Uma representação gráfica da variação espacial da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  para uma barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dupla é apresentada na Fig. 2.5. Deve se observar que as bordas da barreira dupla abrupta coincidem com aquelas da barreira dupla não-abrupta, o que ocorre nos pontos  $z_j$ .

Para se obter o potencial e a massa efetiva dos portadores nas regiões interfaciais a partir da variação da fração molar de alumínio nas mesmas, supõe-se que as Eqs. (2.2, 2.3) são válidas para dimensões características da ordem de Angstrom. Com isto,  $x \rightarrow \chi(z)$ , e ao se fazer uso da hipótese da variação linear de alumínio nas interfaces, obtêm-se que o potencial e a massa efetiva dos portadores numa barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As



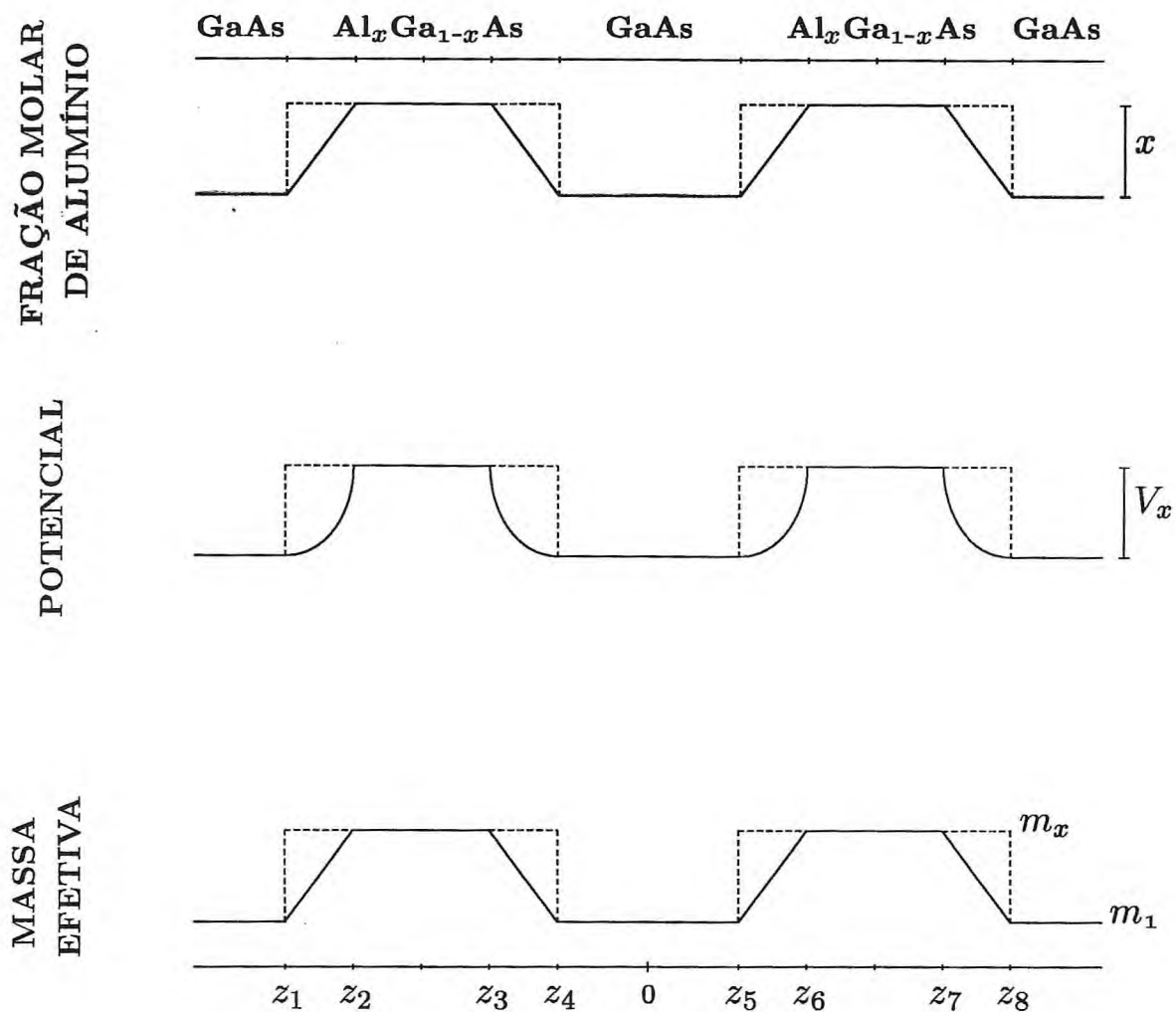


Figura 2.5. Topo: variação espacial da fração molar de alumínio em uma barreira  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial característica de uma barreira  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Base: variação espacial da massa efetiva dos portadores característica de uma barreira  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

não-abrupta dupla são dados por:

$$\frac{V_\alpha(z)}{Q_\alpha} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_{1,2}(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ V_{3,4}(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ V_{5,6}(z), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ V_x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ V_{7,8}(z), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ 0; & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.33)$$

$$m_\alpha(z) = \begin{cases} m_{1,\alpha}, & z \leq z_1 \\ m_{2,\alpha}(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ m_{x,\alpha}, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ m_{3,\alpha}(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ m_{1,\alpha}, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ m_{6,\alpha}(z), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ m_{x,\alpha}, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ m_{7,\alpha}(z), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ m_{1,\alpha}, & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.34)$$

onde nas Eqs. (2.33, 2.34) têm-se que:

$$V_{l,m}(z) = V_0(z_l, z_m) + V_1(z_l, z_m)z + V_2(z_l, z_m)z^2 \quad (2.35.1)$$

$$V_0(z_j, z_i) = -\epsilon_1 z_j \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right) + \epsilon_2 z_j^2 \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 2, 6), \quad (2.35.2)$$

$$V_0(z_i, z_j) = -\epsilon_1 z_j \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right) + \epsilon_2 z_j^2 \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 3, 7), \quad (2.35.3)$$

$$V_1(z_j, z_i) = \epsilon_1 \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right) - 2\epsilon_2 z_j \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 2, 6), \quad (2.35.4)$$

$$V_1(z_i, z_j) = \epsilon_1 \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right) - 2\epsilon_2 z_j \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 3, 7), \quad (2.35.5)$$

$$V_2(z_j, z_i) = \epsilon_2 \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 2, 6), \quad (2.35.6)$$

$$V_2(z_i, z_j) = \epsilon_2 \left( \frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 3, 7), \quad (2.35.7)$$

$$V_x = \epsilon_1 x + \epsilon_2 x^2; \quad (2.35.8)$$

$$\frac{m_{1,\alpha}}{m^*} = \mu_{1,\alpha}, \quad (2.36.1)$$

$$\frac{m_{i,\alpha}(z)}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha}x(z - z_{i-(-1)^i})/(z_i - z_{i-(-1)^i}), \quad (2.36.2)$$

$$\frac{m_{x,\alpha}}{m^*} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha}x, \quad (2.36.3)$$

para  $l = \{1, 3, 5, 7\}$ ,  $m = \{2, 4, 6, 8\}$ , e  $\{i, j\} = \{2, 1\}, \{3, 4\}, \{6, 5\} e \{7, 8\}$ .

Uma representação gráfica da variação espacial do potencial  $V_\alpha(z)$  e da massa efetiva  $m_\alpha(z)$  dos portadores para uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta dupla é apresentada na Fig. 2.5.

Utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66], as equações do tipo Schrödinger que descrevem um portador numa barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dupla não submetida a um campo magnético são:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{1,\alpha}} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z \leq z_1 \quad (2.37)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_{2,\alpha}(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right\} + Q_\alpha V_{1,2}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad (2.38)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{x,\alpha}} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + Q_\alpha V_x\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_2 \leq z \leq z_3 \quad (2.39)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_{3,\alpha}(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right\} + Q_\alpha V_{3,4}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_3 \leq z \leq z_4 \quad (2.40)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{1,\alpha}} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z_4 \leq z \leq z_5 \quad (2.41)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_{6,\alpha}(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right\} + Q_\alpha V_{5,6}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_5 \leq z \leq z_6 \quad (2.42)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{x,\alpha}} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + Q_\alpha V_x\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_6 \leq z \leq z_7 \quad (2.43)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left\{ [m_{7,\alpha}(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right\} + Q_\alpha V_{7,8}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_7 \leq z \leq z_8 \quad (2.44)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{1,\alpha}} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z). \quad z \geq z_8 \quad (2.45)$$

As equações (2.37-2.45) serão resolvidas numericamente no Capítulo 3 considerando a dependência espacial da massa efetiva dos portadores.



## 2.6. Barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abruptas Duplas Submetidas a um Campo Magnético

Um campo magnético uniforme  $\vec{B}$  aplicado transversalmente à direção de crescimento  $z$  da barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> dupla pode ser descrito através de uma escolha conveniente do potencial vetor  $\vec{A}$ , que é definido por:

$$\vec{A} = \begin{cases} (0, 0, 0), & z \leq z_1 \\ [0, -B(z - z_1), 0], & z_1 \leq z \leq z_8 \\ [0, -B(z_8 - z_1), 0], & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.46)$$

Tendo em vista a teoria da massa efetiva e utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [66], o Hamiltoniano que descreve a dinâmica dos portadores numa barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> dupla é da forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}[\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{qB}{c}(z - z_1), \hat{p}_z][m_\alpha(z)]^{-1}[\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{qB}{c}(z - z_1), \hat{p}_z] + V_\alpha(z). \quad (2.47)$$

onde  $q$  é a carga elementar dos portadores,  $c$  a velocidade da luz no vácuo,  $B$  a intensidade do campo magnético e  $V_\alpha(z)$  é dado pela Eq. (2.33).

A existência de uma invariância translacional ao longo das direções  $x$  e  $y$  sugere que se tenha soluções do tipo ondas planas no plano  $x, y$  como solução da equação de Schrödinger independente do tempo,  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , que caracteriza os portadores. Em outras palavras, as auto-funções  $\Psi(x, y, z)$  associadas ao Hamiltoniano da Eq. (2.47) podem ser escritas na forma:

$$\Psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \Phi(z), \quad (2.48)$$

onde  $\Phi(z)$  satisfaz a seguinte equação de autovalores:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_\alpha(z)]^{-1} \frac{d}{dz} \} + \frac{1}{2} m_\alpha(z) \omega_B^2 (z - z_0)^2 + V_\alpha(z) \right\} \Phi(z) = E^* \Phi(z), \quad (2.49)$$

com  $\omega_B = \frac{qB}{cm_\alpha(z)}$ ;  $z_0 = z_1 + \frac{\hbar ck_y}{qB}$  e  $E^* = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_\alpha(z)}$ , onde  $k_x$  e  $k_y$  são números quânticos que caracterizam as auto-funções dos portadores.

Portanto, um campo magnético  $\vec{B}$  aplicado perpendicularmente à direção de crescimento  $z$  de uma barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> dupla altera a configuração do potencial ao qual estão sujeitos os portadores pois o potencial devido ao campo magnético aplicado é dado por  $(1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2$ , como é visto na Eq. (2.49). O termo  $(1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2$  é um potencial do tipo oscilador harmônico, sendo  $\omega_B$  e o parâmetro  $z_0$  denominados, respectivamente, frequência de ciclotron e coordenada do centro das órbitas clássicas de ciclotron. Analogamente em heterojunções e barreiras simples, a interação do campo  $\vec{B}$  com a componente  $\hat{p}_y$  do momento constitui a base física para se avaliar quantitativa e qualitativamente as alterações na transmissão de portadores em uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> dupla.

As expressões para o potencial efetivo da barreira, que é a soma de uma parte devido ao campo magnético e de outra associada a variação composicional de alumínio, são dadas por:

$$V_{ef} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z - z_0)^2 + V_\alpha(z), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ (1/2)[m_\alpha(z)]\omega_B^2(z_8 - z_0)^2, & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.50)$$

onde  $V_\alpha(z)$ ,  $V_x$  e  $m_\alpha(z)$  são dados pelas Eqs. (2.33, 2.34).

Uma representação gráfica de uma barreira não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> dupla submetida a um campo magnético é apresentada na Fig. 2.6.

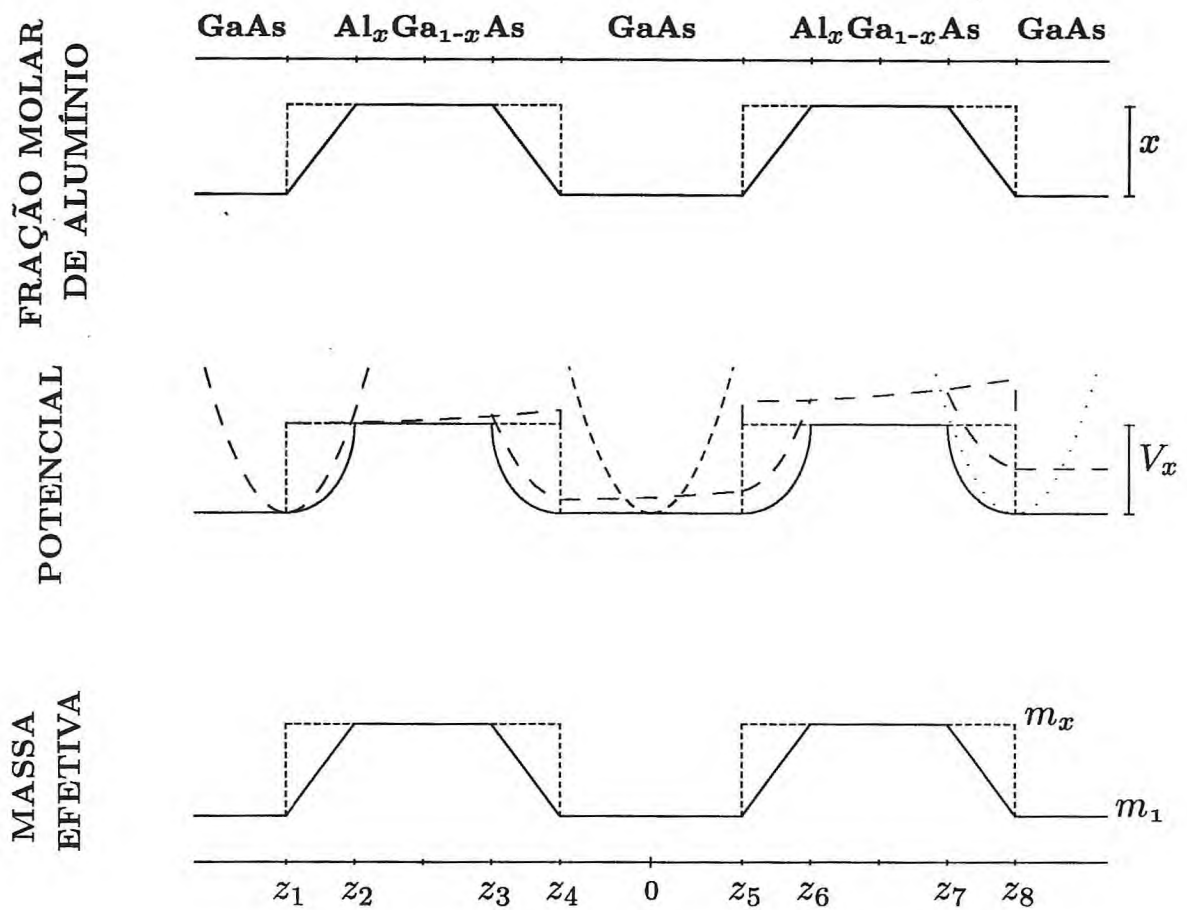


Figura 2.6. Topo: variação espacial da fração molar de alumínio em uma barreira dupla  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial em uma barreira dupla  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua) submetida a um campo magnético no plano. As parábolas representam o termo de potencial devido ao campo para valores específicos de  $z_0$ . Base: variação espacial da massa efetiva dos portadores em uma barreira dupla  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).



## CAPÍTULO 3

# PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO EM HETEROJUNÇÕES, BARREIRAS SIMPLES E DUPLAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As NÃO-ABRUPTAS SUBMETIDAS A UM CAMPO MAGNÉTICO

Desde que as técnicas experimentais atuais de crescimento são insuficientes para assegurar o processo de crescimento de interfaces abruptas, alguns pesquisadores têm investigado o papel de interfaces não-abruptas nas propriedades físicas de heteroestruturas semicondutoras [20,21,23,24,26-33]. Uma região interfacial de transição entre os semicondutores constituintes das heterojunções existe, possuindo nos melhores casos uma largura de pelo menos duas unidades de célula da rede cristalina [40,41]. Utilizando o método de *tight binding* e representando o potencial interfacial por uma função linear e mantendo a massa efetiva dos portadores constante nas interfaces, Schulman [22] calculou os níveis de energia em poços quânticos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As e mostrou modificações nos mesmos causadas pela não-abrupticidade. Jiang e Lin [23] calcularam a estrutura de bandas de uma super-rede não-abrupta usando a hipótese de Schulman [22], afirmando que nestas condições a forma exata do potencial interfacial para elétrons e buracos era desconhecida.

Mesmo que barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples não tenham aplicações tecnológicas, elas são estruturas importantes no estudo de fenômenos físicos básicos (tunelamento) e na pesquisa de novos métodos numéricos para a solução de equações do tipo Schrödinger, que conseqüentemente serão aplicados a diversos tipos de heteroestruturas semicondutoras. A barreira semicondutora simples foi, por exemplo, utilizada na investigação da solução numérica da equação de Schrödinger pelo método dos elementos finitos para obtenção da probabilidade de transmissão e do tempo de tunelamento ressonante por Nakamura *et al.* [89]. Ando e Itoh [90] utilizaram também uma barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples como primeiro caso no estudo da validade do método numérico que propuseram para solução numérica da equação de Schrödinger. O tunelamento ressonante de buracos em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

simples foi estudado por Rousseau *et al.* [91], Morifuji e Hamaguchi [92]. O efeito de transferência intervale entre os diferentes mínimos das bandas de condução no tunelamento ressonante de barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples foi estudado por Liu [93], e expressões analíticas para o tempo de tunelamento de elétrons foram obtidos por Thanikasalam *et al.* [94].

