

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS - DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**MODELO E PROPRIEDADES DE HETEROJUNÇÕES**  
**NÃO-ABRUPTAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

***José Ribeiro Filho***

**Orientador: Dr. Valder Nogueira Freire**

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

**MARÇO 1995**

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)

---

R369m Ribeiro Filho, José.

Modelo e propriedades de heterojunções não-abruptas GaAs/AlxGa1-xAs / José Ribeiro Filho. – 1995.

136 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1995.

Orientação: Prof. Dr. Valder Nogueira Freire.

1. Partículas - Física Nuclear. 2. Alumínio. I. Título.

CDD 530

---

**MODELO E PROPRIEDADES DE HETEROJUNÇÕES  
NÃO-ABRUPTAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

*José Ribeiro Filho*

**Tese 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 (Orientador, UFC)**

**Dr. José Alzamir Pereira da Costa (UFRN)**

**Dr. Gil de Aquino Farias (UFC)**

**Aprovada em 15 de março de 1995.**

**À minha querida esposa,  
e minha filha Jamily.**

# Agradecimentos

Ao professor Valder Nogueira Freire, pela constante orientação e incentivo para a realização desta tese;

- Ao professor Gil de Aquino Farias, pelo interesse e apoio durante o desenvolvimento da tese;

À professora Margarida Moreira Auto, que viu nascer a id'eia da tese, e participou de minha formação básica na área de Semicondutores;

Aos professores Josué Mendes Filho e Antônio José da Costa Sampaio, enquanto coordenadores do Curso de Pós-Graduação em Física, UFC;

- Aos professores que tiveram participação em minha formação profissional;
- Ao colega Raimundo Costa Filho, pela troca de idéias;

Aos colegas da graduação e pós-graduação em Física, pela convivência no decorrer de ambos os cursos;

Aos funcionários do Departamento de Física-UFC , que contribuíram na produção desta tese.

## RESUMO

Um modelo de interfaces foi desenvolvido para o estudo das propriedades de heterojunções semicondutoras não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Ele generaliza aquele de Freire, Auto e Farias [*Superlattices and Microstructures* **1**, 17 (1992)], permitindo qualquer variação da liga semicondutora na interface, inclusive com a possibilidade da existência de rugosidades aleatórias. Utiliza-se operadores energia cinética com massa dependente da posição para investigar as propriedades de transmissão de portadores através das heterojunções. O método de *multisteps* de Ando e Itoh [*J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987)] é generalizado para uma determinada classe de operadores energia cinética, e utilizado para as soluções numéricas dos problemas de autovalores necessárias ao cálculo da transmissão. Utilizando um perfil linear para a variação da fração molar de alumínio, demonstra-se as limitações da aproximação da massa efetiva na interface. Neste caso, os picos de ressonância anteriormente previstos por Freire, Auto and Farias desaparecem quando a dependência espacial da massa efetiva é considerada. A influência de cinco tipos de padrões de crescimento nas propriedades das heterojunções é também investigada. Demonstra-se que a transmissão de portadores, em particular a existência de picos de ressonância, depende do tipo de variação interfacial da fração molar de alumínio considerada. Constata-se que efeitos do padrão de crescimento são mais importantes para buracos pesados do que para elétrons. Quando rugosidades aleatórias são introduzidas na variação da fração molar de alumínio na interface, obtém-se um crescimento da transmissão. Mostra-se que influência do tipo de operador energia cinética no cálculo da transmissão é marcante, principalmente no caso de buracos pesados, e cresce com a diminuição da largura interfacial. Os resultados obtidos indicam a limitação de trabalhos que consideram representações abruptas para as interfaces, ou aqueles que na descrição da interface fazem a hipótese da massa efetiva dos portadores ser constante na mesma.

## ABSTRACT

A model was developed to study the properties of nonabrupt semiconductor heterojunctions GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. It is a generalization of the model of Freire, Auto e Farias [*Superlattices and Microstructures* **1**, 17 (1992)]. It is included the possibility of any variation of the semiconductor alloy in the interface region, and also the possibility of the existence of random roughness. Kinetic energy operators with position dependent effective mass are used to calculate carrier transmission through nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions. The multistep method of Ando and Itoh [*J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987)] is generalized for a class of kinetic energy operators, and used to obtain numerical solution of the eigenvalue problems necessary for the calculation of the transmission. By using a linear profile for the interfacial aluminium molar fraction variation, it is shown the limits of the constant effective mass approximation in the interface. In this case, resonant peaks whose existence was early supposed by Freire, Auto, and Farias, it is shown to disappear when the spacial dependence of the effective mass is considered. The role of five types of growth patterns in the heterojunction properties is studied. It is shown that carrier transmission, in particular the existence of resonant peaks, is dependent of the type of growth pattern of the aluminium molar fraction in the interface region. Effects of growth patterns are more important to heavy holes than electrons. When random roughness are included in the variation of the aluminium molar fraction in the interface region, it is obtained a growth of the transmission. It is shown that the type of the kinetic energy operator is important, principally in the case of heavy holes, and when the interface width is small. Our results indicate the limitations of models that consider an abrupt picture of the interface, and those that consider the constant effective mass approximation in the interfacial region.

# Índice

CAPÍTULO 1	1
INTRODUÇÃO . . . . .	2
CAPÍTULO 2 . . . . .	12
UM MODELO PARA INTERFACES NÃO-ABRUPTAS GaAs/Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As . . . . .	13
2.1 O Modelo . . . . .	16
2.2 Operadores Energia Cinética . . . . .	22
2.3 O Método Numérico . . . . .	25
CAPÍTULO 3 . . . . .	29
RESULTADOS E DISCUSSÕES	30
3.1 Além da Aproximação da Massa Efetiva Constante na Interface	33
3.2 A Influência de Padrões de Crescimento da Interface na Transmissão	43
3.3 Rugosidades e Transmissão . . . . .	51
3.4 Operador Energia Cinética e Transmissão . . . . .	62
CAPÍTULO 4 . . . . .	71
CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	72
REFERÊNCIAS . . . . .	77
APÊNDICES . . . . .	83

# **CAPITULO 1**

# INTRODUÇÃO

A origem da pesquisa em sistemas semicondutores de dimensionalidade reduzida, isto é, menor que três, foi a proposta original de Tsu e Esaki de que estruturas, de potenciais unidimensionais a base de semicondutores, poderiam ser obtidas por justaposição de camadas alternadas ultra-finas dos mesmos [1, 2]. Na ocasião, estes pesquisadores já previram dois tipos possíveis de hetero-estruturas, uma obtida com dopagem e outra com variação composicional.

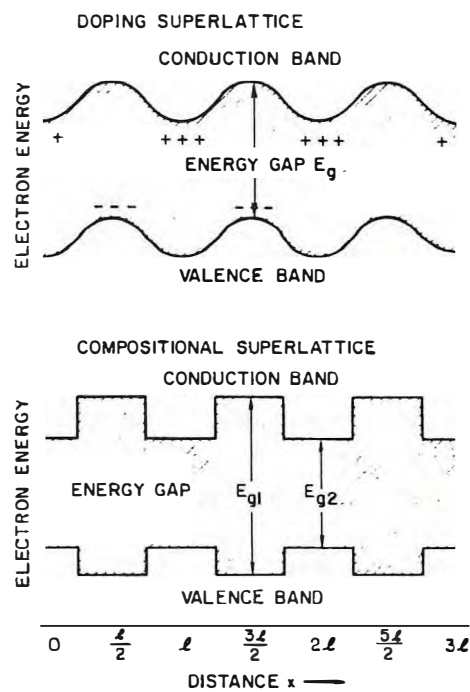


Figura 1 - Variação espacial das bandas de condução e valência em super-redes composicionais e por dopagem (extraída de Esaki [3]).

Como as dimensões das hetero-estruturas semicondutoras são da ordem de grandeza das funções de onda dos portadores de carga, as propriedades físicas das mesmas dependem tanto das suas configurações espaciais quanto de suas dimensões características. Conseqüentemente, as hetero-estruturas semicondutoras constituem sistemas quânticos criados pelo homem.

Experimentos que comprovaram as previsões iniciais das propriedades de hetero-estruturas semicondutoras foram realizados somente algum tempo depois das proposições teóricas originais [4, 5]. Atualmente, sistemas comerciais para o crescimento de hetero-estruturas estão disponíveis àqueles que tenham cerca de um a dois milhões de dólares para adquiri-los. No Brasil, estes sistemas são encontrados, por exemplo, na Universidade Federal de São Carlos (SP), Universidade Estadual de Campinas (SP), e Universidade Federal de Minas Gerais (MG).

As hetero-estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade compreendem barreiras (simples, duplas, ..., múltiplas), poços quânticos, super-redes, fios quânticos e pontos quânticos [6,7]. Com a evolução das técnicas de crescimento de cristais, pode-se obter hoje em dia hetero-estruturas semicondutoras com dimensões da ordem de nanômetros ( $10^{-9}m$ ), sendo a epitaxia por feixe molecular (MBE - *Molecular Beam Epitaxy*) a mais sofisticada e flexível entre as técnicas de crescimento atuais de filmes finos epitaxiais em semicondutores, metais e dielétricos [8,9].

No seu aspecto mais básico, a MBE é um processo de evaporação realizado em um ambiente de vácuo ultra-elevado (ver Fig. 2). Os constituintes evaporados, que

controlam a taxa de crescimento na MBE, ficam presos em qualquer superfície que atinjam, embora processos de difusão ocorram posteriormente. O fluxo que emana de um feixe molecular pode ser interrompido abruptamente ao se inserir um anteparo (*shutter*) no caminho do feixe molecular. Algumas técnicas podem ser usadas para monitorar a qualidade da interface, como por exemplo a RHEED (*Reflection High Energy Electron Diffraction*).

O desafio para o projeto e crescimento de materiais artificialmente postos em camadas é minimizar o espalhamento por impurezas, agregados das ligas ou irregularidades nas interfaces para que os portadores possam se deslocar com o menor impedimento possível através das interfaces.

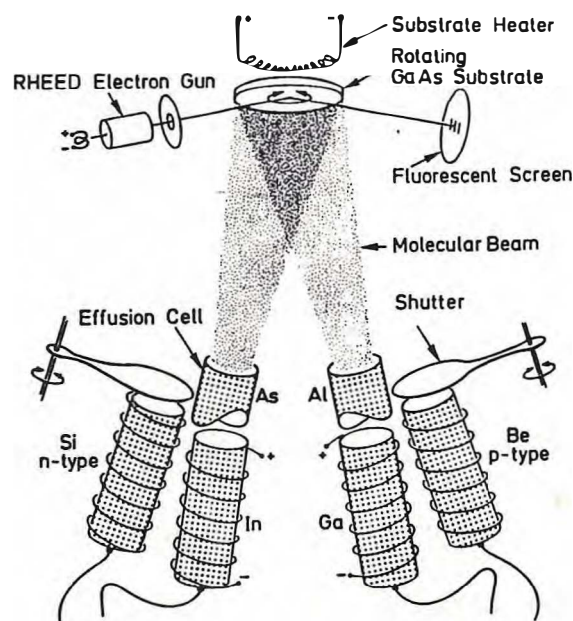


Figura 2 - Ilustração esquemática do processo de crescimento por MBE de semicondutores III-V (extraída de Ploog [9]).

