



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**EFEITOS DE DOPANTES PROTRUSIVOS
NAS PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO
DE HETERO-ESTRUTURAS $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$**

Luiz Ozório de Oliveira Filho

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

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas

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

O48e Oliveira Filho, Luiz Ozônio de.
Efeitos de dopantes protrusivos nas propriedades de transmissão de hetero-estruturas
GaAs/Al_iGa_{1-x}As / Luiz Ozônio de Oliveira Filho. – 1997.
84 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. Shrodinger, Equação de . I. Título.

CDD 530

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
Centro de Ciências, Departamento de Física

**EFEITOS DE DOPANTES PROTRUSIVOS
NAS PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO
DE HETERO-ESTRUTURAS GaAs/Al_xGa_{1-x}As**

Luiz Ozório de Oliveira Filho

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. Raimundo Nogueira da Costa Filho, UFC

Dra. Maria Consuelo Alves Lima, UFMA

Aprovada em 19 de dezembro de 1997

Aos meus pais, Luis Osório e Marian
e ao meu irmão Jean Lima.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Dr. Valder Nogueira Freire, pela orientação deste trabalho de tese.

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

Ao Professor Dr. Ricardo Renan por sua valiosa colaboração na compilação final deste texto, que ajudaram-me a salvar bastante tempo.

Ao Professor Dr. Raimundo Nogueira Costa pelo auxílio e dicas na realização deste trabalho.

Aos demais professores do Departamento de Física da UFC, que tiveram participação na minha formação acadêmica.

A Sâmia e ao Egmídio Filho pela inestimável ajuda, sem a qual não conseguiria levar a bom termo este trabalho.

Aos amigos Ascânio, Alexandre Magno, Márcio André, pelas horas de descontração (biritas) vividas durante este período.

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

RESUMO

Os efeitos de impurezas localizadas nas propriedades de transmissão de elétrons em hetero-estruturas (heterojunções, barreiras simples e dupla) GaAs/Al_xGa_{1-x}As com interfaces abruptas e não-abruptas são investigados. As impurezas são descritas por um potencial atrativo gaussiano cuja largura ($\sim 20 \text{ \AA}$) foi estimada por microscopia de tunelamento quântico, e sua profundidade é tal que seu estado ligado fundamental coincide com o de impurezas hidrogenóides. A descrição das interfaces não-abruptas segue o esquema proposto anteriormente por Freire, Auto e Farias [Superlatt. Microstruct. 1, 17 (1992)]. As soluções numéricas das equações de Schrödinger com massa efetiva dependente da posição mostram que o espalhamento inelástico por uma impureza pode modificar consideravelmente as propriedades de transmissão dos elétrons nas hetero-estruturas, podendo inclusive ser mais importante do que efeitos de interfaces não-abruptas. Além da possibilidade de surgimento de ressonância na transmissão de elétrons nas heterojunções devido à existência de impurezas protrusivas, demonstra-se que as alterações na transmissão de elétrons nas barreiras simples e duplas dependem fortemente da localização e densidade da impurezas.

ABSTRACT

The effects of localized impurities on the transmission properties of electrons in heterojunctions and single/double barriers with abrupt and non-abrupt interfaces are investigated. The impurities are described by gaussian wells whose widths ($\sim 20 \text{ \AA}$) were estimated with tunneling microscopy, and whose depths determines a ground state that is the same as those calculated considering hydrogenoid impurities. The non-abrupt interfaces description follows the previously proposed scheme of Freire, Auto, and Farias [Superlatt. Microstruct. 1, 17 (1992)]. The numerical solution of the Schrödinger equations with position dependent effective mass shows that the inelastic scattering with a impurity can strongly modify the electron transmission properties in the heterostructures, being in certain cases more important than the effects of non-abrupt interfaces. It is shows not only that protrusion dopants can produce transmission resonances in the case of heterojunctions, but that changes on the transmission properties of single/double barriers are strongly dependent on the localization and density of the impurities.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	. 70
APÊNDICE A	. 75
REFERÊNCIAS	. 80

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O interesse no estudo de estruturas semicondutoras de dimensionalidade reduzida começou com os trabalhos de Tsu e Esaki [1, 2]. Desde então um notável progresso vem sendo alcançado nesta área, impulsionado tanto por razões tecnológicas (devido a sua aplicação na microeletrônica, como a fabricação de diodos, transistores, dispositivos eletrônicos e fotoeletrônicos, etc. [3]), quanto pela busca da solução de questões ainda em aberto que despertam interesse do ponto de vista da física básica.

A superposição de camadas de semicondutores forma o que chamamos de heteroestruturas semicondutoras. Essas camadas possuem extensão da ordem de grandeza das funções de ondas associadas aos portadores de carga (\sim Angstrom). Suas propriedades físicas dependem tanto das suas configurações espaciais quanto de suas dimensões características. Essas hetero-estruturas confinam os portadores de carga em dimensões reduzidas (menor ou igual a três) pois limitam de alguma forma o movimento dos portadores em certas direções.

Sistemas semicondutores bi-dimensionais são exemplos típicos de heteroestruturas semicondutoras que podem ser obtidas. Camadas semicondutoras de dimensão atômica são crescidas alternando um tipo de semicondutor com outro tipo de semicondutor, dando origem a poços, barreiras, super-redes e outras hetero-estruturas quânticas [4]. Estas camadas são em sua grande maioria, compostas de dois, três ou quatro elementos dos grupos III e IV.

Na época dos trabalhos de Tsu e Esaki [1, 2], estes já previram que dois tipos de hetero-estruturas, uma obtida por dopagem e outra por variação composicional, poderiam ser obtidos (ver Fig. 1.1). Neste trabalho, somente serão investigadas as hetero-estruturas semicondutoras (barreiras simples, barreiras duplas, poços quânticos, etc.) do tipo obtido por variação composicional. Dentre as várias hetero-estruturas produzidas, uma merece destaque, que é a do tipo GaAs/Al_xGa_{1-x}As pelo fato de seu

processo de crescimento ser o mais aperfeiçoado e conhecido atualmente.

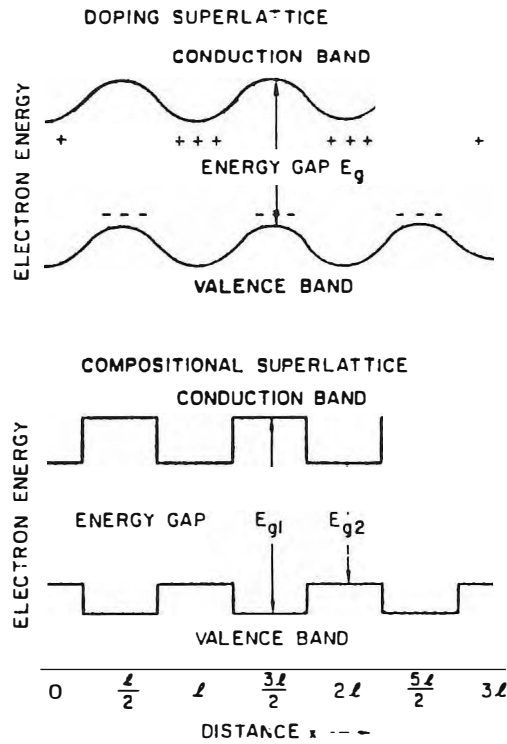


Figura 1.1 - Variação espacial das bandas de condução e valência em hetero-estruturas semicondutoras obtidas por variação de dopagem e por alteração composicional (extraída de Esaki [5]).

Com a evolução das técnicas de crescimento de cristais, como a epitaxia por feixe molecular (MBE) e a deposição química por vapor metálico-orgânico (MOCVD) entre outras, tornou-se possível crescer hetero-estruturas semicondutoras e monitorar seu crescimento através de técnicas tais como difração por reflexão dos elétrons de alta energia (RHEED), o que permite obter camadas semicondutoras com uma quantidade de imperfeições cada vez menor e interfaces (região de transição entre as diferentes camadas que formam a hetero-estrutura) tão abruptas quanto possível.

Logo abaixo descreveremos brevemente alguns aspectos básicos de uma das técnicas de crescimento de hetero-estruturas semicondutoras mais largamente empregada devido tanto a sua sofisticação e versatilidade, quanto pelo controle dos parâmetros de crescimento que propicia. A Fig. 1.2 mostra uma ilustração esquemática de uma câmara de MBE.

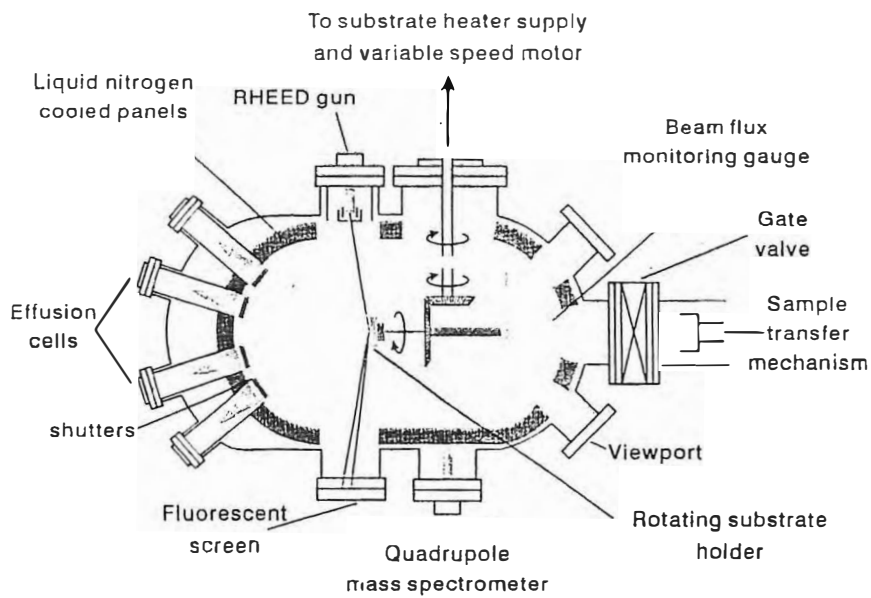


Figura 1.2 - Ilustração esquemática dos processos básicos de evaporação para o crescimento por MBE de semicondutores III - V, realizado em condições de vácuo ultra-elevado, que pode chegar a 10^{-12} Torr (extraída de Henini [6]).

Basicamente, a MBE é uma técnica de deposição termicamente controlada em uma câmara de vácuo ultra-elevado (da ordem de 10^{-12} Torr) [7], onde materiais em forma líquida ou sólida são aquecidos em cadinhos, usualmente referidos como células de Knudsen. Esses materiais irão produzir os feixes atômicos ou moleculares que se depositarão em um substrato aquecido, onde processos de difusão ocorrem posteriormente. Pode-se usar técnicas como RHEED para monitorar a temperatura de crescimento, a superfície da hetero-estrutura semicondutora, a dinâmica e a taxa de crescimento das hetero-estruturas na câmara.

Investigar os fundamentos dos processos de crescimento de materiais semicondutores é importante, pois os dispositivos semicondutores exigem cada vez mais um controle da distribuição dos dopantes em camadas nanoscópicas. O entendimento desses fundamentos irá propiciar um avanço tremendo na performance dos dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos [8]. Um aspecto chave, fundamental na investigação do crescimento heteroepitaxial, é a determinação das interações químicas que tomam lugar nos estágios iniciais do crescimento. Existem inúmeras técnicas de análise química e estrutural de superfícies, como a microscopia iônica de campo (FIM), a microscopia de emissão de campo (FEM), a microscopia de tunelamento (STM), entre outras. Comparada com as outras técnicas de análise de superfície, a STM tem se mostrado uma ferramenta poderosa para o estudo de semicondutores, defeitos no bulk, doadores e aceitadores rasos [9, 10], etc.

Apesar do notável desenvolvimento obtido nas técnicas de crescimento das hetero-estruturas semicondutoras (e que continua a ser obtido!), não se consegue crescer heterojunções sem a presença de imperfeições na interface. Possuem as interfaces nos melhores casos largura de pelo menos dois parâmetros de rede (2 LP) da estrutura semicondutora constituinte da heterojunção [11, 12], isso dependendo do tipo de crescimento. **Além disso, pode ocorrer a existência de impurezas absorvidas durante o processo de crescimento, devido por exemplo a uma contaminação da câmara de MBE .**

No início da década de 80, Price e Stern [13] e Stern e Das Sarma [14] mostraram que as mudanças nos níveis de energia de uma heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As com camadas interfaciais de transição (≤ 1 nm) era pequeno (≤ 1 meV), fazendo com que os estudos realizados posteriormente considerassem abruptas as interfaces entre esses materiais. Entretanto, usando microscopia de tunelamento e espectroscopia, Albrektsen *et al.* [11] mostraram que a interface entre o GaAs e o Al_xGa_{1-x}As não é abrupta podendo se estender por alguns parâmetros de rede do GaAs.

Muitos estudos foram desenvolvidos para investigar o papel das interfaces nas propriedades das hetero-estruturas semicondutoras. Schulman [15] calculou os níveis de energia de poços quânticos GaAs/Al_xGa_{1-x}As não-abruptos utilizando uma função linear para representar o potencial interfacial (mas considerando constante a massa efetiva dos portadores). Jiang e Li [16] calcularam a estrutura de bandas de uma super-rede não-abrupta utilizando o mesmo modelo de Schulman. Proctor *et al.* [17] explicaram os desvios entre os resultados teóricos e experimentais das transições de energia entre elétrons e buracos pesados em poços GaAs/Al_xGa_{1-x}As quânticos múltiplos utilizando um perfil simétrico e suave para o potencial interfacial, que tinha sido proposto anteriormente por Nelson *et al.* [18].

O estudo das propriedades de transmissão de portadores através de heterojunções semicondutoras GaAs/Al_xGa_{1-x}As quando se considera a existência de interfaces graduais não-abruptas, com larguras tão pequenas quanto duas células unitárias do GaAs foi realizado por Freire *et al.* [19, 20, 21]. Esses estudos mostraram o efeito da dependência espacial da massa efetiva dos portadores e do padrão de crescimento interfacial nas propriedades de transmissão das heterojunções. Fazendo inclusive uma generalização [21] do método numérico de Ando e Itoh [22], o modelo preliminar de Freire *et al.* [19] tem sido utilizado no estudo das propriedades de transmissão de barreiras GaAs/Al_xGa_{1-x}As simples e duplas não submetidas a campo elétrico por Renan *et al.* [23, 24]. O efeito de um campo elétrico foi abordado por Lima *et al.* [25].

Existe hoje um grande número de técnicas experimentais utilizadas para a investigação de interfaces em hetero-estruturas semicondutoras, tais como fotoluminescência [26, 27], espalhamento Raman vibracional [28], espectroscopia e topografia de tunelamento quântico [29, 30]. Embora controvérsias ainda ocorram atualmente, esses resultados experimentais permitem as seguintes afirmações sobre as interfaces de hetero-estruturas semicondutoras:

- (i) elas não são abruptas e possuem larguras interfaciais de pelo menos duas células unitárias da rede cristalina dos semicondutores que as compoem;
- (ii) ilhas de diferentes tamanhos estão presentes nas mesmas;
- (iii) possuem grau de rugosidade que depende da técnica de crescimento das hetero-estruturas e do tratamento pós-crescimento;
- (iv) pode existir uma assimetria interfacial - a deposição do semicondutor B em A (tipo A-B) pode gerar uma espessura diferente daquela quando há deposição do semicondutor A em B (tipo B-A). Por exemplo, interfaces $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ são mais largas que interfaces $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Naturalmente, a existência de impurezas em uma hetero-estrutura pode ser capaz de alterar as suas propriedades e vir a ser tão relevante quanto as interfaces não-abruptas, por exemplo. A importância básica do estudo de impurezas para o entendimento das propriedades eletrônicas tem sido reconhecida desde o primórdio da física de semicondutores (Mott e Gurney [31]). Em particular, a possibilidade de controlar as impurezas em baixas concentrações ($\leq 10^{-15} \text{cm}^{-3}$) tem sido essencial para o grande desenvolvimento da tecnologia dos semicondutores nos últimos quarenta anos.

Recentemente, a microscopia de tunelamento (STM) [32] vem sendo aplicada para o estudo da geometria e da estrutura eletrônica de impurezas rasas em semicondutores, tal como silício substitucional em GaAs. Esses experimentos indicam

que impurezas doadoras do tipo substitucional em GaAs apresentam características protusivas que se estendem por cerca de 25\AA (ver Fig.1.3) [10, 32].

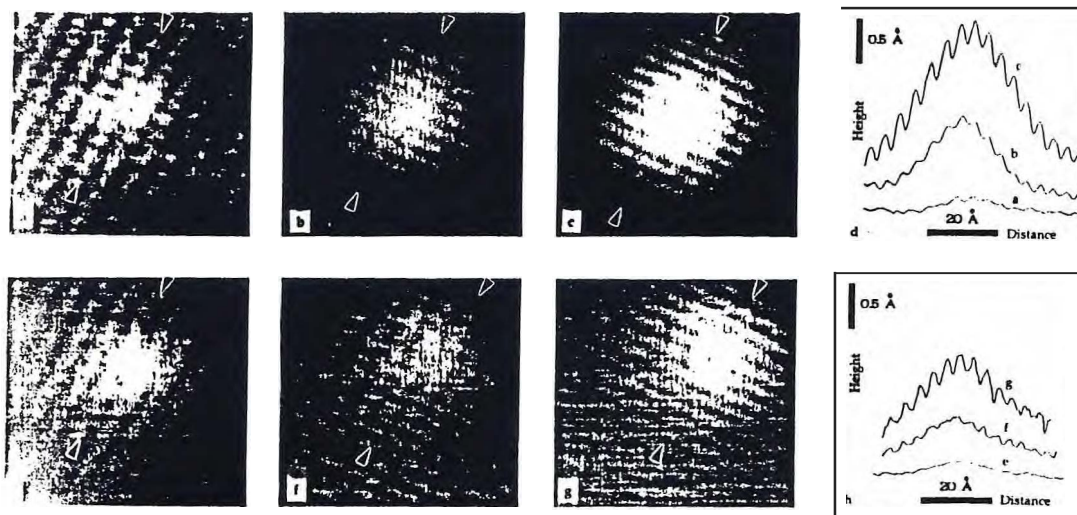


Figura 1.3 - Extensão espacial da perturbação devido a uma impureza de Si substitucional em uma rede periódica de GaAs [10].

A investigação dos efeitos de impurezas do tipo substitucional nas propriedades de hetero-estruturas semicondutoras não foi realizada tanto quando o problema das interfaces nas propriedades de transmissão dessas hetero-estruturas. Entretanto, já em 1981 Bastard [33] investigou os níveis de energia de estados ligados e a sua densidade levando em conta a existência de impurezas hidrogenóides em poços quânticos, tendo se obtido os seguintes resultados:

- (i) a energia de ligação varia com a posição da impureza dentro do poço, sendo esta mínima quando a impureza está localizada na interface;
- (ii) há uma forte concentração da densidade de estados na interface e no centro do poço.

Uma outra estrutura que está sendo alvo de muitos estudos [34] recentemente é o confinamento de impurezas doadoras e/ou aceitadoras em uma única monocamada perpendicular à direção de crescimento do cristal, ao que se dá o nome de dopagem delta (planar) por este tipo de dopante se assemelhar a uma função delta de Dirac. Essas estruturas têm sido usadas para a investigação de efeitos de tunelamento ressonante em diodos [35].

Portanto, o assunto impurezas em semicondutores, em especial em heteroestruturas, é vasto e não simples, tendo sido devotado um grande esforço no sentido de se entender melhor os mecanismos e complicações que estão por trás de cada novo resultado experimental que surge.

A finalidade deste trabalho de tese é investigar a influência de perturbações (protusões) devido a impurezas nas hetero-estruturas semicondutoras GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (heterojunções, barreiras simples e duplas) abruptas e não-abruptas. As perturbações são representadas por uma estrutura confinadora sobreposta ao potencial da hetero-estrutura e descrita por um dado tipo de potencial. Tomando a hipótese da fração molar variando linearmente com a posição, o modelo proposto por Freire, Auto e Farias é utilizado para obtenção do potencial e da massa efetiva dos portadores nas regiões interfaciais e comparado com o modelo abrupto. Serão portanto investigadas as seguintes questões:

(a) Caso haja uma contaminação na câmara de crescimento da máquina de MBE, e uma quantidade ínfima de impurezas (localizadas) contaminem o crescimento de hetero-estruturas do tipo GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, poderiam estas impurezas modificar as propriedades de transmissão de portadores através destas hetero-estruturas ?

(b) Havendo modificação na transmissão, qual o nível de modificação e qual o tipo de impurezas e sua localização exerce maior influência nas propriedades de transmissão ?

(c) Enfim qual seria o papel das impurezas individuais (localizadas) nos fenômenos de transmissão em hetero-estruturas semicondutoras ?

O operador energia cinética de BenDaniel e Duke [36] $(\hat{p} [m(z)]^{-1} \hat{p})/2$ é utilizado para a obtenção das equações de Schrödinger, bem como condições de contorno $\Psi(z)$ e $[m(z)]^{-1} \Psi'(z)$ são impostas para sua solução. Para a solução numérica das equações é empregado o método de *multisteps* proposto por Ando e Itoh [22].

No Capítulo 2 são apresentados os modelos para as perturbações nas heterojunções e barreiras GaAs/Al_xGa_{1-x}As simples e duplas, bem como suas equações. O método numérico utilizado para resolver essas equações é descrito no Apêndice. Serão considerados tanto os casos em que a fração molar varia linearmente nas regiões interfaciais como o caso abrupto, com e sem perturbações nessas hetero-estruturas.

Resultados e discussões são mostrados no Capítulo 3. Começando por verificar o papel das estruturas confinadoras nas propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas, o Capítulo 3 prossegue com a apresentação dos resultados obtidos sobre a influência das impurezas localizadas nos fenômenos de transmissão para o caso de barreiras GaAs/Al_xGa_{1-x}As simples e duplas, também abruptas e não-abruptas.

Finalmente, no Capítulo 4 são apresentadas as conclusões finais, bem como as perspectivas para futuros trabalhos.

CAPÍTULO 2

UM MODELO PARA HETEROJUNÇÕES, BARREIRAS SIMPLES E DUPLAS $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ABRUPTAS E NÃO-ABRUPTAS

Um cristal perfeito consiste de um arranjo regular de átomos numa estrutura periódica tridimensional. A introdução de imperfeições em um cristal distorce a estrutura periódica e pode alterar as propriedades do material de maneira significativa. Devido a variedade de imperfeições que podem estar presentes, e as várias maneiras como essas alteram as propriedades do material hospedeiro (cristal perfeito), começaremos por discutir as formas de classificação das imperfeições.