Os primeiros estudos sobre fenômenos de transmissão em barreiras semicondutoras duplas foram iniciados com os trabalhos de Tsu e Esaki [95] e Chang, Esaki e Tsu [3], que lançaram a própria base da física de hetero-estruturas semicondutoras. Devido a sua imensa aplicabilidade em dispositivos eletrônicos [7,96], as barreiras semicondutoras duplas são um dos tipos de hetero-estruturas mais estudados.

Para descrever as propriedades de transmissão de portadores através de barreiras semicondutoras duplas, tem-se utilizado dois modelos: o modelo do tunelamento ressonante e o modelo do tunelamento sequencial.

O modelo do tunelamento ressonante (ou coerente) foi proposto por Chang, Esaki e Tsu [3]. Nele se considera que a probabilidade de tunelamento do portador através da barreira dupla semicondutora cresce de forma ressonante quando a energia dos portadores que tunelam é próxima daquela dos níveis de energia do poço formado entre as duas barreiras. Entre muitos trabalhos publicados sobre tunelamento ressonante, pode se destacar: Ricco e Azbel [8]; Brennan e Summers [97]; Capasso, Mohammed e Cho [7]; Peng, Chen e Zhou [98]; e Allen e Richardson [99].

O modelo de tunelamento sequencial (ou incoerente), que foi proposto originalmente por Luryi [100], considera o tunelamento através da barreira dupla semicondutora como um processo em dois estágios: primeiro o portador tunela através da primeira barreira; depois o portador tunela através da segunda barreira. Entre os dois tunelamentos o portador tem um período de permanência em um dos níveis de energia do poço entre as barreiras, período no qual ele pode sofrer espalhamento com fônons [100-108], rugosidades interfaciais [9,109-118], ou efeitos relacionados [123-125].



Ainda que estes modelos fundamentam importantes características dos fenômenos de transmissão através de barreiras semicondutoras duplas, eles não explicam porque a medida experimental da razão entre os valores pico e vale na corrente de tunelamento através de uma barreira semicondutora dupla é menor cerca de 20 vezes do que aquela calculada na teoria [4-6].

Geralmente em todos os trabalhos relativos a propriedades de transmissão de portadores através de barreiras semicondutoras duplas, não se tem levado em conta o fato da existência de interfaces não-abruptas. Como elas são capazes de alterar relevantemente os níveis de energia de poços quânticos semicondutores [119], as propriedades de transmissão dos portadores deverão ser afetadas significativamente.

De um ponto de vista teórico, desde que a presença de um campo magnético transversal quebra a simetria do problema da hetero-estrutura, o caso do campo no plano é mais complicado do que os casos em que o campo magnético é aplicado longitudinalmente ou na ausência do mesmo. Com a simetria do problema quebrada pelo campo, teorias magneto-ópticas e de magneto-tunelamento fazem uso de computação numérica ou muitas vezes utilizam aproximações inapropriadas. Por exemplo, teorias que investigam os níveis de energia de hetero-estruturas na presença de um campo magnético transversal empregam o método variacional [49,50]. Em um trabalho pioneiro, Ando [49] usa este método para calcular os níveis de energia em estruturas  $S_i/S_iO_2$ . Xia e Fan [50] fizeram cálculos análogos para super-redes. A técnica variacional tem uma limitação no que diz respeito ao consumo excessivo de CPU quando se tem hetero-estruturas compostas por um grande número de camadas. Por outro lado, Brey, Platero e Tejedor [51] aplicaram a THT (Transfer-Hamiltonian Technique) para calcular o tunelamento em hetero-estruturas submetidas a um campo magnético transversal. Esta técnica tem como grande limitação o fato de ser uma teoria de perturbação. Eaves, Stevens e Sheard [52] utilizaram o método WKB para estudar magneto-tunelamento em barreiras simples. Posteriormente, Zaslarsky *et al.* [53] usaram o mesmo método para o estudo de magneto-tunelamento ressonante em

barreiras duplas. A aproximação WKB falha para casos em que as hetero-estruturas semicondutoras são constituídas de camadas bastante finas.

Devido as limitações de tais métodos, surgiu a necessidade de se desenvolver um modo capaz de tratar problemas relativos a estruturas semicondutoras submetidas a campos magnéticos transversos de forma eficiente e independente da espessura das camadas. Tsu e Esaki [95] desenvolveram, em trabalho original, o método da matriz transferência para estudar o tunelamento de elétrons numa estrutura de muitas barreiras. Ando e Itoh [90] calcularam tunelamento em barreiras simples utilizando a aproximação multistep para o potencial. Esta técnica inclui variações contínuas da energia potencial e da massa efetiva dos portadores, bem como é eficiente para casos em que variações abruptas do potencial em heterojunções sejam pertinentes.

Em se tratando de heterojunções, Jonhson *et al.* [61] mostraram que interfaces (caracterizadas por potenciais abruptos ou não-abruptos) imersas em um campo magnético transverso, geram uma estrutura complexa nos níveis de Landau para transmissão de elétrons através destas interfaces. Esta complexidade está associada a uma superposição do potencial gerado pelo campo magnético com o potencial interfacial da heterojunção.

Estruturas eletrônicas em super-redes na presença de um campo magnético perpendicular à direção de crescimento das interfaces tem sido investigadas em trabalhos teóricos e experimentais [50,62]. Xia e Fan [50] utilizando o método de expansão em funções seno, calcularam os níveis de energia em super-redes GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$  em função da intensidade do campo magnético. Eles mostraram uma larga dispersão nos níveis de energia quando o campo interage com os autovalores do momento linear (associados aos portadores) . Trabalhando experimentalmente em super-redes GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ , Belle *et al.* [62] observaram, utilizando um potencial Kronig-Penney, que os níveis de energia dependem significativamente da interação do campo magnético com o momento linear associado aos portadores.



Estudando barreiras simples GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As submetidas a um campo magnético transversal, Guéret *et al.* e Eaves *et al.* [63,64] mostraram que o campo provoca alterações na altura da barreira e uma consequente modificação na probabilidade de transmissão de elétrons.

Por sua grande aplicabilidade em dispositivos eletrônicos, hetero-estruturas semicondutoras do tipo barreiras duplas têm sido alvo de intensas pesquisas quando submetidas a campos magnéticos transversos. Medidas experimentais feitas por Zaslavsky *et al.* [53] do tunelamento ressonante em barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, mostraram alterações nos picos de ressonância da corrente de tunelamento na presença do campo; a explicação qualitativa deste fato está associada a uma interação do campo com o momento linear dos portadores, quando elétrons tunelam para dentro e para fora do poço [63,120-122]. Hung *et al.* [65] trabalhando teoricamente em barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As mostraram a dependência dos níveis de energia e das funções de onda em função da interação do campo com momento linear (ou seja, os autovalores associados ao operador) dos portadores. Além disso, revelaram mudanças nas curvas de transmissão e na densidade de corrente em função da intensidade do campo magnético.

Heterojunções, barreiras simples e duplas não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As submetidas a um campo magnético transversal serão utilizadas neste Capítulo para o estudo da influência do campo nas propriedades de transmissão de elétrons. As alterações causadas pela interação do campo magnético com momento linear associado aos portadores e intensidade do campo são estudadas. Influências de interfaces não-abruptas, das larguras das hetero-estruturas semicondutoras e, em particular, da assimetria das barreiras em barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As na presença do campo magnético, são investigadas.

O efeito de interfaces na presença do campo magnético será estudado fazendo-se a hipótese da dependência linear da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  nas interfaces. Consequentemente, empregar-se-á expressões para a variação espacial da massa efetiva e



do potencial nas interfaces GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  obtidas nas Seções 2.1-6. Portanto, a transmissão de elétrons será calculada, considerando a dependência espacial do potencial e da massa efetiva, via solução numérica da equação de Schrödinger pelo método multistep de Ando e Itoh [90].

Nas Seções 3.1, 3.2, 3.3, resultados numéricos serão obtidos, respectivamente, para a transmissão de elétrons através de heterojunções, barreiras simples e barreiras duplas não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  submetidas a um campo magnético, com a massa efetiva variando linearmente nas interfaces.

### 3.1. Transmissão de Elétrons Através de Heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abruptas Submetidas a um Campo Magnético

Coeficientes de transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas submetidas a um campo magnético perpendicular à direção de crescimento das interfaces são calculados (ver Fig. 2.2 da pag. 18). Para investigar o efeito de interfaces não-abruptas na transmissão quando um campo magnético é aplicado na região que engloba a heterojunção, os cálculos foram realizados utilizando-se larguras interfaciais de 0-4 células unitárias (UC) do GaAs. A fração molar  $x = 0.3$  na liga Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, que implica em  $V_x = 0.227eV$  para o valor do degrau de potencial da heterojunção na ausência do campo, foi considerada em todos os resultados deste trabalho. De acordo com os valores atualmente aceitos na literatura [128,129], *band offsets*  $Q_e = 0.6$  para elétrons foram utilizadas em todo o estudo. Larguras de 100 Å nas quais o campo magnético é aplicado foram consideradas em geral, embora também tenha se utilizado larguras de 50 Å e 75 Å, tendo em vista investigar a influência de interfaces e do campo na transmissão de elétrons em função destas larguras. No sentido de localizar  $z_0$  somente na região de aplicação do campo magnético, os resultados foram obtidos considerando-se portadores (elétrons) com autovalores  $k_y$  pertencente ao seguinte intervalo :  $0 < k_y < 4.5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . É válido ressaltar que para valores negativos de  $k_y$  (significa dizer que a onda plana se propaga no sentido negativo do eixo  $y$ ) o parâmetro  $z_0$  assumirá valores simétricos em relação aos valores de  $z_0$  no caso de  $k_y$  positivo (em torno da constante  $z_a$ ), uma vez fixado o campo (trata-se de uma reflexão do semi-eixo  $0y$  em relação ao plano  $x, z$ ). Isto é análogo se o campo magnético mudar de sentido ao longo da direção de aplicação do mesmo, uma vez fixado  $k_y$  (agora a reflexão é do semi-eixo  $0x$  em relação ao plano  $y, z$ ). Se os sentidos de propagação da onda plana e aplicação do campo forem invertidos simultaneamente, nenhuma alteração na física do problema é observada, haja visto ter ocorrido uma simples operação de simetria no sistema de coordenadas em consideração, ou seja, uma rotação de 180 graus é realizada no plano  $x, y$ .



Efeitos do campo magnético, quando interfaces abruptas são consideradas, em função dos autovalores  $k_{y,s}$  (que determinam a localização da coordenada do centro das órbitas clássicas de cíclotron  $z_0(k_y)$  quando um campo magnético é aplicado) da componente  $\hat{p}_y$  do operador momento linear associado aos portadores na transmissão de elétrons, podem ser vistos na Fig. 3.1. Ao comparar as transmissões calculadas considerando-se campos que variam de 0 T a 30 T, pode se constatar que para todos os valores de  $k_y$  em que a razão  $k_y/B$  determina todas as possíveis posições de  $z_0$  na região de aplicação do campo, ocorre um deslocamento das curvas de transmissão para regiões de altas energias à medida que o campo cresce em intensidade, isto é, a transmissão de elétrons diminui quando heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As são submetidas a um campo magnético transversal à direção de crescimento da mesma. A interação do campo  $B$  com o autovalor  $k_y$  dos portadores gera um termo de potencial (dependente de  $z$ ) do tipo oscilador harmônico e proporcional a  $B^2$ , o qual se superpõe ao degrau de potencial presente na heterojunção produzindo um potencial efetivo na direção de crescimento  $z$ . Por ser proporcional ao quadrado da intensidade do campo, este termo cresce com o aumento da intensidade do campo. Conseqüentemente, a diminuição na transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As em função da intensidade do campo magnético está associada a um levantamento no degrau de potencial da heterojunção.

Também na Fig. 3.1 pode se observar que, para um determinado valor  $B$  do campo magnético, os diferentes autovalores  $k_{y,s}$  associados aos portadores que interagem com o campo determinando o parâmetro  $z_0$  provocam efeitos diferentes em intensidade na transmissão. O efeito do campo  $B$  é mais significativo quando ele interage com portadores cujo autovalor  $k_y$  localiza  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$  comparado àqueles com  $k_{y,s}$  que localizam  $z_0$  em  $0 \text{ \AA}$  e  $50 \text{ \AA}$ . O termo de potencial devido ao campo é uma função da coordenada  $z$  na forma  $B^2(z - z_0)^2$ . Portanto, quando a razão  $k_y/B$  define o parâmetro  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ , tem-se uma contribuição da quantidade  $(z - z_0)^2$  no potencial efetivo que conduz a um levantamento máximo no degrau de potencial da heterojunção, sendo que este levantamento vai se minimizando à medida que o



parâmetro  $z_0$  vai de  $-50 \text{ \AA}$  a  $50 \text{ \AA}$ .

Quando se considera interfaces abruptas, ainda na Fig. 3.1 observa-se uma leve ressonância na curva de transmissão associada a campos de 30 T e autovalor  $k_y$  cuja razão  $k_y/B$  localiza  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$ . Conservando fixos todos os parâmetros envolvidos no problema da transmissão e simplesmente levando em conta a existência de interfaces não-abruptas em heterojunções semicondutoras que variam de 0 UC a 4 UC ( células unitárias do cristal GaAs ), a influência da não-abrupticidade interfacial na transmissão de elétrons para campos de 30 T e  $z_0 = -50 \text{ \AA}$  é observada no sentido de que a leve ressonância desaparece gradativamente quando a largura interfacial é aumentada, como pode ser visto na Fig. 3.2. O potencial efetivo a que estão submetidos os portadores (elétrons) é uma superposição de um termo de campo do tipo  $B^2(z - z_0)^2$  com um  $V(z)$  gerado pela heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Como se considera mudanças apenas nas larguras interfaciais, tem-se variações somente no termo  $V(z)$  relativo à heterojunção. Conseqüentemente, uma vez que no caso de interfaces abruptas o potencial  $V(z)$  é abrupto, o termo de potencial devido ao campo (parabólico) atenua consideravelmente esta abrupticidade, ao passo que no caso de interfaces não-abruptas  $V(z)$  é um potencial parabólico em  $z$  que pouco será atenuado pelo termo devido ao campo.

Uma vez que a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  foi estudada [27,28], também se investigou como esta não-abrupticidade causa alterações na transmissão de elétrons quando estas heterojunções são submetidas a um campo magnético perpendicular à direção de crescimento das mesmas. Considerando-se portadores com autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  localiza  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$ , trabalhou-se com heterojunções imersas em campos magnético de intensidades 0 T, 15 T e 30 T. Para cada um dos três campos mencionados considerou-se interfaces abruptas e não-abruptas (até 4 UC de largura). O que se observa na Fig. 3.3 é que na ausência do campo a transmissão aumenta significativamente quando as larguras interfaciais são aumentadas como já

foi investigado [27,28], sendo que para campos intensos (da ordem de 30 T) a transmissão melhora quando as larguras interfaciais são diminuídas (abrupticidade). A explicação física para este fato foi discutida acima (forte atenuação na abrupticidade causada por campos intensos).

Sabendo-se que os efeitos da intensidade do campo magnético em relação aos autovalores  $k_{y,s}$  dos portadores (que determinam a localização do parâmetro  $z_0$ ) na transmissão de elétrons em heterojunções, quando interfaces abruptas são consideradas, são mais significativos em  $z_0 = -50 \text{ \AA}$  comparado a  $z_0 = 0 \text{ \AA}$  e  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ , é de se esperar que, para campos intensos (em torno de 30 T), a influência de interfaces não-abruptas na transmissão de elétrons seja mais relevante em  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Como é mostrado na Fig. 3.4, tal fato acontece. Com a razão  $k_y/B$  localizando  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$ , o aumento na largura interfacial diminui a transmissão de elétrons, sendo que a transmissão aumenta gradativamente com o alargamento interfacial quando  $z_0$  se localiza, respectivamente, em  $z_0 = 0 \text{ \AA}$  e  $z_0 = 50 \text{ \AA}$  (em comparação com a transmissão associada as interfaces abruptas). Da literatura [27,28] sabe-se que a presença de interfaces não-abruptas em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  na ausência do campo melhora sensivelmente a transmissão, sendo que a não-abrupticidade na presença do campo têm pouca relevância na transmissão quando os autovalores  $k_{y,s}$  dos portadores determinam  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$ , e praticamente não altera os resultados existentes na ausência do campo [27,28] à medida que  $z_0$  se desloca de  $-50 \text{ \AA}$  a  $50 \text{ \AA}$  (novamente em relação as interfaces abruptas). A explicação disto, como já discutido acima, está relacionada com uma maior contribuição do termo de potencial  $B^2(z - z_0)^2$  no potencial efetivo da heterojunção causando uma maior atenuação da abrupticidade (em relação a não-abrupticidade) quando  $z_0 = -50 \text{ \AA}$  e campos de 30 T são aplicados.

Até agora tem-se investigado a influência de interfaces não-abruptas e os efeitos de um campo magnético aplicado em uma região de  $100 \text{ \AA}$  de largura (direção  $z$ ) que engloba uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , nas propriedades de transmissão de elétrons. O que acontecerá se o campo for aplicado em regiões que englobam a



heterojunção com larguras menores ou maiores que 100 Å? Na Fig. 3.5, utilizando-se larguras de 50 Å, 75 Å e 100 Å nas quais são aplicados os campos, interfaces abruptas e portadores com  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  posiciona  $z_0$  em  $-25$  Å,  $-37.5$  Å e  $-50$  Å, observa-se que os efeitos devido a intensidade do campo crescem à proporção que as regiões de atuação do mesmo crescem em largura, ou seja, as curvas de transmissão são deslocadas para faixas de altas energias com maior relevância quando as regiões de campo se tornam mais largas. Como o termo de potencial relativo ao campo é proporcional a largura da região de aplicação do campo na forma  $B^2(z - z_0)^2$ , quanto mais larga esta região maior será a contribuição da parcela  $(z - z_0)^2$  no potencial efetivo ao qual estão sujeitos os portadores. Por outro lado, levando-se em conta a influência de interfaces não-abruptas em termos da largura das regiões de aplicação do campo, na Fig. 3.6, utilizando-se os mesmos parâmetros da Fig. 3.5 (larguras e respectivos  $z_0$ ) e campo da ordem de 30 T, nota-se que a não-abrupticidade diminui em importância com o aumento das larguras de atuação do campo, ou seja, interfaces não-abruptas diminuem a transmissão à medida que as regiões de campo se alargam, em contraste com os efeitos de não-abrupticidade em heterojunções na ausência do campo magnético [27,28]. A contribuição do campo no potencial efetivo presente na heterojunção, através da quantidade  $(z - z_0)^2$ , cresce com o alargamento da região de campo, conseqüentemente a atenuação da abrupticidade cresce com este alargamento.