As componentes básicas das hetero-estruturas semicondutoras são suas hetero-junções. Uma heterojunção ideal é aquela que apresenta uma interface perfeita, sem distorções devido a variações composicionais. Quando a variação de um tipo de semicondutor da heterojunção para outro ocorre localmente, isto é, em um único plano atômico, diz-se que a heterojunção tem interface abrupta, e por isto é denominada de heterojunção abrupta.

Na prática, mesmo os mais modernos equipamentos e melhores crescedores não conseguem obter interfaces abruptas. Uma região interfacial de transição entre os semicondutores constituintes da heterojunção sempre existe, possuindo nos melhores casos uma largura de pelo menos dois parâmetros de rede ( $2 LP$ ) da estrutura cristalina em questão [10,11]. Por outro lado, não se consegue crescer heterojunções semicondutoras sem a presença de imperfeições na interface, geradas por processos de difusão, impurezas, stress etc, o que dá origem, por exemplo, a existência de rugosidades nas interfaces [11-21].

O desafio experimental sempre tem sido crescer heterojunções cada vez mais próximas da perfeição e tão abruptas quanto possível. Para a perfeição, procura-se minimizar o espalhamento por impurezas, irregularidades nas interfaces, deslocamentos etc. A busca da abrupticidade está fundamentada na firme crença de que ela seja uma condição optimal para a produção de hetero-estruturas com as melhores características para aplicações tecnológicas.

Fotoluminescência [12, 14-18, 20], espalhamento Raman vibracional [18], espectroscopia e topografia de tunelamento [10, 11, 13, 19, 21] são algumas das técnicas utilizadas para a investigação de interfaces em hetero-estruturas semicondutoras. Embora controvérsias ainda ocorram atualmente, os resultados experimentais indicam fortemente que, das interfaces de hetero-estruturas semicondutoras, pode-se afirmar: (i) elas são não-abruptas, com larguras interfaciais de pelo menos dois parâmetros de rede nos melhores casos; (ii) ilhas de diferentes tamanhos estão presentes nas mesmas; (iii) elas possuem um grau de rugosidade que depende da técnica de crescimento [10-21].

Como as modernas técnicas de crescimento de hetero-estruturas semicondutoras foram e ainda são incapazes de um controle absoluto sobre o crescimento da interface, quer em relação a largura da interface, quer pelo controle da variação da liga semicondutora na interface, para se obter informações sobre o papel da interface nas propriedades de hetero-estruturas semicondutoras é necessário desenvolver modelos teóricos para a obtenção do potencial e da massa efetiva de portadores na região interfacial.

O ponto de partida no desenvolvimento de modelos teóricos foi a hipótese de hetero-interfaces semicondutoras abruptas, que continua a ser a mais utilizada até hoje na grande maioria dos trabalhos teóricos, embora não seja compatível com os atuais resultados experimentais disponíveis.

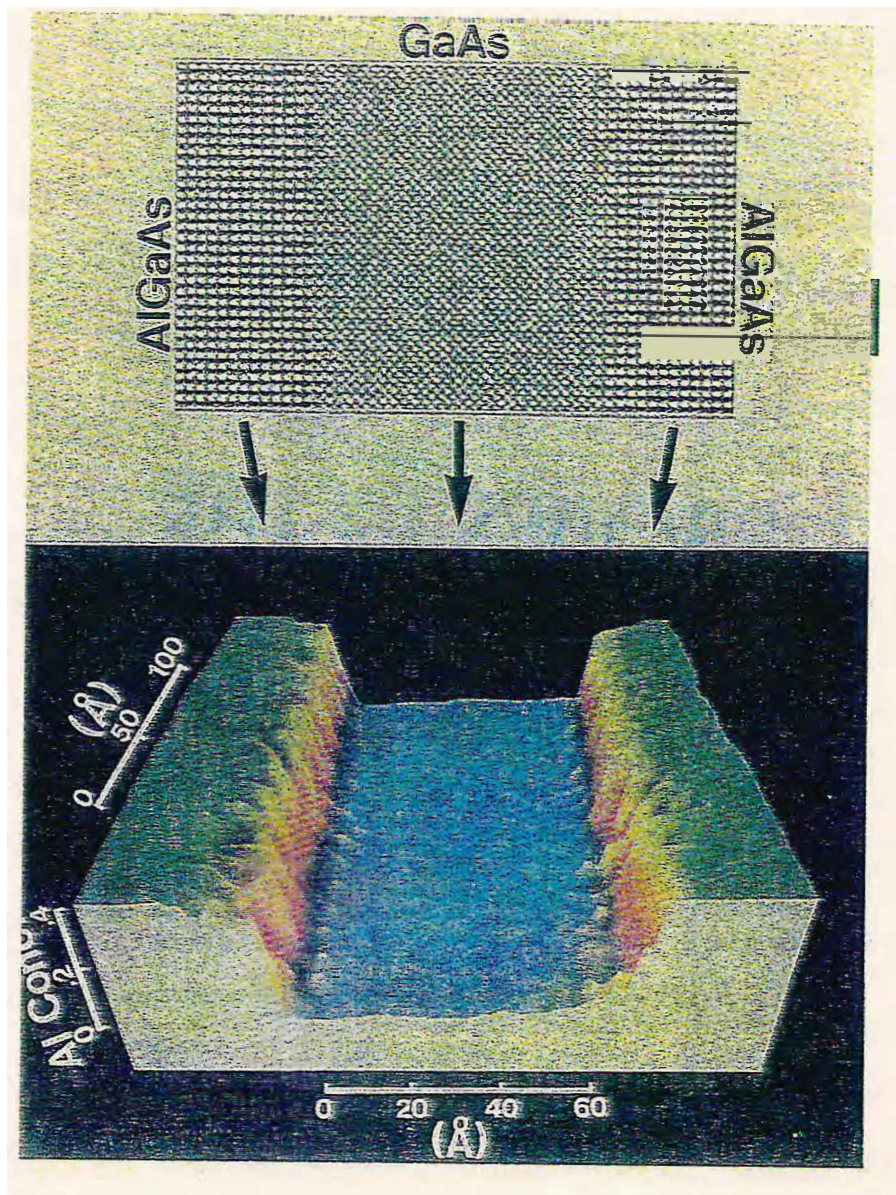


Figura 3 - Parte superior: Microfotografia que revela a composição química de uma hetero-estrutura semicondutora com precisão atômica. Parte inferior: representação artística tridimensional da concentração de alumínio no poço quântico GaAs/AlGaAs da microfotografia da parte superior da figura. A concentração de alumínio varia de zero na parte central GaAs do poço quântico, até 40% nas camadas externas. A existência de interfaces não-abruptas e rugosidades é aparente (extraída de Chemla [22]).

Schulman [23] foi provavelmente o primeiro a investigar o papel de interfaces não-abruptas nas propriedades de hetero-estruturas. Utilizando o método de *tight binding*, representando o potencial interfacial por uma função linear, e mantendo a massa dos portadores constante na interface, ele calculou níveis de energia em poços quânticos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptos, e mostrou as modificações nos mesmos produzidas pelas interfaces. Jiang e Lin [24] calcularam a estrutura de bandas de uma super-rede não-abrupta, usando para isto a mesma hipótese que Schulman [23], tendo inclusive afirmado que *naquele estágio a forma exata do potencial para elétrons e buracos na interface era desconhecida*.

Thomsen *et al.* [25] investigaram o ordenamento de operadores na teoria da massa efetiva, introduzindo uma dependência na massa efetiva dos portadores na região interfacial que contribui com um termo de potencial linear efetivo ao problema de autovalores. Liu e Kuhn [26] usaram funções erro para descrever tanto o potencial quanto a massa efetiva de portadores nas regiões interfaciais de poços quânticos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Argumentando que *nenhuma informação direta do perfil próximo a interface da heterojunção AlAs/GaAs/AlAs existia disponível*, Proctor *et al.* [27] calcularam as energias de transição em poços quânticos GaAs/AlAs com heterojunções graduais, através da utilização de um potencial simétrico suave proposto previamente por Nelson *et al.* [28]. Tsung *et al.* [29] também utilizaram padrões suaves semelhantes ao de Nelson *et al.* [28] para o potencial na interface de hetero-estruturas semicondutoras, e consideraram a massa dos portadores constante ou variando suavemente nas interfaces.

Em nenhum dos modelos mencionados acima, o potencial e a massa interfacial das hetero-estruturas semicondutoras estavam relacionados entre si, sendo completamente independentes um do outro.

Freire, Auto e Farias [30, 31] desenvolveram um modelo em que o potencial e a massa efetiva de portadores na região interfacial de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta é obtido a partir da hipótese da existência de uma variação linear da fração molar  $x$  de alumínio na interface. Com base nesta hipótese, eles mostraram que o potencial na região de transição é proporcional ao quadrado da coordenada na direção de crescimento da heterojunção,  $V(z) \propto z^2$ , enquanto a massa efetiva dos portadores tem uma dependência linear da forma  $m(z) \propto z + b$ , onde  $b$  é uma constante associada tanto ao tipo de portador quanto ao tipo de semicondutor.

Tanto para hetero-estruturas semicondutoras abruptas e não-abruptas, é a teoria da massa efetiva (EMT - *Effective Mass Theory*) que mais tem sido utilizada para o cálculo de suas propriedades. A idéia básica desta teoria consiste em colocar todas as complicações do potencial cristalino em um tensor de massa efetiva, a massa do portador. Inicialmente desenvolvida para tratar de impurezas em cristais [32, 33], a EMT foi estendida para cristais cuja composição muda periodicamente de uma região para outra [34-37], mas de forma suave. Não existe ainda um aperfeiçoamento plenamente satisfatório da EMT para variações abruptas da composição de uma região para outra, embora considerável progresso tenha sido realizado por Burt [38, 39, 40].

Portanto, além de incompatível com resultados experimentais recentes já antes mencionados [10, 11], os modelos que utilizam a hipótese de interfaces abruptas ainda apresentam uma incoerência adicional ao usar a EMT mesmo para o cálculo de propriedades de hetero-estruturas semicondutoras abruptas, já que neste caso está se fazendo uso de uma teoria além do seu limite de validade.

Um problema importante na utilização da EMT em hetero-estruturas semicondutoras, tanto abruptas quanto não-abruptas, é a dependência espacial da massa dos portadores com a posição. Não existe ainda um único trabalho que aponte para uma forma única do operador energia cinética. Desde que a massa efetiva dos portadores depende da posição,  $m \equiv m(z)$ , e não comuta com o momentum  $p(z)$ , o problema consiste em estabelecer a forma do operador energia cinética e condições de contorno relacionadas à massa efetiva do portador, sua função de onda e a derivada da mesma para obtenção da continuidade da corrente [37, 41-46].

Devido a importância das propriedades de transmissão em heterojunções não-abruptas  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , tanto pelo fato dela constituir o bloco básico das hetero-estruturas não-abruptas, como pelas ainda não esgotadas possibilidades de investigação, um estudo das mesmas será realizado neste trabalho de tese.

Inicialmente, o modelo de Freire, Auto e Farias [30, 31] será generalizado no Capítulo 2 para incluir a possibilidade de qualquer perfil de variação da fração molar de alumínio na interface [47]. A seguir, é abordado o problema dos tipos de operadores energia cinética existentes com massa dependente da posição e a escolha das condições

de continuidade da função de onda e sua derivada. O Capítulo 2 encerra-se com a apresentação da generalização do método de multisteps de Ando e Itoh [48] para operadores energia cinética outros que o de Ben Daniel e Duke [49].