Primeiramente, existe uma diferença entre defeitos causados na estrutura espacial da rede (defeitos pontuais, deslocamentos, defeitos planares, etc.) e os defeitos causados pela presença de átomos estranhos na rede, as chamadas impurezas. Para o presente trabalho nos limitaremos ao estudo dos defeitos do segundo tipo, para o caso de impurezas simples (presença de um único átomo estranho).

Uma impureza simples pode ser classificada em termos de sua localização espacial. Quando um átomo estranho substitui um átomo do cristal, esse átomo recebe o nome de impureza substitucional. Investigamos a influência das impurezas substitucionais nas propriedades de transmissão de hetero-estruturas $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e comparamos com os resultados obtidos sobre a influência de interfaces não-abruptas.

Ao descrever as hetero-interfaces semicondutoras não-abruptas, muitos dos 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 [15, 18]. Uma exceção à regra é o modelo proposto originalmente por Freire *et al.* [19] para interfaces $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, 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. Posteriormente, Freire [21] generalizou o modelo para hetero-estruturas de qualquer tipo de semicondutor.

No caso abrupto, a transição de um tipo de semicondutor para outro ocorre em um único ponto. 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, 37]. Processos de difusão de átomos constituintes de semicondutores que ocorrem em e através das interfaces [13, 37] fazem com que as larguras interfaciais cheguem a ser de pelo menos duas unidades de célula da rede cristalina nos melhores casos, como foi detectado experimentalmente [11, 12].

Neste capítulo é utilizado o esquema proposto por Freire *et al.* [19] para criação de um modelo de heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/Al_xGa_{1-x}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 para heterojunções GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas é apresentado. A modificação da heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta devido a presença de impurezas, que são representadas por estruturas confinadoras, é apresentada na Seção 2.2. Na Seção 2.3, o modelo para uma barreira GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta simples é apresentado. Na Seção 2.4 apresentamos o modelo de barreiras GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas simples com a presença de impurezas localizadas. Na Seção 2.5, temos o modelo para uma barreira dupla GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta. A modificação da barreira dupla GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta não-abrupta devido a presença de impurezas localizadas é apresentada na Seção 2.6.

2.1. Heterojunções abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As

A composição variável na interface semicondutora GaAs/Al_xGa_{1-x}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_xGa_{1-x}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 na liga Al_xGa_{1-x}As. Uma representação gráfica da variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ para uma heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta é apresentada na Fig. 2.1.

Através de expressões empíricas obtidas de resultados experimentais [38], foram determinadas as seguintes relações na direção Γ para a dependência da diferença do alumínio da banda de condução e da massa efetiva dos portadores em Al_xGa_{1-x}As na temperatura ambiente :

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

$$m^\Gamma(x) = (\mu_1 + \mu_2 x)m_o, \quad (2.3)$$

onde $\epsilon_0 = 1.425 \text{ eV}$ é o gap de energia do GaAs na direção Γ , $\epsilon_1 = 1.155 \text{ eV}$, $\epsilon_2 = 0.37 \text{ eV}$; $\mu_1 = 0.067$ e $\mu_2 = 0.083$ [4] e m_o é a massa de repouso dos elétrons no vácuo.

A diferença entre os gaps de energia de GaAs e Al_xGa_{1-x}As na interface de uma heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As produz uma barreira de potencial tanto na banda de condução como na banda de valência que limita o movimento dos portadores de uma dimensão (a direção de crescimento da interface), ficando os mesmos livres para

se moverem nos planos perpendiculares a direção de crescimento z da interface. Essas diferenças entre os gaps fica dividida para elétrons e buracos, o que dá origem ao *band offset* Q_α , que determina a porcentagem desta divisão para o tipo do portador [39]. Com isso, o potencial em toda extensão de uma heterojunção GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ não-abrupta para elétrons fica com a forma:

$$V(z) = Q\{\epsilon_1\chi(z) + \epsilon_2\chi^2(z)\}. \quad (2.4)$$

Para se obter o potencial e a massa efetiva dos elétrons 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, obtêm-se que o potencial e a massa efetiva dos portadores numa heterojunção GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ não-abrupta são dados por:

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

$$m(z) = \begin{cases} m_1, & z \leq z_1 \\ m_2(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ m_x, & z \geq z_2 \end{cases} \quad (2.6)$$

onde nas Eqs. (2.5, 2.6) têm-se que:

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

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

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

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

$$\frac{m_1}{m_o} = \mu_1, \quad (2.8.1)$$

$$\frac{m_2(z)}{m_o} = \mu_1 + \mu_2 x(z - z_1)/(z_2 - z_1), \quad (2.8.2)$$

$$\frac{m_x}{m_o} = \mu_1 + \mu_2. \quad (2.8.3)$$

Uma representação gráfica da variação espacial do potencial $V(z)$ e da massa efetiva $m(z)$ dos elétrons para uma heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta é apresentada na Fig. 2.1.

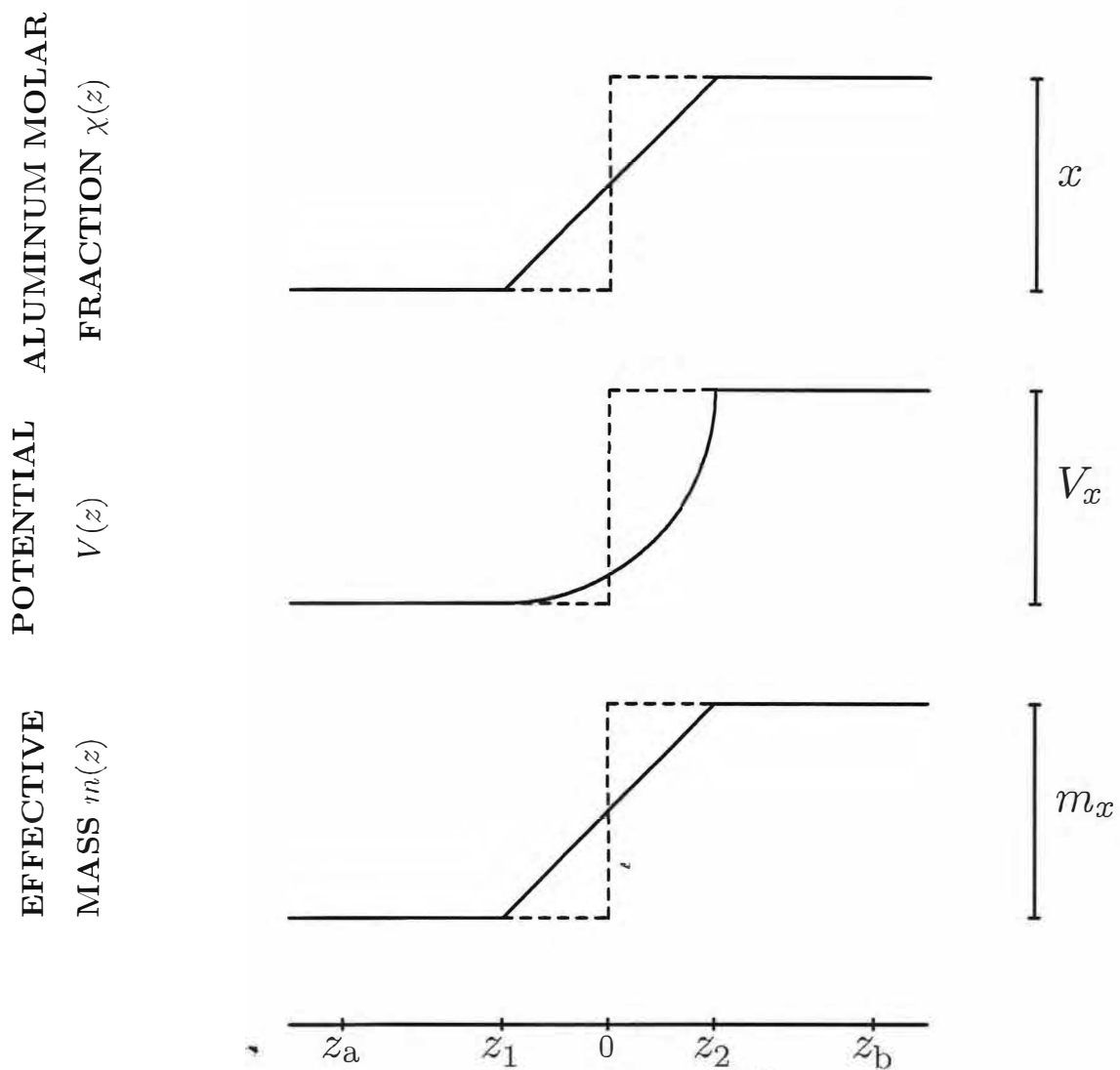


Figura 2.1 - Topo: variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ em uma heterojunção GaAs/ $Al_x Ga_{1-x} As$ abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial $V(z)$ característico de uma heterojunção GaAs/ $Al_x Ga_{1-x} As$ abrupta (pontuada) e não-abrupta (contínua). Base: variação espacial da massa efetiva $m(z)$ de portadores em uma heterojunção GaAs/ $Al_x Ga_{1-x} As$ abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

Enquanto no passado o valor de Q_α era conhecido com bastante imprecisão (para elétrons os valores utilizados variavam desde 0.5 até 0.85), atualmente é praticamente um consenso que $Q_e = Q = 0.6$ e $Q_{hh} = Q_{hl} = 0.4$ [39].

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 $[m(z)]^{-1}\Psi'(z)$ nas bordas das interfaces ainda são problemas em aberto [40, 41], embora considerável progresso tenha sido realizado por Burt [42, 43] e Cavalcante *et al.* [44].

Após a proposição da EMT por Wannier [45], Slater [46] e Luttinger and Kohn [47], vários trabalhos tentaram extendê-la além do quadro da massa efetiva constante para estudar cristais com impurezas e composição gradual. Como a massa efetiva dos portadores varia espacialmente nas regiões interfaciais da heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As não-abrupta (ver Eq. (2.6)), as equações do tipo Schrödinger que devem descrever as heterojunções tem 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 [35], $K_{BDD} = p[m(z)]^{-1}p/2$; Zhu e Kroemer [48], $K_{ZK} = [m(z)]^{-1/2}p^2[m(z)]^{-1/2}/2$; Gora e Williams [49] e/ou Bastard [39], $K_{GW(B)} = \{p^2[m(z)]^{-1} + [m(z)]^{-1}p^2\}/4$; Li and Kuhn [50], $K_{LK} = \{p[m(z)]^{-1}p[m(z)]^{-1} + [m(z)]^{-1}p[m(z)]^{-1}p\}/4$. Vale destacar que a forma mais geral do operador energia cinética foi proposta por von Roos [51], 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 $\alpha + \beta + \gamma = -1$. Neste caso, as condições de continuidade são impostas em $m^\bullet \Psi(z)$ e $m^{\alpha+\beta} \Psi(z)$.

Através de um limite relativístico do Hamiltoniano de Dirac e de uma transformação Foldy-Wouthuysen, Cavalcante *et al.* [44] mostraram recentemente que o operador energia cinética com massa efetiva variando espacialmente tem a forma proposta anteriormente por Li e Kuhn [50]. No entanto, as propriedades de transmissão de um elétron através de uma heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As calculadas com esta forma e com a mais utilizada na literatura - que é aquela de BenDaniel e Duke [35], 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 [35] 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_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas.

Utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [35], as equações do tipo Schrödinger que descrevem um elétron numa heterojunção não-abrupta GaAs/Al_xGa_{1-x}As sem a presença de perturbações é:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_2(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + Q[V_0 + V_1z + V_2z^2]\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad (2.10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + QV_x\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z \geq z_2 \quad (2.11)$$

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

2.2. Heterojunções abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As com impurezas localizadas

Apresentamos nesta Seção o modelo para descrever a existência de impurezas localizadas em heterojunções GaAs/Al_xGa_{1-x}As. A origem dessas impurezas pode estar associada, por exemplo, à contaminação na câmara de crescimento MBE das heterojunções. No nosso modelo, a impureza é representada por uma estrutura confinadora no potencial da heterojunção, sendo representada por um dado tipo de potencial unidimensional. Escolhemos inicialmente dois tipos de potenciais para descrever a impureza, um gaussiano e outro quadrado, mas exigindo que o estado ligado desses poços fossem o mesmo estado ligado de uma impureza em GaAs ou Al_xGa_{1-x}As (ver Tabela 2.1). A expressão que descreve a heterojunção GaAs/Al_xGa_{1-x}As não-abrupta com impureza ao longo da direção z de crescimento é dada por:

$$V(z) \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_3, & z_1 \leq z \leq z_2 \\ 0 & z_2 \leq z \leq z_3, \\ V_0(z_3, z_4) + V_1(z_3, z_4)z + V_2(z_3, z_4)z^2, & z_3 \leq z \leq z_4 \\ V_x, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ V_x - V_3, & z_5 \leq z \leq z_6 \\ V_x, & z \geq z_6 \end{cases} \quad (2.12)$$

onde V_i ($i = 0, 1, 2, 3, x$) são dados em (2.7.1), (2.7.2), (2.7.3), (2.7.4), e V_3 é a expressão associada aos potenciais.

$$V_3 = \begin{cases} V_0, & (\text{impureza quadrada}) \\ \text{ou} \\ V_0 \exp(-((z - z_0)/w_0)^2), & (\text{impureza gaussiana}) \end{cases} \quad (2.13)$$

z_0 é o ponto médio do poço quadrado e w_0 é escolhido de tal maneira que a largura média do poço gaussiano seja igual a largura do poço quadrado, ou seja, $z_0 = \frac{1}{2}(s_1 + s_2)$, $s_1 = z_{(1,5)} + \frac{1}{3}(z_{(2,6)} - z_{(1,5)})$ e $s_2 = z_{(2,6)} - \frac{1}{3}(z_{(2,6)} - z_{(1,5)})$ e $w_0 = \frac{1}{\sqrt{\log 2}}(s_1 - z_0)$. A interface abrupta é obtida fazendo $z_3 = z_4$ na Eq. (2.12) e os z_i ($i=3, 4$) especificam as bordas da interface. O valor de V_3 é escolhido de tal maneira que o potencial para uma determinada largura tenha um estado ligado dado pela Tabela 2.1.

A massa efetiva dos portadores será dada pela Eq.(2.6) pois não temos nenhum resultado experimental que nos diga como a massa efetiva de um portador varia nas regiões próximas das impurezas. Aparentemente não há ainda nenhuma teoria que nos possa fornecer informações sobre isto.

Poço Quadrado			Poço Gaussiano		
Larg. (LP)	Prof. (meV)	E_0 (meV)	Larg. (LP)	Prof. (meV)	E_0 (meV)
2	-105,6	-5,8	2	-99,5	-5,8
4	-54,8	-5,8	4	-52,8	-5,8
6	-37,9	-5,8	6	-37,1	-5,8
2	-174,0	-15,0	2	-166,0	-15,0
4	-92,0	-15,0	4	-90,2	-15,0
6	-65,0	-15,0	6	-64,9	-15,0
2	-251,5	-30,0	2	-243,5	-30,0
4	-136,2	-30,0	4	-136,0	-30,0
6	-98,0	-30,0	6	-97,8	-30,0

Tabela 2.1 - Níveis de energia E_0 do primeiro estado ligado de poços quadrados e gaussianos em função da largura (em parâmetros de rede do GaAs - LP) e da profundidade dos mesmos.

Os níveis de energia da Tab. 2.1 são da mesma ordem do estado fundamental de impurezas hidrogenóides em GaAs [52]. As impurezas associadas a esses estados

ligados são $-5,8$ meV para o silício e $-30,0$ meV para o telúrio, enquanto escolhemos $-15,0$ meV para um estado intermediário que argumentamos talvez possa vir a poder ser associado a um *cluster* ou a outro átomo de impureza ainda não conhecido. O parâmetro de rede (LP) do GaAs $\sim 5.6\text{\AA}$.

A Fig. 2.2 mostra uma representação de uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ abrupta e não abrupta com os dois tipos de potenciais representativos da impureza localizada que utilizamos neste trabalho.

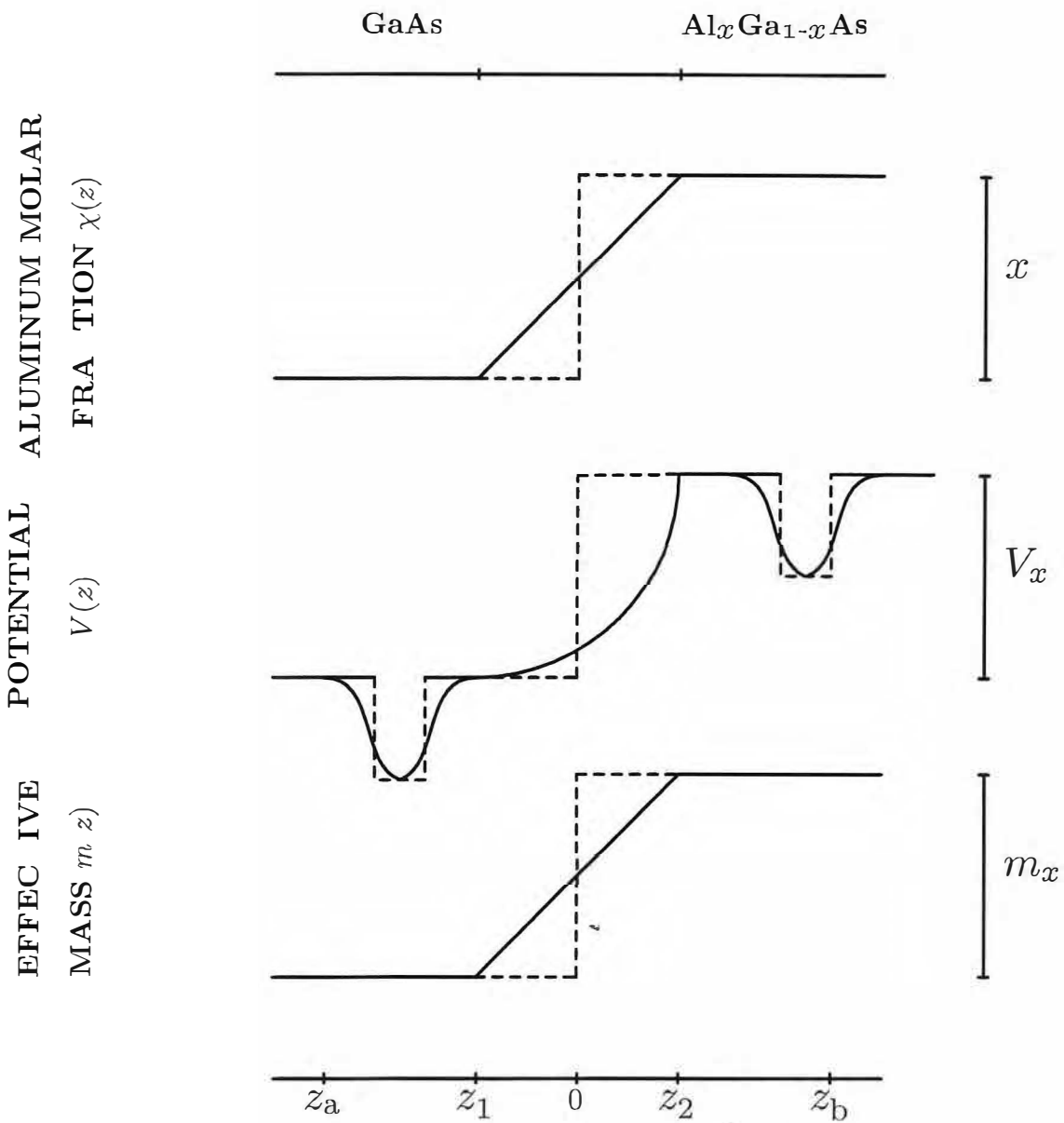


Figura 2.2 - Topo: variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ em uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial $V(z)$ característico de uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ abrupta (pontuada) e não-abrupta (contínua) com impurezas localizadas representadas por um poço quadrado e por um poço gaussiano. Base: variação espacial da massa efetiva $m(z)$ de portadores em uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

2.3. Barreiras abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As simples

Considerando uma hetero-estrutura GaAs/Al_xGa_{1-x} formada por duas camadas de GaAs separada por uma camada de Al_xGa_{1-x}As, devido a diferença entre os gaps do GaAs e Al_xGa_{1-x}As surge uma barreira de potencial na banda de condução da hetero-estrutura. Considerando novamente o caso em que a interface entre GaAs e Al_xGa_{1-x}As é não abrupta e que a fração molar de alumínio varia de forma linear nas interfaces, obtém-se que o conteúdo de alumínio que caracteriza a barreira não-abrupta simples é dado por:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ x(z - z_1)/(z_2 - z_1), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ x(z - z_4)/(z_3 - z_4), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.14)$$

onde os z_i ($i=1,2,3,4$) especificam as bordas das interfaces, e x é a fração molar de alumínio na liga Al_xGa_{1-x}As. Aqui levou-se em conta uma possível assimetria nas interfaces.