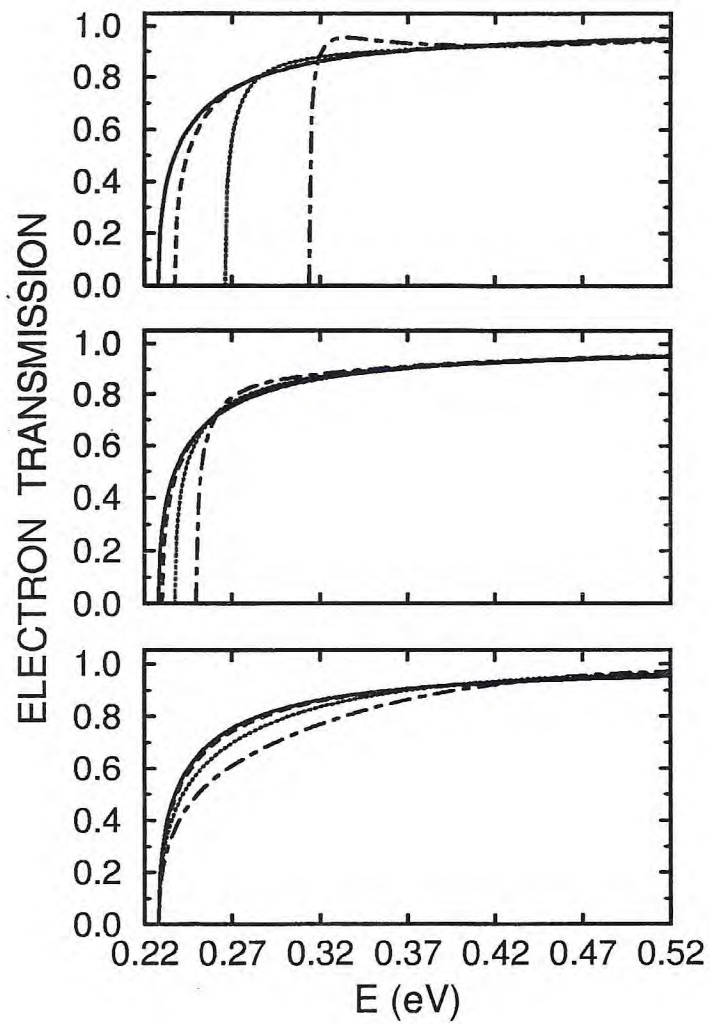


Figura 3.1. Transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas imersas numa região de campo magnético com largura de  $100 \text{ \AA}$ . Topo:  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Meio:  $z_0 = 0 \text{ \AA}$ . Base:  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ . Foram utilizados campos magnéticos da ordem de: 0 T (contínua); 10 T (tracejada); 20 T (pontilhada); 30 T (tracejada-pontilhada).

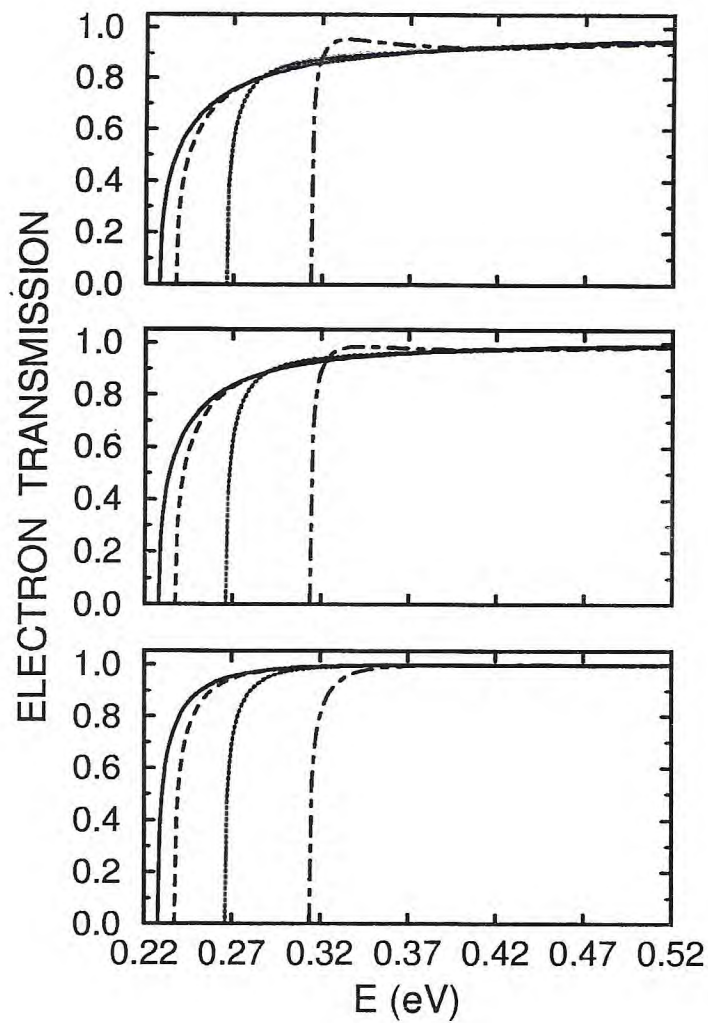


Figura 3.2. Transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  imersas numa região de campo magnético com largura de  $100 \text{ \AA}$  e  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Topo: 0 UC. Meio: 2 UC. Base: 4 UC. Foram utilizados campos magnético da ordem de: 0 T (contínua); 10 T (tracejada); 20T (pontilhada); 30 T (tracejada-pontilhada).

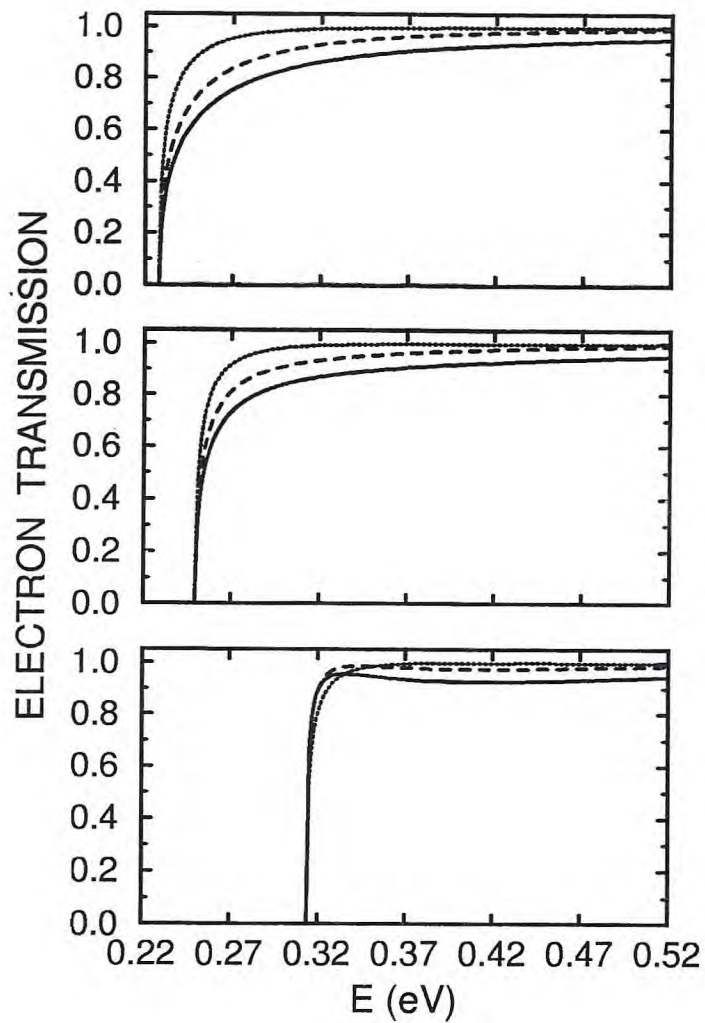


Figura 3.3. Transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  imersas numa região de campo magnético com largura de  $100 \text{ \AA}$  e  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Topo: 0 T. Meio: 15 T. Base: 30 T. Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua); 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).



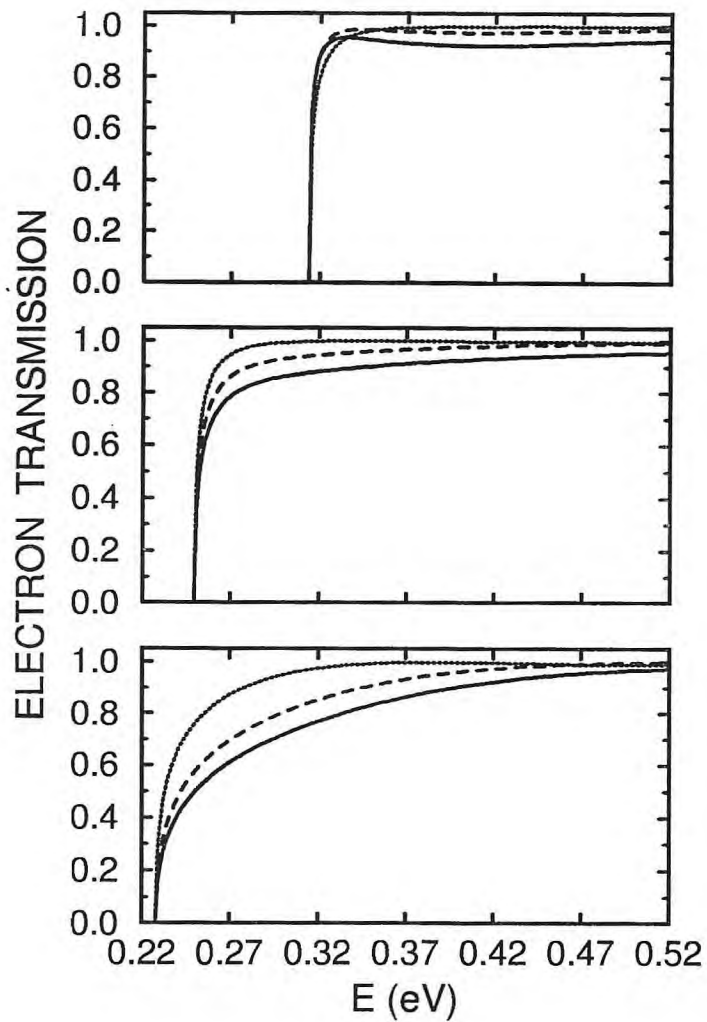


Figura 3.4. Transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  imersas numa região de campo magnético com largura de  $100 \text{ \AA}$  e  $B = 30 \text{ T}$ . Topo:  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Meio:  $z_0 = 0 \text{ \AA}$ . Base:  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ . Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua); 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).

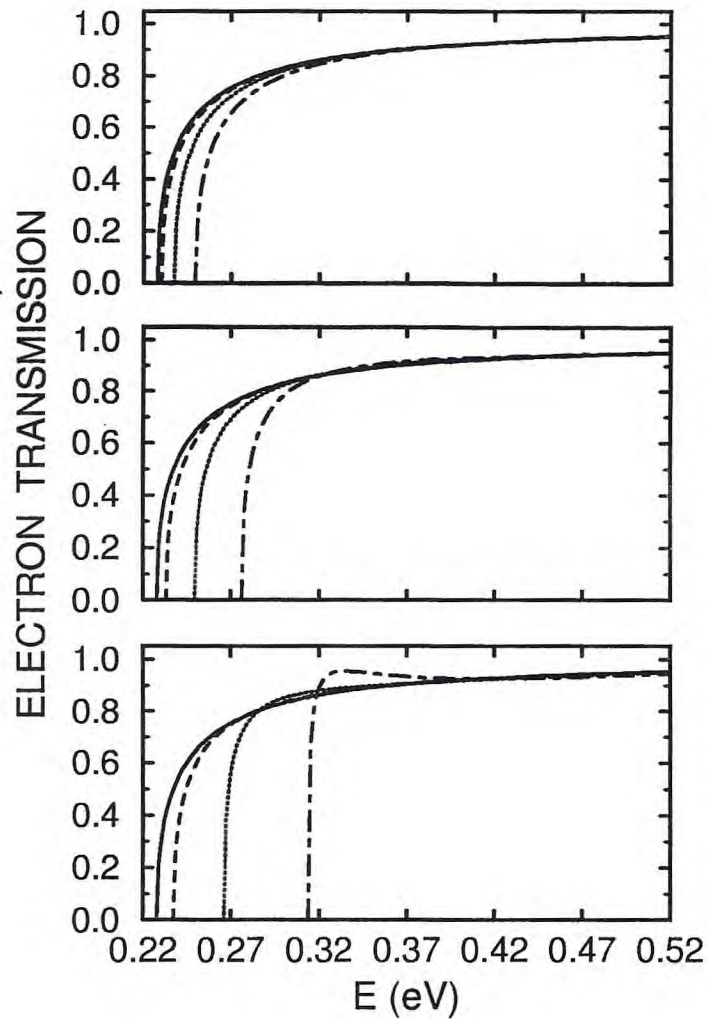


Figura 3.5. Transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas imersas em regiões de campo magnético com larguras de 50 Å, 75 Å e 100 Å. Topo:  $z_0 = -25$  Å e largura de 50 Å. Meio:  $z_0 = -37,5$  Å e largura de 75 Å. Base:  $z_0 = -50$  Å e largura de 100 Å. Foram utilizados campos magnético da ordem de: 0 T (contínua); 10 T (tracejada); 20 T (pontilhada); 30 T (tracejada-pontilhada).

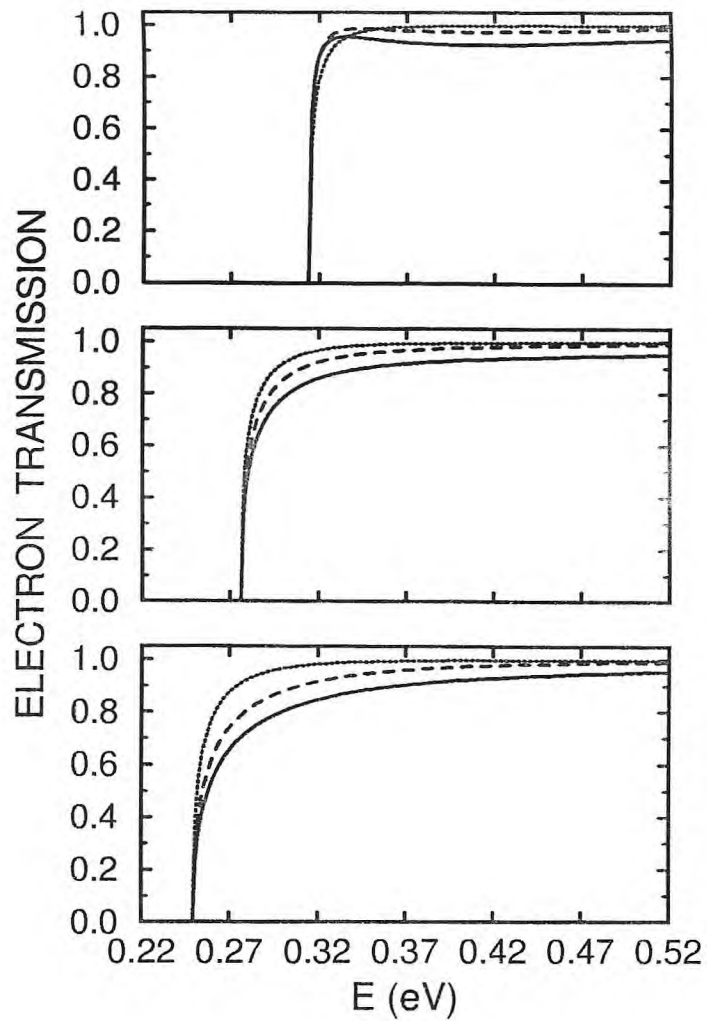


Figura 3.6. Transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  imersas em regiões de campo magnético com larguras de  $50 \text{ \AA}$ ,  $75 \text{ \AA}$  e  $100 \text{ \AA}$  e  $B = 30 \text{ T}$ . Topo:  $z_0 = -50 \text{ \AA}$  e largura de  $100 \text{ \AA}$ . Meio:  $z_0 = -37,5 \text{ \AA}$  e largura de  $75 \text{ \AA}$ . Base:  $z_0 = -25 \text{ \AA}$  e largura de  $50 \text{ \AA}$ . Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua); 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).



### 3.2. Transmissão de Elétrons Através de Barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abertas Simples Submetidas a um Campo Magnético

Coefficientes de transmissão de elétrons em barreiras simples GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abertas submetidas a um campo magnético perpendicular à direção de crescimento  $z$  são calculados (ver Fig.2.4 da pag. 25). Como na Seção anterior, os cálculos também foram realizados utilizando-se *band offsets*  $Q_e = 0.6$  para elétrons, larguras interfaciais de 0 – 4 células unitárias do GaAs e fração molar  $x = 0.3$  na liga Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Barreiras com larguras de 100 Å (interfaces abertas) foram consideradas em geral, embora também se tenha utilizado barreiras com larguras de 60 Å, 80 Å e 90 Å, tendo em vista investigar a influência de interfaces e do campo na transmissão de elétrons em função da largura das barreiras simples. No sentido de localizar  $z_0$  somente na região de aplicação do campo magnético (região da barreira), os resultados foram obtidos considerando-se portadores (elétrons) com autovalores  $k_y$  pertencente ao seguinte intervalo :  $0 < k_y < 4.5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ .

Efeitos do campo magnético, quando interfaces abertas são consideradas, em função dos autovalores  $k_{y,s}$  (que no mesmo sentido da Seção 3.1, localizam a coordenada  $z_0(k_y)$  e são autovalores da componente  $\hat{p}_y$  do operador momento linear) que caracterizam os portadores na transmissão de elétrons, podem ser vistos na Fig. 3.7. Comparando as transmissões calculadas considerando-se campos que variam de 0 T a 30 T, pode se constatar que para todos os valores de  $k_y$  em que a razão  $k_y/B$  determina todas as possíveis posições de  $z_0$  na região da barreira de potencial, ocorre um deslocamento das curvas de transmissão para regiões de altas energias à medida que o campo cresce em intensidade (a transmissão de elétrons diminui através de barreiras simples GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quando submetidas a um campo magnético transversal à direção de crescimento da mesma), ou seja, os picos de ressonância são deslocados para faixas de altas energias e suas respectivas razões pico-vale são reduzidas. Da mesma forma que em heterojunções, a interação do campo  $B$  com o autovalor  $k_y$  dos

portadores gera um termo de potencial (do tipo oscilador harmônico) proporcional a  $B^2$  que se superpõe a barreira de potencial da hetero-estrutura produzindo um potencial efetivo na direção de crescimento  $z$  da barreira. Conseqüentemente, o deslocamento dos picos de ressonância e a redução de suas razões pico-vale em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, em função da intensidade do campo magnético, estão associados a um aumento na altura da barreira de potencial e uma quebra de simetria da barreira.