Resultados e discussões são mostrados no Capítulo 3. Começando com a apresentação das propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas composicionalmente [50], calculadas além da aproximação da massa efetiva constante na interface, o Capítulo 3 prossegue com a apresentação de um estudo da influência de padrões de crescimento nas propriedades de transmissão de heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas. A seguir, uma investigação da relação entre padrões de rugosidade e transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas é realizada [51]. O Capítulo 3 termina com a abordagem do problema da influência de diferentes tipos de operadores energia cinética nas propriedades de transmissão de heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas.

No Capítulo 4, as conclusões e perspectivas da presente tese são apresentadas, bem como a ligação da mesma com outros trabalhos de pesquisa que estão se desenvolvendo no Grupo de Semicondutores do Departamento de Física da UFC. Nele são ainda destacados os trabalhos/publicações já realizados [50], já apresentados ou aceitos para apresentação em congressos nacionais e internacionais [51], ou aqueles submetidos [47] que são frutos da presente tese, bem como os que ainda deverão ser preparados [40, 41]. Uma breve apresentação das extensões da tese que já estão sendo executadas [42, 43] e aquelas ainda a serem realizadas encerra o Capítulo 4.

## **CAPITULO 2**

# UM MODELO PARA INTERFACES NAO-ABRUPTAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

Alguns modelos foram propostos para descrever hetero-interfaces semicondutoras não-abruptas [23-29]. Eles não consideram 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 criar um relacionamento entre ambas.

O esquema proposto por Freire, Auto e Farias [30, 31] para descrever interfaces GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas baseia-se em duas hipóteses:

- (i) existência de uma variação linear da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  desde 0 até  $x$  na região interfacial  $-a < z < +a$ , onde  $z$  é a direção de crescimento da heterojunção;
- (ii) validade, para cristais semicondutores GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com dimensões da ordem de Angstrom, da relação empírica (obtida a partir de experimentos) que determina a dependência com a fração molar  $x$  de alumínio do gap de energia na direção  $\Gamma$  e da massa efetiva dos portadores [52].

Com estas duas hipóteses, Freire, Auto e Farias [30, 31] mostraram que na região interfacial GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, o potencial é proporcional ao quadrado da coordenada da direção de crescimento  $z$ ,  $V(z) \propto z^2$ , e a massa efetiva dos portadores apresenta uma dependência linear,  $m(z) \propto z + b$ , onde  $b$  é uma constante associada ao tipo de portador e de semiconductor.

Inicialmente, o modelo foi utilizado para o cálculo de propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas, sem [30, 31] e com campo elétrico aplicado [53]. Nestes trabalhos, a aproximação da massa constante na interface foi utilizada, o que permitiu a obtenção de expressões analíticas para os coeficientes de transmissão.

Posteriormente, o modelo foi usado para o cálculo de propriedades de transmissão em barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas simples [54] e duplas [55, 56]. Neste caso, utilizou-se o método de multisteps de Ando e Itoh [48] para a obtenção das propriedades de transmissão levando em conta a dependência linear em  $z$  da massa efetiva. Uma investigação do efeito de uma massa efetiva dos portadores constante na interface infelizmente não foi realizada pelos autores nestes trabalhos.

Os resultados obtidos com o modelo de Freire, Auto e Farias [30, 31] sugerem que cálculos teóricos que supõem a existência de interfaces abruptas podem ser usados para descrever medições experimentais em hetero-estruturas semicondutoras somente quando a técnica de crescimento do cristal assegura larguras interfaciais  $\ell \ll 2LP$ , que está justamente no limite da abrupticidade obtida pelas atuais técnicas de cresci-

mento [10, 11]. Há assim dificuldades cada vez mais crescentes na justificativa de modelos teóricos que consideram abruptas as hetero-interfaces semicondutoras.

Neste Capítulo, o modelo de Freire, Auto e Farias [30, 31] é generalizado na Seção 2.1 para incluir variações de  $\chi(z)$  outras que a linear, o que elimina a severa restrição da hipótese (i) anteriormente mencionada. Para levar em consideração a dependência espacial da massa efetiva na interface, uma descrição das diferentes possibilidades de escolha do operador energia cinética com massa efetiva dependente da posição é apresentada na Seção 2.2. Uma generalização do método de Ando e Itoh [48], para possibilitar a solução numérica de equações para diferentes tipos de Hamiltonianos com massa dependente da posição, é apresentada na Seção 2.3.

## 2.1 O Modelo

Desafortunadamente, as técnicas atuais de crescimento de cristal são incapazes de fabricar tanto interfaces abruptas quanto interfaces não-abruptas com uma variação espacial específica da liga, embora considerável progresso tenha sido realizado recentemente neste último caso [57].

Para obter informações sobre a influência do tipo de variação espacial da liga na região interfacial nas propriedades de hetero-estruturas semicondutoras, é necessário o desenvolvimento de um modelo teórico para a obtenção do potencial e da massa efetiva associada do portador como função de qualquer tipo de variação interfacial da liga semicondutora. Os padrões de crescimento que serão utilizados no Capítulo 3 para o cálculo de propriedades de transmissão em heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As serão representativos daqueles que possivelmente ocorrem na prática como consequência de diferentes técnicas e/ou condições de crescimento de cristais. As Figuras 4 e 5 mostram diversos padrões de crescimento da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de largura  $\ell = 2a$ , sem e com rugosidade aleatória sobreposta.

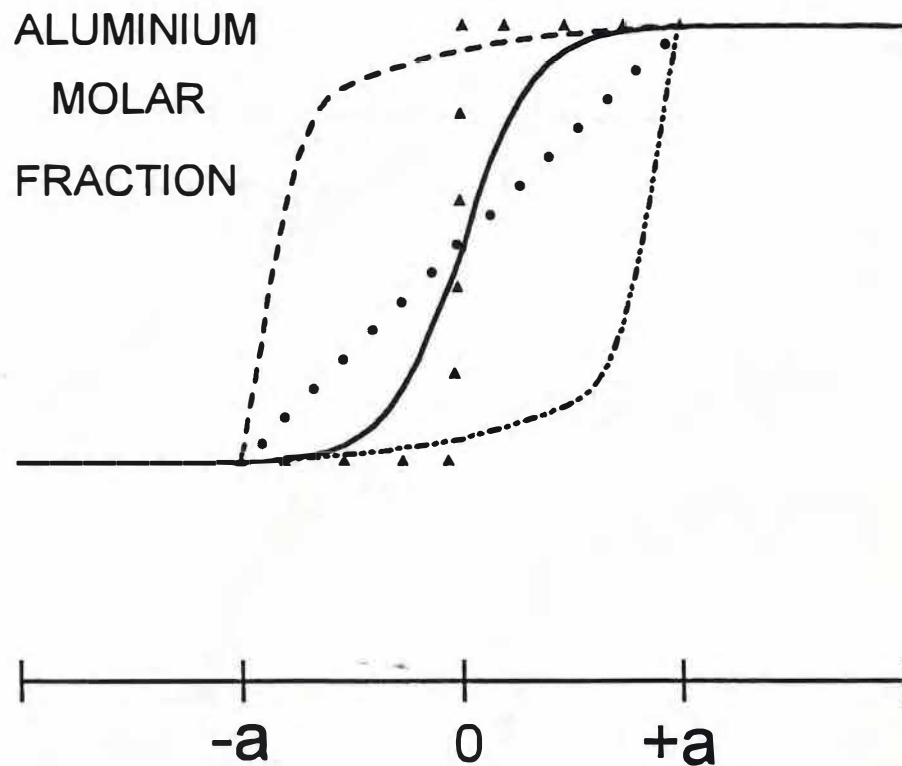


Figura 4 - Possíveis padrões de crescimento da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  através de uma heterojunção não-abrupta GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  de largura  $\ell = 2a$ :  $\chi_A(z)$ , crescimento abrupto (triângulos);  $\chi_L(z)$ , crescimento linear;  $\chi_S(z)$ , crescimento suave;  $\chi_W(z)$ , crescimento lento no início da região interfacial, seguido de um crescimento rápido no final da região interfacial;  $\chi_F(z)$ , crescimento rápido no início da região interfacial, seguido de um crescimento lento no final da região interfacial.

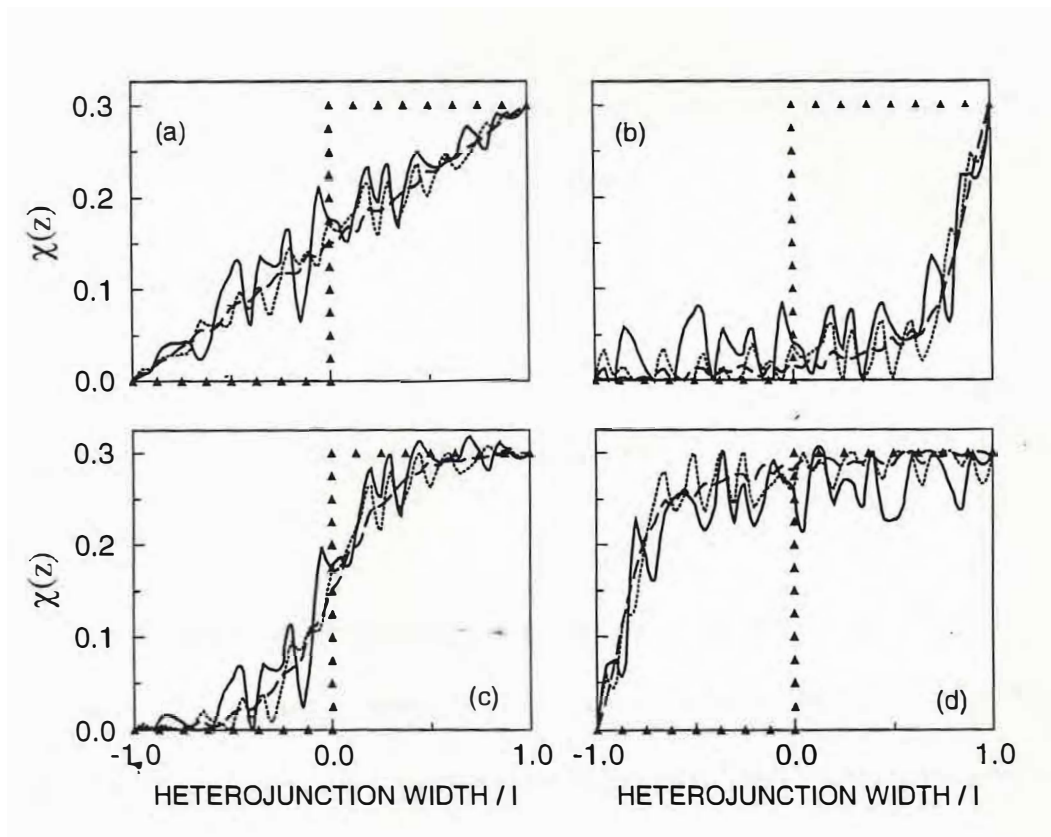


Figura 5 - Perfis interfaciais para as variações da fração molar de alumínio  $\chi(z)$  dadas na Fig. 4, mas com a super-posição de três graus de rugosidade aos padrões (a)  $\chi_L(z)$ , (b)  $\chi_W(z)$ , (c)  $\chi_S(z)$ , e (d)  $\chi_F(z)$ .