Uma representação gráfica da variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ para uma barreira simples GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta é apresentada na Fig. 2.3. Levou-se em conta o fato que as bordas da barreira não-abrupta coincidem com aquelas da barreira abrupta, o que ocorre nos pontos z_i . O potencial que descreve a barreira tem a forma:

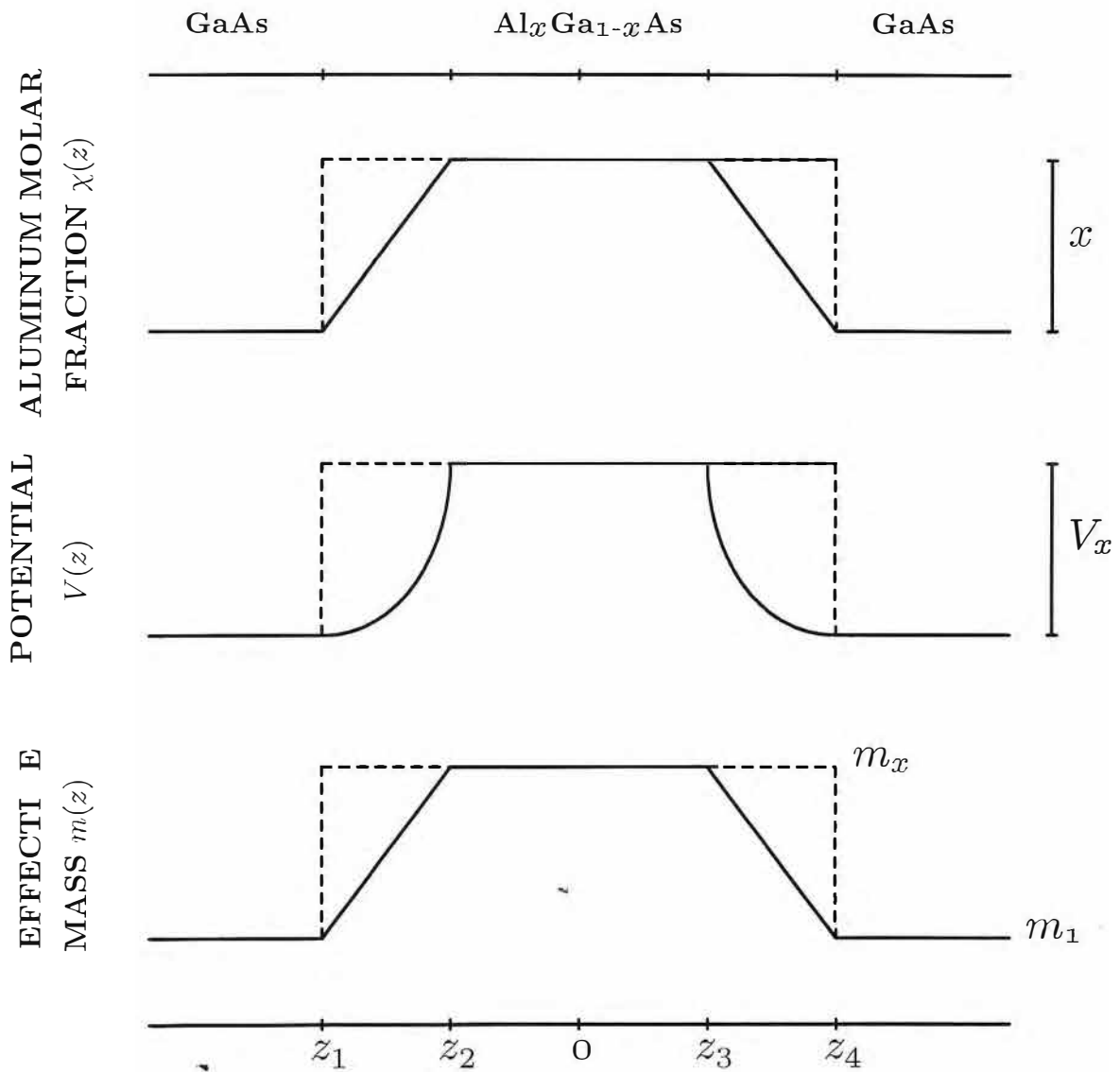


Figura 2.3 - Topo: variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ em uma barreira GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial $V(z)$ característico de uma barreira GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ simples abrupta (pontuada) e não-abrupta (contínua). Base: variação espacial da massa efetiva $m(z)$ de portadores em uma barreira GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

$$\frac{V(z)}{Q} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_0(z_1, z_2) + V_1(z_1, z_2)z + V_2(z_1, z_2)z^2, & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ V_0(z_3, z_4) + V_1(z_3, z_4)z + V_2(z_3, z_4)z^2, & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.15)$$

$$m(z) = \begin{cases} m_1, & z \leq z_1 \\ m_2(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ m_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ m_3(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ m_1, & z \geq z_4 \end{cases} \quad (2.16)$$

onde nas Eqs. (2.15, 2.16) têm-se que:

$$V_0(z_1, z_2) = -\epsilon_1 z_1 \left(\frac{x}{z_2 - z_1} \right) + \epsilon_2 z_1^2 \left(\frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2, \quad (2.17.1)$$

$$V_0(z_3, z_4) = -\epsilon_1 z_4 \left(\frac{x}{z_3 - z_4} \right) + \epsilon_2 z_4^2 \left(\frac{x}{z_3 - z_4} \right)^2, \quad (2.17.2)$$

$$V_1(z_1, z_2) = \epsilon_1 \left(\frac{x}{z_2 - z_1} \right) - 2\epsilon_2 z_1 \left(\frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2 \quad (2.17.3)$$

$$V_1(z_3, z_4) = \epsilon_1 \left(\frac{x}{z_3 - z_4} \right) - 2\epsilon_2 z_4 \left(\frac{x}{z_3 - z_4} \right)^2, \quad (2.17.4)$$

$$V_2(z_1, z_2) = \epsilon_2 \left(\frac{x}{z_2 - z_1} \right)^2 \quad (2.17.5)$$

$$V_2(z_3, z_4) = \epsilon_2 \left(\frac{x}{z_3 - z_4} \right)^2 \quad (2.17.6)$$

$$V_x = \epsilon_1 x + \epsilon_2 x^2; \quad (2.17.7)$$

$$\frac{m_1}{m_0} = \mu_1, \quad (2.18.1)$$

$$\frac{m_2}{m_0} = \mu_1 + \mu_2 x(z - z_1)/(z_2 - z_1), \quad (2.18.2)$$

$$\frac{m_x}{m_0} = \mu_1 + \mu_2 x, \quad (2.18.3)$$

$$\frac{m_3}{m_0} = \mu_1 + \mu_2 x(z - z_4)/(z_3 - z_4). \quad (2.18.4)$$

Utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [35], as equações de Schrödinger que descrevem um elétron numa barreira não-abrupta GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ simples sem a presença de impurezas são:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z \leq z_1 \quad (2.19)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_2(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + QV_{1,2}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad (2.20)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + QV_x\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_2 \leq z \leq z_3 \quad (2.21)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_3(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + QV_{3,4}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_3 \leq z \leq z_4 \quad (2.22)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z_4 \leq z \leq z_5 \quad (2.23)$$

As Eqs. (2.19-2.23) serão resolvidas numericamente no Capítulo 3 considerando a dependência espacial da massa efetiva dos portadores.

2.4. Barreiras abruptas e não-abruptas

GaAs/Al_xGa_{1-x}As simples com impurezas localizadas

Apresentamos nesta Seção o modelo para descrever a existência de impurezas localizadas em barreiras simples GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas. As impurezas são representadas por uma estrutura confinadora no potencial representativo da barreira conforme a Seção 2.2. As impurezas que podem estar presentes nas três regiões GaAs/Al_xGa_{1-x}/GaAs, geram as seguintes expressões para o potencial

$$\frac{V(z)}{Q} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_3, & z_1 \leq z \leq z_2 \\ 0 & z_2 \leq z \leq z_3, \\ V_{lm}(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ V_x, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ V_x - V_3, & z_5 \leq z \leq z_6 \\ V_x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ V_{lm}(z), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ 0, & z_8 \leq z \leq z_9 \\ V_3, & z_9 \leq z \leq z_{10} \\ 0 & z \geq z_{10} \end{cases} \quad (2.24)$$

onde $V_{lm}(z) = V_0(z_l, z_m) + V_1(z_l, z_m)z + V_2(z_l, z_m)z^2$; para $l = \{3, 7\}$ e $m = \{4, 8\}$, V_i ($i = 0, 1, 2, 3$) são dados pelas Eqs.(2.71-2.74) e (2.13) V_3 é o potencial associado a perturbação.

A Fig. 2.4 apresenta uma barreira GaAs/Al_xGa_{1-x} simples abrupta e não-abrupta com a presença de perturbações.

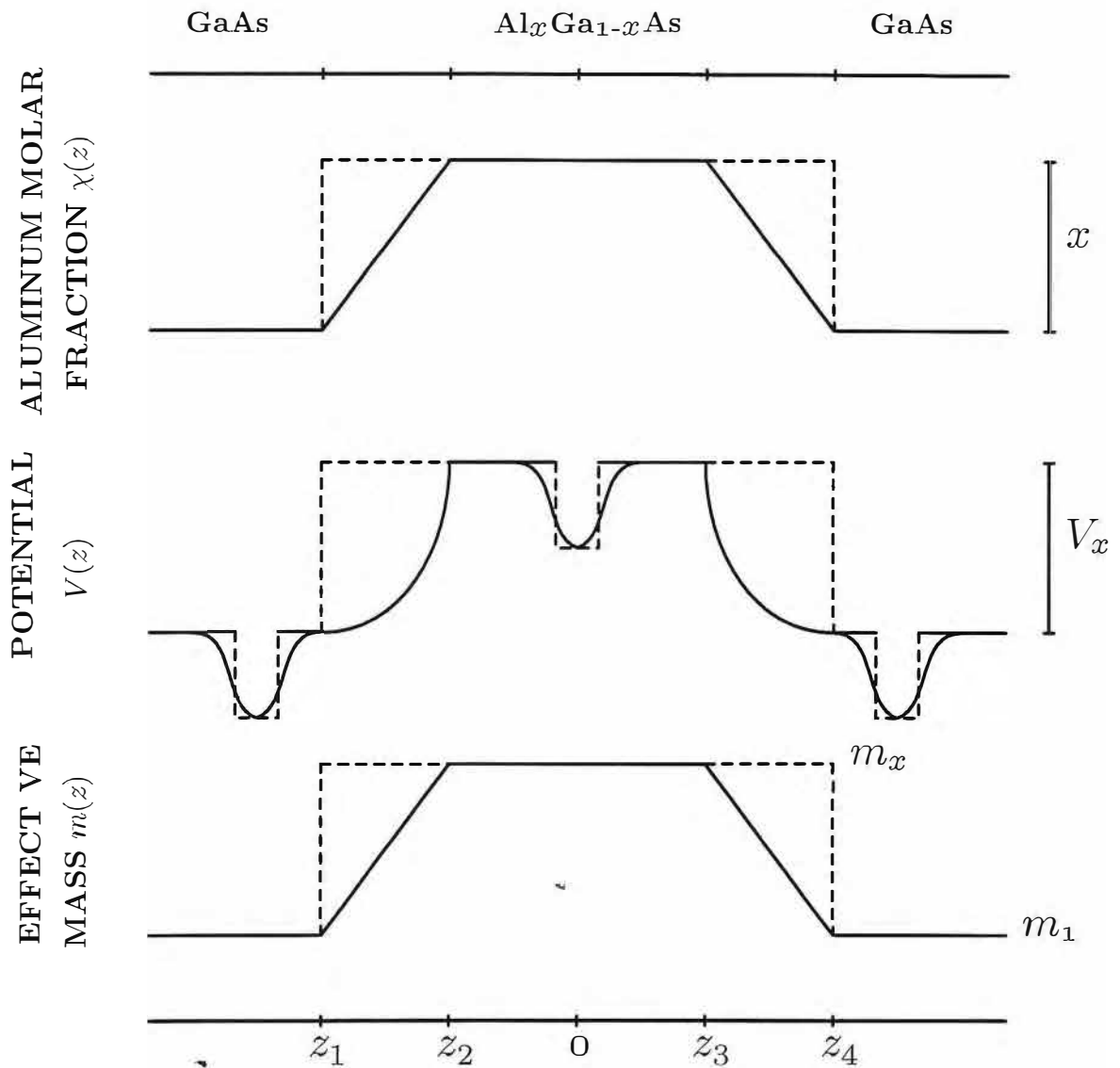


Figura 2.4 - Topo: variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ em uma barreira $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial $V(z)$ característico de uma barreira $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ simples abrupta (pontuada) e não-abrupta (contínua) com impurezas localizadas representadas por um poço quadrado e por um poço gaussiano. Base: variação espacial da massa efetiva $m(z)$ de portadores em uma barreira $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ simples abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

2.5. Barreiras Abruptas e Não-Abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As Duplas

O potencial e a massa efetiva dos portadores numa barreira abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}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:

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ x(z - z_1)/(z_2 - z_1), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ x(z - z_4)/(z_3 - z_4), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ x(z - z_5)/(z_6 - z_5), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ x(z - z_8)/(z_7 - z_8), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ 0, & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.25)$$

onde z_j ($j = 1, \dots, 8$) especificam as bordas das interfaces, e x é a fração molar de alumínio na liga Al_xGa_{1-x}As.

Uma representação gráfica da variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ para uma barreira abrupta e não-abrupta GaAs/Al_xGa_{1-x}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 .

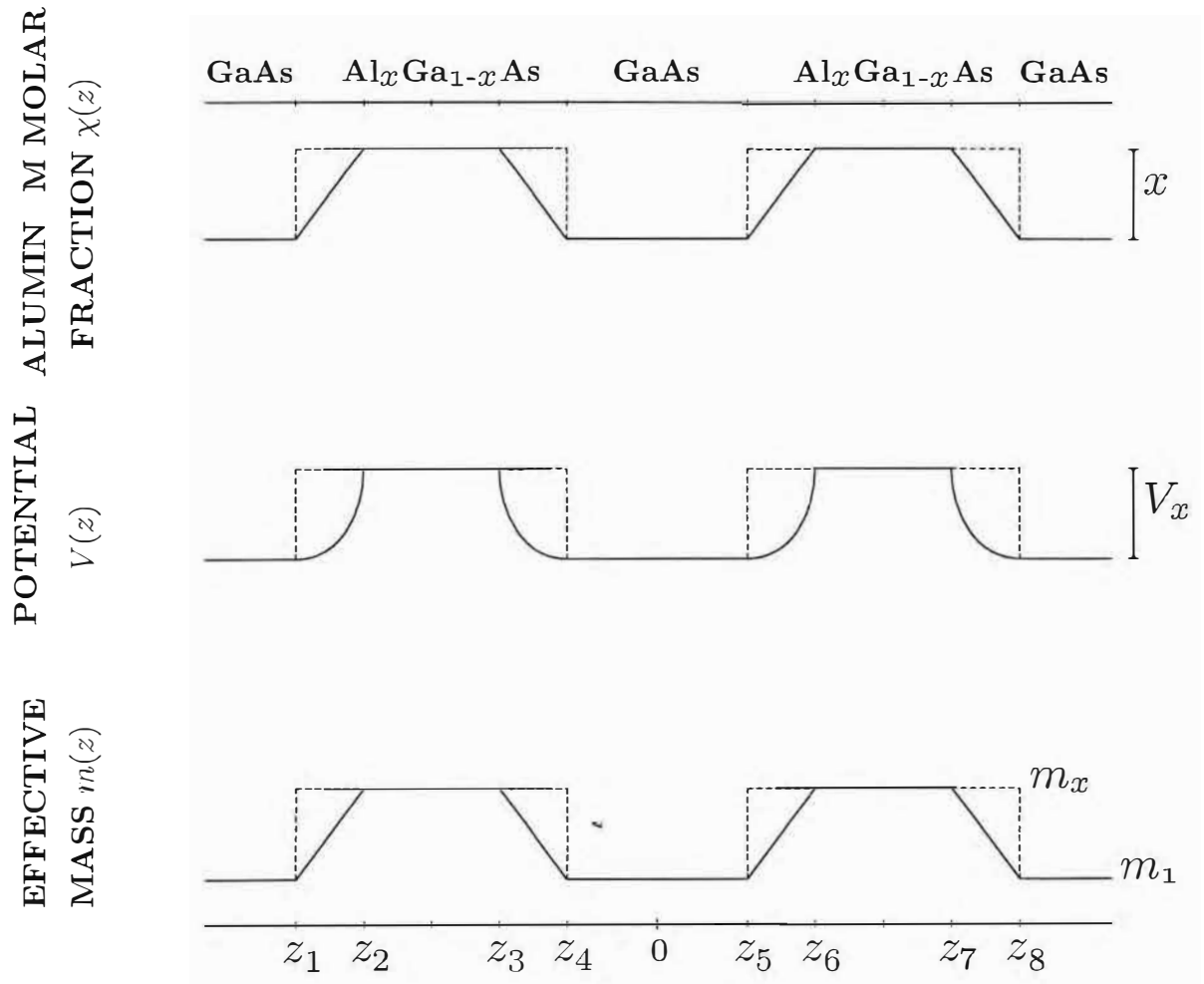


Figura 2.5 - Topo: variação espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ em uma barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variação espacial do potencial $V(z)$ característico de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla abrupta (pontuada) e não-abrupta (contínua). Base: variação espacial da massa efetiva $m(z)$ de portadores em uma barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

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 e 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 dupla GaAs/Al_xGa_{1-x}As não-abrupta são dadas por:

$$\frac{V(z)}{Q} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_{1,2}(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ V_{3,4}(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ V_{5,6}(z), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ V_x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ V_{7,8}(z), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ 0, & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.26)$$

$$m(z) = \begin{cases} m_1, & z \leq z_1 \\ m_2(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ m_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ m_3(z), & z_3 \leq z \leq z_4 \\ m_1, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ m_4(z), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ m_x, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ m_5(z), & z_7 \leq z \leq z_8 \\ m_1, & z \geq z_8 \end{cases} \quad (2.27)$$

onde nas Eqs. (2.26, 2.27) têm-se que:

$$V_{l,m}(z) = V_0(z_l, z_m) + V_1(z_l, z_m)z + V_2(z_l, z_m)z^2 \quad (2.28.1)$$

$$V_0(z_j, z_i) = -\epsilon_1 z_j \left(\frac{x}{z_i - z_j} \right) + \epsilon_2 z_j^2 \left(\frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 2, 6), \quad (2.28.2)$$

$$V_1(z_j, z_i) = \epsilon_1 \left(\frac{x}{z_i - z_j} \right) - 2\epsilon_2 z_j \left(\frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 2, 6), \quad (2.28.3)$$

$$V_2(z_j, z_i) = \epsilon_2 \left(\frac{x}{z_i - z_j} \right)^2, \quad (i = 2, 6), \quad (2.28.4)$$

$$V_x = \epsilon_1 x + \epsilon_2 x^2; \quad (2.28.5)$$

$$\frac{m_1}{m_0} = \mu_{1,\alpha}, \quad (2.29.1)$$

$$\frac{m_i}{m_0} = \mu_{1,\alpha} + \mu_{2,\alpha} \frac{(z - z_{i-1})}{(z_i - z_{i-1})}, \quad (2.29.2)$$

$$\frac{m_x}{m_0} = \mu_1 + \mu_{2,\alpha} x, \quad (2.29.3)$$

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

Utilizando o operador energia cinética de BenDaniel e Duke [35], as equações do tipo Schrödinger que descrevem um elétron numa barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla não-abrupta sem a presença de impurezas localizadas são dadas por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z \leq z_1 \quad (2.30)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_2(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + QV_{1,2}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_1 \leq z \leq z_2 \quad (2.31)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + Q_\alpha V_x \Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_2 \leq z \leq z_3 \quad (2.32)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_3(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + QV_{3,4}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_3 \leq z \leq z_4 \quad (2.33)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z_4 \leq z \leq z_5 \quad (2.34)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_4(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + QV_{5,6}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_5 \leq z \leq z_6 \quad (2.35)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + QV_x \Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_6 \leq z \leq z_7 \quad (2.36)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \{ [m_5(z)]^{-1} \frac{d\Psi(z)}{dz} \} + QV_{7,8}(z)\Psi(z) = E\Psi(z), \quad z_7 \leq z \leq z_8 \quad (2.37)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = E\Psi(z), \quad z \geq z_8 \quad (2.38)$$

As Eqs. (2.30-2.38) serão resolvidas numericamente no Capítulo 3 considerando a dependência espacial da massa efetiva dos portadores.

2.6. Barreiras Duplas abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As com impurezas localizadas

Descreveremos agora as impurezas localizadas em barreiras GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abrupta duplas quando essas são representadas por uma estrutura confinadora no potencial da barreira dupla. As impurezas são colocadas tanto nas regiões GaAs quanto nas Al_xGa_{1-x}As. As expressões para o potencial são dadas por:

$$\frac{V(z)}{Q} = \begin{cases} 0, & z \leq z_1 \\ V_{lm}(z), & z_1 \leq z \leq z_2 \\ V_x, & z_2 \leq z \leq z_3 \\ V_x - V_3, & z_3 \leq z \leq z_4 \\ V_x, & z_4 \leq z \leq z_5 \\ V_{lm}(z), & z_5 \leq z \leq z_6 \\ 0, & z_6 \leq z \leq z_7 \\ V_3, & z_7 \leq z \leq z_8 \\ 0, & z_8 \leq z \leq z_9 \\ V_{lm}(z), & z_9 \leq z \leq z_{10} \\ V_x, & z_{10} \leq z \leq z_{11} \\ V_x - V_3, & z_{11} \leq z \leq z_{12} \\ V_x, & z_{12} \leq z \leq z_{13} \\ V_{lm}(z), & z_{13} \leq z \leq z_{14} \\ 0, & \geq z_{14} \end{cases} \quad (2.39)$$

onde $V_{lm}(z) = V_0(z_l, z_m) + V_1(z_l, z_m)z + V_2(z_l, z_m)z^2$; $l = \{3, 7, 11, 15\}$, $m = \{4, 8, 12, 16\}$, V_i ($i = 0, 1, 2, 3$) são dados pelas Eqs.(2.71-2.74) e (2.13). V_3 é o potencial associado a perturbação.

A Fig.2.6 apresenta uma barreira GaAs/Al_xGa_{1-x}As abrupta e não-abrupta com a presença de perturbações.

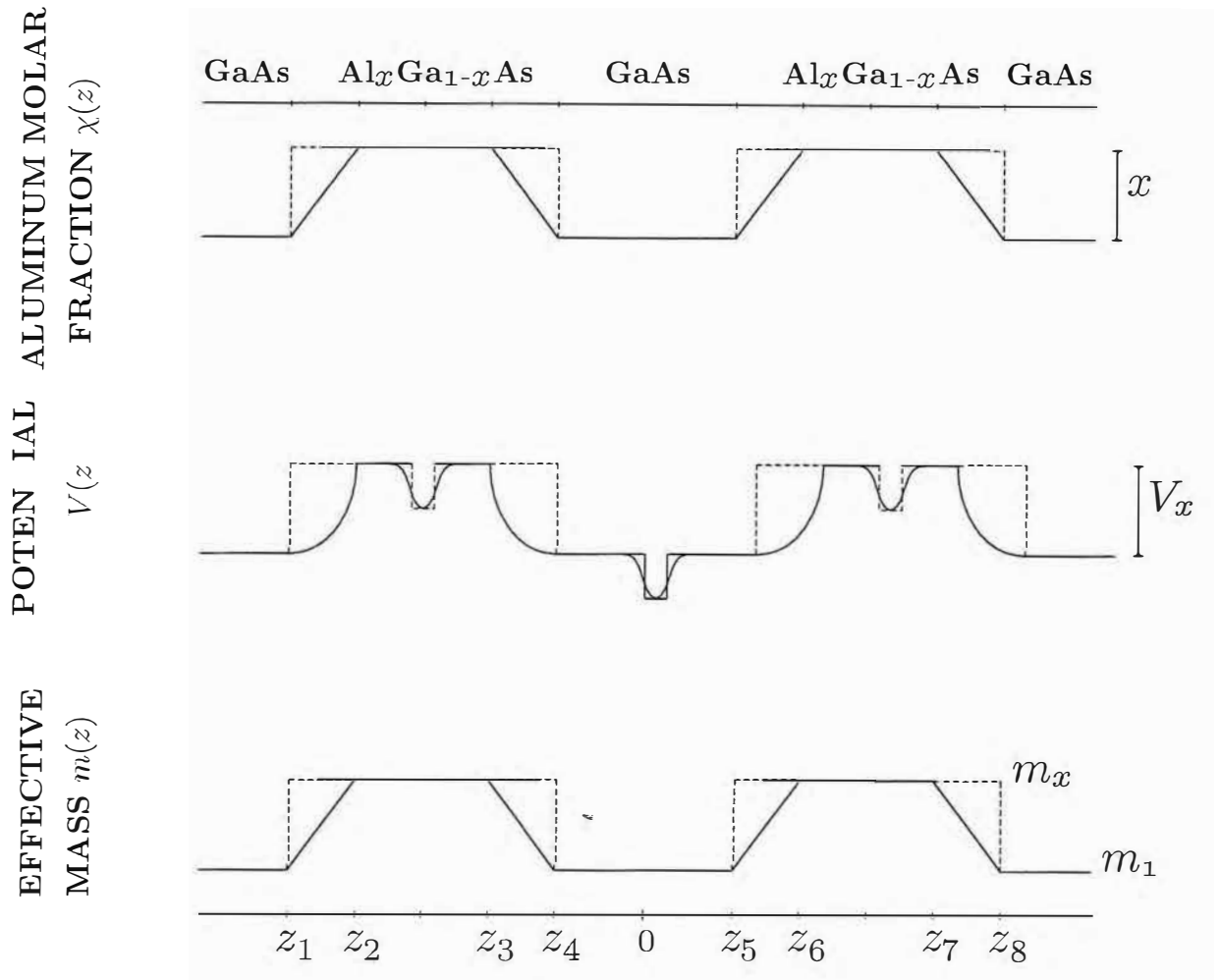


Figura 2.6 - Topo: variaçao espacial da fração molar de alumínio $\chi(z)$ em uma barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua). Meio: variaçao espacial do potencial $V(z)$ característico de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla abrupta (pontuada) e não-abrupta (contínua) com impurezas localizadas representadas por um poço quadrado e por um poço gaussiano. Base: variaçao espacial da massa efetiva $m(z)$ de portadores em uma barreira GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dupla abrupta (tracejada) e não-abrupta (contínua).