Ainda na Fig. 3.7 pode se observar que, para uma determinada intensidade do campo magnético, os diferentes autovalores  $k_{y,s}$  associados aos portadores que interagem com o campo magnético determinando o parâmetro  $z_0$  causam efeitos diferentes em intensidade na transmissão. O efeito do campo é mais significativo quando ele interage com portadores cujo autovalores  $k_{y,s}$  localizam  $z_0$  nas bordas da barreira simples ( $-50 \text{ \AA}$  e  $50 \text{ \AA}$ ) comparado àqueles cujo  $k_y$  localizam  $z_0$  em  $0 \text{ \AA}$  (posição de simetria da barreira simples). O termo de potencial devido ao campo é uma função de  $z$  na forma  $(z - z_0)^2$ . Portanto, quando a razão  $k_y/B$  determina o posicionamento de  $z_0$  nas bordas da barreira (extremos da barreira simples), tem-se uma contribuição da quantidade  $(z - z_0)^2$  no potencial efetivo que produz um aumento máximo na altura da barreira de potencial e uma forte quebra de simetria da mesma, ao passo que quando o parâmetro  $z_0$  (definido pela razão  $k_y/B$ ) se desloca para a posição de simetria da barreira ( $z_0 = 0 \text{ \AA}$ ), o aumento na altura e a quebra de simetria da barreira de potencial se minimizam.

Utilizando-se interfaces abruptas, na Fig. 3.7 observa-se uma maior redução na razão pico-vale das curvas de transmissão à medida que o campo magnético cresce em intensidade e quando este campo interage com portadores cujos autovalores  $k_{y,s}$  localizam  $z_0$  nas bordas da barreira (extremos da barreira) semicondutora. A pergunta que surge é a seguinte: Será que, levando em conta portadores com autovalores cuja razão  $k_y/B$  posiciona  $z_0$  nas bordas da barreira, a não-abrupticidade terá maior ou menor relevância em relação a abrupticidade na redução da razão pico-vale na



transmissão de elétrons através de barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples submetidas a um campo magnético transverso? Considerando-se portadores com autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  localiza  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$  (borda esquerda) e fazendo uso da hipótese de existência de interfaces não-abruptas em hetero-estruturas semicondutoras que variam de 0 UC a 4 UC, a influência de interfaces não-abruptas na transmissão de elétrons é evidenciada na Fig. 3.8 no sentido de que a redução da razão pico-vale (com o aumento da intensidade do campo) das curvas de transmissão diminui em relação às interfaces abruptas e com o alargamento das larguras interfaciais. O potencial efetivo a que estão submetidos os portadores na barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As é a superposição do termo de campo do tipo  $B^2(z - z_0)^2$  com o termo de potencial da hetero-estrutura (barreira abrupta ou não-abrupta) gerado pela variação composicional de alumínio. Quando se tem interfaces abruptas, a contribuição do termo de campo  $B^2(z - z_0)^2$  é máxima no aumento da altura da barreira de potencial gerando forte quebra de simetria, sendo que quando interfaces não-abruptas são consideradas e se tornam mais largas, a contribuição do termo de campo  $B^2(z - z_0)^2$  se minimiza no aumento da altura da barreira amenizando a quebra de simetria da mesma. Isto explica fisicamente o fato de que interfaces não-abruptas em barreiras simples submetidas a um campo magnético transverso são bastante irrelevantes na redução da razão pico-vale (quando campos intensos são aplicados) em comparação com as abruptas.

Uma vez que a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de transmissão de elétrons em barreiras simples GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As foi estudada [31-33], investigou-se como esta não-abrupticidade causa alterações na transmissão de elétrons quando estas barreiras são submetidas a um campo magnético transverso à direção de crescimento das mesmas e localizado somente na região da barreira de potencial. Considerando-se portadores com autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  localiza  $z_0$  em  $-50 \text{ \AA}$  (borda esquerda da barreira simples), trabalhou-se com barreiras submetidas a campos magnéticos de intensidades 0 T, 15 T e 30 T. Para cada um dos campos mencionados considerou-se interfaces não-abruptas de até 4 UC (células uni-



tárias do cristal). O que se nota na Fig. 3.9 é que na ausência do campo ocorre uma redução na razão pico-vale das curvas de transmissão quando interfaces não-abruptas são consideradas, como foi investigado anteriormente [31-33]. Por outro lado, quando campos magnéticos intensos (da ordem de 30 T) são aplicados na barreira simples, a redução da razão pico-vale das curvas de transmissão é mais relevante se interfaces abruptas são propostas. Como já discutido acima, este fato está associado a um maior aumento na altura da barreira de potencial e uma maior quebra de simetria da mesma (submetida a campos intensos) quando a abrupticidade é considerada.

Sabendo-se que os efeitos da intensidade do campo magnético (na redução da razão pico-vale das curvas de transmissão) em função dos autovalores  $k_{y,s}$  dos portadores (que determinam a localização da coordenada  $z_0$ ) na transmissão de elétrons em barreiras simples são mais significativos quando  $z_0$  está localizado nas bordas da barreira e interfaces abruptas são consideradas, é de se esperar que, para campos intensos, a influência de interfaces abruptas em relação as não-abruptas (em reduzir a razão pico-vale) na transmissão de elétrons seja mais relevante em  $z_0$  localizado nas bordas da barreira simples. Como se vê na Fig. 3.10, utilizando-se um campo de 30 T e razão  $k_y/B$  localizando  $z_0$  nas bordas da barreira, tem-se uma maior redução na razão pico-vale das curvas de transmissão quando interfaces abruptas são propostas e menor ou quase nenhuma redução na razão pico-vale se interfaces não-abruptas são consideradas, sendo que para razão  $k_y/B$  localizando  $z_0$  em 0 Å (posição de simetria da barreira) nenhum efeito do campo magnético é observado na redução da razão pico-vale das curvas de transmissão quando se leva em conta interfaces abruptas ou não-abruptas. Como já foi dito, o termo de potencial devido ao campo  $(z - z_0)^2$  provoca um aumento máximo na altura da barreira de potencial e uma forte quebra de simetria da mesma quando os autovalores dos portadores localizam  $z_0$  nas bordas da barreira e interfaces abruptas são consideradas.

Até agora tem-se investigado a influência de interfaces não-abruptas e os efeitos de um campo magnético transversal (à direção  $z$ ) nas propriedades de transmissão

de elétrons em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples com largura de 100 Å. O que acontecerá se o campo for aplicado em barreiras simples com larguras menores ou maiores que 100 Å? Utilizando-se barreiras simples de 60 Å, 80 Å e 100 Å de largura, interfaces abruptas e portadores com  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  posiciona  $z_0$  em -30 Å, -40 Å e -50 Å, observa-se na Fig. 3.11 que os efeitos devido a intensidade do campo magnético crescem à proporção que as barreiras simples crescem em largura, ou seja, as curvas de transmissão são deslocadas para regiões de altas energias e as suas respectivas razões pico-vale reduzidas com maior relevância quando as barreiras se tornam mais largas. Como o termo de potencial associado ao campo é proporcional a largura da região de aplicação do mesmo (largura da barreira) na forma  $B^2(z-z_0)^2$ , quanto mais larga a barreira maior será a contribuição da parcela  $(z-z_0)^2$  no potencial efetivo ao qual estão sujeitos os portadores. Por outro lado, levando-se em conta a influência de interfaces não-abruptas em termos da largura das barreiras simples onde o campo é aplicado, observa-se na Fig. 3.12 que, utilizando os mesmos parâmetros da Fig. 3.11 (exceto uma barreira de 90 Å de largura e  $z_0 = -45$  Å) e campo da ordem de 30 T, a não-abrupticidade tem pouca relevância na redução da razão pico-vale das curvas de transmissão com o aumento da largura das barreiras simples, ao passo que a abrupticidade de interfaces tem maior influência em reduzir as razões pico-vale quando as barreiras são alargadas. Quanto mais larga a barreira maior a região de atuação do campo, conseqüentemente a contribuição do campo através da quantidade  $(z-z_0)^2$  cresce com o alargamento das barreiras e quando interfaces abruptas são propostas provocando um aumento máximo na altura da barreira de potencial e maior quebra de simetria da mesma.



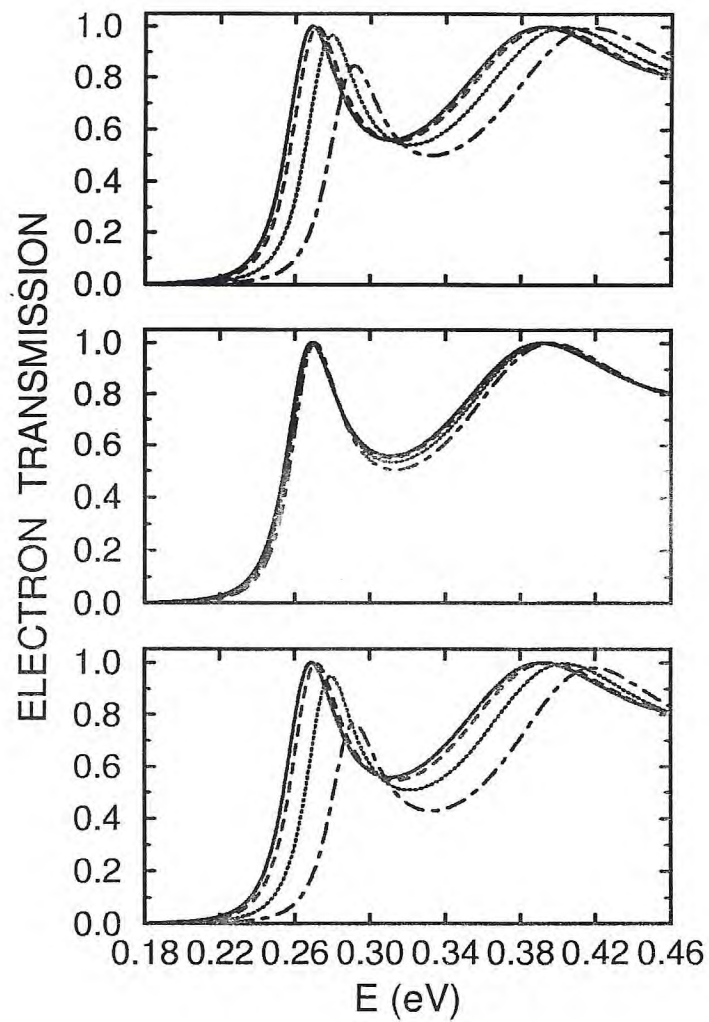


Figura 3.7. Transmissão de elétrons através de barreiras simples GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas com largura de 100 Å. Topo:  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Meio:  $z_0 = 0 \text{ \AA}$ . Base:  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ . Foram utilizados campos magnéticos da ordem de: 0 T (contínua); 10 T (tracejada); 20 T (pontilhada); 30 T (tracejada-pontilhada).



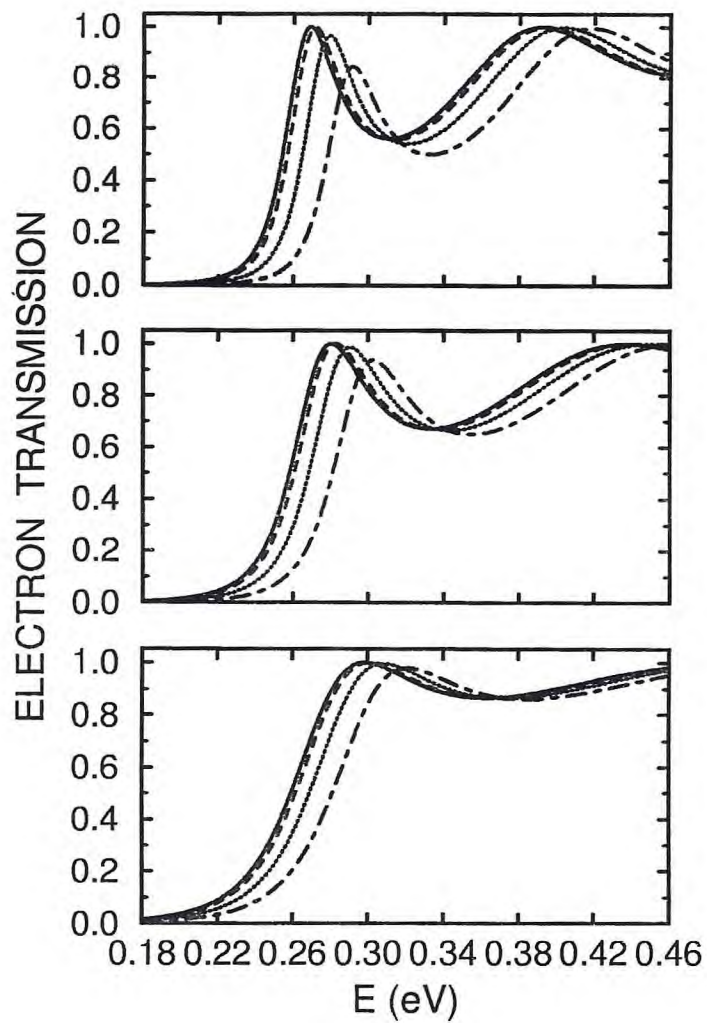


Figura 3.8. Transmissão de elétrons através de barreiras simples GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  com largura de  $100 \text{ \AA}$  e  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Topo: 0 UC. Meio: 2 UC. Base: 4 UC. Foram utilizados campos magnéticos da ordem de: 0 T (contínua); 10 T (tracejada); 20 T (pontilhada); 30 T (tracejada-pontilhada).

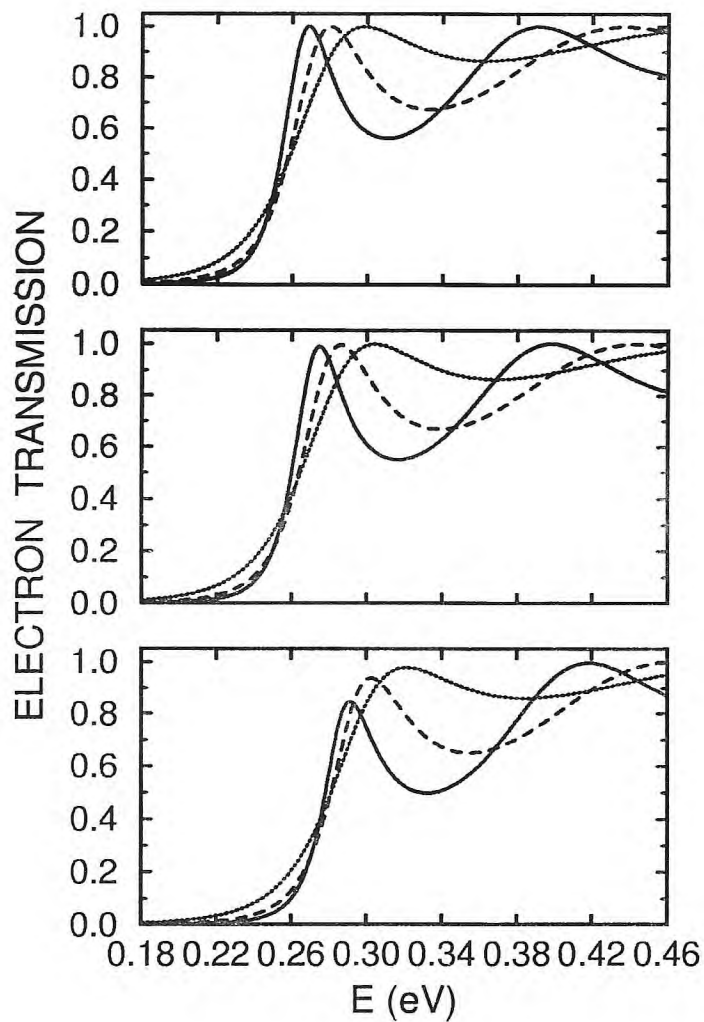


Figura 3.9. Transmissão de elétrons através de barreiras simples GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  com largura de  $100 \text{ \AA}$  e  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Topo: 0 T. Meio: 15 T. Base: 30 T. Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua); 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).

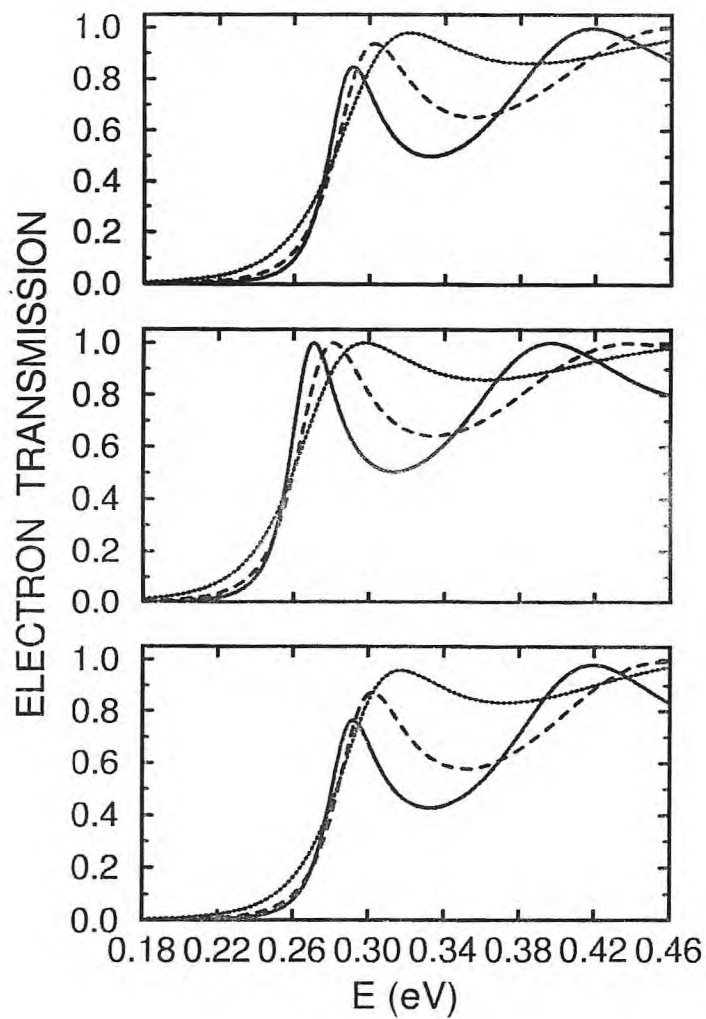


Figura 3.10. Transmissão de elétrons através de barreiras simples GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  com largura de  $100 \text{ \AA}$  e  $B = 30 \text{ T}$ . Topo:  $z_0 = -50 \text{ \AA}$ . Meio:  $z_0 = 0 \text{ \AA}$ . Base:  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ . Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua); 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).