O potencial interfacial e a massa efetiva dos portadores são obtidos através das variações acima mencionadas, e também de qualquer outra variação de  $\chi(z)$ , através da hipótese (ii) apresentada na abertura deste Capítulo. De fato, segundo resultados experimentais compilados por Adachi [52] para GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , o *gap* direto de energia e a massa dos portadores relacionados à estrutura de bandas geradora deste *gap*, são

$$m_{\delta(\text{GaAs})}^* = \mu_{\delta,1(\text{GaAs})} m_o \quad (2.1)$$

$$m_{\delta(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})}^* = [\mu_{\delta,1(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})} + \mu_{\delta,2(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})} x] m_o \quad (2.2)$$

$$E_{(\text{GaAs})}^{\Gamma} = \varepsilon_{0(\text{GaAs})} m_o \quad (2.3)$$

$$E_{(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})}^{\Gamma} = \varepsilon_{0(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})} + \varepsilon_{1(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})} x + \varepsilon_{2(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})} x^2 \quad (2.4)$$

onde  $m_o$  é a massa do elétron livre, e  $\varepsilon_j$ ,  $\mu_{\delta,j}$  são constantes associadas com o tipo de portador ( $\delta = e$  para elétrons,  $\delta = lh$  para buracos leves, e  $\delta = hh$  para buracos pesados) e, se for o caso, com a dependência composicional de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  em  $x$  [52].

Através da hipótese (ii), ao se considerar a interface de uma hetero-estrutura GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , a diferença entre os *gaps* de energia de GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  produzem uma barreira de potencial na banda de condução que pode limitar o movimento dos portadores de uma dimensão (a direção de crescimento da hetero-estrutura), ficando os mesmos livres para se moverem em direções paralelas aos planos de crescimento  $z$ .

A diferença entre os *gaps* fica dividida entre elétrons e buracos, o que dá origem ao *band offset*  $Q_\delta$ , que determina a porcentagem do *gap* de energia para cada tipo de portador [58, 59]. O potencial da barreira GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As é dado então por

$$V_{\delta,x} = Q_\delta\{\varepsilon_1x + \varepsilon_2x^2\} \quad (2.5)$$

Com a hipótese (ii), a transformação  $x \Rightarrow \chi(z)$  é válida, de modo que, sem considerar rugosidades, as expressões para o potencial e a massa dos portadores na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As são dadas respectivamente por

$$V_{\delta,x}(z) = Q_\delta\{\varepsilon_1\mathcal{X}(z) + \varepsilon_2[\mathcal{X}(z)]^2\} \quad (2.6)$$

$$m_{\delta,x}(z) = \mu_{\delta,1} + \mu_{\delta,2}\mathcal{X}(z) \quad (2.7)$$

onde nas equações acima  $V_{\delta,x}(z)$  é dado em  $eV$ , enquanto  $m_{\delta,x}(z)$  é dada em unidade da massa do elétron livre  $m_0$ .

Para se considerar rugosidades (ver Fig. 5), é necessário incluir a contribuição de uma componente aleatória  $P(z)$  modulada por certa forma (a escolhada de uma forma gaussiana foi feita aqui)  $G_d(z)$  a perfis  $X(z) \equiv \chi_L(z), \chi_S(z), \chi_W(z), \chi_F(z)$ . O padrão de crescimento  $\chi_{l,d}(z)$  da interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta que permite a existência de rugosidades aleatórias é dado então por

$$\chi_{l,d}(z) = [1 + P(z)G_d(z)] X_l(z) \quad (2.8)$$

onde o índice  $l$  caracteriza o tipo de perfil suave, e o índice  $d$  o grau de rugosidade sobre o perfil suave. O potencial e a massa efetiva dos portadores na região interfacial são obtidos utilizando-se  $\chi_{l,d}(z)$  nas eqs. (2.6) e (2.7), respectivamente.

A inter-dependência entre o potencial interfacial e a massa efetiva dos portadores, ambos obtidos aqui através de  $\chi(z)$ , não é levada em conta em praticamente todas as descrições de hetero-interfaces semicondutoras não-abruptas [23-28]. Não somente o potencial interfacial, mas também a massa dos portadores com dependência espacial, é importante para o cálculo das propriedades de transmissão de hetero-junções  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não-abruptas. No Capítulo 3 do presente trabalho irá se mostrar que modelos que consideram representações abruptas para as interfaces, assim como aqueles que fazem a hipótese da massa efetiva constante na interface, possuem consideráveis limitações.

## 2.2 Operadores Energia Cinética

Para estudar a influência da dependência espacial da massa efetiva dos portadores na região interfacial nas propriedades de transmissão através de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, a utilização da teoria da massa efetiva para ligas semicondutoras, cuja composição varia gradual e suavemente, é plenamente justificável [34-37]. Ela envolve a utilização de operadores energia cinética com massa efetiva dependente da posição, e condições de continuidade envolvendo a função de onda, sua derivada e a própria massa efetiva dos portadores para a garantia da conservação da corrente através da interface.

A forma do operador energia cinética com massa dependente da posição é questão de controvérsias atualmente [26, 41-46, 60-63]. Morrow e Brownstein [41] consideraram a classe geral de operadores energia cinética

$$(-\hbar^2/2) m_\delta^\alpha \hat{p} m_\delta^\beta \hat{p} m_\delta^\gamma \quad (2.9)$$

com  $\alpha + \beta + \gamma = -1$ . Concluíram que somente formas com  $\alpha = \gamma$  são viáveis, o que leva ao seguinte operador energia cinética  $\mathcal{T}$  [41, 42]:

$$\mathcal{T} = (-\hbar^2/2)[m_\delta(z)]^\alpha \nabla [m_\delta(z)]^\beta \nabla [m_\delta(z)]^\alpha \quad (2.10)$$

onde  $2\alpha + \beta = -1$ , e condições de contorno dadas pela continuidade de  $m^\alpha(z)\Psi(z)$  e

$m^{\alpha+\beta}(z) \nabla_n \Psi(z)$ , com  $n$  caracterizando a derivada normal a heterojunção.

Csavinszky e Elabsy [60] mostraram que a energia de ligação de um átomo doador colocado no centro de um poço quântico depende do tipo de operador energia cinética utilizado, *i. e.* dos valores de  $\alpha$  e  $\beta$ . Galbraith e Duggan [61] determinaram não conclusivamente que  $\beta = -1$  ao comparar cálculos teóricos com espectra de fotoluminescência de excitação em poços quânticos GaAs/(Al,Ga)As. Brezini e Sebbani [62] obtiveram também a mesma forma para o operador energia cinética considerando o limite assintótico da energia próximo ao limite da banda.

Entretanto, Fu e Chao [63] mostraram que as sub-bandas de poços quânticos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As múltiplos não são sensíveis à forma do operador energia cinética, enquanto Li e Kuhn [26] mostraram que o próprio *band offset* depende da forma particular do operador energia cinética utilizado. Recentemente, Hagston *et al.* [46] obtiveram que não é uma boa escolha o operador energia cinética

$$[\hat{p}(1/m)\hat{p}]/2 \tag{2.11}$$

que foi proposto originalmente por Ben Daniel e Duke [64]. Sugeriram em contrapartida o operador energia cinética

$$[(\sqrt{1/m})\hat{p}\sqrt{(1/m)}\hat{p}]/2 \tag{2.12}$$

Mesmo com todos os problemas mencionados, o operador energia cinética (em uma dimensão) mais utilizado atualmente continua sendo aquele dado pela Eq. (2.11). Esta forma será a mais frequentemente utilizada no presente trabalho para o cálculo das propriedades de transmissão de portadores através de barreiras não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, com condições de contorno em  $\Psi(z)$  e  $[m(z)]^{-1}(d\Psi(z)/dz)$  em  $z = \pm a$ . No entanto, quando se for abordar o problema da influência do operador energia cinética nas propriedades de transmissão de barreiras não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As na Seção 3.4, a forma mais geral dada pela Eq. (2.10) será utilizada.

Como resultados analíticos parecem ser bem pouco prováveis de serem obtidos quando a dependência espacial da massa efetiva dos portadores é considerada, uma generalização do método de *multisteps* de Ando e Itoh [48] será apresentada na próxima Seção. Ela será utilizada no Capítulo 3 para cálculos numéricos de coeficientes de transmissão de barreiras não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As para perfis de variação da fração molar de alumínio como os descritos nas Figs. 4 e 5.

## 2.3 O Método Numérico

Métodos numéricos para a solução de equações diferenciais são bastante úteis face o limitado número das mesmas que possuem soluções analíticas. No caso particular da equação de Schroedinger, embora já existam métodos para a sua solução numérica como a aproximação de degraus múltiplos (*multisteps*) [48] métodos de elementos finitos [64], e a aproximação linear por partes [65, 66], outros continuam a surgir [67].

Neste trabalho, o método de *multisteps* proposto por Ando e Itoh [48] será generalizado para ser aplicado a equações do tipo da Eq.(2.9), *i. e.* para  $\beta \neq 0$ . Neste método tanto o potencial quanto a massa efetiva dependente da posição são decompostos em segmentos, os quais podem ser reconhecidos como constantes. Ambos ficam então representados por uma sequência de  $N$  segmentos, como na Fig. 6, onde uma função qualquer  $f(x)$  é dividida em 10 segmentos.

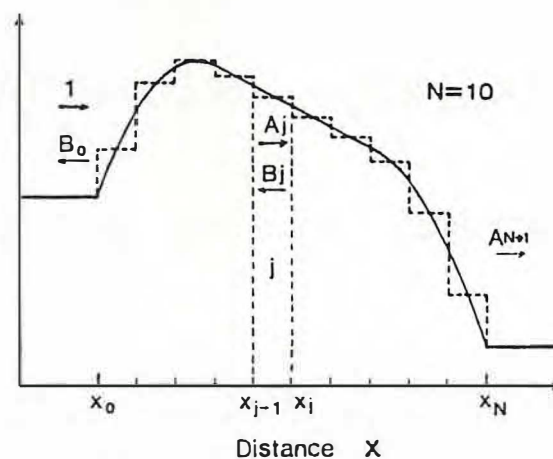


Fig. 6 - Partição em degraus múltiplos de uma função genérica  $f(x)$ .

Para o caso de uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com massa efetiva dependente da posição, divide-se na região interfacial tanto o potencial quanto a massa efetiva dos portadores em  $N$  intervalos de iguais comprimentos. O  $j$ -ésimo intervalo  $(z_{j-1}, z_j)$  apresenta um potencial e uma massa efetiva dados por

$$V(z) = V_j = V(\bar{z}_j) \quad (2.13)$$

$$m(z) = m_j = m(\bar{z}_j) \quad (2.14)$$

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 Schroedinger no  $j$ -ésimo intervalo é

$$\Psi_j(z) = A_j e^{ik_j z} + B_j e^{-ik_j z} \quad (2.15)$$

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

$$m_j^\alpha \Psi_j(z_j) = m_{j+1}^\alpha \Psi_{j+1}(z_j) \quad (2.16)$$

$$m_j^{\alpha+\beta} (d\Psi_j(z_j)/dz) = m_{j+1}^{\alpha+\beta} (d\Psi_{j+1}(z_j)/dz) \quad (2.17)$$

Substituindo-se a Eq. (2.15) nas Eqs. (2.16, 17), o reajuste de alguns termos resulta em

$$A_{j+1} = \frac{1}{2} \left[ \frac{m_j}{m_{j+1}} \right]^\alpha \{A_j e^{-i\Delta k_j z} (1 + \theta) + B_j e^{-i\Sigma k_j z} (1 - \theta)\} \quad (2.18)$$

$$B_{j+1} = \frac{1}{2} \left[ \frac{m_j}{m_{j+1}} \right]^\alpha \{A_j e^{+i\Delta k_j z} (1 - \theta) + B_j e^{+i\Sigma k_j z} (1 + \theta)\} \quad (2.19)$$

onde  $\Sigma k_j = k_j + k_{j+1}$ ,  $\Delta k_j = k_{j+1} - k_j$  e  $\theta = [m_j/m_{j+1}]^\beta [k_j/k_{j+1}]$ .