CAPÍTULO 3

PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO EM HETERO-JUNÇÕES, BARREIRAS SIMPLES E DUPLAS GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ABRUPTAS E NÃO-ABRUPTAS COM IMPUREZAS LOCALIZADAS

Vários cálculos teóricos [35, 53-58] e resultados experimentais [59-63] têm mostrado que o espalhamento inelástico de portadores com impurezas podem produzir mudanças importantes nas propriedades de tunelamento dos portadores e nas características da corrente de tunelamento em hetero-estruturas semicondutoras. Nos modelos teóricos, estes efeitos foram obtidos considerando a introdução de planos de impureza (profundas ou não e geralmente descritas por potenciais do tipo função delta) ou por modelos *tight binding*.

Usando uma função do tipo delta para descrever centros de espalhamento ressonante e a técnica da matriz de transferência para a realização de cálculos em uma dimensão, Gu *et al.* [54] encontraram que o efeito do espalhamento tende diminuir a corrente de tunelamento, e também deslocar e alargar os picos dos espectros de tunelamento ressonante em estruturas silício-carbeto de silício amorfas. Arsenault e Meunier [55] realizaram cálculos teóricos das propriedades de transmissão de barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com planos de impurezas característicos de níveis profundos (PINPs) localizados nas barreiras. Eles descobriram que o acoplamento entre um PINP e o poço quântico aumenta quando o plano está próximo do centro do poço, o que produz fortes ressonâncias e pode aumentar consideravelmente os picos de ressonâncias das densidades de corrente. Xu e Chen [56] estudaram efeitos de espalhamento no tunelamento ressonante em barreiras duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ colocando um plano de impureza do tipo delta no meio do poço quântico. Com seus cálculos analíticos, eles encontraram que as energias de ressonância são deslocadas para regiões de energia mais elevadas, e que as larguras dos estados de ressonância crescem no que diz respeito aos estados pares, mas não apresenta nenhuma mudança quando se trata de estados ímpares.

Usando um Hamiltoniano *tight binding* para a modelagem de um poço quântico localizado entre duas barreiras, Davidovich e Gornsztejn [35] obtiveram aumento ou redução na densidade da corrente assim como na razão pico-a-vale da mesma em função da energia e da posição da camada de impurezas dentro do poço. Através de um Hamiltoniano de Hubbard, Chen *et al.* [57] estudaram a condutância de uma junção de tunelamento que possui um *cluster* de impurezas. Eles obtiveram que os picos de ressonância na condutância dependem do tamanho e da estrutura dos *clusters*. Sugakov e Yatskevich [58] usaram um modelo *tight binding* para estudar o tunelamento de elétrons através de uma barreira de potencial com níveis de impurezas submetida a um campo elétrico. Eles mostraram que as impurezas podem produzir uma região de resistência diferencial negativa nas características corrente-voltagem da barreira.

Por outro lado, Bastard *et al.* [53] descreveram defeitos de interfaces em poços quânticos semicondutores através de um potencial semi-Gaussiano de raio a e profundidade b , **mesmo reconhecendo que o raio e a profundidade hipotética ainda não estavam disponíveis naquela época**. Contudo, através do emprego recente da microscopia de escaneamento por tunelamento para o estudo de dopantes em GaAs, Johnson *et al.* [32] descreveram a observação de sítios dopadores individuais em GaAs, que foram detectados como protuberâncias com diâmetro de cerca de 2 nm. Zheng *et al.* [10] identificaram e caracterizaram silício como doador substitucional em sítios GaAs, mostrando que sua estrutura eletrônica deslocalizada dá origem a protrusões cuja extensão espacial típica é de cerca de 25 Å na imagem do microscópio de escaneamento por tunelamento.

Visando comparações que serão realizadas posteriormente, a Fig. 3.1 mostra o efeito de interfaces nas propriedades de transmissão de uma heterojunção (a), barreira simples (b) e dupla (c). A presença de interface não-abrupta atenua a abrupticidade do potencial degrau melhorando assim as propriedades de transmissão para heterojunção. No caso da barreira simples, a existência de interfaces não-abruptas faz

com que os picos das curvas de transmissão se desloquem para regiões de mais alta energia e reduz as suas razões pico-a-vale. Para o caso da barreira dupla, as interfaces não-abruptas fazem com que os picos de ressonância sejam deslocados para regiões de menor energia. O deslocamento é maior no caso de ressonâncias de ordem mais elevada, devido ao alargamento do poço de potencial formado pelas barreiras, que faz com que os níveis de energia de ordem mais elevada sejam deslocados mais fortemente.

Os resultados dos cálculos numéricos dos efeitos de impurezas localizadas nas propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas são apresentados neste Capítulo. Inicialmente verificamos o efeito da escolha do potencial para representação da impureza (gaussiano ou quadrado), bem como as modificações causadas pela profundidade e largura do potencial representativo da impureza. A seguir apresentamos os resultados referentes às modificações das propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções (Seção 3.1), barreiras simples (Seção 3.2) e duplas (Seção 3.3) GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas devido a existência de impurezas, conforme os modelos anteriormente apresentados no Capítulo 2.

3.1 Propriedade de transmissão em heterojunções abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As com impurezas localizadas

Os coeficientes de transmissão de elétrons através de heterojunções, GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas com impurezas localizadas em diferentes posições da heterojunção são calculados (ver Fig. 2.2) considerando larguras de 2 - 6 LP (parâmetros de rede do GaAs) para a extensão espacial do potencial representativo da impureza. Tomamos $Q=0.6$ como *band offset* [39], e a fração molar $x=0.30$ na liga Al_xGa_{1-x}As, de modo que o valor do potencial degrau para elétrons seja $V_x=227$ meV.

Uma análise para a escolha do tipo de potencial que venha representar a estrutura confinadora que descreverá a presença da impureza no *bulk* GaAs e Al_xGa_{1-x}As é realizada a partir da Fig. 3.2. Pode-se observar que, os efeitos dos tipos de poço (quadrado e gaussiano) nas propriedades de transmissão diferem apenas quantitativamente um do outro. Portanto há uma equivalência aproximada da representação da impureza pelos dois tipos de potencial, o que nos dá uma indicação de que a forma do poço representativo da impureza não é o parâmetro mais relevante no estudo dos efeitos das mesma nas propriedades de transmissão das hetero-estruturas. As alterações causadas pela presença tanto de um, como de outro poço, na região de GaAs praticamente não modifica as propriedades de transmissão para esse tipo de configuração na hetero-estrutura. Já na região Al_xGa_{1-x}As temos a presença de ressonância, mas que se observa nos dois tipos de representação. Escolhemos a representação gaussiana em todos os resultados deste trabalho, seguindo o modelo de Bastard *et al.* [53].

Nos resultados que irao se seguir, avaliamos o comportamento do coeficiente de transmissão em diferentes situações, como a localização da impureza na hetero-estrutura, bem como sua largura e a profundidade (determinado por seu estado ligado). Nos basearemos nos seguintes aspectos que deverão ser levados em conta como

análise para o coeficiente de transmissão T como função da energia normalizada. O coeficiente de transmissão cresce a partir do zero e flutua entre máximos ($T=1$) a medida que crescemos a razão (E/V_x). Os picos de ressonância surgiram quando as ondas incidentes e refletidas estiverem em fase e a interferência entre uma e outra seja construtiva.

As Figs. 3.3 e 3.4 mostram o efeito da localização da impureza nas propriedades de transmissão através de uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Quando a impureza está distante 6 LP da interface verificamos que a presença da impureza influencia muito pouco as propriedades de transmissão para baixas energias (~ 1.25) da razão (E/V_x) depois disso há uma redução na transmissão no caso em que a impureza está localizada somente na parte esquerda da heterojunção. Quando localizamos a impureza na região $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ começa a surgir picos de ressonâncias nas curvas de transmissão, para impurezas mais rasas, nas regiões de baixa energia com a presença de impurezas em GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ surge um pico adicional, significando dizer que as ondas incidentes e refletidas estão em fase para esta configuração.

Quando diminuimos a distância da impureza à interface para 4 LP temos uma melhora nos coeficientes de transmissão e um aumento dos picos de ressonância, isso se deve ao fato da distância entre a impureza e à interface ser um número inteiro de comprimento de onda de de Broglie, de modo que a onda incidente e a onda que tenha sido refletida pelo potencial degrau fiquem em fase e fortifiquem uma a outra. Podemos observar também que para essa nova configuração o pico de ressonância que existia quando as impurezas estavam localizadas nas regiões de GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{x-1}\text{As}$ desaparecem, havendo uma atenuação das curvas de transmissão. O fato do aumento na intensidade dos coeficientes de transmissão ocorrer somente para energias mais baixas, deve-se ao comprimento de onda associado aos elétrons dependerem da energia com que os mesmos incidem sobre o potencial degrau.

Na Fig. 3.5 fixamos a distância da impureza à interface (6 LP) e observamos o comportamento das curvas de transmissão quando se varia a largura do poço de

potencial representativo da impureza, e constatamos que para as diferentes larguras o que causa maior modificação nas propriedades de transmissão foram as impurezas estreitas e profundas.

Já na Fig. 3.6 temos duas impurezas de larguras 2 LP cada uma e fazemos variar a distância entre elas, ou seja queremos verificar como se comportará as curvas de transmissão quando aumentamos a distância entre as impurezas. O que se observa quando as impurezas estão muito próximas é o fato do elétron praticamente não perceber duas impurezas. A medida que vamos aumentando a distância entre elas, começa a surgir picos de ressonância que também vão ficando mais pronunciados a medida que se vai aumentando a profundidade dos poços representativos das impurezas.

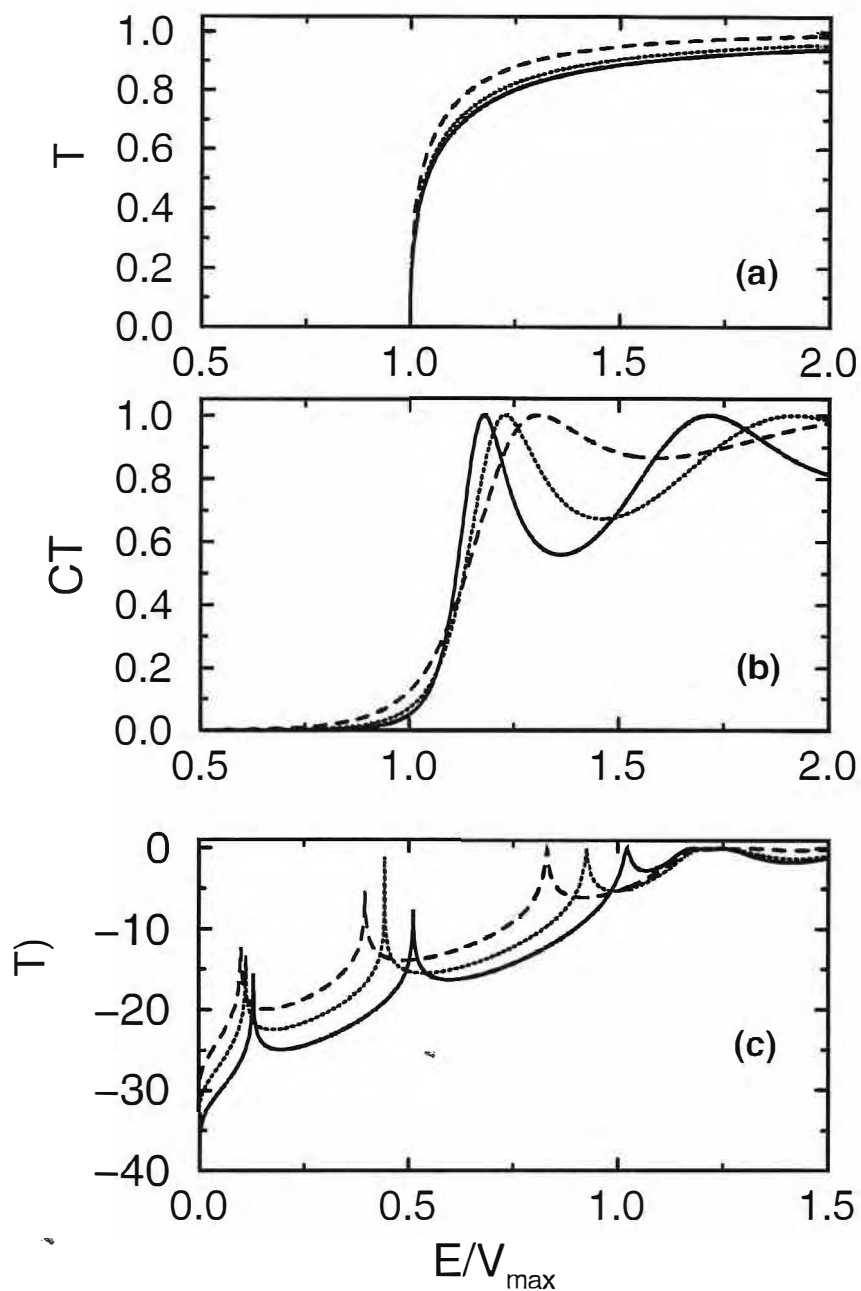


Figura 3.1 - Coeficiente de transmissão de elétrons para uma: (a) heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta (contínua) e não-abrupta com interfaces de 2 LP (pontuada) e 4 LP (tracejada); (b) barreira simples GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta (contínua) e não-abrupta com interfaces de 2 LP (pontuada) e 4 LP (tracejada); (c) barreira dupla GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta (contínua) e não-abrupta com interfaces de 2 LP (pontuada) e 4 LP (tracejada). As barreiras e os poços abruptos têm larguras de 100 Å.

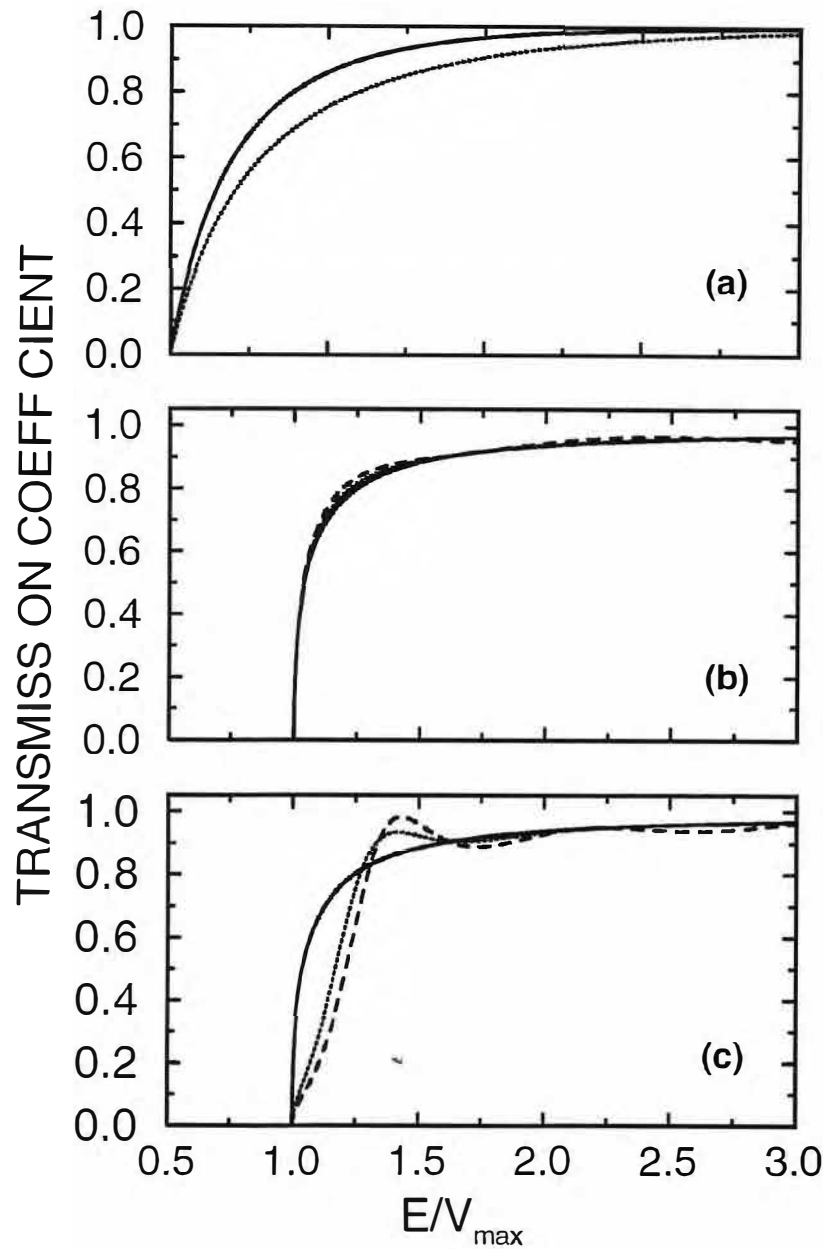


Figura 3.2 - Coeficiente de transmissão de elétrons para: (a) um poço quadrado (contínua) e um poço gaussiano (tracejada) em GaAs; (b) uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta com impureza representada por um poço quadrado (contínua) e por um poço gaussiano (tracejada) distante 6 LP à esquerda da heterojunção abrupta; (c) uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta com impureza representada por um poço quadrado (contínua) e por um poço gaussiano (tracejada) distante 6 LP à direita da heterojunção abrupta. Os estados fundamentais dos poços possuem níveis de energia de -30 meV .

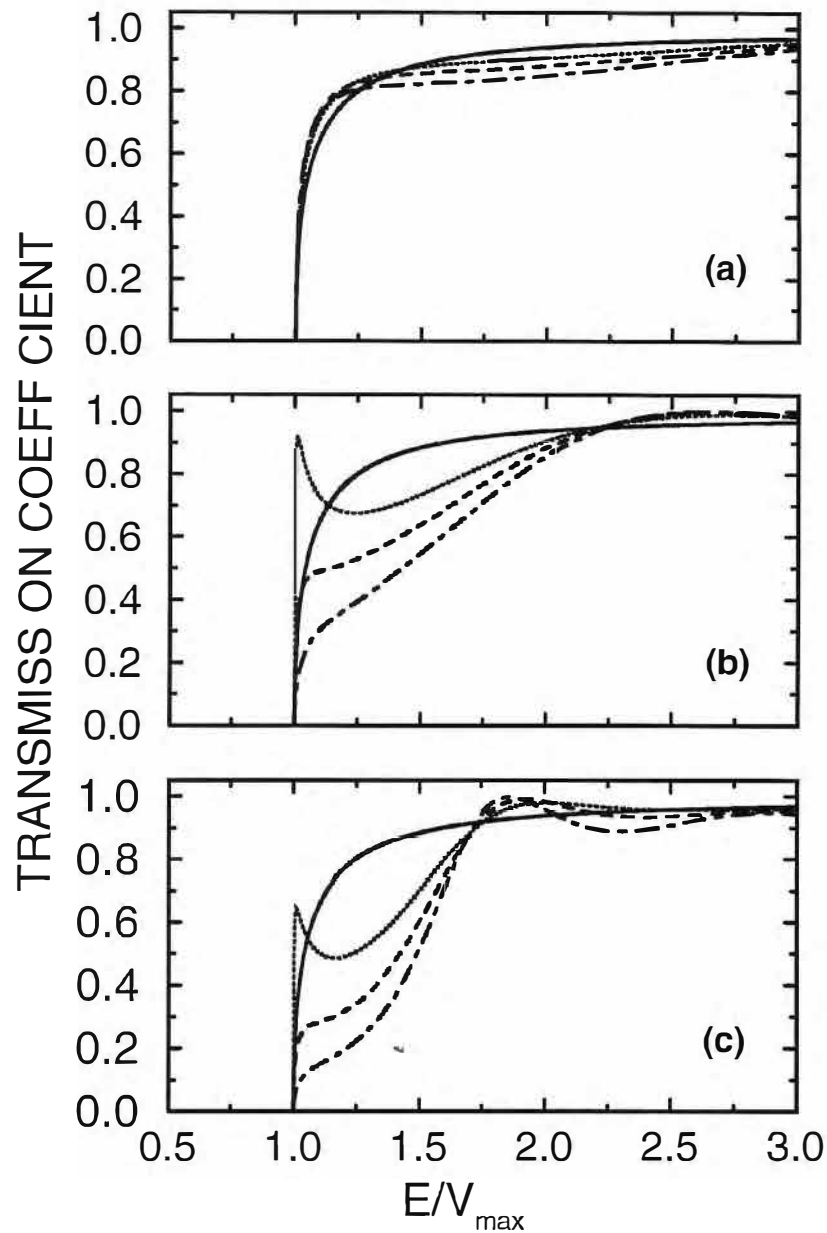


Figura 3.3 - Coeficiente de transmissão de elétrons para uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta : (a) com impureza gaussiana à esquerda da heterojunção; (b) com impureza gaussiana à direita da heterojunção; (c) com impureza gaussiana à esquerda e à direita da heterojunção. As distâncias do poço gaussiano à heterojunção é 6 LP, e a largura do poço é 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma heterojunção abrupta sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab. 2.1.