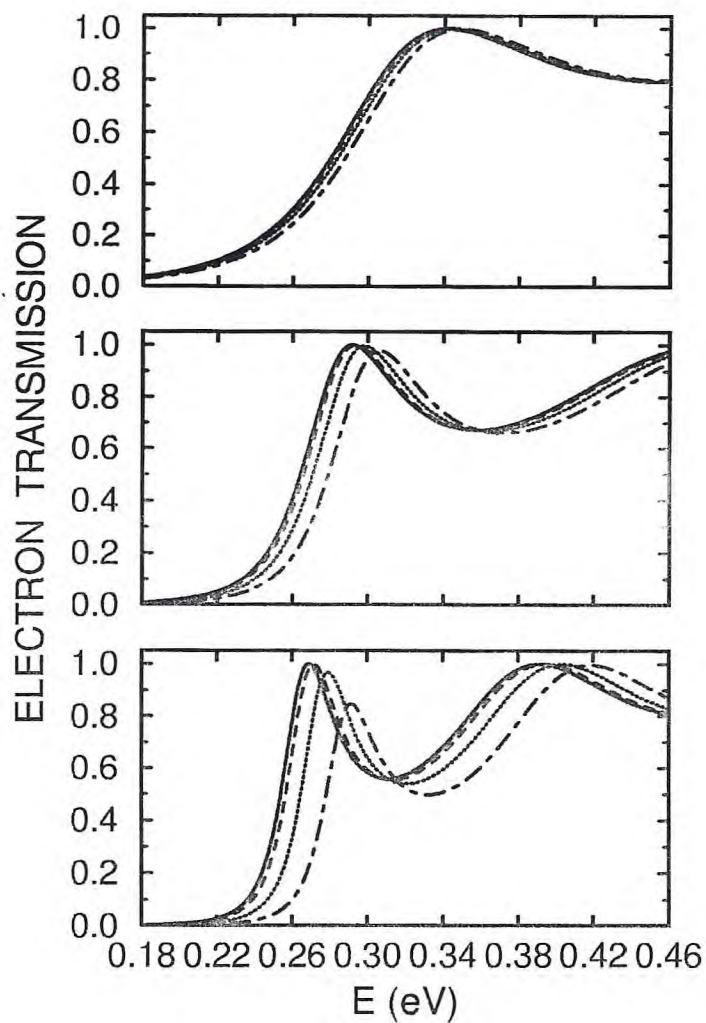


Figura 3.11. Transmissão de elétrons através de barreiras simples GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas com larguras de 60 Å, 80 Å e 100 Å. Topo:  $z_0 = -30$  Å e largura de 60 Å. Meio:  $z_0 = -40$  Å e largura de 80 Å. Base:  $z_0 = -50$  Å e largura de 100 Å. Foram utilizados campos magnéticos da ordem de: 0 T (contínua); 10 T (tracejada); 20 T (pontilhada); 30 T (tracejada-pontilhada).

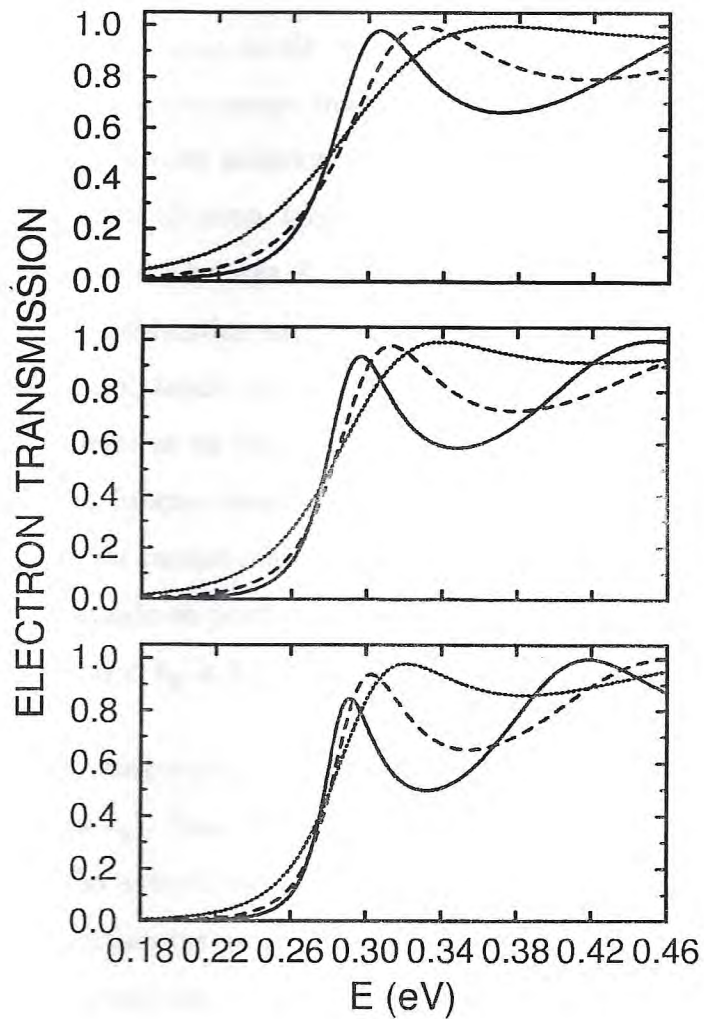


Figura 3.12. Transmissão de elétrons através de barreiras simples GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com larguras de 80 Å, 90 Å e 100 Å e  $B = 30$  T. Topo:  $z_0 = -40$  Å e largura de 80 Å. Meio:  $z_0 = -45$  Å e largura de 90 Å. Base:  $z_0 = -50$  Å e largura de 100 Å. Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua) ; 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).

### 3.3. Transmissão de Elétrons Através de Barreiras Duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Não-Abertas Submetidas a um Campo Magnético

Coefficientes de transmissão de elétrons em barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abertas submetidas a um campo magnético no plano são calculados (ver Fig.2.6 da pag. 32). Como nas Seções anteriores, os cálculos foram realizados utilizando-se *band offsets*  $Q_e = 0.6$  para elétrons, larguras interfaciais de 0 – 4 células unitárias do GaAs e fração molar  $x = 0.3$  na liga Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Barreiras com larguras de 50 Å e poço de 100 Å foram considerados em geral, embora se tenha utilizado barreiras com larguras de 75 Å e 100 Å, tendo em vista estudar a influência do campo magnético e da assimetria das barreiras na transmissão de elétrons através de barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As em função dessas larguras. No sentido de localizar  $z_0$  somente na região de aplicação do campo magnético (região da barreira dupla), os resultados foram obtidos considerando-se portadores (elétrons) com autovalores  $k_y$  pertencente ao seguinte intervalo :  $0 < k_y < 6.7 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ .

Efeitos do campo magnético, quando interfaces abertas são consideradas, em função dos autovalores  $k_{y,s}$  (que no mesmo sentido da Seções 3.1 e 3.2, localizam a coordenada  $z_0(k_y)$  e são autovalores da componente  $\hat{p}_y$  do operador momento linear) que caracterizam os portadores na transmissão de elétrons, podem ser vistos na Fig. 3.13. Comparando as transmissões calculadas considerando-se campos que variam de 0 T a 15 T, pode se constatar que para todos os valores de  $k_y$  em que a razão  $k_y/B$  determina todas as possíveis posições de  $z_0$  na região da barreira dupla, ocorre um deslocamento das curvas de transmissão para regiões de altas energias à medida que o campo cresce em intensidade (a transmissão de elétrons diminui através de barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quando submetidas a um campo magnético transversal à direção de crescimento da mesma), ou seja, os picos de ressonância são deslocados para faixas de altas energias. Da mesma forma que em heterojunções e barreiras simples, a interação do campo  $B$  com o autovalor  $k_y$  dos portadores gera um termo de



potencial (do tipo oscilador harmônico) proporcional a  $B^2$  que se superpõe ao potencial da hetero-estrutura produzindo um potencial efetivo na direção de crescimento  $z$  da barreira dupla. Conseqüentemente, o deslocamento dos picos de ressonância em barreiras duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, em função da intensidade do campo magnético, está associado a uma alteração nos níveis de energia do poço entre as barreiras no sentido de que o campo provoca um levantamento destes estados ligados.

Ainda na Fig. 3.13 pode se observar que, para uma determinada intensidade do campo magnético, os diferentes autovalores  $k_{y,s}$  associados aos portadores que interagem com o campo magnético determinando o parâmetro  $z_0$  causam efeitos diferentes em intensidade na transmissão. O efeito do campo é mais significativo quando ele interage com portadores cujo autovalores  $k_{y,s}$  localizam  $z_0$  nas bordas da barreira dupla ( $-100 \text{ \AA}$  e  $100 \text{ \AA}$ ) comparado àqueles cujo  $k_y$  localizam  $z_0$  em  $0 \text{ \AA}$  (posição de simetria da barreira dupla). O termo de potencial devido ao campo é uma função de  $z$  na forma  $(z - z_0)^2$ . Portanto, quando a razão  $k_y/B$  determina o posicionamento de  $z_0$  nas bordas da barreira dupla (extremos da barreira dupla), tem-se uma contribuição da quantidade  $(z - z_0)^2$  no potencial efetivo provocando máximo levantamento nos estados ligados do poço, ao passo que quando  $z_0$  (definido pela razão  $k_y/B$ ) se desloca para a posição de simetria da barreira ( $z_0 = 0 \text{ \AA}$ ), tem-se um levantamento mínimo nos estados ligados. Além do mais, ocorre o desaparecimento do primeiro pico de ressonância quando  $z_0$  se localiza em  $-100 \text{ \AA}$  e campos de intensidade 10 T e 15 T são aplicados provocado pelo aparecimento de um degrau de potencial na região a direita da barreira dupla (nesta região o potencial vetor é uma constante diferente de zero).

Utilizando interfaces abruptas, na Fig. 3.13 observa-se um maior deslocamento dos picos de ressonância para regiões de altas energias à medida que o campo magnético se torna intenso e quando o mesmo interage com portadores com autovalores  $k_{y,s}$  que localizam  $z_0$  nas bordas da barreira dupla (extremos da barreira dupla). A questão que surge é a seguinte: será que, levando-se em a localização de  $z_0$  nas

bordas da barreira dupla, interfaces não-abruptas terão maior ou menor relevância em relação às abruptas no deslocamento dos picos de ressonância quando campos intensos são aplicados em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As duplas? Considerando-se portadores com autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  localiza o parâmetro  $z_0$  em 100 Å (borda direita) e interfaces não-abruptas que variam de 0 UC a 4 UC, pode se observar na Fig. 3.14 uma mudança equivalente no deslocamento dos picos de ressonância (com o crescimento do campo em intensidade) tanto para barreiras duplas com não-abrupticidade e abrupticidade. Isto está associado a alterações semelhantes nos níveis de energia do poço quando barreiras abruptas ou não-abruptas experimentam um campo magnético transversal, pois as energias dos primeiros estados ligados estão muito próximas da base do poço, e nesta região o potencial não-abrupto do poço difere pouco do abrupto. No sentido de confirmar as alterações semelhantes nos estados ligados do poço causadas por interfaces abruptas e não-abruptas na presença do campo magnético, na Fig. 3.15 observa-se que, utilizando-se portadores com autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  localiza  $z_0$  na borda direita e campos de 0 T, 7.5 T e 15 T, na ausência do campo os picos de ressonância são deslocados para regiões de baixas energias quando a não-abrupticidade é proposta e na presença de campos de até 15 T os efeitos de não-abrupticidade continuam os mesmos. Como se considerou a transmissão somente na região de energia dos primeiros estados ligados do poço (o potencial abrupto difere pouco do não-abrupto), a influência de interfaces não-abruptas na presença do campo é imperceptível; é de se esperar que nas regiões de altas energias a não-abrupticidade na presença do campo seja relevante, como foi observado em heterojunções e barreiras simples (nestas faixas de energia o potencial abrupto difere bastante do não-abrupto).

Tendo em vista que um campo magnético transversal (à direção  $z$ ) aplicado na região de uma barreira dupla GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As altera os níveis de energia do poço (entre as barreiras), investigou-se o efeito de assimetria das barreiras na ausência e na presença do campo. Como os efeitos do campo são mais relevantes quando os autovalores  $k_{y,s}$  associados aos portadores determinam a localização de  $z_0$  nas bordas



da barreira dupla, observa-se na Fig. 3.16 que, considerando-se autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  posiciona  $z_0$  em 100 Å (borda direita) e campos magnéticos de 0 T, 7.5 T e 15 T, na ausência do campo os picos de ressonância não são deslocados entre si nas configurações das barreiras utilizadas (50 Å/50 Å, 25 Å/75 Å e 75 Å/25 Å), e na presença do campo os picos de ressonância se deslocam entre si nas mesmas configurações. Em comparação a transmissão associada à configuração 50 Å/50 Å, tem-se um deslocamento dos picos de ressonância para regiões de altas energias na transmissão da assimetria 25 Å/75 Å e para regiões de baixas energias da assimetria 75 Å/25 Å quando a barreira dupla está na presença do campo, sendo que este efeito de assimetria é mais significativo para campos intensos. Na verdade o que se tem é que na ausência do campo nenhuma alteração nos estados ligados acontece, ao passo que na presença do campo ocorrem alterações nos estados ligados (existe um termo de potencial devido ao campo magnético) do poço e que em relação a configuração 50 Å/50 Å ocorre um maior levantamento dos níveis de energia do poço para o caso 25 Å/75 Å e menor levantamento destes níveis para o caso 75 Å/25 Å.

Até agora tem-se investigado os efeitos de um campo magnético transversal nas propriedades de transmissão de elétrons em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As duplas formadas por barreiras com largura de 50 Å e poço de 100 Å. O que acontecerá se o campo for aplicado em barreiras duplas formadas por barreiras com larguras maiores que 50 Å? Utilizando-se barreiras (que constituem a barreira dupla) de 50 Å, 75 Å e 100 Å de largura, interfaces abruptas e portadores com  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  posiciona  $z_0$  em 100 Å, 125 Å e 150 Å, observa-se na Fig. 3.17 que os efeitos devido a intensidade do campo magnético crescem à proporção que as barreiras crescem em largura, ou seja, os picos de ressonância das curvas de transmissão são deslocadas para regiões de altas energias com maior relevância quando as barreiras se tornam mais largas. Como o termo de potencial associado ao campo é proporcional a largura da região de aplicação do mesmo (largura da barreira dupla) na forma  $B^2(z - z_0)^2$ , quanto mais largas as barreiras maior será a contribuição da parcela  $(z - z_0)^2$  no potencial efetivo ao qual estão sujeitos os portadores.



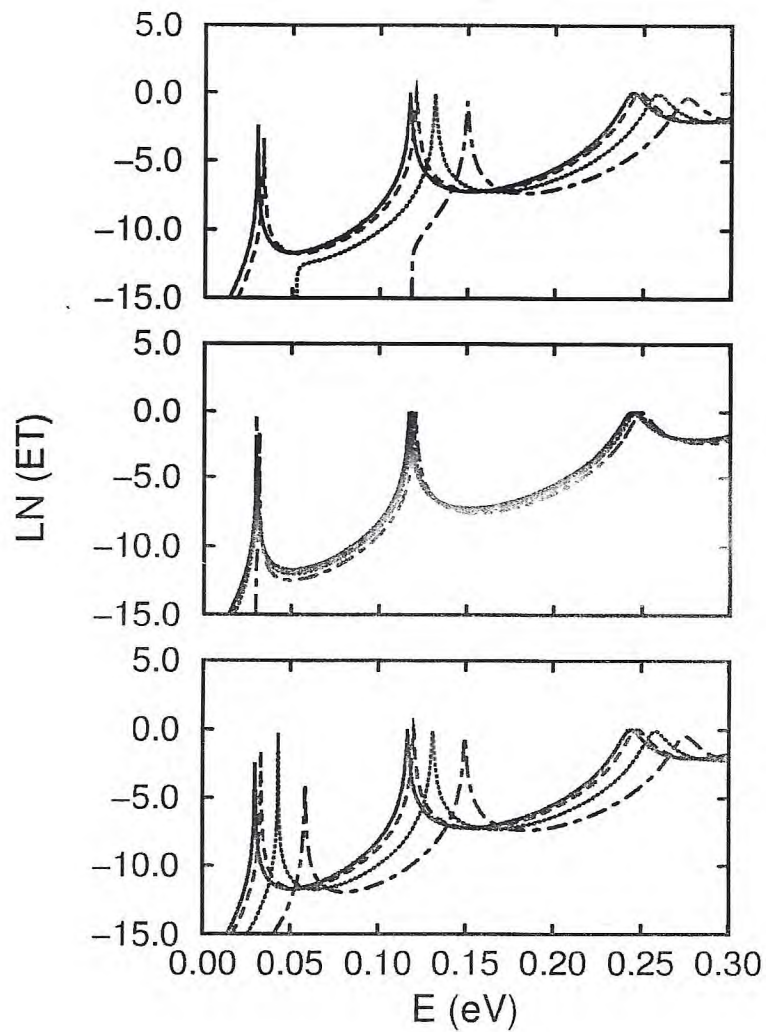


Figura 3.13. Transmissão de elétrons através de barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas com barreiras de 50 Å e poço de 100 Å. Topo:  $z_0 = -100$  Å. Meio:  $z_0 = 0$  Å. Base:  $z_0 = 100$  Å. Foram utilizados campos magnéticos da ordem de: 0 T (contínua); 5 T (tracejada); 10 T (pontilhada); 15 T (tracejada-pontilhada).