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

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

onde

$$M_j = \frac{1}{2} \left[ \frac{m_j}{m_{j+1}} \right]^\alpha \begin{pmatrix} (1 + \theta)e^{-i\Delta K_j z} & (1 - \theta)e^{-i\Sigma K_j z} \\ (1 - \theta)e^{+i\Sigma K_j z} & (1 + \theta)e^{+i\Delta K_j z} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Utilizando-se a Eq. 2.20 para todos os  $N$  intervalos, relaciona-se os últimos coeficientes  $A_{N+1}, B_{N+1}$  com os primeiros  $A_0, B_0$ :

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

onde

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \prod_{j=0}^N M_j \quad (2.23)$$

Fazendo-se  $A_0 = 1$  e  $B_{N+1} = 0$ , tem-se

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

Resolvendo-se a equação acima, encontra-se que

$$B_0 = -\frac{M_{21}}{M_{22}}, \quad (2.25)$$

$$A_{N+1} = \frac{\det(M)}{M_{22}} \quad (2.26)$$

Como

$$\det(M) = \left[ \frac{m_j}{m_{j+1}} \right]^{\beta+2\alpha} \left[ \frac{k_j}{k_{j+1}} \right] \quad (2.27)$$

e tem-se  $2\alpha + \beta = -1$ , encontra-se que

$$A_{N+1} = \left[ \frac{m_{N+1}}{m_0} \right] \left[ \frac{k_0}{k_{N+1}} \right] \frac{1}{M_{22}} \quad (2.28)$$

e conseqüentemente o coeficiente de transmissão é dado por

$$\mathcal{T} = |A_{N+1}|^2 \cdot \left[ \frac{k_{N+1}}{k_0} \right] \left[ \frac{m_0}{m_{N+1}} \right] \quad (2.29)$$

O número  $N$  de partições a ser utilizado para se obter uma boa convergência no resultado depende do padrão interfacial da fração molar em questão, que determina por sua vez o potencial e a massa efetiva dos portadores. Por exemplo, interfaces rugosas necessitam de um número maior de partições para serem bem descritas do que interfaces suaves.

Os resultados obtidos neste Capítulo serão a seguir utilizados para o cálculo das propriedades de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

## **CAPITULO 3**

## RESULTADOS E DISCUSSOES

De posse dos resultados apresentados no Capítulos, as propriedades de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As serão calculadas para determinados tipos de interfaces. Heterojunções foram escolhidas porque elas são o elemento fundamental de todas as hetero-estruturas não-abruptas. Alargamento ou encurtamento suplementares de dimensões características das hetero-estruturas (largura do poço, largura da barreira etc) não estão presentes neste caso, e aspectos fundamentais relativos ao papel da interface podem transparecer mais claramente. Tem ainda a virtude de que a análise dos resultados em termos de Mecânica Quântica se faz no seu nível mais fundamental.

O material semiconductor GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As foi escolhido por ser o mais utilizado em experimentos, e para o qual as técnicas de crescimento são as mais avançadas. Os seus parâmetros  $\epsilon_i, \mu_i$ , fundamentais para a determinação da variação do potencial e da massa efetiva dos portadores na direção  $\Gamma$ , foram obtidos do trabalho de Adachi [52].

Neste trabalho faz-se a hipótese de bandas parabólicas na direção  $\Gamma$ . Trata-se de uma aproximação, desde que as energias dos elétrons consideradas nos cálculos realizados neste trabalho, são superiores, em geral, a  $0.34eV$  e, portanto, transições dos elétrons do vale  $\Gamma$  [ $E_g^\Gamma(GaAs) = 1.55eV$  para o vale  $L$  [ $E_g^L(GaAs) = 1.89eV$ ] seriam possíveis através de fônons [68]. Os resultados obtidos aqui podem então

ser melhor comparados com experimentos realizados a baixas temperaturas, onde a influência de vibrações da rede cristalina são menores.

Também não se considera aqui a não-parabolicidade das bandas de condução e valência, que gera uma dependência da massa dos portadores com a energia dos mesmos. Esta dependência é um efeito de segunda ordem, e pouco deve modificar os resultados aqui obtidos para as energias mais baixas dos portadores. No entanto, para portadores com energia elevada, as modificações devido a não-parabolicidade podem se tornar relevantes [69].

Neste Capítulo será abordado inicialmente o problema da influência da variação da massa efetiva dos portadores nas propriedades de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, uma continuação/complementação natural do trabalho de Freire, Auto e Farias [30, 31]. Este estudo tem relevância porque muitos dos modelos que levam em conta a existência de interfaces não-abruptas desconsideram a variação da massa efetiva na região interfacial. Resultados iniciais da pesquisa já foi objeto de uma publicação de Ribeiro Filho, Farias e Freire [50].

A seguir, será investigada a influência de padrões de crescimento da liga semicondutora na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As nas suas propriedades de transmissão. Neste caso, os resultados obtidos são como uma indicação do que futuros experimentos poderão medir, desde que, atualmente, mesmo as mais avançadas técnicas de crescimento são bastante limitadas quando se trata de um controle realmente preciso do crescimento de interfaces. Deve destacar-se que progressos estão sendo feitos nesta

direção [57]. Um trabalho contendo alguns dos resultados obtidos foi recentemente submetido a publicação [70].

O Capítulo prossegue com a investigação do papel de rugosidades sobrepostas a perfis suaves da variação interfacial da fração molar de alumínio nas propriedades de transmissão de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Este também é um tema importante pois muitos trabalhos têm sido publicados demonstrando que elas são relevantes nas propriedades óticas (ver, por exemplo, [16] e suas referências), e portanto também devem ser importantes para as propriedades de transmissão. Uma comunicação dos resultados obtidos foi submetida para apresentação no *2nd International Workshop on Quantum Functional Devices*, a se realizar em 23-25 Maio 1995, em Kunibiki Messe, Matsue, Japan.

Para encerrar o Capítulo, será abordada a influência do tipo de operador energia cinética com massa dependente da posição nas propriedades de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Este é um assunto extremamente palpitante, e que atualmente está em efervescência e longe de soluções conclusivas, como pode ser observado no Capítulo 2, Seção 2.2. Os resultados, ainda bem prospectivos mas interessantes, foram submetidos como um trabalho a ser apresentado no *7<sup>th</sup> Brazilian Workshop on Semiconductor Physics*, que será realizado em 16-21 Julho 1995, no Rio de Janeiro, Brasil.

### 3.1 Além da Aproximação da Massa Efetiva Constante na Interface

Para descrever a dependência espacial de hetero-estruturas semicondutoras na composição da liga, considera-se em geral uma massa efetiva para os portadores que é dependente da posição,  $m = m(z)$ . Entretanto, mesmo atualmente muitos dos trabalhos teóricos fazem a hipótese de uma representação abrupta para as hetero-interfaces semicondutoras, embora resultados experimentais mostrem que as regiões interfaciais têm largura da ordem de duas células unitárias nos melhores casos [10,11].

Conseqüentemente, a dependência espacial da massa efetiva dos portadores é de fato limitada quase exclusivamente a descontinuidades do tipo degrau nas hetero-interfaces semicondutoras, sendo usada somente para assegurar continuidade das funções de onda e suas derivadas nas interfaces. Informações claras sobre o papel da massa dos portadores dependente da posição só podem ser obtidas ao se considerar variações suaves da mesma.

Freire, Auto e Farias [30, 31] usaram seu modelo para o cálculo de propriedades de transmissão em heterojunções não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , mas utilizaram a aproximação da massa efetiva dos portadores constante na interface. Obtiveram resultados analíticos mostrando que modelos abruptos para as interfaces podem descrever propriedades de transmissão de heterojunções medidas em experimentos somente quando as larguras das interfaces dos cristais são menores que  $2 LP$ . Eles

demonstraram também a existência de picos de ressonância no coeficiente de transmissão quando a largura interfacial era superior a  $4 LP$ . Posteriormente, os mesmos autores estudaram propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas submetidas a campo elétrico [53].

Nesta Seção irá se considerar a dependência linear da massa efetiva dos portadores através da interface para se estudar a sua influência nas propriedades de transmissão de heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas.

Uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com variação linear da fração molar de alumínio em  $-a < z < +a$  (limites da região de transição), são descritas segundo o modelo de Freire, Auto e Farias [30, 31] pelas seguintes expressões:

- Região GaAs ( $z < -a$ )

$$V_{x,\delta}(z)/Q_\delta = 0 \quad (3.1)$$

$$m_{x,\delta}(z)/m_0 = \mu_{1,\delta} \quad (3.2)$$

- Região de Liga Mista ( $-a < z < +a$ )

$$V_{x,\delta}(z)/Q_\delta = V_0 + (V_1/2a)z + (V_2/a^2)z^2 \quad , \quad (3.3)$$

$$m_{x,\delta}(z)/m_0 = m_{0,\delta} + (m_{1,\delta}/2a)z \quad (3.4)$$

onde

$$V_0 = (x/2)[\varepsilon_1 + \varepsilon_2(x/2)] \quad (3.5)$$

$$V_1 = x[\varepsilon_1 + \varepsilon_2 x] \quad (3.6)$$

$$V_2 = \varepsilon_2(x/2)^2 \quad (3.7)$$

$$m_{0,\delta} = \mu_{1,\delta} + \mu_{2,\delta}(x/2) \quad (3.8)$$

$$m_{1,\delta} = \mu_{2,\delta}x \quad (3.9)$$

• Região  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $z > +a$ )

$$V_{x,\delta}(z)/Q_\delta = x[\varepsilon_1 + \varepsilon_2 x] \quad (3.10)$$

$$m_{x,\delta}(z)/m_0 = \mu_{1,\delta} + \mu_{2,\delta}x \quad (3.11)$$

onde  $z$  é a coordenada associada a direção de crescimento,  $x$  é a fração molar de alumínio na região  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $Q_\delta$  é o *band offset* para o tipo  $\delta$  de portador ( $\delta = e$  para elétrons,  $\delta = hh$  para buracos pesados,  $\delta = lh$  para buracos leves),  $m_0$  é a massa do elétron no espaço livre, e  $\varepsilon_i(\mu_{i,\delta})$  são constantes obtidas de experimentos e associadas ao tipo de liga semicondutora. Elas se originam da dependência em  $x$  do gap de energia na direção  $\Gamma$  (dependência em  $x$  da massa dos portadores). A Figura 7 mostra uma representação gráfica de uma heterojunção  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não-abrupta.