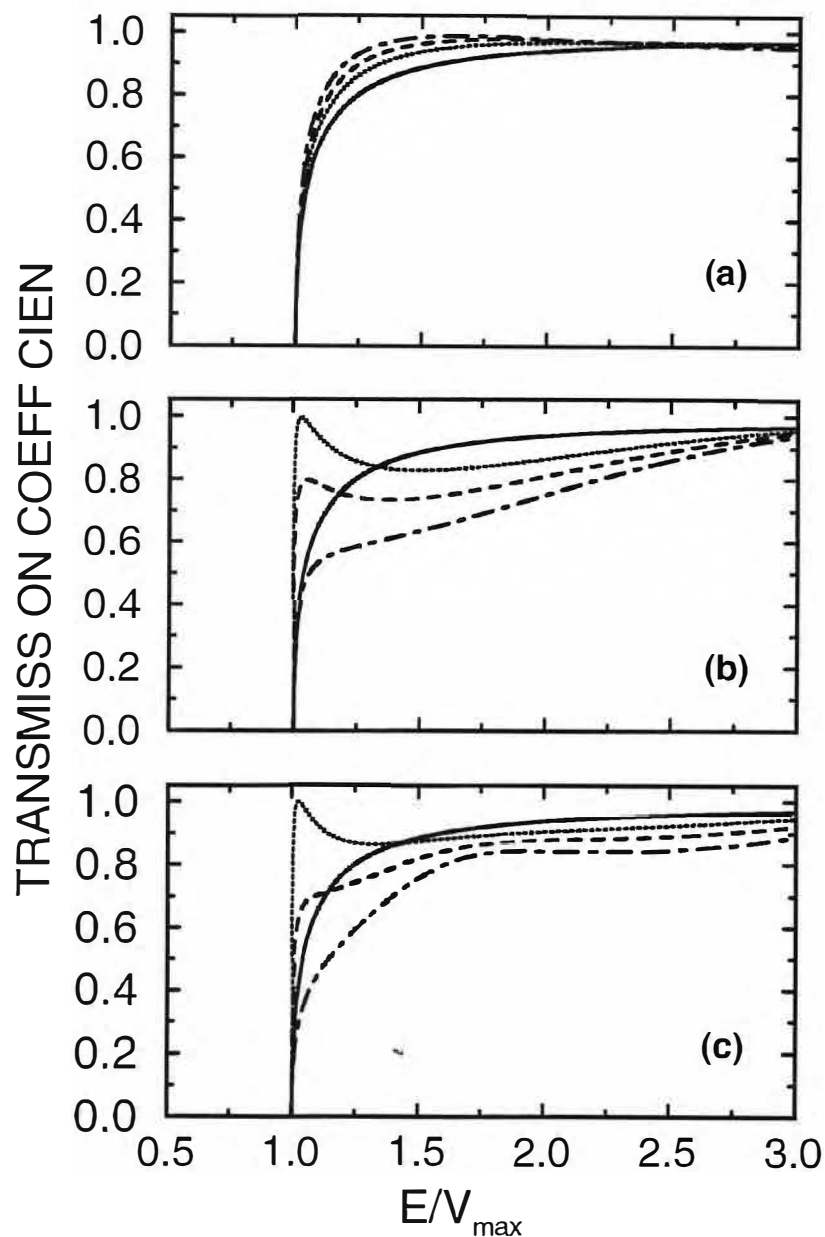


Figura 3.4 - Coeficiente de transmissão de elétrons para uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta : (a) com impureza gaussiana à esquerda da heterojunção; (b) com impureza gaussiana à direita da heterojunção; (c) com impureza gaussiana à esquerda e à direita da heterojunção. A distância do poço gaussiano à heterojunção é 4 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma heterojunção abrupta sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab. 2.1.

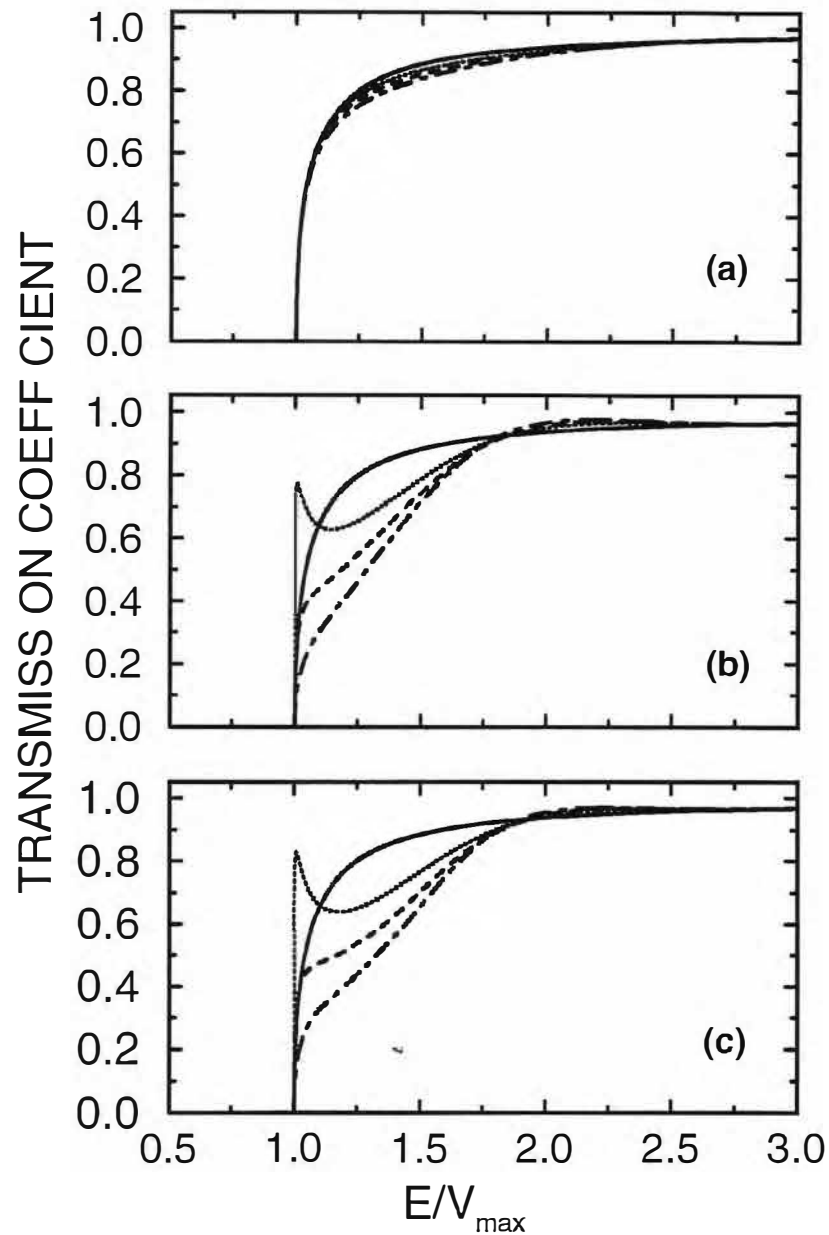


Figura 3.5 - Coeficiente de transmissão de elétrons para uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ abrupta : (a) com impureza gaussiana à esquerda da heterojunção; (b) com impureza gaussiana à direita da heterojunção; (c) com impureza gaussiana à esquerda e à direita da heterojunção . A distância da poço gaussiano à heterojunção é 6 LP, e a largura do poço 4 LP. O coeficiente de transmissão de uma heterojunção abrupta sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab. 2.1.

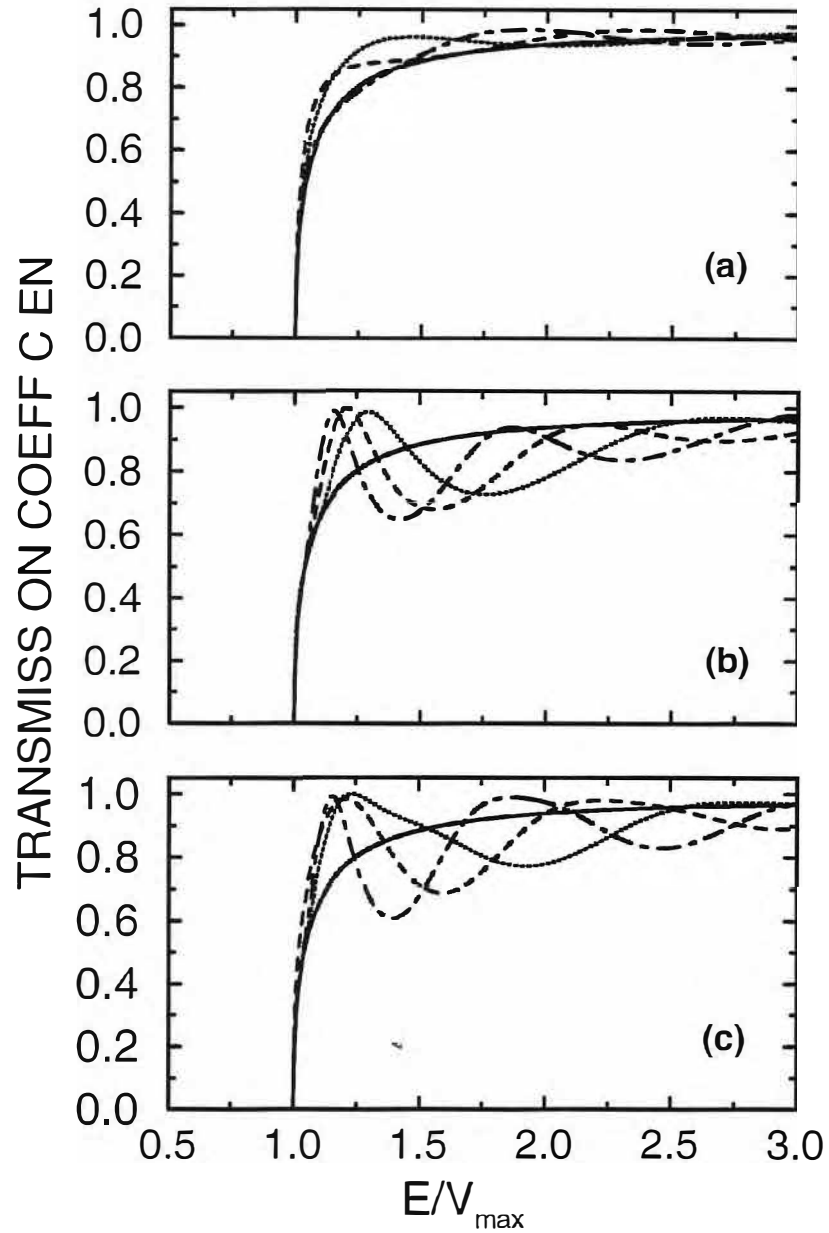


Figura 3.6 - Coeficiente de transmissão de elétrons para uma heterojunção GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$: (a) com duas impurezas gaussianas à esquerda da heterojunção abrupta; (b) com duas impurezas gaussianas à direita da heterojunção abrupta; (c) com duas impurezas gaussianas à esquerda e à direita da heterojunção abrupta. Distância do primeiro poço à interface 4 LP. A distância entre os poços gaussianos são 6 LP (pontuada), 8 LP (tracejada) e 10 LP (tracejada-pontuada), e a largura da impureza 2 LP. Os coeficiente de transmissão de uma heterojunção abrupta sem impureza está incluído para comparação (contínua). O níveis de energias das impurezas são -5.8 meV. A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab. 2.1.

3.2 Propriedade de transmissão em barreiras GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ simples abruptas e não-abruptas com impurezas localizadas

Coeficiente de transmissão de elétrons através de barreiras simples, GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ abruptas e não-abruptas com impurezas localizadas em diferentes posições da barreira são calculados (ver Fig. 2.4). Como na Seção anterior, larguras de 2 - 6 LP (parâmetros de rede) foram consideradas para a extensão espacial do potencial representativo da impureza. Tomamos a fração molar $x=0.30$ na liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ neste caso, o valor do potencial da barreira para elétrons é $V_x=227$ meV com *band offset* $Q=0.6$ [39], esses valores foram considerados em todos os resultados deste Capítulo. Tomamos as largura interfaciais 0 - 4 LP e a largura da barreira abrupta como sendo 100\AA .

A Fig. 3.7 e 3.8 mostra o coeficiente de transmissão de elétrons através de barreiras abruptas e não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ simples com impurezas localizadas à esquerda e à direita da interface distante 4 LP da interface. O que se observa é uma redução da razão pico-a-vale nas barreiras abruptas, que vai desaparecendo a medida que as interfaces aumentam, ficando inclusive maior quando se tem interface com 4 LP, pois a medida que se vai aumentando as interfaces vai se perdendo a cooperação entre as ondas incidentes e refletidas pelas barreiras para energias do elétron maior que do que a altura da barreira ($E \geq V_x$). Já na região de tunelamento observa-se um efeito contrário, pois a presença da interface e o aparecimento da impureza, melhora o efeito de tunelamento na barreira, pois com a mudança do comprimento de onda associado ao elétron há um favorecimento para que esse tūnele. As Figs. 3.7 e 3.8 são idênticas e isso implica que tanto faz uma impureza está localizada à esquerda ou à direita da interface, (simetria com relação ao posicionamento da impureza) de modo que as propriedades de transmissão não mudam. Os picos de transmissão ficam inalterados.

A Fig. 3.9 mostra mais claramente o que foi dito no parágrafo anterior, só que

com duas impurezas localizadas à esquerda e à direita da interface. Nas barreiras abruptas há uma redução da razão pico-a-vale e uma mudança no comprimento de onda associada ao elétron. Em consequência do aparecimento de duas impurezas e mais o efeito interfacial, temos uma associação de tal modo a colaborar com a passagem do elétron pela barreira, quando ele a energia ($E \leq V_x$). Pode-se notar também que há apenas um deslocamento dos picos de transmissão para região de maior energia bem como um aumento da razão pico-a-vale, a medida que se vai tomando interfaces mais largas.

Quando temos a mesma configuração da Fig. 3.9 e aumentamos apenas a distância da impurezas a interface para 6 LP Fig. 3.10 o que há é uma perda dos efeitos de tunelamento e dos deslocamentos dos picos de transmissão, ficando esses picos praticamente coincidindo com o das barreiras sem impurezas. Observa-se da Fig.3.10 que novamente esses efeitos são maiores para o caso de barreiras com interface de 4 LP. Notamos também que surge um estreitamento dos picos de transmissão e o aumento acentuado da razão pico-a-vale.

Investigando agora o efeito da largura impureza (4 LP) Fig. 3.11 para a configuração da Fig. 3.9 vemos que a região de tunelamento ($E \leq V_x$) desaparece e ao contrário da Fig. 3.9 há um aumento da razão pico-a-vale. Quanto aos picos de ressonância estes coincidem com aqueles de uma barreira simples sem impurezas.

A Fig. 3.12 mostra uma impureza localizada no centro de barreira simples, a impureza faz com os picos de ressonância na região de tunelamento ($E \leq V_x$) se desloquem para região de menor energia por consequência do estreitamento da barreira de potencial. Há aumento das relações pico-a-vale. Para ($E \geq V_x$) os picos de ressonância ficam inalterados.

Com a impurezas no centro à esquerda ou à direita da barreira Fig. 3.13 e 3.14 respectivamente predomina o efeito de tunelamento causado pela impureza no meio da barreira, mas os picos de ressonância para ($E \geq V_x$) agora se deslocam para a

região de maior energia devido ao aparecimento das impurezas no GaAs. As razões pico-a-vale permanecem inalteradas com relação à Fig. 3.12 e o comportamento das curvas de transmissão é análogo para as Fig. 3.13 e 3.14 conforme discutidos acima.

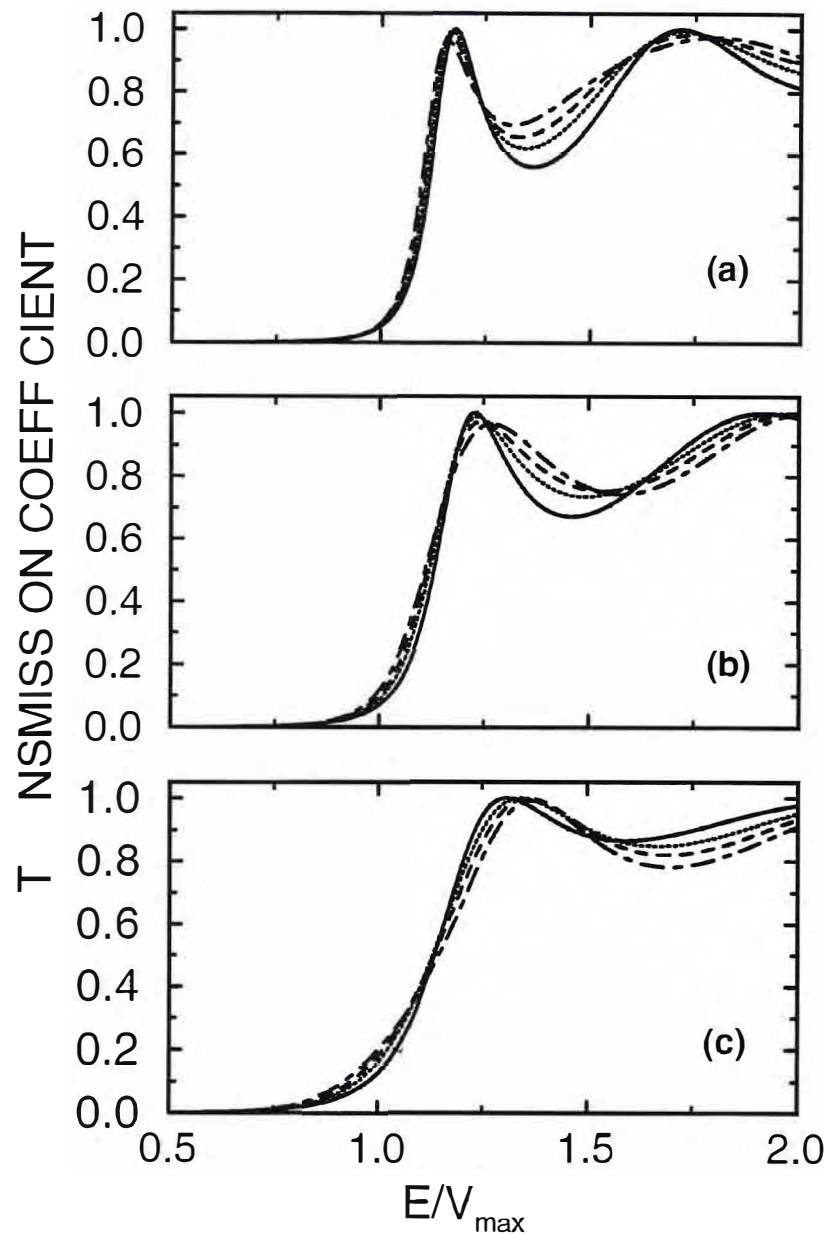


Figura 3.7 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana à esquerda da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana à esquerda da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana à esquerda da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 4 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

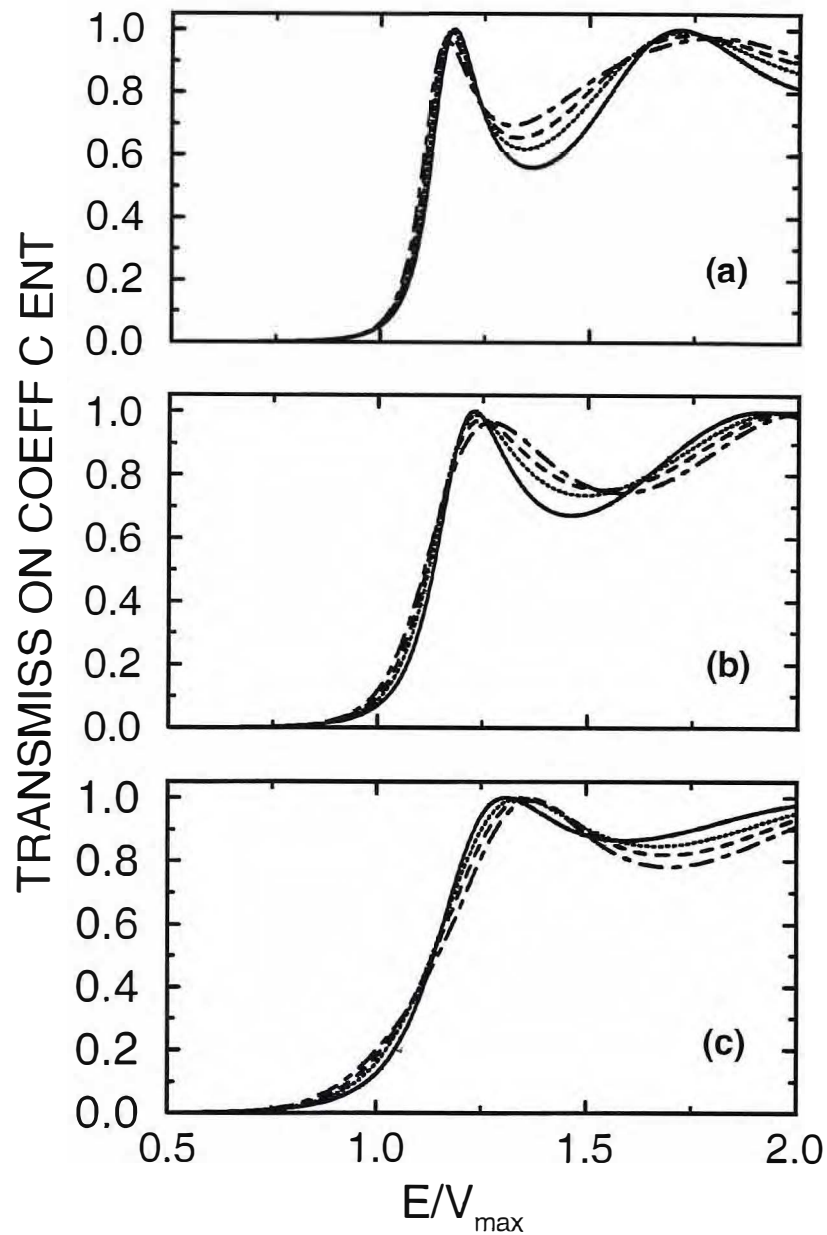


Figura 3.8 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana à direita da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana à direita da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana à direita da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 4 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