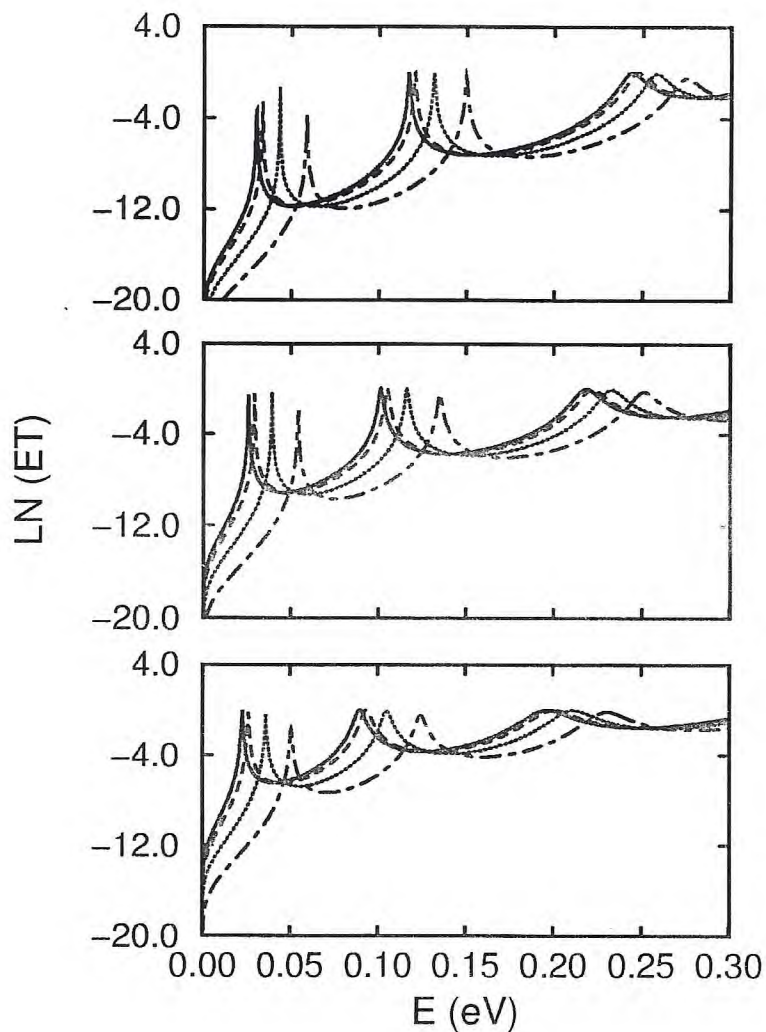


Figura 3.14. Transmissão de elétrons através de barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  com barreiras de  $50 \text{ \AA}$ , poço de  $100 \text{ \AA}$  e  $z_0 = 100 \text{ \AA}$ . Topo: 0 UC. Meio: 2 UC. Base: 4 UC. Foram utilizados campos da ordem de: 0 T (contínua); 5 T (tracejada); 10 T (pontilhada); 15 T (tracejada-pontilhada).

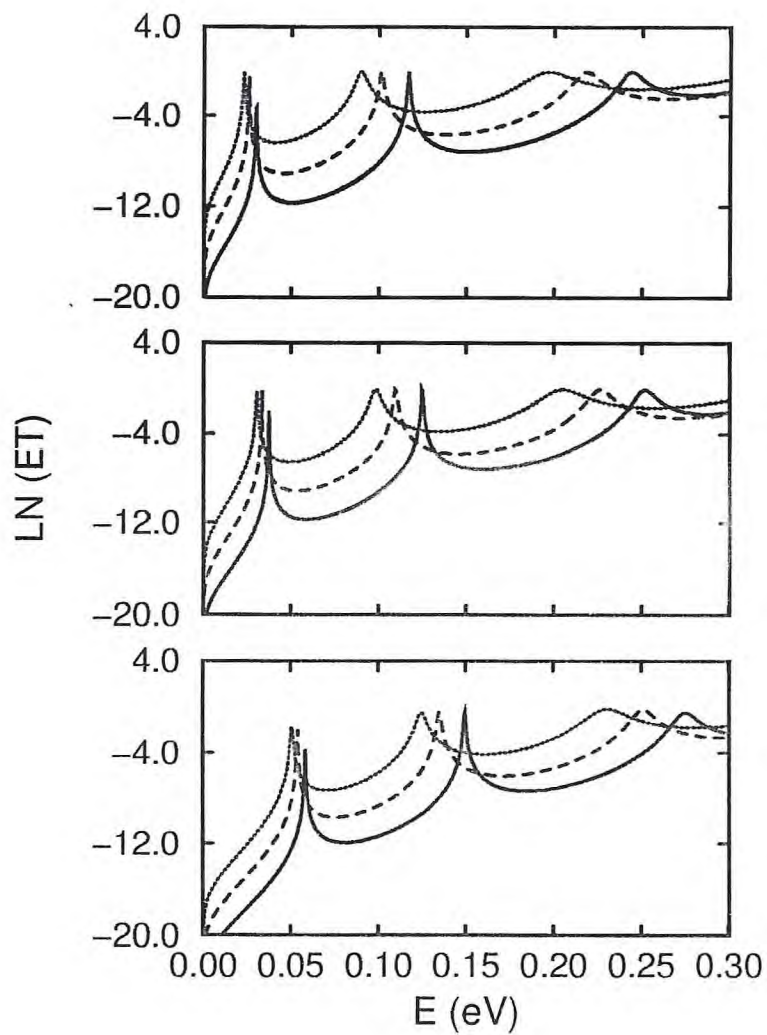


Figura 3.15. Transmissão de elétrons através de barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  com barreiras de 50 Å, poço de 100 Å e  $z_0 = 100$  Å. Topo: 0 T. Meio: 7.5 T. Base: 15 T. Foram utilizadas interfaces com larguras de: 0 UC (contínua); 2 UC (tracejada); 4 UC (pontilhada).



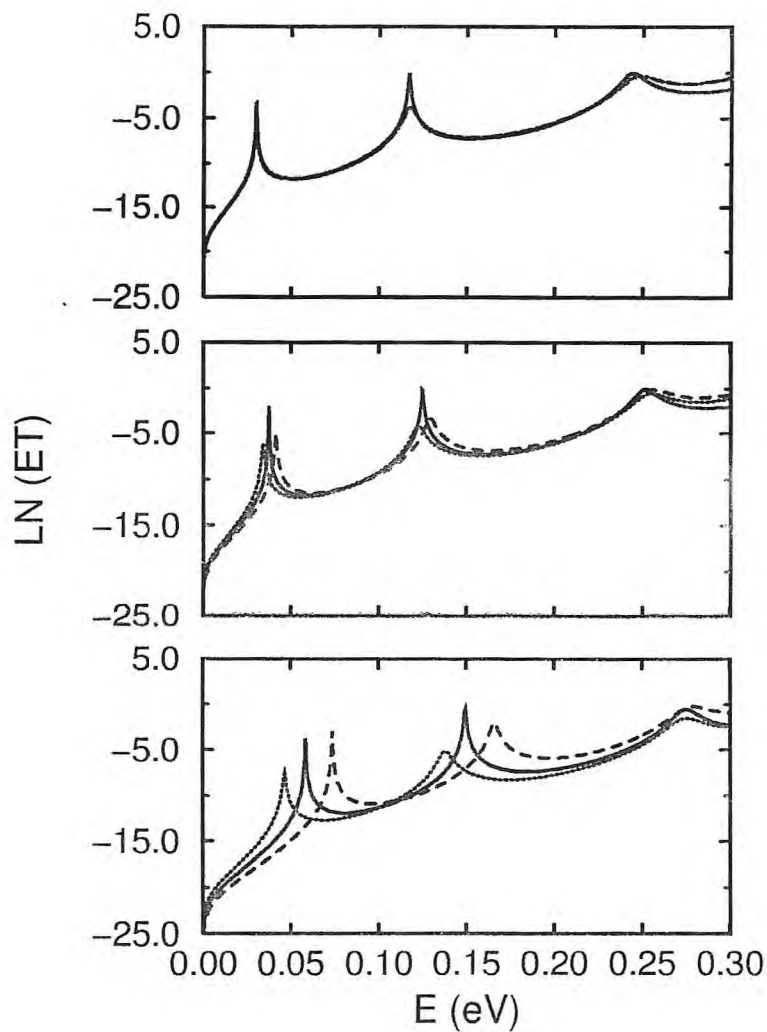


Figura 3.16. Transmissão de elétrons através de barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas com assimetria nas barreiras, poço de  $100 \text{ \AA}$  e  $z_0 = 100 \text{ \AA}$ . Topo: 0 T. Meio: 7.5 T. Base: 15 T. Foram utilizadas barreiras com assimetria do tipo:  $50 \text{ \AA}/50 \text{ \AA}$  (contínua);  $25 \text{ \AA}/75 \text{ \AA}$  (tracejada);  $75 \text{ \AA}/25 \text{ \AA}$  (pontilhada).

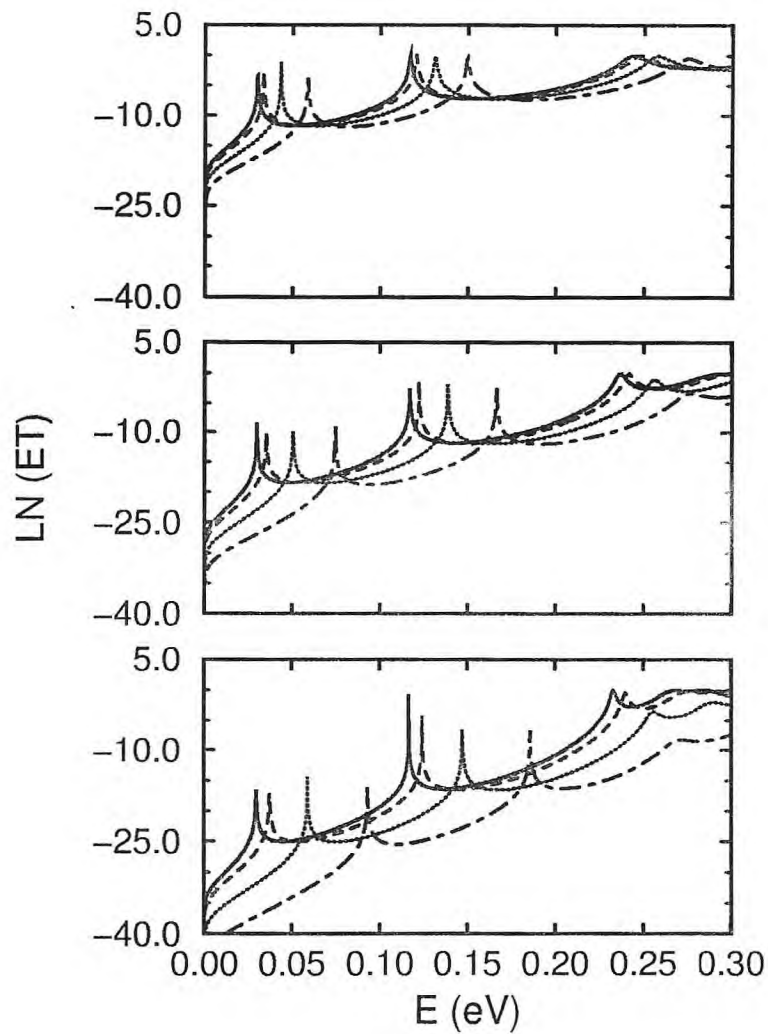


Figura 3.17. Transmissão de elétrons através de barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  abruptas com barreiras de 50 Å, 75 Å e 100 Å e poço de 100 Å. Topo:  $z_0 = 100$  Å e barreiras de 50 Å. Meio:  $z_0 = 125$  Å e barreiras de 75 Å. Base:  $z_0 = 150$  Å e barreiras de 100 Å. Foram utilizados campos da ordem de: 0 T (contínua); 5 T (tracejada); 10 T (pontilhada); 15 T (tracejada-pontilhada).

## CAPÍTULO 4



## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

A melhoria das técnicas de crescimento e dos métodos de caracterização de hetero-estruturas semicondutoras tem revelado dados que comprovam a influência de interfaces (não-abruptas) nas propriedades físicas das mesmas. O conjunto de todos os resultados experimentais obtidos até hoje mostram claramente as grandes limitações dos modelos teóricos que levam em conta a abrupticidade de interfaces em estruturas semicondutoras. Em função destas limitações, alguns pesquisadores passaram a considerar a existência de rugosidades interfaciais (ilhas, degraus). Por exemplo, nas propriedades óticas de poços quânticos semicondutores as rugosidades são consideradas fontes de espalhamento elástico e inelástico. Nos fenômenos de transmissão em barreiras múltiplas, as rugosidades constituem uma fonte de espalhamento que influenciam no tunelamento não-ressonante de portadores.

A idéia de rugosidades interfaciais em hetero-estruturas semicondutoras se sustenta na hipótese da existência de ilhas, sendo descartada uma possível gradualidade nas interfaces. Embasados na hipótese da existência de interfaces graduais, muitos trabalhos foram publicados levando em conta perfis suaves para o potencial interfacial e considerando a massa efetiva dos portadores constante nas interfaces. Em se tratando da variação espacial da massa efetiva dos portadores, Freire *et al.* [27] propuseram um modelo que acopla a dependência espacial do potencial e da massa efetiva dos portadores em termos da fração molar de alumínio. Utilizando este modelo, conseguiu-se mostrar uma mudança significativa nas propriedades de transmissão de portadores em heterojunções [29,30], barreiras simples e duplas [31-33] semicondutoras GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quando regiões de pelo menos duas células unitárias do semicondutor são consideradas.

Heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não-abruptas foram submetidas a um campo magnético transversal com a finalidade de investigar os efeitos causados pelo campo e a influência de interfaces não-abruptas (na presença do

campo) nas propriedades de transmissão de elétrons através das mesmas. O modelo para descrever as regiões interfaciais é aquele proposto por Freire *et al.* [27].

Dentre os resultados obtidos ao longo do desenvolvimento deste trabalho, pode-se destacar:

i) um campo magnético aplicado transversalmente (à direção de crescimento das camadas do cristal semiconductor) em heterojunções e hetero-estruturas semicondutoras GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  gera efeitos relevantes, quando se utiliza a aproximação parabólica nas bandas de energia (bandas de valência e condução), nas propriedades de transmissão de elétrons nestes dispositivos semicondutores. A presença do campo magnético, na forma em que foi definido o potencial vetor, gera uma interação do mesmo com os autovalores  $k_{y,s}$  da componente  $\hat{p}_y$  do operador momento linear associado aos portadores produzindo um termo de potencial (do tipo oscilador harmônico) que se superpõe ao potencial da hetero-estrutura. Para todos os possíveis valores do parâmetro  $z_0$  definidos através da interação do campo com os autovalores  $k_{y,s}$ , observou-se que a presença do campo desloca as curvas de transmissão para regiões de altas energias nos três tipos de estruturas semicondutoras estudadas, as razões pico-vale diminuem em barreiras simples e os níveis de energia (estados ligados) do poço são levantados em barreiras duplas.

ii) como a interação da componente transversa  $\hat{p}_y$  do momento linear com o campo determina a localização do centro das órbitas clássicas de ciclotron  $z_0$  (consequentemente, o raio da órbita), observou-se que os portadores com autovalores  $k_{y,s}$  cuja razão  $k_y/B$  localiza todos os possíveis valores de  $z_0$  na região de atuação do campo provocam efeitos diferentes em intensidade uma vez fixado o campo (uns provocam efeitos mais intensos do que outros). Em heterojunções, a interação dos portadores com o campo (maior deslocamento das curvas de transmissão) é mais intensa quando a razão  $k_y/B$  localiza  $z_0$  na borda esquerda da região de atuação do campo e diminui a medida que  $z_0$  se desloca para a borda direita (o degrau de potencial da heterojunção é assimétrico). Por outro lado, em barreiras simples e duplas a



interação dos portadores com o campo é mais intensa (alterações da razão pico-vale e dos estados ligados do poço) quando a razão  $k_y/B$  posiciona  $z_0$  nas bordas das barreiras (borda esquerda e direita) simples e duplas e diminui a medida que  $z_0$  se aproxima da posição de simetria destas hetero-estruturas (potenciais simétricos).

iii) a influência de interfaces não-abruptas nas propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  foi bastante investigada [29-33], onde ficou evidenciado que a não-abrupticidade aumenta significativamente a transmissão de portadores em relação a abrupticidade. O que se observou foi que ocorrem alterações nos efeitos de interfaces não-abruptas na transmissão de elétrons em heterojunções, barreiras simples GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  submetidas a um campo magnético transversal em comparação com os efeitos das mesmas interfaces não-abruptas na ausência do campo, nas regiões de altas energias. Por outro lado, em barreiras duplas isto não ocorre nas regiões dos níveis de energia do poço, ou seja, os picos de ressonância (estados ligados) são deslocados para regiões de baixas energias de forma equivalente na presença ou não do campo (campos de até 15 T), pois na região de energia dos estados ligados do poço o potencial abrupto praticamente coincide com o não-abrupto, fato que não ocorre para regiões de altas energias. As alterações na influência de interfaces não-abruptas em heterojunções GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quando submetidas a um campo magnético ocorrem para campos intensos (em torno de 30 T) e interação do mesmo com portadores cujos autovalores  $k_{y,s}$  localizam  $z_0$  na borda esquerda da região de atuação do campo, sendo que na presença do campo a não-abrupticidade não melhora a transmissão tanto quanto na ausência do mesmo. Em barreiras simples estas alterações são análogas ao caso das heterojunções, exceto que ocorrem com  $z_0$  localizados nas bordas da barreira simples (borda esquerda e direita) onde na presença do campo interfaces não-abruptas reduzem as razões pico-vale em maior intensidade do que na ausência do mesmo.

iv) tendo em vista investigar os efeitos da intensidade do campo magnético e das alterações na influência de interfaces não-abruptas em heterojunções, barreiras



simples e duplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As submetidas a um campo magnético em função da largura das barreiras (simples e formadoras das duplas) e das regiões de atuação do campo onde estão imersas as heterojunções, observou-se que a intensidade do campo é mais significativa (deslocar as curvas de transmissão) quanto maior forem estas larguras e que as alterações na influência de não-abrupticidade na presença do campo em relação a ausência do campo são mais relevantes com o alargamento das regiões de atuação do campo.

v) sabendo-se que os estados ligados do poço entre as duas barreiras que formam a barreira dupla são alterados significativamente pela aplicação do campo magnético na região da hetero-estrutura, observou-se que a assimetria das barreiras modifica sensivelmente os níveis de energia do poço e estas modificações são mais relevantes com o aumento da intensidade do campo. Quando o campo interage com portadores cujo autovalores  $k_{y,s}$  determinam a coordenada  $z_0$ , tem-se que as configurações assimétricas (assimetria para direita e esquerda) das barreiras em relação a configuração de simetria deslocam os picos de ressonância de forma inversa, isto é, uma levanta os níveis de energia e a outra baixa os níveis.