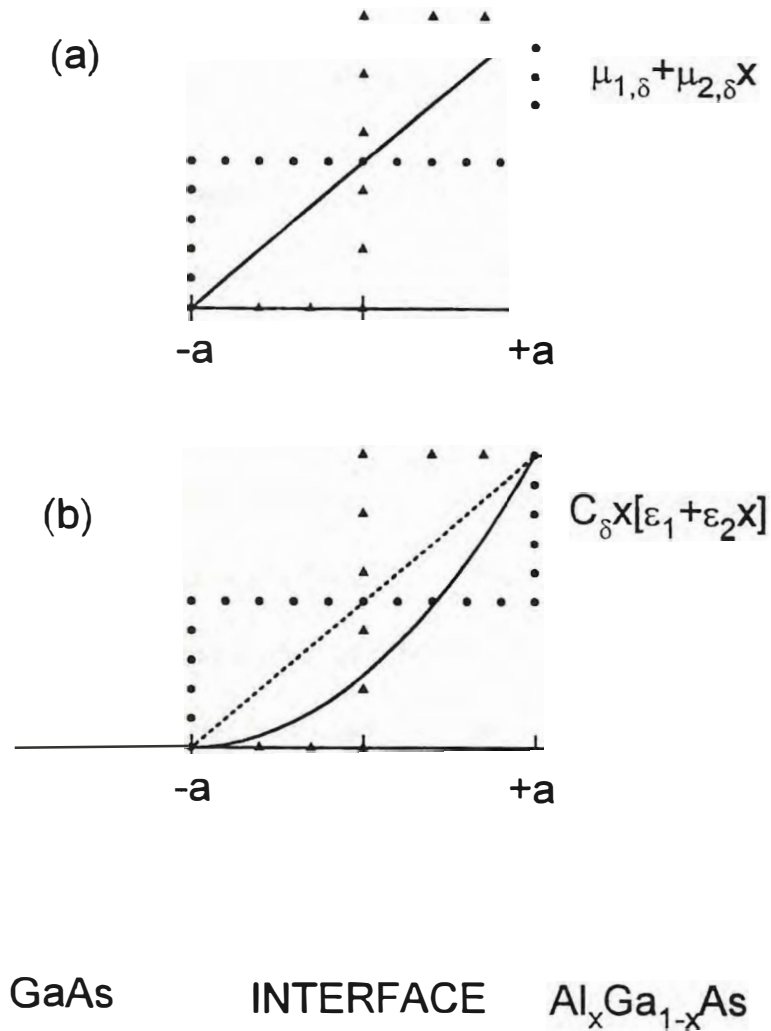


Figura 7 - (a) Perfil da massa efetiva de um portador em uma heterojunção GaAs/ $Al_x Ga_{1-x} As$  não-abrupta: variação abrupta (triângulos), aproximação da massa efetiva constante (círculos), função linear (contínua); (b) perfil do potencial em uma heterojunção GaAs/ $Al_x Ga_{1-x} As$  não-abrupta: variação abrupta (triângulos), aproximação do potencial constante na interface (círculos), aproximação linear (tracejada); potencial parabólico completo (contínua).  $2a$  é a largura da interface, e  $z$  é a coordenada da direção de crescimento da heterojunção.

Portadores com energia superior ao degrau de potencial são considerados, e suas propriedades de transmissão através de heterojunções GaAs/Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>As não-abruptas são calculadas. Faz-se a hipótese de que o *band offset* para elétrons  $Q_e = 0.60$ , enquanto para buracos leves e pesados  $Q_{lh} = Q_{hh} = 0.40$ .

Os coeficientes de transmissão de elétrons, buracos leves e pesados são apresentados nas Figs. 8-10, respectivamente, para várias larguras interfaciais da heterojunção. Eles foram calculados além da aproximação da massa efetiva constante, *i. e.* considerando a variação linear da massa efetiva (MLI) na interface, tanto para a aproximação do potencial constante na interface (PCI), como para o potencial parabólico completo na interface (PPI). Os resultados dos cálculos realizados com a aproximação do potencial linear na interface não são apresentados pois eles dão essencialmente o mesmo resultado calculado com o PPI. Em todos os conjuntos de Figuras é incluído o coeficiente de transmissão calculado para a heterojunção GaAs/Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>As abrupta, assim-como aquele obtido com PIP e a aproximação da massa efetiva constante na interface (MCI). Nas Figuras, a energia dos portadores é normalizada em  $V_{xe} = Q_e x [\epsilon_1 + \epsilon_2 x]$ .

As Figs. 8-10 mostram que MCI-PCI não é uma boa aproximação para nenhum tipo de portador, principalmente quando a largura da interface  $\ell > 4, LP$ . Entretanto, pode ser observado nas Figuras que MCI-CIP é semelhante a MCI-PPI.

Consequentemente, a influência da dependência espacial da massa efetiva dos portadores na interface nas propriedades de transmissão é tão importante quanto a influência da dependência espacial do potencial, principalmente para buracos pesados ou interfaces largas.

Quando  $\ell < 4,LP$ , o coeficiente de transmissão obtido com MCI-PCI é sempre mais próximo do que aquele calculado para o caso abrupto quando comparado com aqueles obtidos com MCI-PPI.

Devido a massa efetiva dos elétrons em GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  serem bem próximas daquelas dos buracos leves, as diferenças entre as transmissões dos mesmos são principalmente uma consequência dos *band offsets*,  $Q_e$  e  $Q_{hh}$ . Assim, ao se comparar as Figs. 8 e 9, pode se concluir que os efeitos interfaciais nas propriedades de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  crescem com o *band offset* e com a fração molar de alumínio em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Isto ocorre porque ambos agem fazendo decrescer o momento dos portadores depois que estes ultrapassam a interface.

Efeitos da massa efetiva dos portadores nas propriedades de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  são mais importantes do que  $Q_\delta$  e  $x$ . De fato, os coeficientes de transmissão para buracos leves e buracos pesados apresentados nas Figs. 9 e 10, respectivamente, mostram que o último é mais dependente da largura da interface do que o primeiro. Uma heterojunção pode ser considerada

abrupta para buracos leves quando sua largura interfacial é da mesma ordem ou maior do que  $2 LP$ , enquanto para buracos pesados isto ocorre quando a largura interfacial é menor do que  $1 LP$ .

Pode se concluir, indo-se além da aproximação da massa efetiva constante na interface, que modelos abruptos para o potencial são capazes de descrever de forma conveniente as propriedades de transmissão de elétrons e buracos leves (buracos pesados) em heterojunções reais somente quando as suas larguras interfaciais  $\ell < 2,LP$  ( $\ell < 1,LP$ ).

Considerável discordância entre resultados teóricos obtidos com a representação abrupta para a interface e medições experimentais em cristais semicondutores com larguras interfaciais  $\ell > 2,LP$  irá ocorrer, principalmente aquelas relacionadas a buracos pesados.

A dependência espacial linear da massa de elétrons e buracos leves na interface é responsável pela ausência de picos de ressonância para  $\ell \geq 8,LP$  cuja existência tinha sido prevista por Freire, Auto e Farias [30, 31]. Deve ser observado que picos de ressonância do tipo estão ausentes no coeficiente de transmissão de buracos pesados, na e além da aproximação da massa efetiva na interface. Isto ocorre porque buracos pesados são mais pesados do que elétrons e buracos leves.

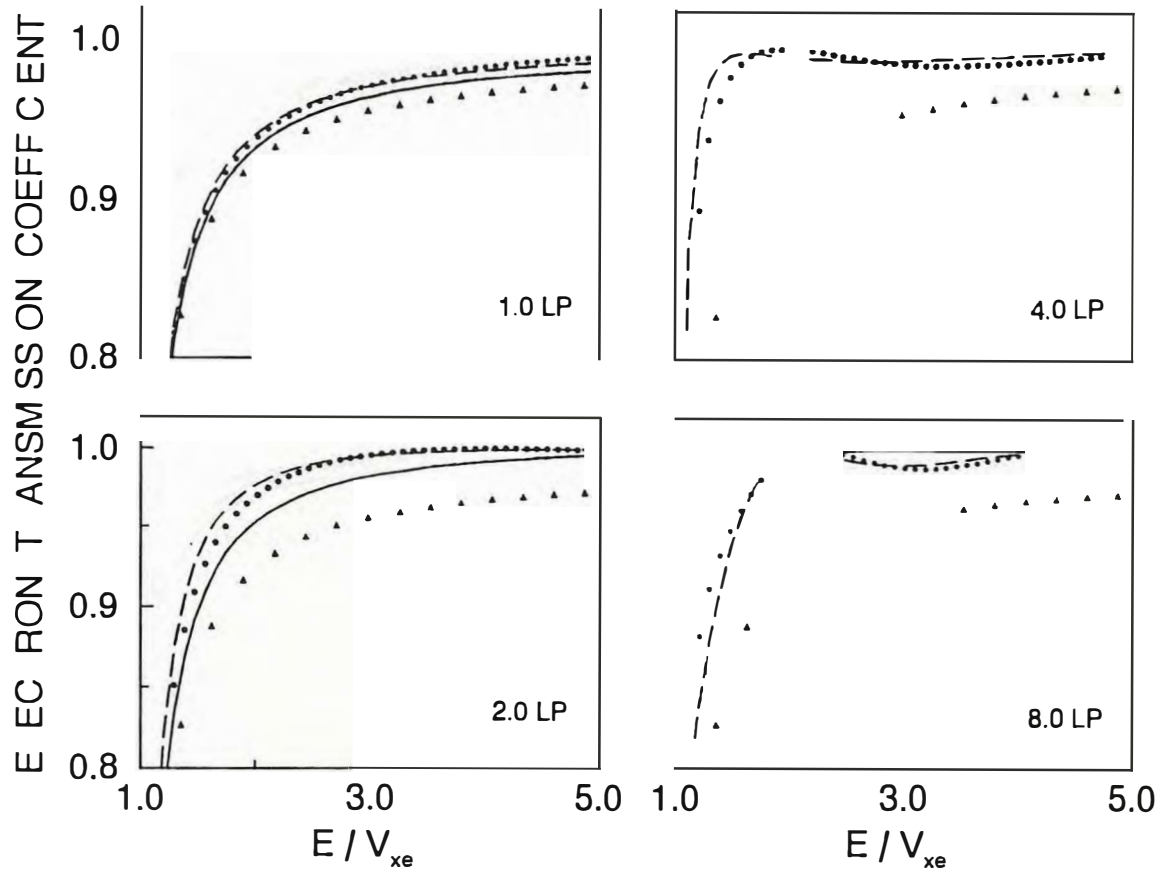


FIGURA 8 - Coeficientes de transmissão de elétrons através de heterojunções não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  com interfaces de 1, 2, 4 e 8 parâmetros de rede do GaAs calculados com: massa efetiva com dependência linear na direção de crescimento  $z$ , aproximação do potencial constante na interface (tracejada); massa efetiva com dependência linear na direção de crescimento  $z$ , potencial parabólico completo na interface (contínua); massa efetiva constante na interface, potencial parabólico completo na interface (círculos). O coeficiente de transmissão de elétrons através de uma heterojunção não-abrupta GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (triângulos) estão também incluídos para comparação.