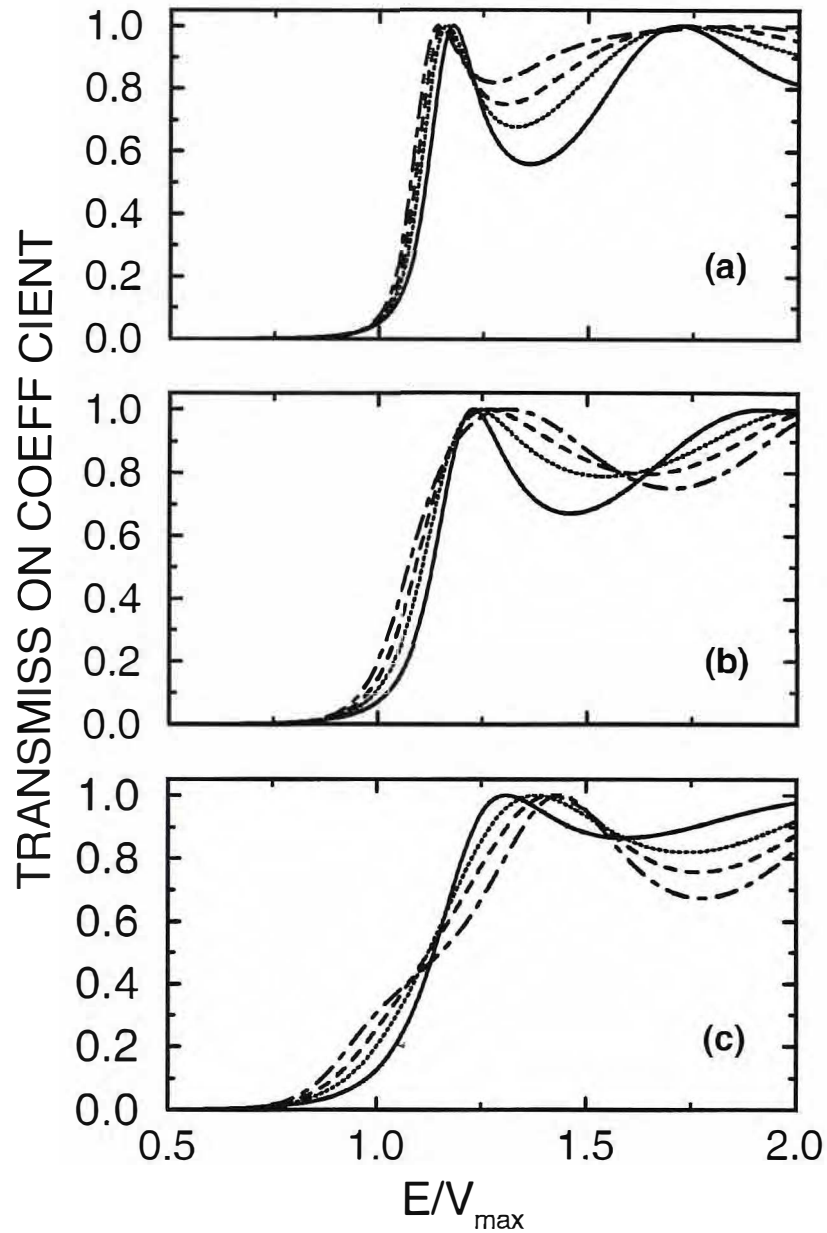


Figura 3.9 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 4 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

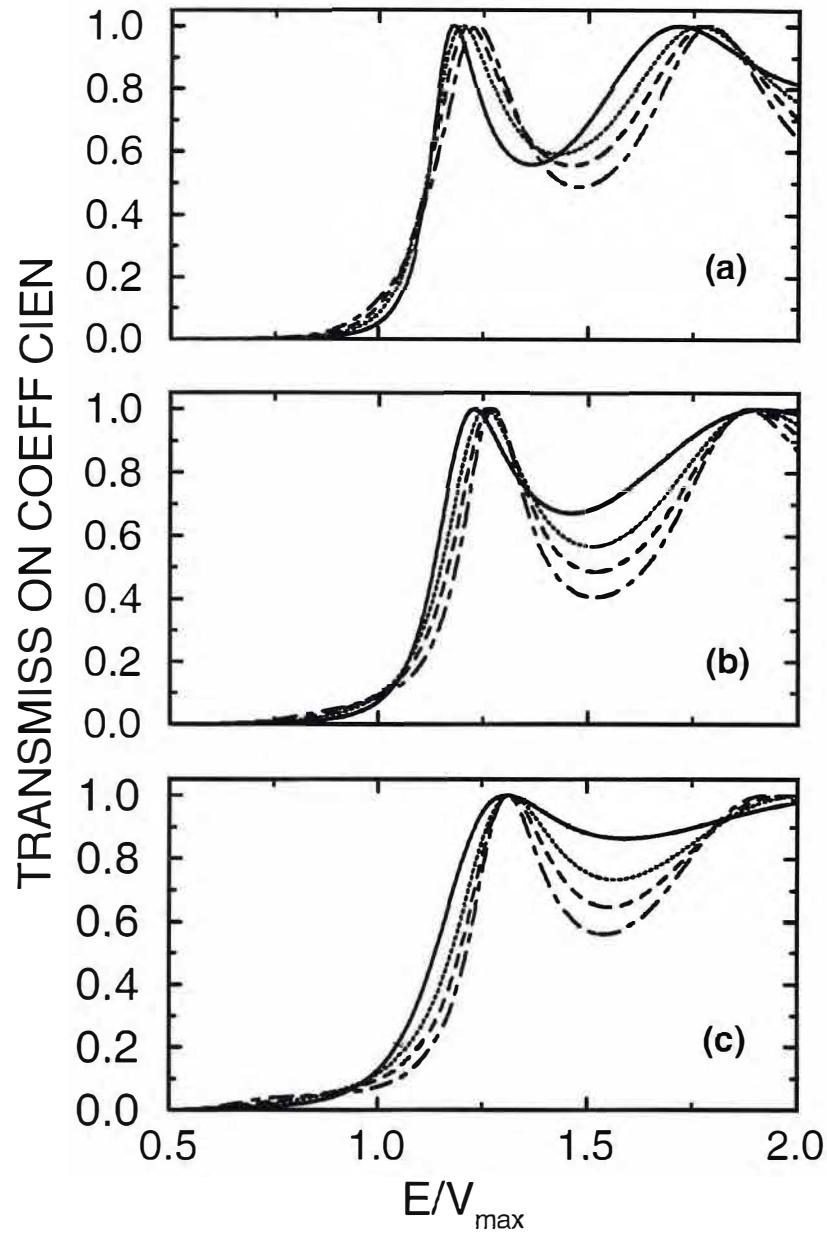


Figura 3.10 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 6 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

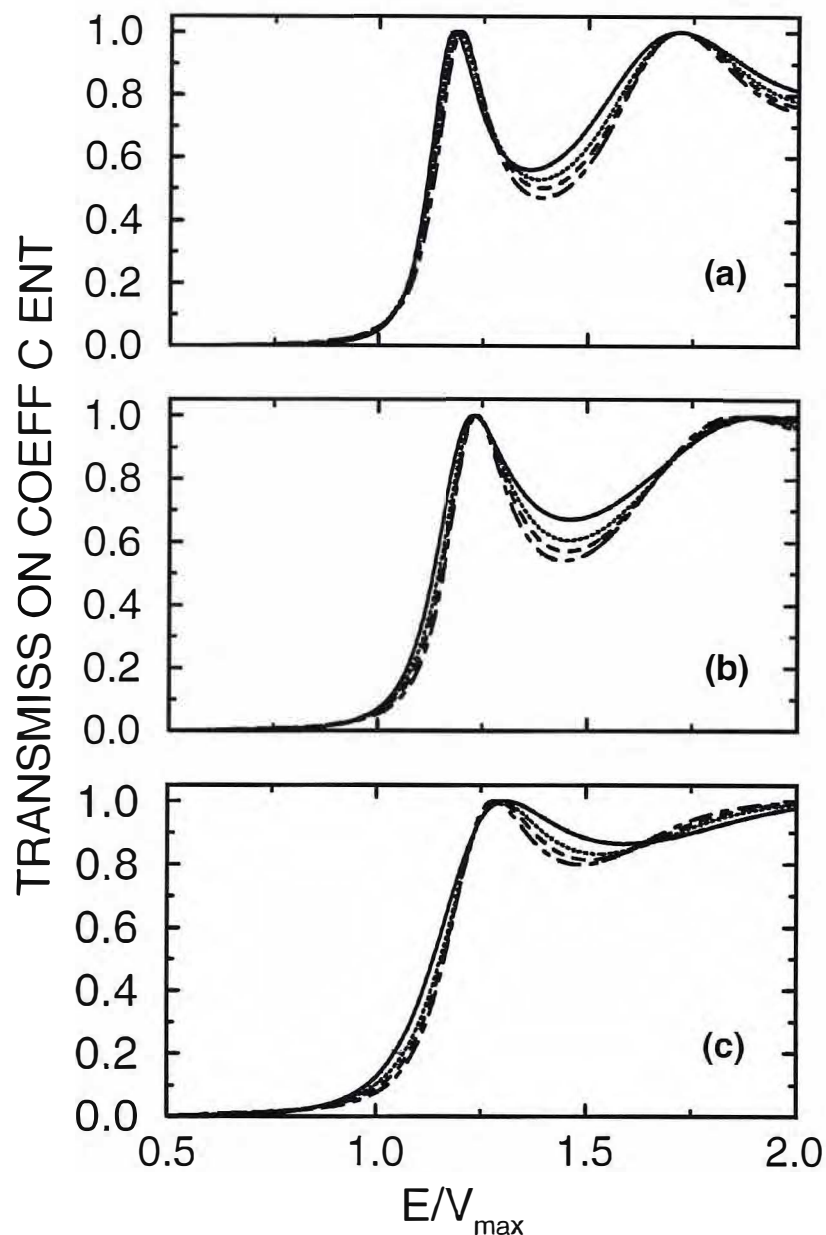


Figura 3.11 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana à direita e à esquerda da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 4 LP, e a largura do poço 4 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

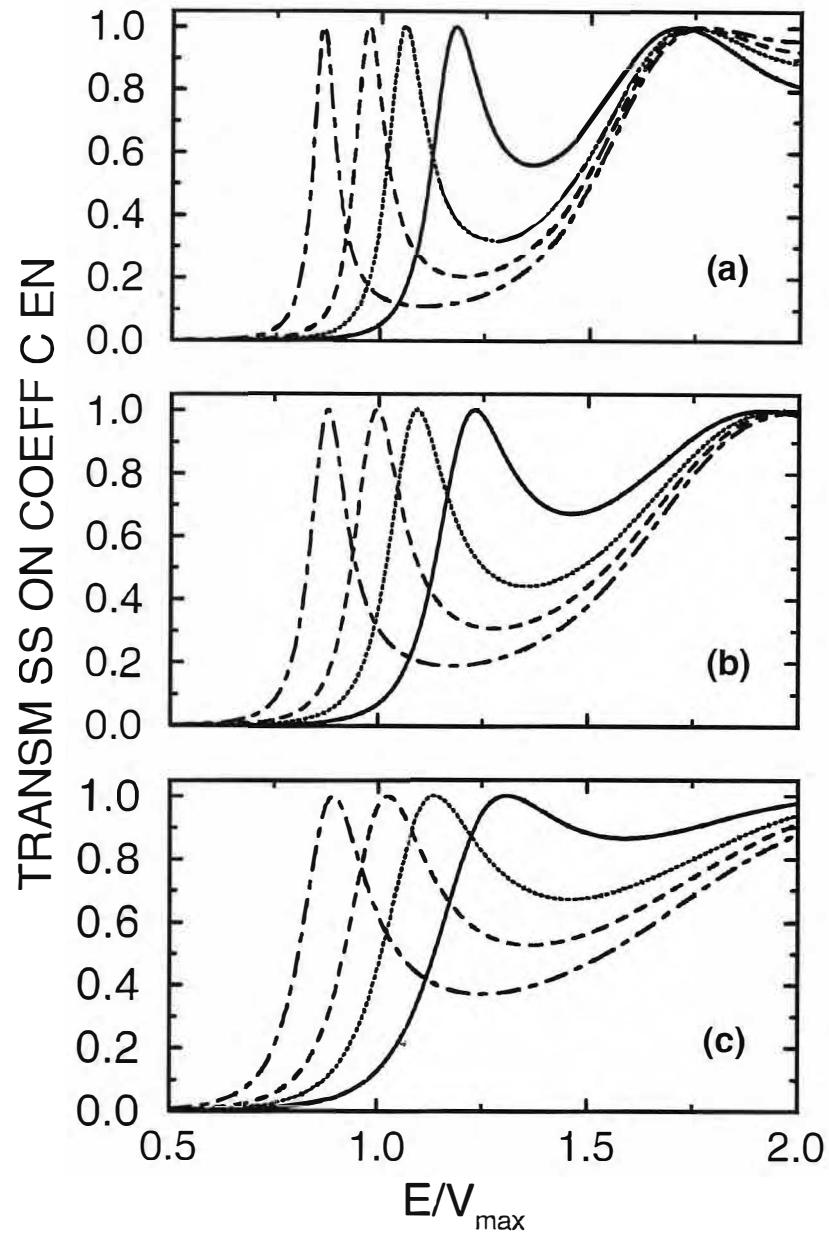


Figura 3.12 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana no centro da barreira; (b) não-abrupta com interfaces (2 LP) e impureza gaussiana no centro da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana no centro da barreira. A largura do poço gaussiano (2 LP). O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

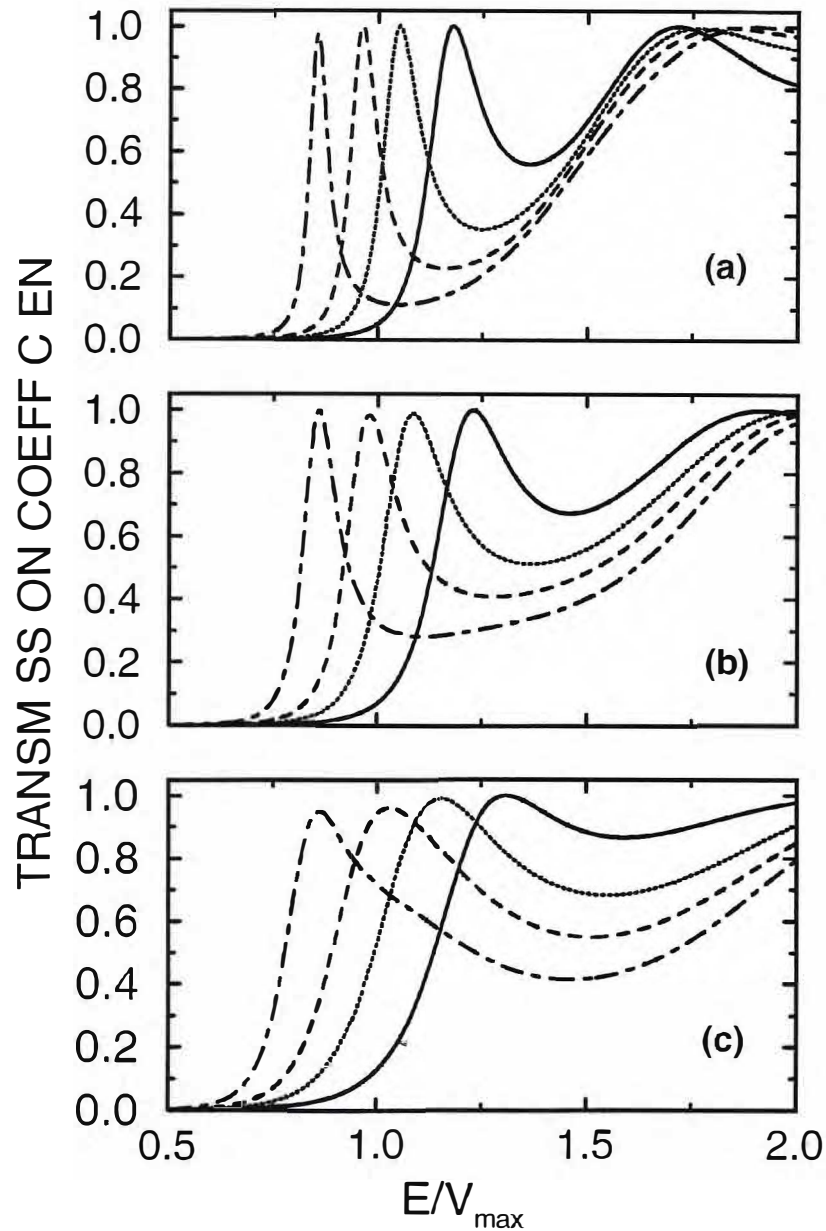


Figura 3.13 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana no centro e à esquerda da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana no centro e à esquerda da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana no centro e à esquerda da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 4 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

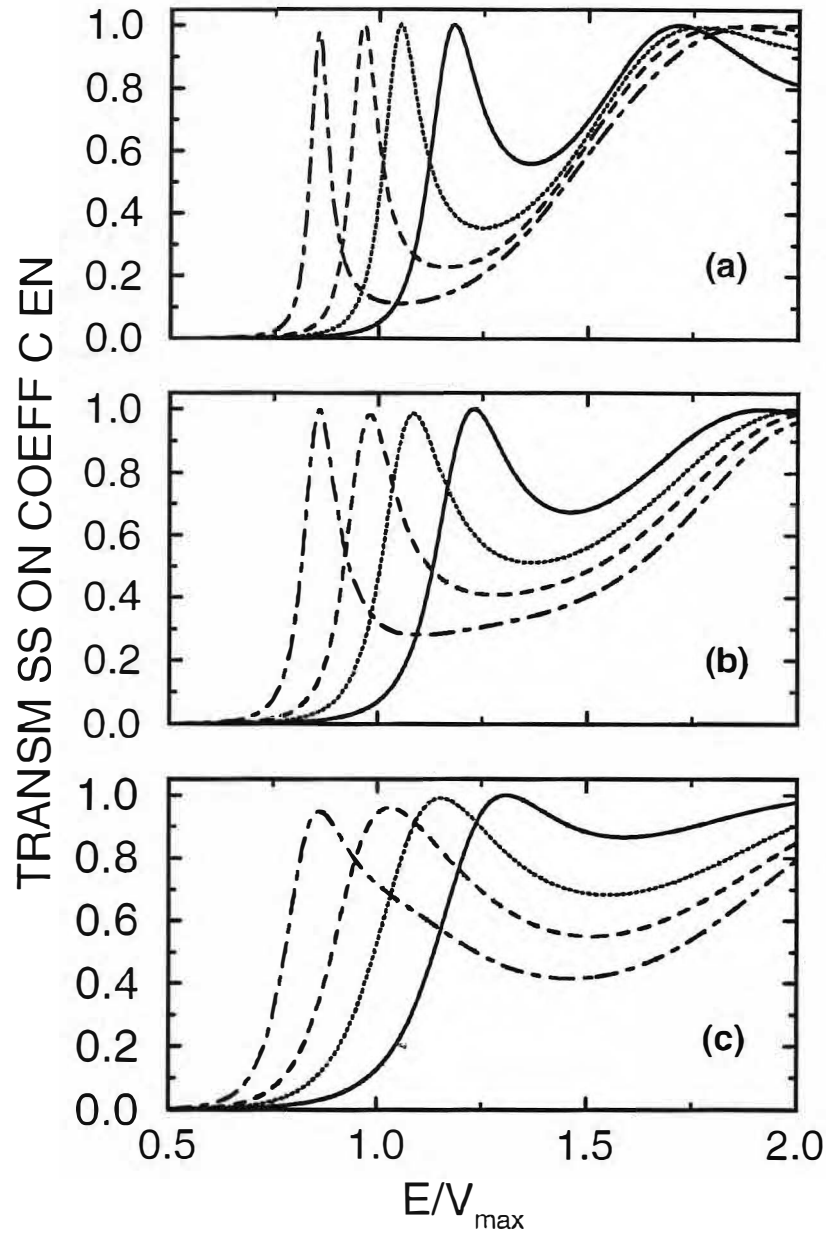


Figura 3.14 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ simples: (a) abrupta com impureza gaussiana no centro e à direita da barreira; (b) não-abrupta com interface (2 LP) e impureza gaussiana no centro e à direita da barreira; (c) não-abrupta com interface (4 LP) e impureza gaussiana no centro e à direita da barreira. A distância do poço gaussiano à barreira é 4 LP, e a largura do poço 2 LP. O coeficiente de transmissão de uma barreira sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

3.3 Propriedade de transmissão em barreiras abruptas e não-abruptas GaAs/Al_xGa_{1-x}As duplas com impurezas localizadas

Barreiras duplas semicondutoras possuem importantes aplicações tecnológicas como, por exemplo, em transistores de tunelamento ressonante [67]. Como consequência de suas suas aplicações as barreiras semicondutoras duplas são um dos tipos de hetero-estruturas mais frequentemente estudados. No modelo do tunelamento ressonante sabe-se que os níveis de energia do poço quântico localizado entre as barreiras estão diretamente relacionados com os picos de ressonância dos portadores que tunelam por entre as barreiras.

Coefficiente de transmissão de elétrons através de barreira duplas, GaAs/Al_xGa_{1-x}As abruptas e não-abruptas com impurezas localizadas em diferentes posições da barreira são calculados (ver Fig. 2.6). Como na Seção anterior, larguras de 2 - 6 LP (parâmetros de rede) foram consideradas para a extensão espacial do potencial representativo da impureza. Tomamos a fração molar $x=0.30$ na liga Al_xGa_{1-x}As neste caso, o valor do potencial da barreira para elétrons é $V_x=227$ meV com *band offset* $Q=0.6$ [39], esses valores foram considerados em todos os resultados deste Capítulo. Tomamos as largura interfaciais 0 - 4 LP e a largura das barreiras e poços abruptos como sendo 100Å.

A Fig. 3.15 mostra o coeficiente de transmissão de elétrons com uma impureza localizada no centro da primeira barreira, tomando-se as três larguras interfaciais 0 - 4 LP. Pode se notar que os dois primeiros picos de ressonância coincidem, havendo apenas um pequeno deslocamentos do pico de transmissão de ordem mais elevada para região de menor energia. Esse comportamento é mais perceptível no caso abrupto pois com o estreitamento da barreira, devido ao aparecimento das interfaces e surgimento de um poço de potencial no meio da barreira há uma possibilidade maior do elétron tunelar por essa barreira, ficando o mesmo menos ligado. Já no caso abrupto a largura da barreira ainda é larga o suficiente para o elétron não tunelar, e o papel da

impureza nesse caso é de ligar mais o elétron ao poço de potencial.

Salientamos ainda que estamos interessado apenas nas região dos estados ligados do poço formado pela barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, haja vista que tomamos a análise apenas para E/V_x menor que a unidade.