Com o objetivo de explorar esta linha de pesquisa realizada neste trabalho, algumas perspectivas no sentido de avançar nas investigações envolvendo hetero-estruturas semicondutoras estão relacionadas abaixo:

i) a realização deste trabalho pode ser direcionada para outros tipos de semicondutores que envolvam os mais variados tipos de elementos químicos.

ii) seria interessante, se ao invés de um campo magnético transversal, considerar um campo magnético aplicado longitudinalmente à direção de crescimento das heterojunções, barreiras simples e duplas semicondutoras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

iii) também seria interessante estudar os efeitos devido a campos magnético e elétrico aplicados simultaneamente em hetero-estruturas semicondutoras, tendo em

vista analisar possíveis mudanças quantitativas e qualitativas causadas pelos campos nas propriedades físicas dos semicondutores.

iv) o direcionamento deste trabalho para outros tipos de hetero-estruturas semicondutoras GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , especialmente super-redes, poços quânticos e barreiras múltiplas, é de grande valia; no caso especial de poços quânticos seria válido investigar possíveis alterações nos níveis de energia causadas pelo campo magnético.

A publicação realizada na revista *Physics of Low Dimensional Structures*, e que tem como base alguns dos resultados apresentados neste trabalho, faz parte do Apêndice A.

## REFERÊNCIAS



- [1] L. Esaki and R. Tsu, IBM Res. Note, RC-2418 (1969).
- [2] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop., pp. 61-65 (1970).
- [3] L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [4] C. Rossel, P. Guéret, and H. P. Meier, J. Appl. Phys. **67**, 900 (1990).
- [5] P. Guéret, C. Rossel, W. Schlup, and H. P. Meier, J. Appl. Phys. **66**, 4312 (1989).
- [6] P. Guéret, C. Rossel, E. Marclay, and H. P. Meier, J. Appl. Phys. **66**, 278 (1989).
- [7] F. Capasso, K. Mohammed, and A. Y. Cho, IEEE J. Quantum Electron. QJ-22, 1853 (1986).
- [8] B. Ricco and M. Ya. Azbel, Phys. Rev. B **29**, 1970 (1984).
- [9] P. Johansson, Phys. Rev. B **48**, 8938 (1993).
- [10] J. A. B. Saip and V. N. Freire, Solid State Commun. **82**, 363 (1992).
- [11] R. K. Mains, I. Mehdi, and G. I. Haddad, Appl. Phys. Lett. **55**, 2631 (1989).
- [12] D. Z.-Y. Ting, S. K. Kirby, and T. C. McGill, Appl. Phys. Lett. **64**, 2004 (1994).
- [13] C. Delalande and G. Bastard, em *Semiconductor Interfaces: Formation and Properties*, editado por G. Le Lay, J. Derrien, and N. Boccara, pp. 340-359 (Springer, Berlim, 1987).
- [14] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor physics* ( Les Editions de Physique, Les Ulis, 1994).

- [15] P. J. Price and F. Stern, *Surf. Sci.* **132**, 577 (1983).
- [16] F. Stern and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **30**, 840 (1984).
- [17] K. G. Günther, *Z. Naturforschg. A* **13**, 1081 (1958).
- [18] K. Ploog, em *Semiconductor Interfaces: Formation and Properties*, editado por G. Le Lay, J. Derrien, and N. Boccara, pp. 10-42 (Springer, Berlim, 1987).
- [19] C. Weisbuch and B. Vinter, in *Quantum semiconductor structures*, (Academic Press, 1991).
- [20] C. Weisbuch, R. Dingle, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, *Solid State Commun.* **38**, 709 (1981).
- [21] M. A. Herman, D. Bimberg, and J. Christen, *J. Appl. Phys.* **70**, 158 (1991).
- [22] J. N. Schulman, *J. Vac. Sci. Technol.* **1**, 644 (1983).
- [23] H. X. Jiang and J. Y. Lin, *Superlattices and Microstructures* **3**, 689 (1987).
- [24] M. Proctor, G. Oelgart, H. Rhan, and F.-K. Reinhart, *Appl. Phys. Lett.* **3**, 843 (1993).
- [25] D. F. Nelson, R. C. Miller, C. W. Tu, and S. K. Sputz, *Phys. Rev. B* **36**, 8063 (1987).
- [26] A. K. Freire, J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlattices and Microstructures* **17**, 351 (1995).
- [27] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* **1**, 17 (1992).
- [28] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *J. Appl. Phys.* **71**, 4076 (1992).

- [29] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlattices and Microstructures* **17**, 123 (1995).
- [30] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlattices and Microstructures* **17**, 411 (1995).
- [31] R. Renan, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **48**, 8446 (1993).
- [32] R. R. L. de Carvalho, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* **15**, 203 (1994).
- [33] R. Renan, J. M. Pereira, J. Ribeiro, V. N. Freire, and G. A. Farias, *Braz. J. Phys.* **24**, 192 (1994).
- [34] C. A. Warwick, W. Y. Jan, A. Ourmazd, and T. D. Harris, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 2666 (1990).
- [35] D. Gammon, B. V. Shanabrook, and D. S. Katzer, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2710 (1991).
- [36] R. F. Kopf, E. F. Schubert, T. D. Harris, and R. S. Becker, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 631 (1991).
- [37] M. Gurioli, A. Vinattieri, M. Colocci, A. Bosachi, and S. Franchi, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 2150 (1991).
- [38] D. Gammon, B. V. Shanabrook, and D. S. Katzer, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1547 (1991).
- [39] B. Orschel, G. Oelgart, and R. Houdré, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 843 (1993).
- [40] A. Ourmazd, D. W. Taylor, J. Cunningham, and C. W. Tu, *Phys. Rev. Lett.*



62, 933 (1989).

- [41] O. Albrechtsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 31 (1990).
- [42] N. Ikarashi, A. Sakai, T. Baba, K. Ishida, J. Motohisa, and H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1983 (1990).
- [43] Y. S. Fatt, *J. Appl. Phys.* **71**, 158 (1992).
- [44] R. M. Feenstra, D. A. Collins, D. Z.-Y. Ting, M. W. Wang, and T. C. McGill, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2749 (1994).
- [45] M. B. Johnson, U. Maier, H.-P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1273 (1993).
- [46] C. Kisielowski, Z. L.-Weber, and E. R. Weber, *Braz. J. Phys.* **26**, 83 (1996).
- [47] A. R. Smith, K.-J. Chao, C. K. Shih, Y. C. Shih, and B. G. Streetman, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 478 (1995).
- [48] K.-M. Hung and G. Y. Wu, *Solid State Commun.* (não publicado).
- [49] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 2978 (1981).
- [50] -B. Xia and W.-J. Fan, *Phys. Rev. B* **40**, 8508 (1989).
- [51] L. Brey, G. Platero, and C. Tejedor, *Phys. Rev. B* **38**, 9649 (1988).
- [52] L. Eaves, K. W. H. Stevens, and F. W. Sheard, in the *Physics and Fabrication of Microstructures and Microdevices*, edited by M. J. Kelly and C. Weisbuch, *Springer Proceedings in Physics Vol. 13* (Springer, New York) p. 343.
- [53] A. Zaslavsky, Y. Yuan, P. Li, D. C. Tsui, M. Santos, and M. Shayegan, *Phys.*

- Rev. B **42**, 1374 (1990).
- [54] C. Mann, Surf. Sci **196**, 518 (1988).
- [55] O. Merkt, in Proceedings of NATO Advanced Study Institute on the Physics of Two-Dimensional Electron Gas, Vol. **157** of NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, edited by J. T. Devreese and F. M. Peeters ( Plenum, New York, 1987 ), p. 293.
- [56] T. W. Hickinott, Solid State Commun. **63**, 371 (1987).
- [57] J. A. Lebens, R. H. Silsbee, and S. L. Wright, Phys. Rev. B **37**, 10308 (1988).
- [58] F. Ancilotto, J. Physics. C **21**, 4657 (1988).
- [59] H. Cruz, A. Hernández-Cabrera, and P. Aceituno, J. Phys. Condens. Matter **2**, 8053 (1990).
- [60] L. A. Cury, A. Celeste, B. Goutiers, E. Ranz, and J. C. Portal, Superlattices and Microstructures **7**, 415 (1990).
- [61] E. A. Johnson, A. MacKinnon, and C. J. Goebel, J. Phys. C: Solid State Phys. **20** (1987) L521-L525.
- [62] G. Belle, J. C. Mann, and G. Weimann, Surf. Sci **170**, 611-617 (1986).
- [63] P. Guéret, A. Baratoff, and E. Marclay, Europhys. Lett., **3(3)**, pp. 367-372 (1987).
- [64] Eaves. L, Taylor. D. C, Portal. J. C, and Dmowsky. L, 1986. Springer Series in Solid State Sciences, Vol **07** (Berlim: Spriger), p.96.
- [65] K. M. Hung and G. Y. Wu, Phys. Rev. B **45**, 3461 (1992).

- [66] D. J. BenDaniel and C. B. Duke, *Phys. Rev. B* **152**, 683 (1966).
- [67] D. G. Deppe and N. Holonyak, Jr., *J. Appl. Phys.* **64**, R93 (1988).
- [68] I. Lahiri, D. D. Nolte, J. C. P. Chang, J. M. Woodall, and M. R. Melloch, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1244 (1995).
- [69] J.-L. Rouviere, Y. Kim, J. Cunningham, J. A. Rentschler, A. Bourret, and A. Ourmazed, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2798 (1992).
- [70] V. N. Freire, Tese para o concurso de professor titular, Universidade Federal do Ceará (não publicada, 1995).
- [71] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **S8**, R1 (1985).
- [72] A. Brezini and M. Sebbani, *phys. sat. sol. (b)* **178**, 141 (1993).
- [73] W. E. Hagston, P. Harrison, T. Piorek, and S. Stirner, *Superlattices and Microstructures* **15**, 199 (1994).
- [74] M. R. Geler and W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3103 (1993).
- [75] C. Schnittler and M. Kirilov, *phys. sat. sol. (b)* **176**, 143 (1993).
- [76] M. G. Burt, *Semic. Sci. Technol.* **2**, 460 (1987).
- [77] M. G. Burt, *Semic. Sci. Technol.* **3**, 739 (1988).
- [78] M. G. Burt, *J. Phys: Condens. Matter.* **4**, 6651 (1992).
- [79] M. G. Burt, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 717 (1994).
- [80] F. S. A. Cavalcante, R. N. Costa Filho, J. Ribeiro Filho, C. A. S. de Almeida, and V. N. Freire, aceito em publicação em *Phys. Rev.* (1996).



- [81] G. H. Wannier, Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- [82] J. C. Slater, Phys. Rev. **76**, 1592 (1949).
- [83] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [84] Q.-G. Zhu and H. Kroemer, Phys. Rev. B **27**, 3519 (1983).
- [85] T. Gora and F. Williams, Phys. Rev. **177**, 1179 (1969).
- [86] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981).
- [87] T. L. Li and K. J. Kuhn, Phys. Rev. B **47**, 12760 (1993).
- [88] O. von Roos, Phys. Rev. B **27**, 7547 (1983).
- [89] K. Nakamura, A. Shimizu, M. Koshihara, and K. Hayata, IEEE J. Quantum Electron. QE-27, 1189 (1991).
- [90] Y. Ando and T. Ytoh, J. Appl. Phys. **61**, 1497 (1987).
- [91] K. V. Rousseau, K. L. Wang, and J. N. Schulman, Superlattices and Microstructures **6**, 67 (1989).
- [92] M. Morifuji and C. Hamaguchi, Phys. Rev. B **52**, 14131 (1995).
- [93] H. C. Liu, Appl. Phys. Lett. **51**, 1019 (1987).
- [94] P. Thanikasalarn, R. Venkatasubramanian, and M. Cahay, IEEE J. Quantum Electron. QE-27, 1189 (1991).
- [95] R. Tsu and L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [96] H. Sakaki, Solid State Commun. **92**, 119 (1994).

- [97] K. F. Brennan and C. J. Summers, *J. Appl. Phys.* **61**, 614 (1987).
- [98] J.-P. Peng, H. Chen, and S.-X. Zhou, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 5451 (1989).
- [99] S. S. Allen and S. L. Richardson, *Phys. Rev. B* **50**, 11693 (1994).
- [100] S. Luryi, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 490 (1985).
- [101] L. I. Glazman and R. I. Shekter, *Solid State Commun.* **66**, 65 (1988).
- [102] N. S. Wingreen, K. W. Jacobsen, and J. W. Wilkins, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1396 (1988).
- [103] M. Jonson, *Phys. Rev. B* **39**, 5924 (1989).
- [104] A. P. Jauho, *Phys. Rev. B* **41**, 12327 (1990).
- [105] E. V. Anda and F. Flores, *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 9087 (1991).
- [106] J. A. Stovneng, E. E. Hauge, P. Lipavský, and V. Spicka, *Phys. Rev. B* **44**, 13595 (1991).
- [107] R. Lake and S. Datta, *Phys. Rev. B* **45**, 6670 (1992).
- [108] N. Zou and K. A. Chao, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3224 (1992).
- [109] H. C. Liu and D. D Coon, *J. Appl. Phys.* **64**, 6785 (1988).
- [110] F. Chevoir and B. Vinter, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 1859 (1989).
- [111] F. Chevoir and B. Vinter, *Phys. Rev. B* **47**, 7260 (1993).
- [112] H. A. Fertig and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **40**, 7410 (1989).
- [113] H. A. Fertig, S. He, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **41**, 3596 (1990).

- [114] B. G. R. Rudberg, *Semic. Sci. Technol.* **50**, 600 (1990).
- [115] J. Leo and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 817 (1990).
- [116] J. Leo and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **43**, 9763 (1992).
- [117] R. Berkovits and S. Feng, *Phys. Rev. B* **45**, 97 (1992).
- [118] P. Johansson, *Phys. Rev. B* **46**, 12865 (1992).
- [119] E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlattices and Microstructures* **17**, 397 (1989).
- [120] R. A. Davies, D. J. Newson, T. G. Powell, M. J. Kelly, and H. W. Meron, *Semic. Sci. Technol.* **2**, 61 (1987).
- [121] M. L. Leadbeater, L. Eaves, P. E. Simmonds, G. A. Toombs, F. W. Sheard, P. A. Claxton, G. Hill, and M. A. Pate, *Solid State Electron.* **31**, 707 (1988).
- [122] P. England, J. R. Hayes, M. Helm, J. P. Harbison, L. T. Florez, and S. S. Allen, Jr., *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1469 (1989).
- [123] P. A. Schulz, *Phys. Rev. B* **43**, 4548 (1991).
- [124] E. Runge and H. Ehrenreich, *Phys. Rev. B* **45**, 9145 (1992).
- [125] E. Runge and H. Ehrenreich, *Ann. Phys.* **219**, 219 (1992).
- [126] Q. S. Zhu, S. M. Mou, X. C. Zhou, and Z. T. Zhong, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 2813 (1993).
- [127] J. Batey, *J. Appl. Phys.* **59**, 200 (1986).



## APÊNDICE A

# Magnetotunneling in Single GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

## Non-Abrupt Barriers

M. C. A. Lima,<sup>1</sup> H. T. Anyele,<sup>1</sup> M. L. X. Feijão,<sup>2</sup>

G. A. Farias,<sup>2</sup> and V. N. Freire<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão,*

*Campus do Bacanga, 67383-360, São Luís, Brazil*

<sup>2</sup>*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,*

*Caixa Postal 6030, 60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil*

### Abstract

The influence of an in-plane magnetic field on the electron transmission properties through single GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As non-abrupt barriers has been investigated. The existence of graded interfaces shifts the resonant peaks of the electron transmission towards high energy, and reduces their peak-to-valley reasons. These shifts compare with those produced by a high magnetic field, and become more important when the center coordinate of the orbital motion is localized close to the barrier borders. Our results expose the limitation of the abrupt interface picture in describing electron magnetotunneling through single GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As barriers.

73.20.-r, 73.20.Dx

Magnetic field phenomena in semiconductor heterostructures constitute an interesting research subject because they can involve symmetry break, Landau subbands filling, and cyclotron-resonant orbits, for example. The effect of a magnetic field on the energy levels and tunneling properties in  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  single and double-barriers<sup>1,2</sup>, as well as in shallow donor impurities in  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  superlattices<sup>3</sup> were recently studied, but within the abrupt interface picture. However, experiments indicate the existence of interfacial regions in  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  heterostructures with widths at least of 2 GaAs unit cells<sup>4,5</sup>. The theoretical results of Freire *et al*<sup>6-9</sup> have highlighted the limitations of the abrupt interface picture by showing the influence of graded interfaces on the properties of  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  heterostructures.

In this work, we calculate the magnetotunneling of an electron through a single  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  non-abrupt barrier subjected to a magnetic field perpendicular to its growth direction. We study the influence of non-abrupt interfaces on the electron transmission considering that the aluminum molar fraction in the interfacial regions can be described according to a function  $x(z)$ , where  $z$  is the growth direction. In general, the interfacial alloy variation depends on the growth condition and experimental technique used to fabricate the semiconductor sample. However, we have assumed here a linear variation of  $x(z)$ , and employed the method of Freire, Auto, and Farias<sup>6</sup> to obtain the interface potential and electron effective mass. We have also studied the effect on the electron transmission resonant peaks of changing the cyclotron orbit center. Numerical results are obtained by solving Schrödinger equations based on the position dependent kinetic energy operator of BenDaniel and Duke<sup>10</sup>.