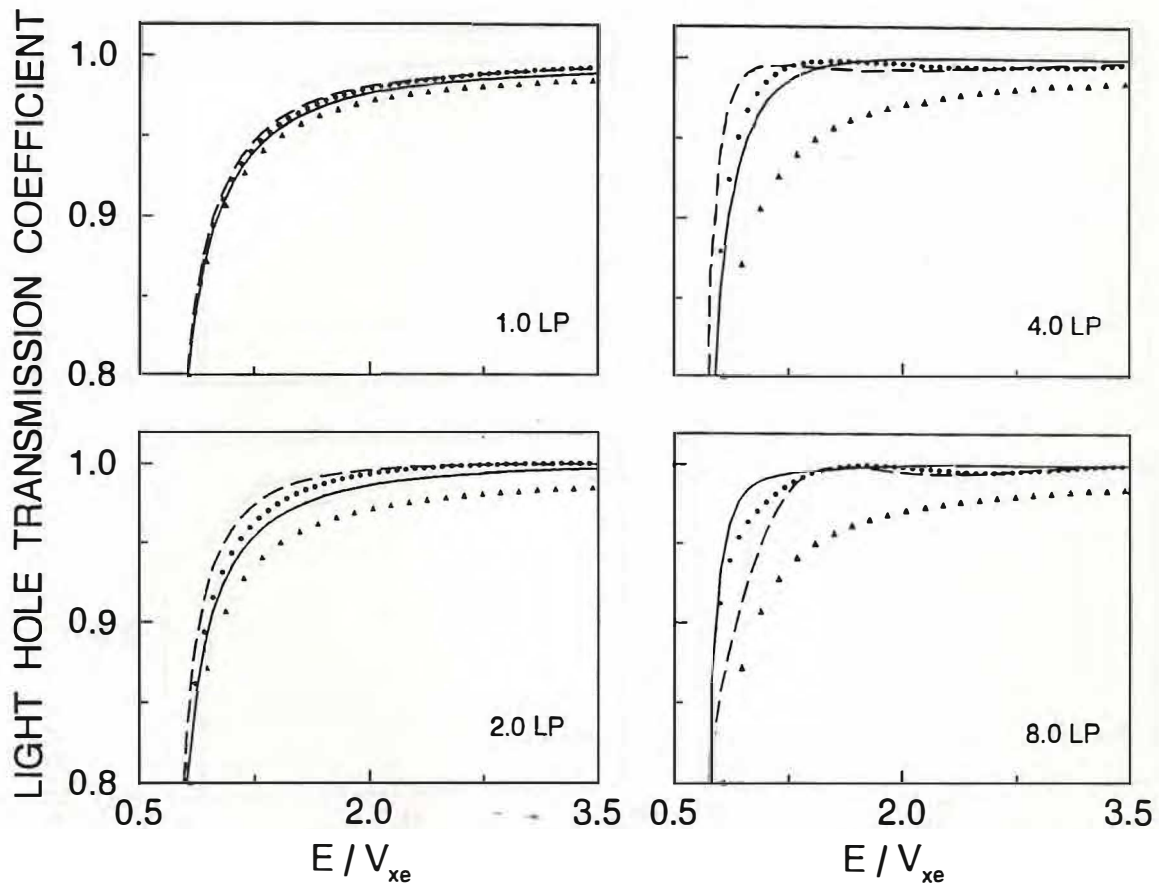


FIGURA 9 - Coeficientes de transmissão de buracos leves através de heterojunções não-abruptas  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  com interfaces de 1, 2, 4 e 8 parâmetros de rede do GaAs calculados com: massa efetiva com dependência linear na direção de crescimento  $z$ , aproximação do potencial constante na interface (tracejada); massa efetiva com dependência linear na direção de crescimento  $z$ , potencial parabólico completo na interface (contínua); massa efetiva constante na interface, potencial parabólico completo na interface (círculos). O coeficiente de transmissão de buracos leves através de uma heterojunção não-abrupta  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  estão também incluídos para comparação.

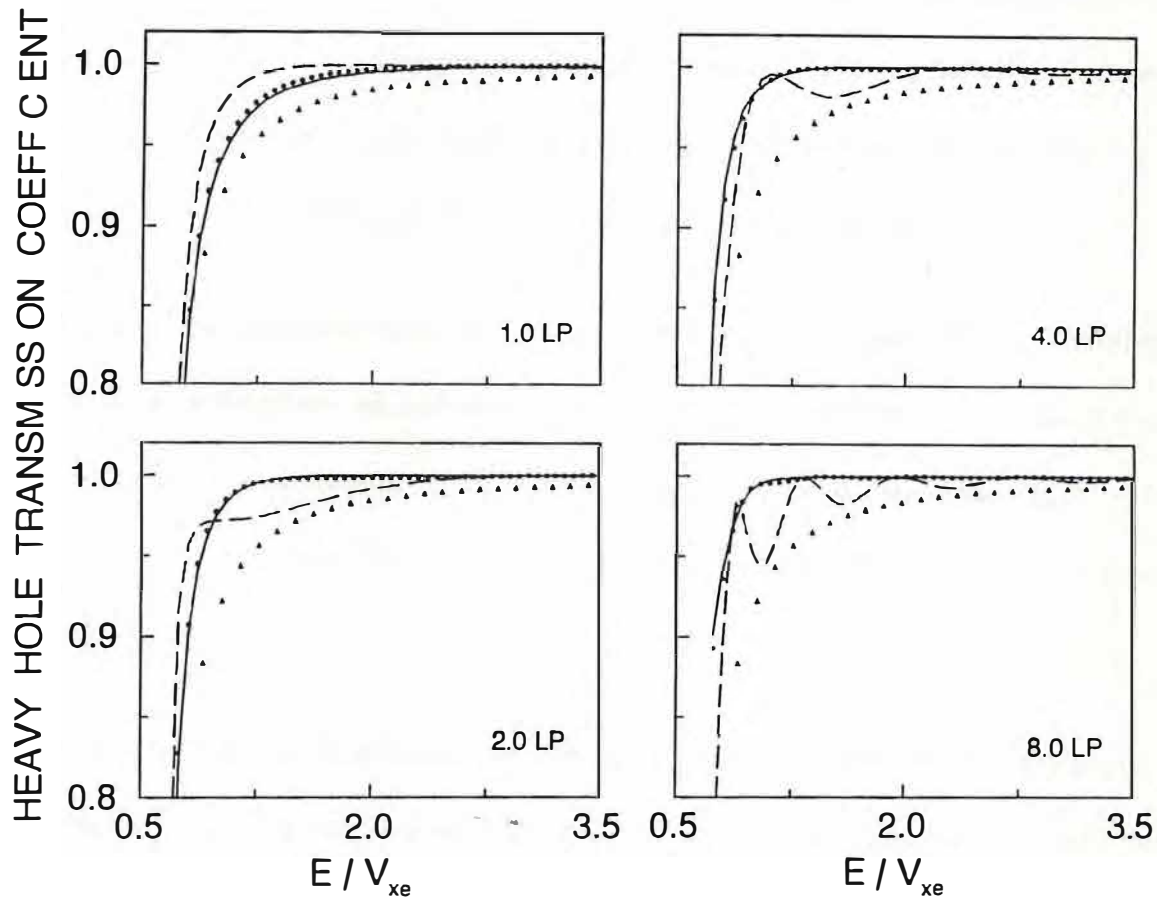


FIGURA 10 - Coeficientes de transmissão de buracos pesados através de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com interfaces de 1, 2, 4 e 8 parâmetros de rede do GaAs calculados com: massa efetiva com dependência linear na direção de crescimento  $z$ , aproximação do potencial constante na interface (tracejada); massa efetiva com dependência linear na direção de crescimento  $z$ , potencial parabólico completo na interface (contínua); massa efetiva constante na interface, potencial parabólico completo na interface (círculos). O coeficiente de transmissão de buracos pesados através de uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (triângulos) estão também incluídos para comparação.

## 3.2 A Influência de Padrões de Crescimento da Interface na Transmissão

Para investigar a influência de padrões de crescimento interfaciais nas propriedades de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, cinco padrões de crescimento foram utilizados, todos representativos de variações da liga semicondutora geradas na interface por diferentes técnicas de crescimento.

A Fig. 11(a) mostra os cinco padrões de crescimento da fração molar de alumínio  $\mathcal{X}(z)$  através da interface não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de largura  $\ell = 2a$ . Conforme o esquema apresentado na Seção 2.1, pode se obter o potencial  $V_{\delta,x}(z)$  e a massa  $m_{\delta,x}(z)$  a partir de  $\mathcal{X}(z)$ . Eles são mostrados nas Figs. 11(b) e 11(c), respectivamente.

Para o cálculo das propriedades de transmissão com os padrões de crescimento dados na Fig. 11, um operador energia cinética com massa efetiva dependente da posição tem que ser usado. O operador  $\mathcal{T} = [(-\hbar^2/2) [(d/dz) m^{-1}(z) (d/dz)]]$  foi o escolhido nesta Seção, embora várias expressões para  $\mathcal{T}$  existam, como discutido no Capítulo 2 do presente trabalho. Ela parece ser a mais razoável, muito embora o problema da determinação do operador mais correto ainda esteja em aberto (ver Capítulo 2, Seção 2.2 e referências lá citadas).

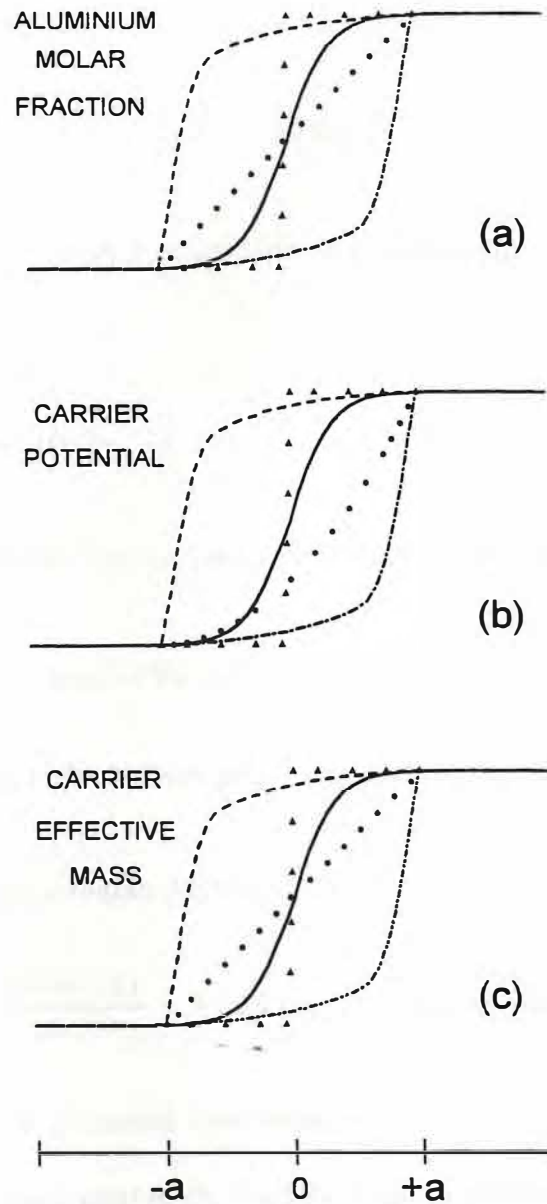


FIGURA 11 - (a) Vários padrões de crescimento para a fração molar de alumínio  $\mathcal{X}(z)$  através da interface de uma heterojunção não-abrupta de largura  $\ell = 2a$ : crescimento abrupto  $\mathcal{X}_A(z)$  (triângulos); crescimento linear  $\mathcal{X}_L(z)$  (círculos); crescimento suave  $\mathcal{X}_S(z)$  (contínua); crescimento lento no início da região interfacial, seguido por um crescimento rápido no final -  $\mathcal{X}_W(z)$  (pontuada tracejada), e sua imagem especular no plano  $z = x - \mathcal{X}_F(z)$  (tracejada); (b) Variação do potencial na interface obtida dos padrões de crescimento apresentados na Fig. 1(a). A legenda dos gráficos é a mesma utilizada para caracterizar os padrões de crescimento  $\mathcal{X}(z)$ ; (c) Variação da massa efetiva dos portadores na interface obtida dos padrões de crescimento apresentados na Fig. 1(a). A legenda dos gráficos é a mesma utilizada para caracterizar os padrões de crescimento  $\mathcal{X}(z)$ .