A Fig. 3.16 mostra o coeficiente de transmissão de elétrons com uma impureza localizada no centro da segunda barreira, tomando-se as três larguras interfaciais 0 - 4 LP. Pode se notar um comportamento análogo ao descrito para a Fig. 3.15, pois houve apenas um inversão do posicionamento da impureza, ficando o elétron sob as mesmas condições do caso anterior.

Já na Fig 3.17 temos as impurezas localizadas no centro das duas barreiras, os níveis de energia mais profundos ainda continuam inalterados, mas há um deslocamento maior do pico de ressonância de ordem mais elevada e novamente a presença da impureza tem uma contribuição no sentido de ligar mais o elétron, (caso abrupto) que com a presença das interfaces pois a interação com a impureza não é compensada pelo efeito de tunelamento quando os elétrons se encontram no poço formado pelas barreiras.

Como no modelo do tunelamento ressonante proposto por Chang, Esaki e Tsu [68] se considera que a probabilidade de tunelamento do portador através de uma barreira dupla, semicondutora cresce de forma ressonante quando a energia dos portadores que tunelam é próxima daquela dos níveis de energia do poço formado pelas barreiras. É de se esperar que a presença de uma impureza representada por uma estrutura confinadora no meio do poço quântico altere de maneira mais significativa o posicionamento dos picos de transmissão. É exatamente o que nos mostra a Fig. 3.18. Há um deslocamento dos níveis de ordem mais elevada e um desaparecimento do pico de energia de menor ordem, para impurezas mais profundas.

As Figs. 3.18 e 3.19 mostram o efeito de impureza de larguras 2 e 4 LP no centro

de um poço quântico formado pelas barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. O que se observa nesse caso é que impurezas profundas fazem desaparecer os níveis de energia de ordem mais baixa e desloca apenas os picos de ordem mais elevada, ficando o pico intermediário inalterado devido a paridade da função de onda. Os deslocamentos dos picos de ordem mais elevada é tanto maior quanto maior for a largura interfacial.

O efeito do deslocamento da impureza no poço faz quebrar a simetria da função de onda e os picos que serão agora deslocados são os picos intermediário ficando os níveis de energia de ordem mais elevada inalterados como se observa nas Figs. 3.20 e 3.21 para as impurezas de larguras 2 e 4 LP. Nota-se também que os deslocamentos dos picos se dá de forma menos acentuada.

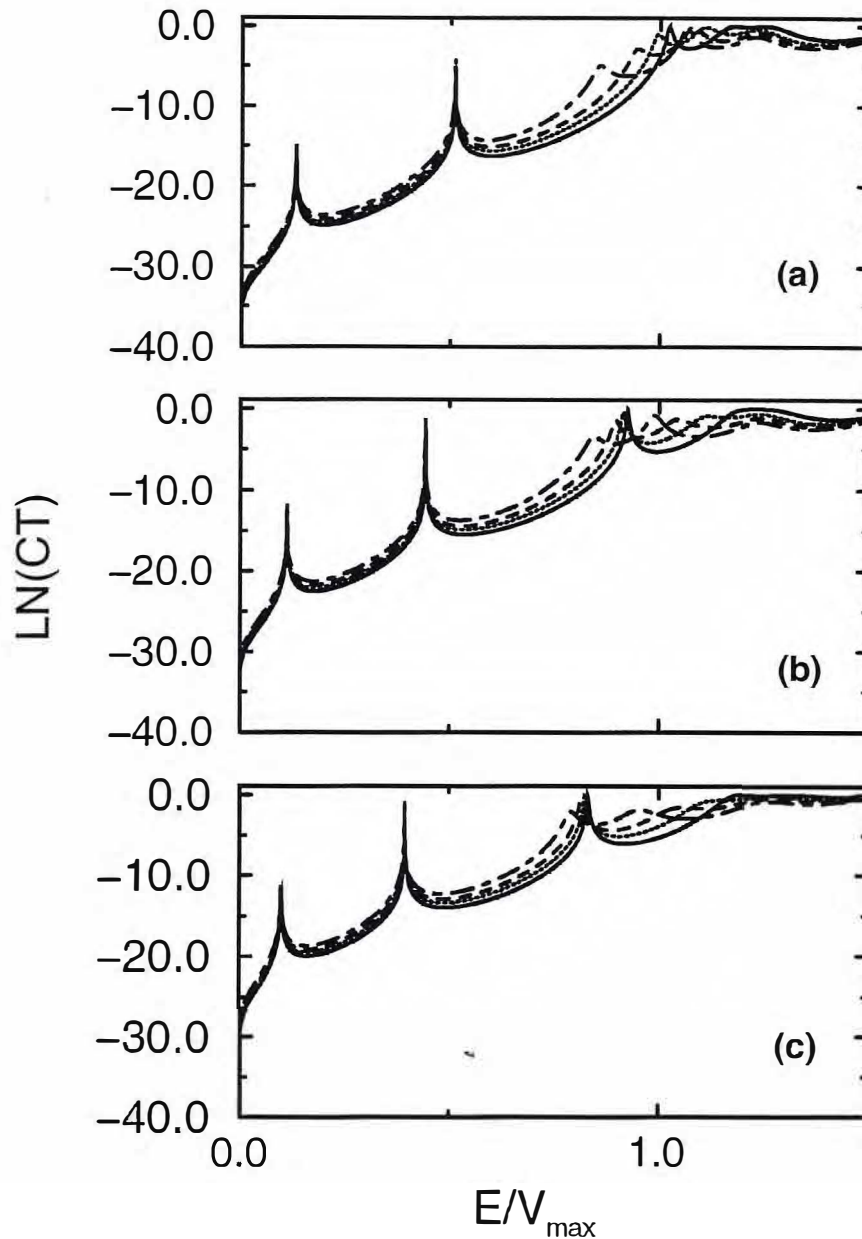


Figura 3.15 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) com impureza gaussiana no centro da primeira barreira abrupta; (b) com impureza gaussiana no centro da primeira barreira não-abrupta com interface (2LP); (c) com impureza gaussiana no centro da primeira barreira não-abrupta com interface (4LP). Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 2 LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

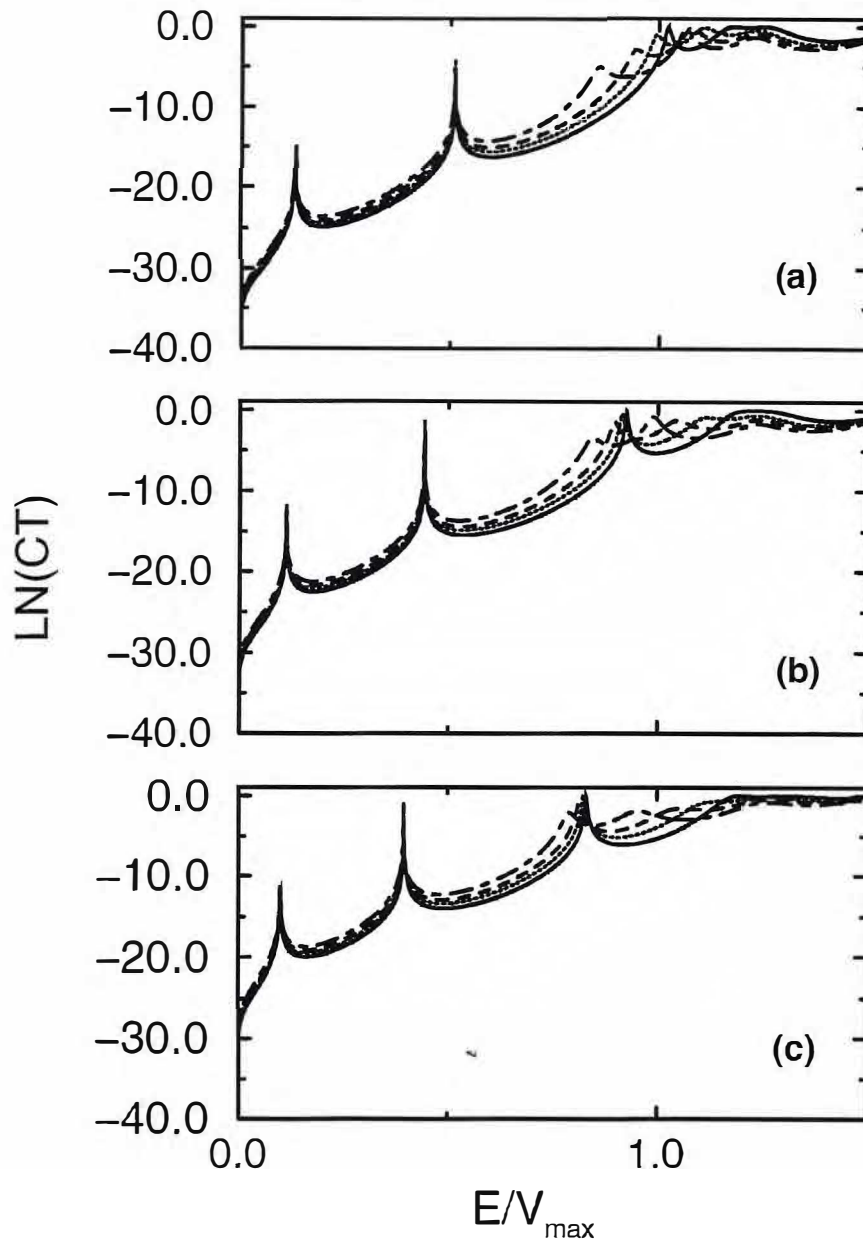


Figura 3.16 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) com impureza gaussiana no centro da segunda barreira abrupta; (b) com impureza gaussiana no centro da segunda barreira não-abrupta com interface (2LP); (c) com impureza gaussiana no centro da segunda barreira não-abrupta com interface (4LP). Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 2 LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

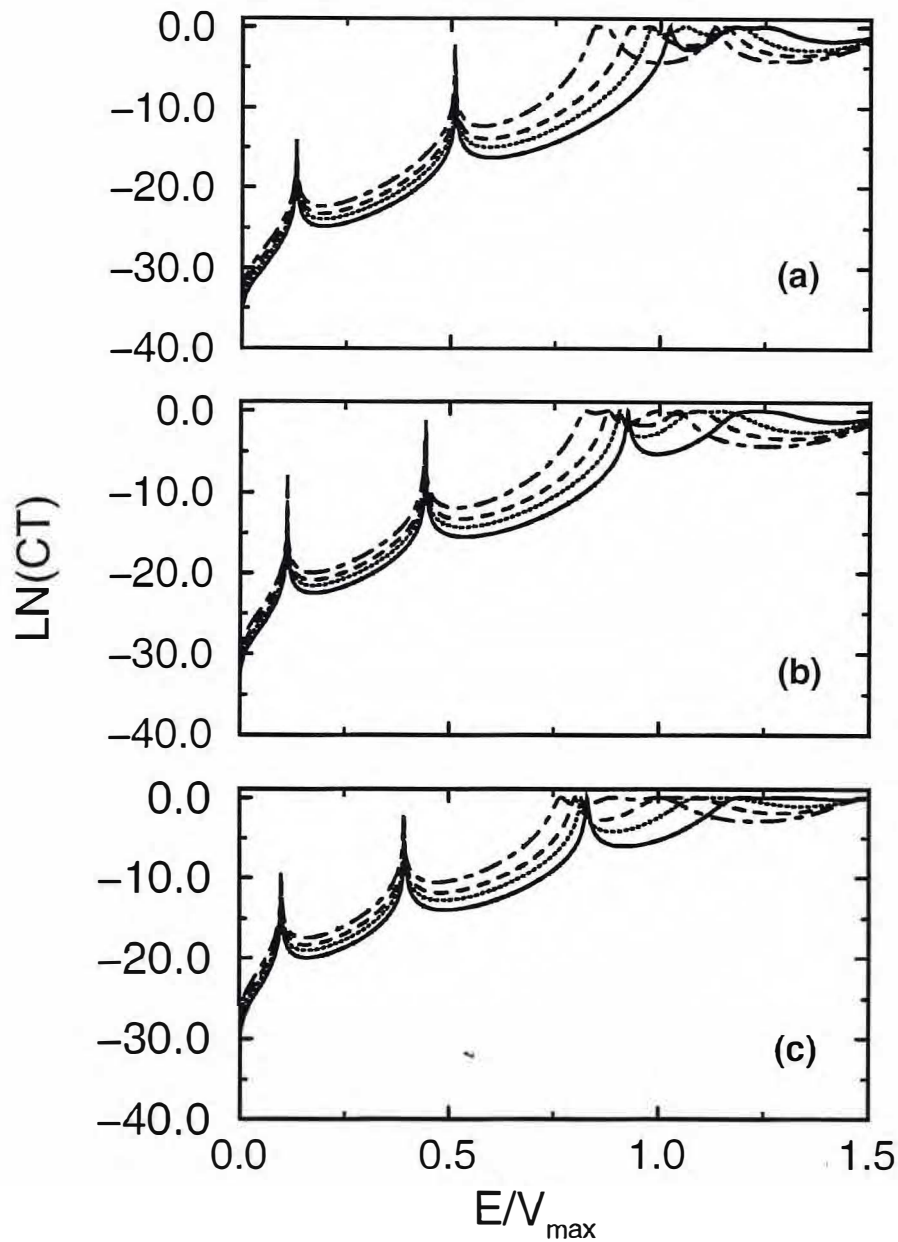


Figura 3.17 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) com impureza gaussiana no centro das barreiras abruptas; (b) com impureza gaussiana no centro das barreiras não-abruptas com interface (2LP); (c) com impureza gaussiana no centro das barreiras não-abruptas com interface (4LP). Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 2 LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

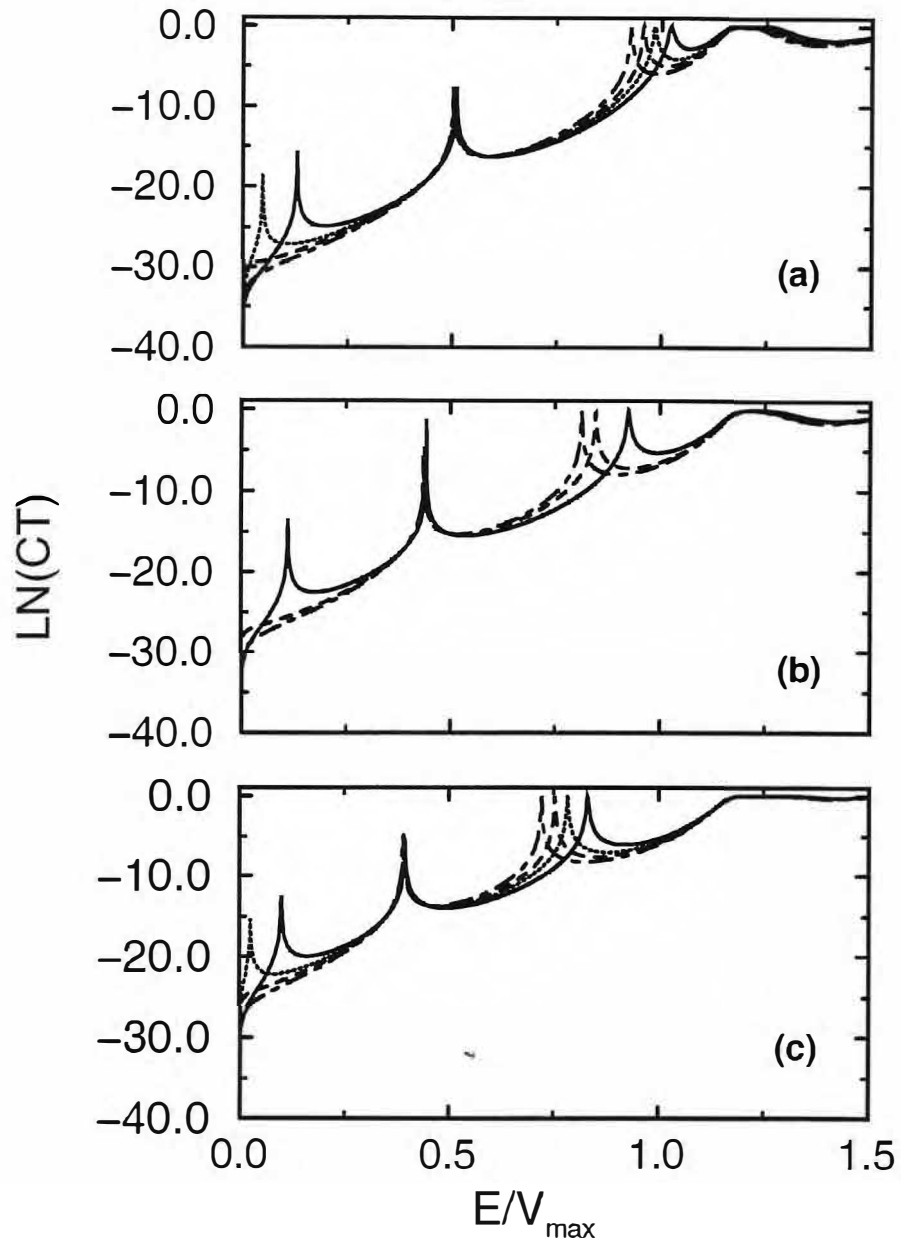


Figura 3.18 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) abrupta com impureza gaussiana no centro do poço; (b) não-abrupta com interfaces (2LP) com impureza gaussiana no centro do poço; (c) não-abrupta com interfaces (4LP) com impureza gaussiana no centro do poço. Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 2 LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

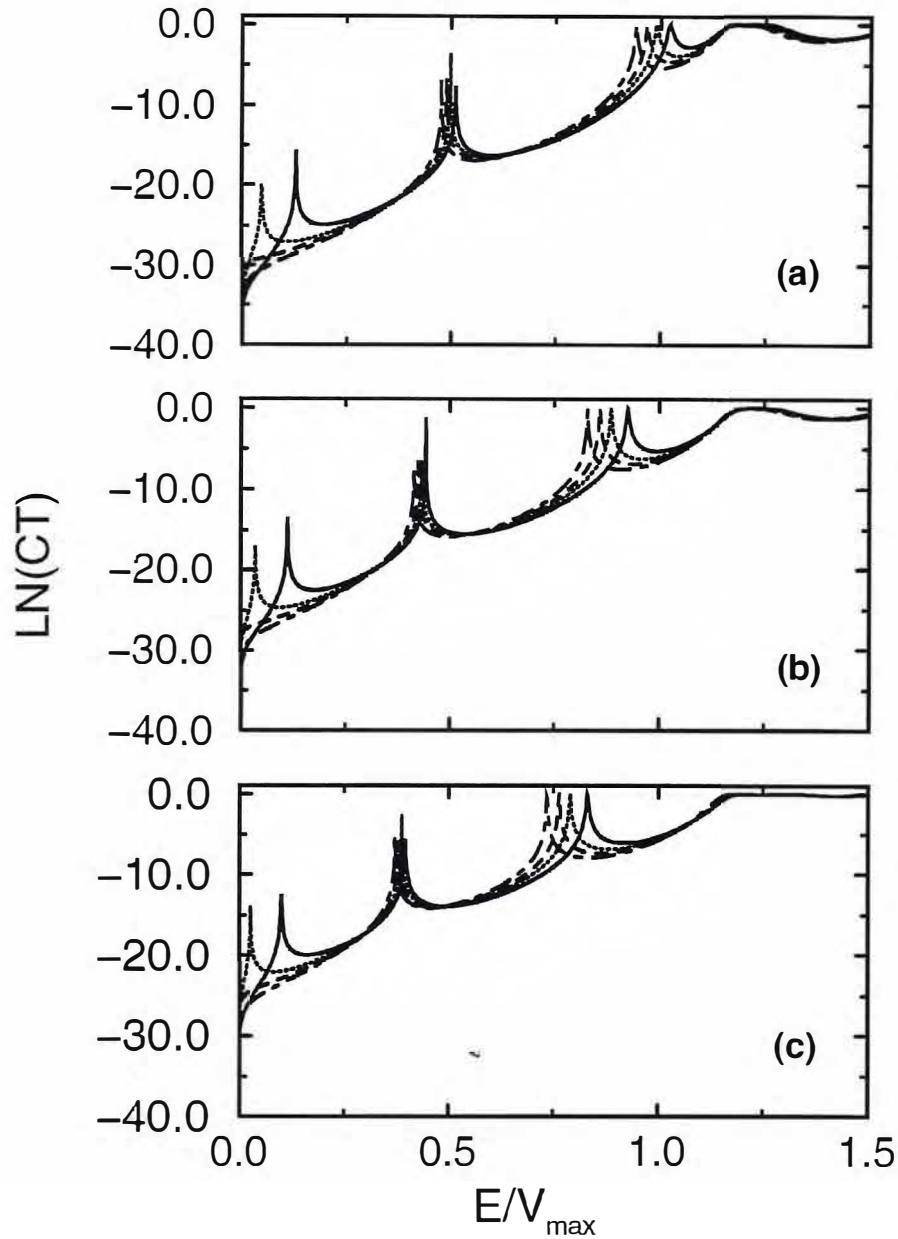


Figura 3.19 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) abrupta com impureza gaussiana no centro do poço; (b) não-abrupta com interfaces (2LP) com impureza gaussiana no centro do poço; (c) não-abrupta com interfaces (4LP) com impureza gaussiana no centro do poço . Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 4 LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada utilizando a Tab.2.1.