We consider a non-abrupt  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  barrier subjected to uniform magnetic field along the positive  $x$ -direction and perpendicular to the growth direction, which is taken to be along the  $z$ -axis. The potential vector is given by:

$$\vec{A}_p = \begin{cases} (0, 0, 0), & z \leq z_1 \\ (0, -B(z - z_1), 0), & z_1 \leq z \leq z_4 \\ (0, -B(z_4 - z_1), 0), & z \geq z_4 \end{cases}, \quad (1)$$



where  $B$  is the strength of the external magnetic field, and  $z_1(z_4)$  is the beginning (end) of the non-abrupt barrier (see Fig. 1). In the non-abrupt interface region between  $z_1(z_3)$  and  $z_2(z_4)$ , the aluminum concentration increases (decreases) from zero ( $x$ ) to  $x$  (zero). According to the model of Freire, Auto, and Farias<sup>6</sup>, in the interface regions the electron effective mass changes linearly with the aluminum molar fraction  $x(z)$  as  $m(z) = m_0[\mu_1 + \mu_2 x(z)]$  (see Fig. 1), where  $m_0$  is the free electron mass<sup>6,7</sup>; the interface potential changes quadratically with the aluminum molar fraction  $x(z)$  as  $V(z) = Q_e\{\varepsilon_1 x(z) + \varepsilon_2 [x(z)]^2\}$ , where  $Q_e$  is the band offset<sup>6,8</sup>.  $\mu_1, \mu_2$  and  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  are parameters obtained from experiments, and they are presented by Adachi<sup>11</sup>, for example.

Considering only energy levels in the conduction band and using the kinetic energy operator of BenDaniel and Duke<sup>10</sup>, we can write the Hamiltonian in the region  $z_1 \leq z \leq z_4$ ,

$$H = \frac{1}{2}(\vec{p}_x, \vec{p}_y + \frac{eB}{c}(z - z_1), \vec{p}_z)[m(z)]^{-1}(\vec{p}_x, \vec{p}_y + \frac{eB}{c}(z - z_1), \vec{p}_z) + V(z) \quad , \quad (2)$$

where  $V(z)$  is the potential describing the non-abrupt barrier<sup>8</sup>,  $e$  the electron charge, and  $c$  the light velocity. For the Hamiltonian considered, we can write the electron wave function

$$\Psi_{k_x, k_y}(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \Phi(z) \quad , \quad (3)$$

with  $k_x(y)$  been the momentum in the  $x(y)$  direction.  $\Phi(z)$  is the solution of the following Schrödinger equation:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} (m(z))^{-1} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} m(z) \omega_B^2 (z - z_0)^2 + V(z) \right] \Phi(z) = E^* \Phi(z) \quad , \quad (4)$$

where  $\omega_B = eB/m(z)c$ ,  $z_0 = z_1 + c\hbar k_y/eB$  and  $E^* = E - \hbar^2 k_x^2/2m(z)$ .  $z_0$  determines the centers of parabolas which represent the magnetic contribution to the potential. They are represented in Fig. 1 when the orbital center is localized at  $z_1$  (long dashed), 0 (small dashed), and  $z_4$  (dotted). In Fig. 1,  $V_{MAX}$  is the maximum barrier height ( $V_x = 227$  meV when  $x = 0.3$ ),  $m_1 = m_0\mu_1$ , and  $m_x = m_0(\mu_1 + \mu_2 x)$ .

transmission properties of electrons through non-abrupt  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  single barriers are calculated by imposing continuity of  $\Phi(z)$  and  $[m(z)]^{-1}\Phi(z)$  at the interfaces extrema solution of the Schrödinger equations. We employ the numerical method by Ando et al.<sup>12</sup> to solve the coupled differential equations.

We have calculated the properties of the tunneling of an electron through non-abrupt  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  single barriers with  $z_1 = -50 \text{ \AA}$  and  $z_4 = 50 \text{ \AA}$ , and interface widths 0, 2, and 4 GaAs unit cells (UC). We have considered magnetic field intensities of 0 T, 10 T, 20 T, and 30 T. The electron band offset is taken as  $Q_e = 0.6$ .

Figure 2 shows the electron transmission (ET) through single  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  barriers subjected to an in-plane magnetic field with  $z_o = 0 \text{ \AA}$ . In this case, we see that magnetic field intensities up to 30 T have small influence on the ET. The existence of the interfaces is shown to be responsible for shifting the resonance transmission peaks towards high energies, and reduction in the peak-to-valley reasons of the transmission peaks. When the interface width is of 2 UC (4 UC), the energy shifts of the resonance peaks are of the order of 10 meV (20 meV). The magnetic field can also reduce the peak-to-valley reasons of the transmission peaks. This reduction increases when the magnetic field becomes strong. However, this reduction is very small even for magnetic fields as high as 30 T, as shown in Fig. 2.

When  $z_o \neq 0$ , *i.e.* when  $k_x \neq 0$  and/or  $k_y \neq 0$ , the magnetic field has a strong influence on the ET. This is shown in the Fig. 3 and Fig. 4 for  $z_o = 50 \text{ \AA}$  and  $z_o = -50 \text{ \AA}$ , respectively. When the barrier is abrupt, a 20 T magnetic field shifts the first transmission resonance peak by as much as 12 meV, that is of the same order of the shift produced by the existence of abrupt interfaces with width of 2 UC. The magnetic field produces also a reduction in the transmission and valley values of the ET. The reduction when  $z_o = 50 \text{ \AA}$  is higher than when  $z_o = -50 \text{ \AA}$ , as can be seen by comparing the Fig. 3 with the Fig. 4. However, in the cases the reduction becomes smaller when the interface widths increase.

The results we have obtained show that the dependence of the magnetotunneling of electrons through  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  single barriers on the existence of non-abrupt interfaces can be as important as the dependence of the magnetotunneling on the electron transverse momenta  $k_x$  and  $k_y$  before the tunneling.

**Acknowledgements** - This work has received financial support from the Brazilian National Research Council (CNPq), the Ministry of Planning (FINEP), and the Science Funding Agency of the Ceará State in Brazil.



## REFERENCES

- <sup>1</sup> K.-M. Hung and G. Y. Wu, *Phys. Rev. B* **45**, 3461 (1992).
- <sup>2</sup> T. M. Fromhold, F. W. Sheard, and G. A. Toombs, *Surf. Science*, **228**, 437 (1990).
- <sup>3</sup> J. M. Shi, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **50**, 15182 (1994).
- <sup>4</sup> A. Ourmazd, D. W. Taylor, J. Cunningham, C. W. Tu, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 933 (1989).
- <sup>5</sup> O. Albrechtsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 31 (1990).
- <sup>6</sup> V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlatt. Microstruc.* **11**, 17 (1992).
- <sup>7</sup> R. Renan, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **48**, 8446 (1993).
- <sup>8</sup> M. C. A. Lima, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Phys. Rev. B* **52**, 5777 (1995).
- <sup>9</sup> E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlatt. Microstruct.* **17**, 397 (1995).
- <sup>10</sup> D. J. BenDaniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
- <sup>11</sup> S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- <sup>12</sup> Y. Ando and T. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).

## FIGURES

FIG. 1. Spatial variation of the aluminum molar fraction (top), potential (middle), and electron effective mass (bottom) in a non-abrupt  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  single barrier subjected to an in-plane magnetic field. The small dashed lines depict the abrupt barrier profile.

FIG. 2. Transmission coefficient of an electron through a  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  single barrier when  $z_o = 0 \text{ \AA}$ , and the in-plane magnetic field intensity is 0 T (solid), 10 T (dashed), 20 T (dotted), and 30 T (dotted dashed). The width of the interfaces are 0 UC (top), 2 UC (middle), and 4 UC (bottom).

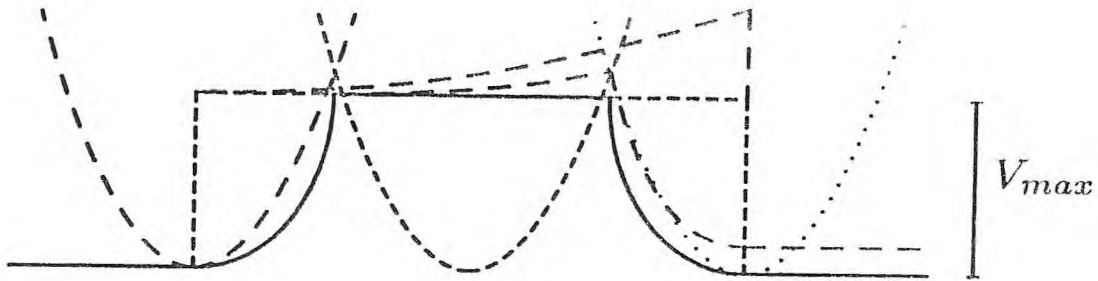
FIG. 3. Transmission coefficient of an electron through a  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  single barrier when  $z_o = 50 \text{ \AA}$ , and the in-plane magnetic field intensity is 0 T (solid), 10 T (dashed), 20 T (dotted), and 30 T (dotted dashed). The width of the interfaces are 0 UC (top), 2 UC (middle), and 4 UC (bottom).

FIG. 4. Transmission coefficient of an electron through a  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  single barrier when  $z_o = -50 \text{ \AA}$ , and the in-plane magnetic field intensity is 0 T (solid), 10 T (dashed), 20 T (dotted), and 30 T (dotted dashed). The width of the interfaces are 0 UC (top), 2 UC (middle), and 4 UC (bottom).

ALUMINIUM MOLAR FRACTION



POTENTIAL



RELATIVE MASS

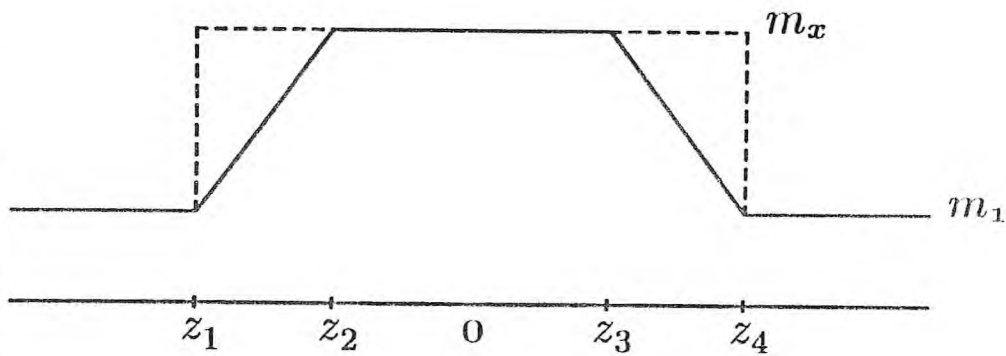
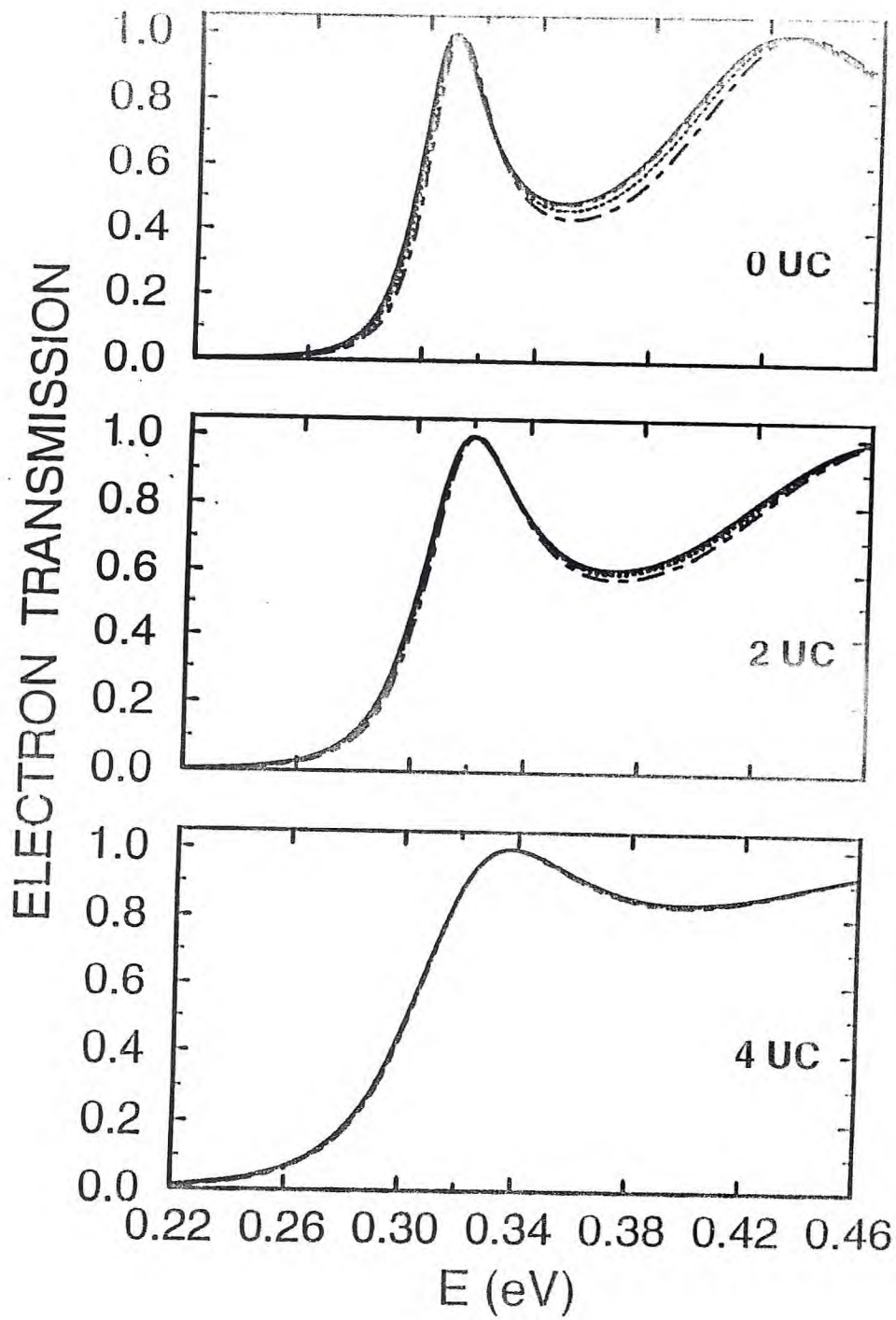
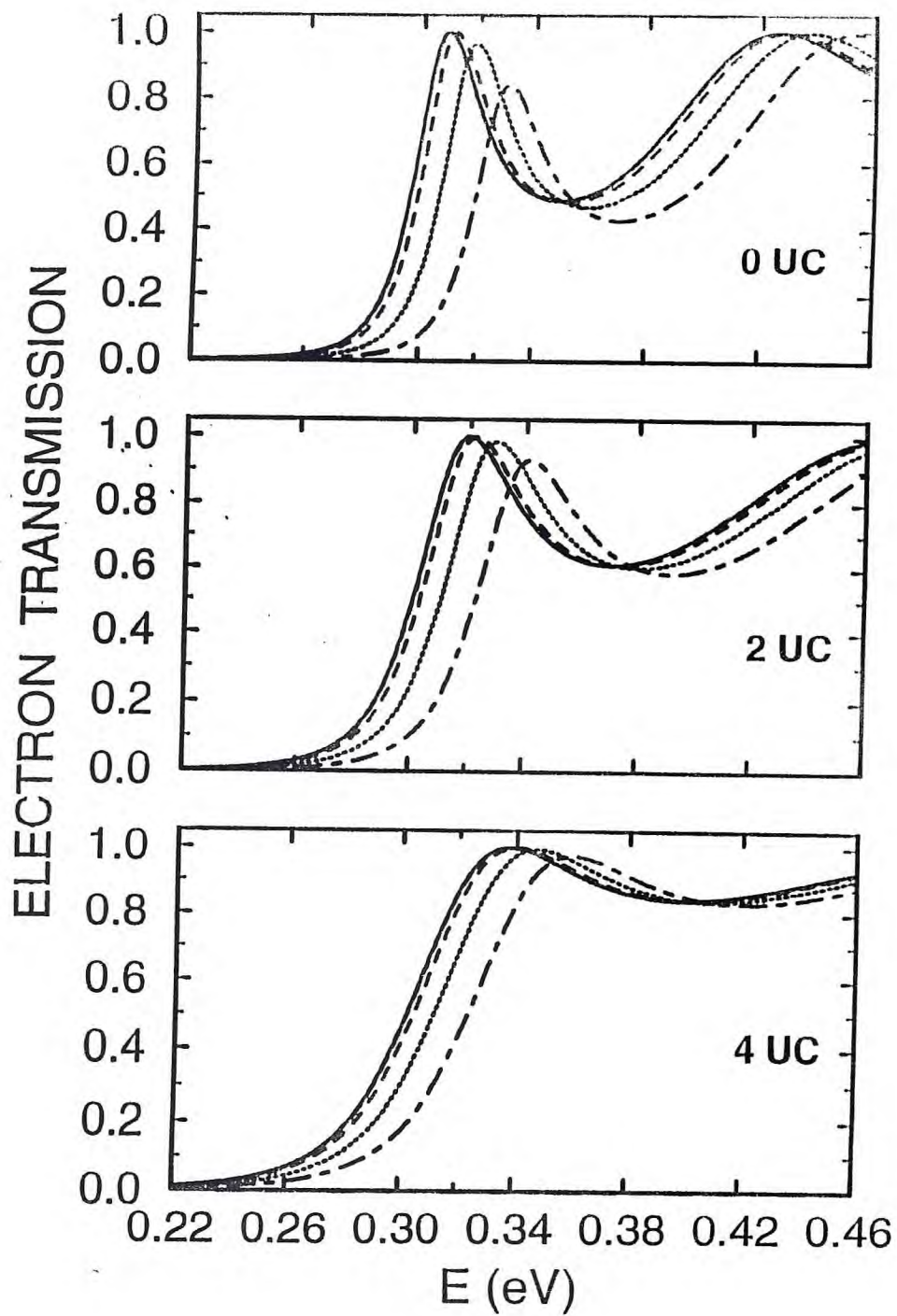


FIGURE 1 96  
Magnetotunnelling in Single GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As...  
M.C.A. Lima, H.T. Anyele, M.L.X. Feijão, G.A. Farias, and V.N. Freire





97  
**FIGURE 2**  
 Magnetotunnelling in Single GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ...  
 M.C.A. Lima, H.T. Anyele, M.L.X. Feijão, G.A. Farias, and V.N. Freire



**FIGURE 4**  
 Magnetotunnelling in Single GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ...  
 M.C.A. Lima, H.T. Anyele, M.L.X. Feijão, G.A. Farias, and V.N. Freire