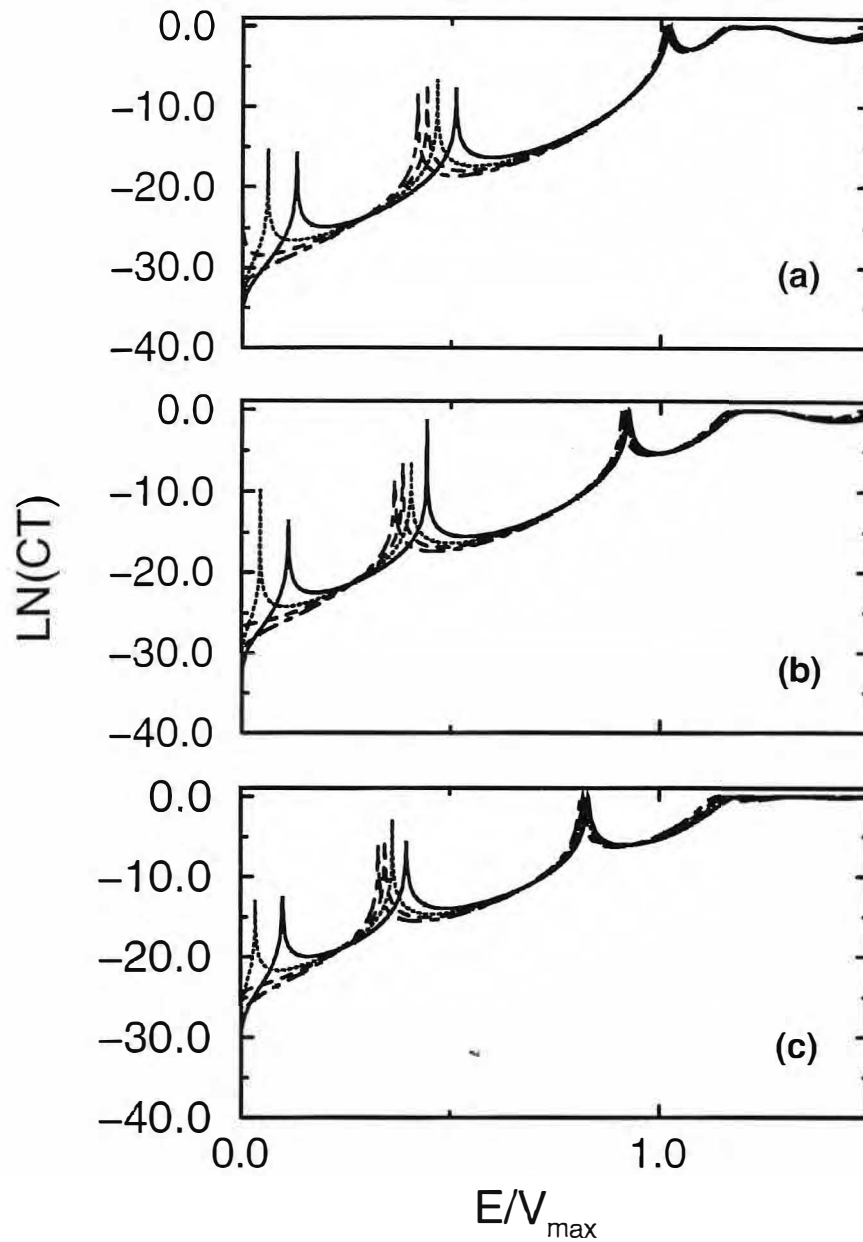


Figura 3.20 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) abrupta com impureza gaussiana no poço distante 6 LP da barreira esquerda; (b) não-abrupta com interfaces (2LP) com impureza gaussiana no poço distante 6 LP da barreira esquerda; (c) não-abrupta com interfaces (4LP) com impureza gaussiana no poço distante 6LP da barreira esquerda. Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 2LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada na Tab.2.1.

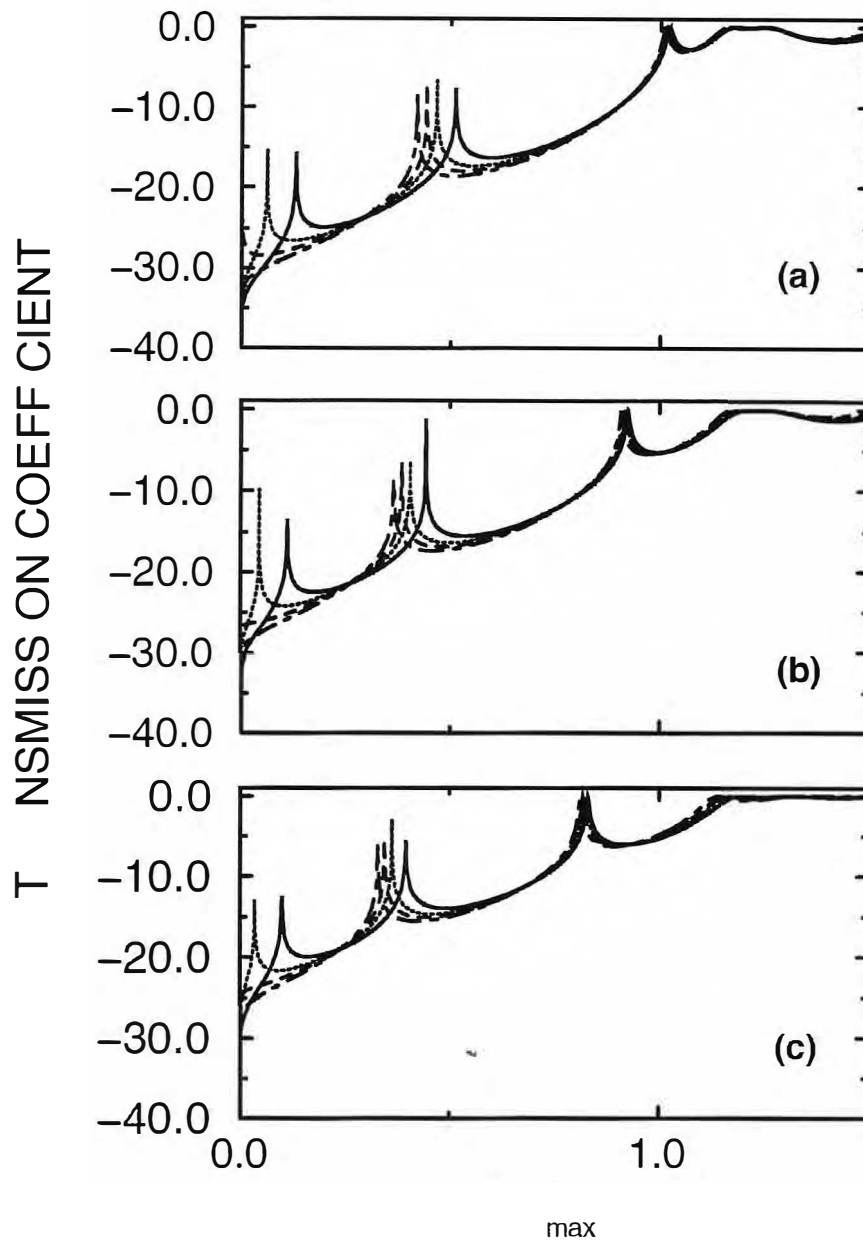


Figura 3.21 - Coeficiente de transmissão de elétrons através de uma barreira GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ dupla: (a) abrupta com impureza gaussiana no poço distante 6 LP da barreira direita; (b) não-abrupta com interfaces (2LP) com impureza gaussiana no poço distante 6 LP da barreira direita; (c) não-abrupta com interfaces (4LP) com impureza gaussiana no poço distante 6 LP da barreira direita. Largura do poço e da barreira abrupta 100\AA . Largura da impureza 2 LP. O coeficiente de transmissão das barreiras duplas sem impureza está incluído para comparação (contínua). Os níveis de energias das impurezas são -5.8 meV (pontuada), -15 meV (tracejada) e -30 meV (tracejada-pontuada). A profundidade de cada poço pode ser encontrada na Tab.2.1.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Com a redução acentuada dos dispositivos semicondutores, a probabilidade da ocorrência de eventos de espalhamento de portadores com dopantes individuais tem crescido consideravelmente. Para um canal de transmissão com 31×29 nm de área e uma concentração de dopagem de $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, há em média cerca de dois átomos dopantes por camada. Assim, embora a probabilidade de um elétron sofrer um espalhamento por uma impureza em um dado plano seja pequena, o mesmo não ocorrerá após o elétron percorrer todos os planos que constituem a heteroestrutura semicondutora em questão, que são da ordem de milhares. Assim, mesmo em casos de dopagens baixas, a probabilidade de um elétron vir a sofrer um espalhamento por um átomo de impureza não é desprezível.

Embora reduzido a uma dimensão, o estudo realizado neste trabalho indica que as propriedades de transmissão de elétrons em heterojunções, barreiras simples e duplas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ abruptas e não-abruptas podem ser consideravelmente influenciadas pela existência de impurezas. Além dos átomos dopantes, estas impurezas poderiam ser originárias, por exemplo, de átomos contaminantes da câmara de crescimento da MBE. Os resultados obtidos sugerem que sempre que existir espalhamento inelástico por impurezas, estes provocam modificações mais relevantes nos fenômenos de transmissão nas heteroestruturas mencionadas anteriormente do que aquelas provocadas pela existência de interfaces não-abruptas.

Para uma afirmação conclusiva da importância das modificações na transmissão devido ao espalhamento inelástico dos portadores com as impurezas localizadas, seria necessário fazer-se uso de um modelo tridimensional para as heteroestruturas semicondutoras, algo que está além do escopo de presente trabalho. Contudo, poderia se indicar que o modelo *tight binding* tridimensional recentemente proposto por Nazareno e Lépine [64] para o estudo da localização dinâmica seria propício para o desenvolvimento de semelhante estudo [65].

Considerando detalhes, os resultados mais relevantes obtidos neste trabalho podem ser destacados como:

- (i) a equivalência aproximada da representação de uma impureza localizada por um potencial gaussiano ou por um poço quadrado (ver Fig. 3.2(c), pg. 42);
- (ii) a possibilidade do surgimento de ressonâncias na transmissão de elétrons em heterojunções GaAs/Al_xGa_{1-x}As quando ocorre espalhamento com impurezas profundas (ver Figs. 3.3-6, pgs. 43-46);
- (iii) o fato da existência de impurezas na região Al_xGa_{1-x}As das barreiras simples GaAs/Al_xGa_{1-x}As modificar de forma mais marcante as propriedades de transmissão de um elétron através destas heteroestruturas do que quando as impurezas estão localizadas nas regiões GaAs (comparar Fig. 3.12-14 com Figs. 3.7-11);
- (iv) o fato de que são as impurezas localizadas dentro do poço da barreira dupla GaAs/Al_xGa_{1-x}As que modificam de forma mais relevante as propriedades de transmissão de elétrons através destas heteroestruturas, e não aquelas localizadas nas regiões Al_xGa_{1-x}As (barreiras) ou ou GaAs externas ao poço (comparar Figs. 3.15-17 com Figs. 3.18-21);
- (v) a talvez surpreendente independência dos picos de tunelamento ímpares de elétrons em barreiras duplas GaAs/Al_xGa_{1-x}As em relação à existência de impurezas localizadas no centro do poço (ver Figs. 3.18).

Alguns dos resultados obtidos neste trabalho estão em concordância com aqueles obtidos para sistemas similares (caso da barreira dupla, principalmente [35]) através do modelo de *tight binding*. Entretanto, a análise aqui realizada é de certa forma mais completa do que as realizadas anteriormente. [35, 53-58]

Além do fato de ter-se utilizado um modelo unidimensional para a descrição do problema, pode destacar-se que não foi levada em consideração o efeito coletivo

da dopagem, que é responsável pelo efeito do encurvamento de bandas. [39] Para considerar este efeito, teria que se resolver as equações diferenciais acopladas de Schrödinger (para a função de onda do elétron na heteroestrutura) e de Poisson (para a densidade de carga na heteroestrutura), trabalho que está incluído como perspectiva para o desenvolvimento futuro deste trabalho.

Outra grande limitação deve-se ao fato de não ter sido realizado o cálculo das correntes de tunelamento a partir dos coeficientes de transmissão aqui calculados para a barreira dupla. No entanto, este é um trabalho para a futura cooperação que está sendo estabelecida. [66]

APÊNDICE

O MÉTODO NUMÉRICO

O método numérico utilizado nas soluções das equações de Schrödinger que aparecem no presente trabalho é o método de degraus múltiplos proposto por Ando e Itoh [22]. Neste método tanto o potencial quanto a massa efetiva (que são dependente da posição) são decomposto em segmentos constante.

No caso das hetero-estruturas semicondutoras com perturbações, os potenciais e a massa efetiva são representadas por uma seqüência de N segmentos como na fig. 1.a onde uma função genérica $f(x)$ é dividida em 10 segmentos.

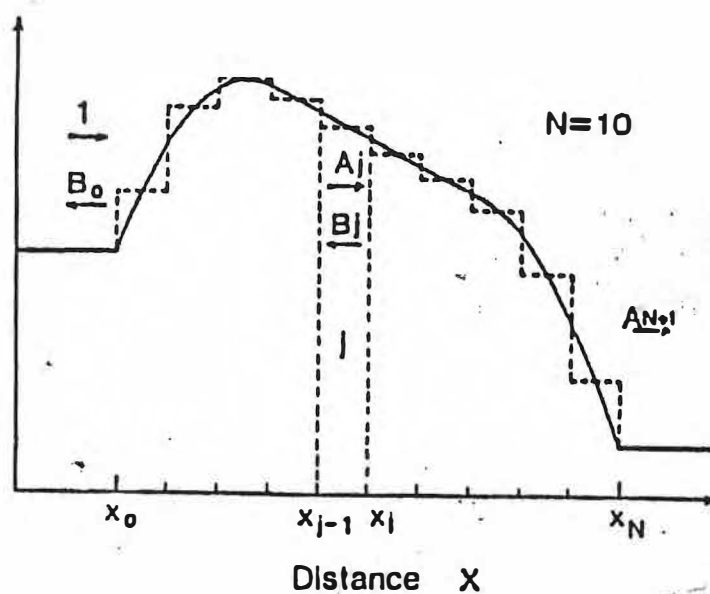


Figura 1.a. Partição em degraus múltiplos de uma função genérica $f(x)$.

Então no j -ésimo intervalo (z_{j-1}, z_j) o potencial e a massa efetiva serão dados por:

$$V(z) = V_j = V(\bar{z}_j) \quad (1.a)$$

$$m(z) = m_j = m(\bar{z}_j) \quad (2.a)$$

onde \bar{z}_j é o ponto médio do j -ésimo intervalo $\bar{z}_j = (z_{j-1} + z_j)/2$.

A solução da equação de Schrödinger no j -ésimo intervalo é

$$\psi_j(z) = A_j e^{ik_j z} + B_j e^{-ik_j z} \quad (3.a)$$

onde $k_j = \sqrt{2m_j(E - V_j)}/\hbar$, sendo E a energia do portador. Utilizando a continuidade de ψ e $m^{-1}(d\psi/dz)$ em $z = z_j$, obtém-se

$$\psi_j(z_j) = \psi_{j+1}(z_j) \quad , \quad (4.a)$$

$$m_j^{-1} (d\psi_j(z_j)/dz) = m_{j+1}^{-1} (d\psi_{j+1}(z_j)/dz) \quad , \quad (5.a)$$

Resolvendo o sistema eq. (4a, 5a) podemos expressar os termos A_{j+1} e B_{j+1} em função de A_j e B_j dando

$$A_{j+1} = \frac{1}{2} \{A_j e^{-i\Delta k_j z} (1 + \theta) + B_j e^{-i\Sigma k_j z} (1 - \theta)\} \quad (6.a)$$

$$B_{j+1} = \frac{1}{2} \{A_j e^{+i\Sigma k_j z} (1 - \theta) + B_j e^{+i\Delta k_j z} (1 + \theta)\} \quad (7.a)$$

onde $\Sigma k_j = k_j + k_{j+1}$, $\Delta k_j = k_{j+1} - k_j$ e $\theta = (m_{j+1} k_j / m_j k_{j+1})$

Colocando-se as duas equações acima em forma matricial, tem-se

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (8.a)$$

onde

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \theta) e^{-i\Delta k_j z} & (1 - \theta) e^{-i\Sigma k_j z} \\ (1 - \theta) e^{+i\Sigma k_j z} & (1 + \theta) e^{+i\Delta k_j z} \end{pmatrix}, \quad (9.a)$$

Usando a Eq. (8.a) em todos os N intervalos, os coeficientes A_{N+1}, B_{N+1} relacionam-se com os primeiros A_0, B_0 por:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (10.a)$$

onde

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \prod_{j=0}^N M_{(N-j)} \quad (11.a)$$

Fazendo-se $A_0 = 1$ e $B_{N+1} = 0$ (nenhum elétron vindo da direita), a eq.(10.a) fica

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (12.a)$$

Resolvendo-se a equação acima, encontra-se que

$$B_0 = -\frac{M_{21}}{M_{22}} \quad (13.a)$$

$$A_{N+1} = \frac{\det(M)}{M_{22}} \quad (14.a)$$

onde

$$\det(M) = \left[\frac{m_j}{m_{j+1}} \right]^{-1} \cdot \left[\frac{k_j}{k_{j+1}} \right] \quad (15.a)$$

e usando a definição do coeficiente de transmissão obtemos:

$$A_{N+1} = \left[\frac{m_{N+1}}{m_0} \right] \left[\frac{k_0}{k_{N+1}} \right] \quad (16.a)$$

e conseqüentemente o coeficiente de transmissão será dado por:

$$\mathcal{T} = |A_{N+1}|^2 \left[\frac{k_{N+1}}{k_0} \right] \left[\frac{m_0}{m_{N+1}} \right] \quad (17.a)$$

Os resultados para o coeficiente de transmissão serão tanto mais preciso quanto maior o valor de N escolhido numa mesma hetero-estruturas que se está tratando. O valor de N utilizado para a presente tese está entre 1500 a 2500 divisões.

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] H. Sakaki, Solid State Commun. **92**, 119 (1994).
- [4] *Two-Dimensional Systems: Physics and New Devices*, editado por G. Bauer, F. Kuchar, and H. Heinrich, (Springer, Berlin, 1986).
- [5] L. Esaki, IEEE J. Quantum Electron. QE - **22**, 1611 (1986).
- [6] M. Henini, II-Vs Review **9**, 32 (1996).
- [7] K. Ploog, em *Semiconductor Interfaces: Formation and Properties*, editado por G. Le Lay, J. Derrien, and Boccara, pp. 10-42 (Springer, Berlin 1987).
- [8] J. Wang, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. B **47**, 10326 (1993).
- [9] J. F. Zheng, X. Liu, N. Newman, E. R. Weber, D. F. Ogletree, and M. Salmeron, Phys. Rev. Lett. **72**, 1490 (1994).
- [10] J. F. Zheng, M. Salmeron, and E. R. Weber, Solid State Commun. **93**, 419 (1995).
- [11] O. Albrechtsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, Appl. Phys. Lett. **57**, 31 (1990).
- [12] A. Ourmazd, D. W. Taylor, J. Cunningham, and C. W. Tu, Phys. Rev. Lett. **62**, 933 (1989).
- [13] P. J. Price and F. Stern, Surf. Sci. **132**, 577 (1983).
- [14] F. Stern and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **30**, 840 (1984).

- [15] J. N. Schulman, *J. Vac. Sci. Technol.* **1**, 644 (1983).
- [16] H. X. Jiang, J. Y. Li, *Superlatt. Microstruct.* **3**, 689 (1987).
- [17] M. Proctor, G. Oelgart, H Rhan, and F. K. Reinhart, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 843 (1987).
- [18] D. F. Nelson, R. C. Miller, C. W. Tu, and S. K. Sputz, *Phys. Rev. B* **36**, 8063 (1987).
- [19] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A Farias, *Superlatt. Microstruct.* **1**, 17 (1992).
- [20] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 4076 (1992).
- [21] V. N. Freire, tese para concurso de professor titular, Universidade Federal do Ceará (não publicada).
- [22] Y. Ando and T. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).
- [23] R. Renan , V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlatt. Microstruct.* **15**, 203 (1994).
- [24] R. Renan , V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **48**, 8446 (1993).
- [25] M. C. A. Lima, V. N. Freire, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **52**, 5777 (1995).
- [26] C. A. Warwick, M. Y. Jan, A. Ourmazd, and T. D. Harris, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 2666 (1990).
- [27] B. Orschel, G. Oelgart, and R. Houdré, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 843 (1993).
- [28] D. Gammon, B. V. Shanabrook, and D. S. Katzer, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2710 (1991).

- [29] M. B. Johnson, U. Meier, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1273 (1993).
- [30] Y. S. Fatt, *J. Appl. Phys.* **71**, 158 (1992).
- [31] N. F. O. Mott and R. W. Gurney, R. W., *Electronic Process in Ionic Crystal* (Clarendon, Oxford 1940).
- [32] M. B. Johnson, O. Albrechtsen, R. M. Feenstra, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 2923 (1993).
- [33] G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 5693 (1981).
- [34] A. G. de Oliveira, *Braz. J. Phys.* **24**, pp. 67 (1994).
- [35] M. A. Davidovich and T. Gornsztejn, *Solid State Commun.* **2**, 213 (1994).
- [36] D. J. BenDaniel and C. B Duke, *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
- [37] C. Delalande and G. Bastard, em *Semiconductor Interfaces: Formation and Properties*, editado por G. Le Lay, J. Derrien, and Boccara, pp. 340-359 (Springer, Berlin, 1987).
- [38] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **S8**, R1 (1985).
- [39] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor physics* (Les Editions de Physique, Les Ulis, 1994).
- [40] A. Brezini and M. Sebbani, *Phys. Stat. Sol. (b)* **178**, 141 (1993).
- [41] C. Shinitler and M. Kirilov, *Phys. Stat. Sol. (b)* **143** (1993).
- [42] M. G. Burt, *Semic. Sci. Technol.* **2**, 460 (1987).

- [43] M. G. Burt, Appl. Phys. Lett. **65**, 717 (1994).
- [44] F. S. A. Cavalcante, R. N, Costa Filho, J. Ribeiro, C. A. S. de Almeida, and V. N. Freire, aceito para publicação em Phys. Rev. (1996).
- [45] G. H. Wannier, Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- [46] J. C. Slater, Phys. Rev. **76**, 1592 (1949).
- [47] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [48] Q. G. Zhu and H Kroemer, Phys. Rev. B **27**, 3519 (1983).
- [49] T. Gora and F. Williams, Phys. Rev. B **177**, 1179 (1969).
- [50] T. L. Li and K. J. Kuhn, Phys. Rev. B **47**, 12760 (1993).
- [51] O. Von. Ross, Phys. Rev. B **27**, 7547 (1983).
- [52] S. M. Sze, Semiconductor Devices (John Wiley 1985).
- [53] G. Bastard and C. Delalande, Phys. Rev. B **29**, 7042 (1984).
- [54] B. Gu, C. Coluzza, M. Mangiantini, and A. Frova, J. Appl. Phys. **65**, 3510 (1989).
- [55] C. J. Arsenault and M. Meunier, J. Appl. Phys. **66**, 4306 (1989).
- [56] H. Xu and G. Chen, Phys. Stat. Sol. (b) **187**, K37 (1995).
- [57] X. Cheng, J. Zhao, and G. Wang, Phys. Rev. B **53**, 7842 (1996).
- [58] V. I. Sugakov and A. Yatskevich, Phys. Stat. Sol. (b) **199**, 119 (1997).
- [59] S. J. Bending and M. R. Beasley, Phys. Rev. Lett. **55**, 324 (1985).

- [60] M. Naito and M. R. Beasley, Phys. Rev. B **35**, 2548 (1987).
- [61] Y. Xu, A. Matsuada, and M. R. Beasley, Phys. Rev. B **42**, 1492 (1990).
- [62] D. Ephron, Y. Xu, and M. R. Beasley, Phys. Rev. Lett. **69**, 3112 (1992).
- [63] D. C. Ralf and R. A. Buhrman, Phys. Rev. Lett. **69**, 2118 (1992).
- [64] H. N. Nazareno and Y. Lépine, Phys. Rev. B **55**, 6661 (1997).
- [65] H. N. Nazareno and V. N. Freire, comunicação privada (1997).
- [66] L. O. de Oliveira Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, trabalho em desenvolvimento.