A equação de autovalores para a região  $z < -a$  é

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\delta} \frac{d^2 \Psi_\delta(z)}{dz^2} = E_\delta \Psi_\delta(z) \quad (3.12)$$

onde  $m_\delta$  é a massa efetiva do  $\delta$ -ésimo tipo de portador em GaAs, e  $m_\delta = m_{\delta,x}(-a) =$

Para a região interfacial  $-a < z < +a$ , a equação de autovalores é

$$\begin{aligned} & (-\hbar^2/2) \{ (d/dz) [m_{\delta,x}(z)]^{-1} (d/dz) \} \Psi_{\delta,x}(z) + \\ & V_{\delta,x}(z) \Psi_{\delta,x}(z) = E_{\delta,x} \Psi_{\delta,x}(z) \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde  $V_{\delta,x}(z)$  e  $m_{\delta,x}(z)$  são obtidos pelo esquema já apresentado na Seção 2.1.

Finalmente, para a região  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$   $z > +a$ , a equação de autovalores é

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\delta,1}} \frac{d^2 \Psi_{\delta,1}(z)}{dz^2} + V_{\delta,1} \Psi_{\delta,1}(z) = E_{\delta,1} \Psi_{\delta,1}(z) \quad (3.14)$$

onde  $V_{\delta,1}$  é o valor do potencial interfacial em  $z = +a$ ,  $V_{\delta,1} = V_{\delta,x}(+a) = Q_\delta[\varepsilon_1 x + \varepsilon_2 x^2]$  e  $m_{\delta,1}$  é a massa efetiva do  $\delta$ -ésimo tipo de portador em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , com  $m_{\delta,1} = m_{\delta,x}(+a) = \mu_{\delta,1} + \mu_{\delta,2} x$ .

O método numérico para solução das Eqs. (3.12-3.14) foi obtido/apresentado no Capítulo 2, Seção 2.3. *Band offsets*  $Q_e = 0.6$ ,  $Q_h = 0.4$  foram utilizados nos cálculos numéricos, assim como uma fração molar  $x = 0.45$  para  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . O coeficiente de transmissão calculado com o potencial interfacial e a massa efetiva dos portadores é denominado:  $T_A$ , quando o perfil abrupto  $\mathcal{X}_A(z)$  da fração molar de

alumínio é utilizado;  $T_L$ , quando o perfil linear  $\mathcal{X}_L(z)$  da fração molar de alumínio é utilizado;  $T_S$ , quando o perfil suave  $\mathcal{X}_S(z)$  da fração molar de alumínio é utilizado  $T_W$  ( $T_F$ ), quando o perfil de crescimento lento (rápido) da fração molar de alumínio no início da região interfacial, seguido por um crescimento rápido (lento) no fim da região interfacial, *i. e.*  $\mathcal{X}_W(z)$  [ $\mathcal{X}_F(z)$ ] é utilizado.

Para o caso de elétrons, a Fig. 12 mostra que  $T_L$  é mais próximo de  $T_A$  do que  $T_S$  quando  $\ell \leq 2 LP$ . Por outro lado,  $T_F$  sempre é mais próximo de  $T_A$  do que  $T_L$ ,  $T_S$  e  $T_W$ . Isto ocorre porque neste caso, heterojunções não-abruptas centradas em  $z = 0$  parecem mais heterojunções abruptas localizada em  $z = -a$  (a dependência espacial da massa efetiva do elétron proíbe um comportamento equivalente de  $T_W$ ). Se a largura da interface é pequena,  $T_W$  é o menor de todos os coeficientes de transmissão para uma dada energia do elétron, e o único a apresentar ressonâncias quando  $\ell \sim 4 LP$ . Todos os coeficientes de transmissão dos elétrons crescem com o aumento da largura interfacial de  $0 LP$  até  $4 LP$ , exceto  $T_S$  que decresce.

Em uma análise da propagação de elétrons em hetero-estruturas, Price sugeriu que oscilações na probabilidade de transmissão de elétrons poderiam estar associadas a perfis estruturais da barreira [71]. Os resultados obtidos aqui confirmam esta predição.

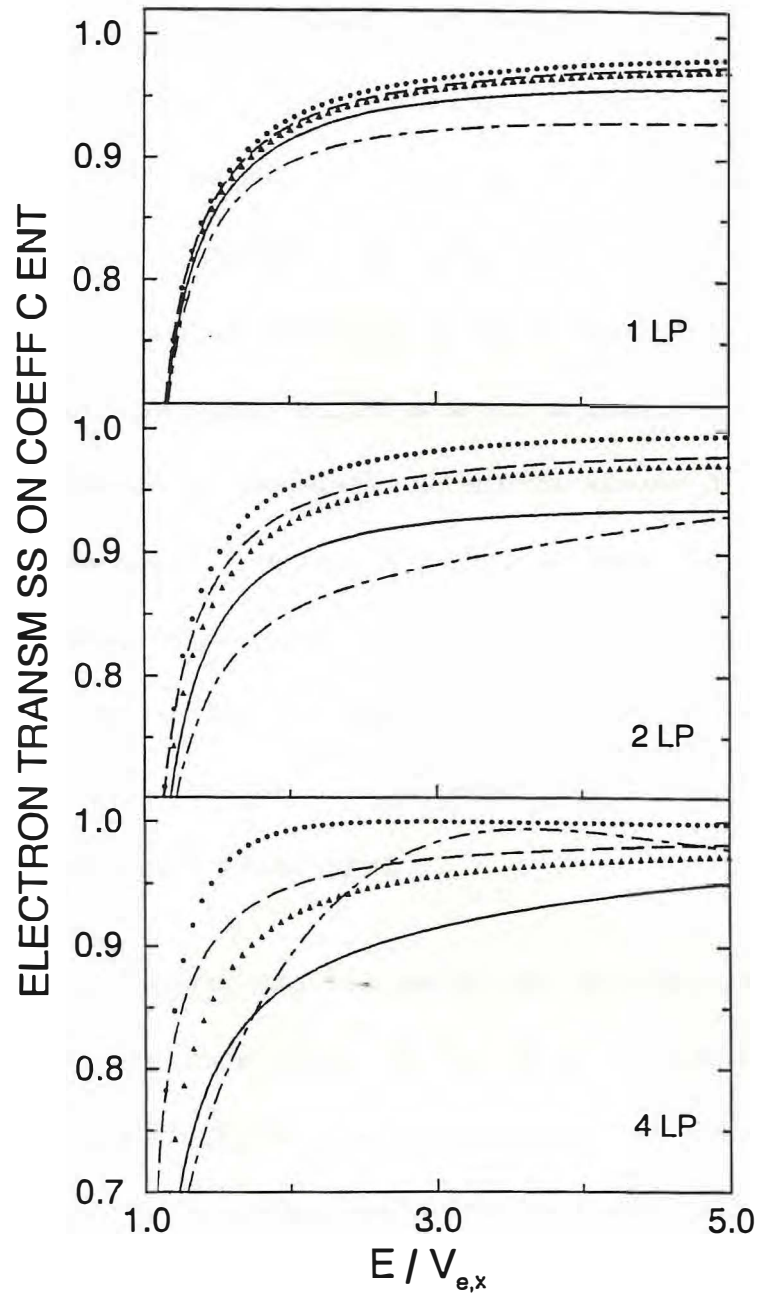


FIGURA 12 - Coeficientes de transmissão de elétrons através de heterojunções não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  com larguras interfaciais de 1 LP, 2 LP e 4 LP:  $T_A$  é calculado com o padrão de crescimento abrupto  $\mathcal{X}_A(z)$  (triângulos);  $T_L$  é calculado com o padrão de crescimento linear  $\mathcal{X}_L(z)$  (círculos);  $T_S$  é calculado com o padrão de crescimento suave  $\mathcal{X}_S(z)$  (contínua);  $T_W$  é calculado com o padrão de crescimento lento no início da região interfacial, e rápido no final da região interfacial -  $\mathcal{X}_W(z)$  (pontuada tracejada);  $T_F$  é calculado com o padrão de crescimento rápido no início da região interfacial, e lento no final da região interfacial -  $\mathcal{X}_F(z)$  (tracejada).

As diferenças entre os coeficientes de transmissão de elétrons apresentados na Fig. 12 mostram que elas são dependentes do tipo de variação da fração molar de alumínio na região interfacial. Perfis suaves (lineares) geram sempre menor (maior) transmissão do que aqueles obtidos com um perfil abrupto. Já que a forma do coeficiente de transmissão de elétrons calculada com o perfil suave é mantida quando cresce a largura da interface, elas parecem ser as mais indicadas para o crescimento de interfaces GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As a serem utilizadas em experimentos com elétrons. O coeficiente de transmissão de elétrons através de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta real, com um perfil linear (suave) de variação da fração molar interfacial de alumínio, deve sempre ser maior do que aquela calculada com modelos que consideram interfaces abruptas. Isto é válido também para buracos leves pois a massa dos mesmos é semelhante àquela dos elétrons, e os efeitos interfaciais decrescem com o *band offset*.

A situação é completamente diferente no caso de buracos pesados como consequência de sua massa mais pesada. A Fig. 13 mostra que quando  $\ell \leq 2LP$ , o coeficiente de transmissão  $T_L$  de buracos pesados é próximo de  $T_F$ , enquanto  $T_W$  e  $T_S$  são próximos de  $T_A$ . Se a largura da interface é grande,  $T_A$  torna-se o menor dos coeficientes de transmissão para uma dada energia dos buracos pesados, e tanto  $T_W$  como  $T_F$  apresentam ressonâncias a partir de  $\ell \sim 3LP$ .

As diferenças entre os coeficientes de transmissão de elétrons apresentados na Fig. 12 mostram que elas são dependentes do tipo de variação da fração molar de alumínio na região interfacial. Perfis suaves (lineares) geram sempre menor (maior) transmissão do que aqueles obtidos com um perfil abrupto. Já que a forma do coeficiente de transmissão de elétrons calculada com o perfil suave é mantida quando cresce a largura da interface, elas parecem ser as mais indicadas para o crescimento de interfaces GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As a serem utilizadas em experimentos com elétrons. O coeficiente de transmissão de elétrons através de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abrupta real, com um perfil linear (suave) de variação da fração molar interfacial de alumínio, deve sempre ser maior do que aquela calculada com modelos que consideram interfaces abruptas. Isto é válido também para buracos leves pois a massa dos mesmos é semelhante àquela dos elétrons, e os efeitos interfaciais decrescem com o *band offset*.

A situação é completamente diferente no caso de buracos pesados como consequência de sua massa mais pesada. A Fig. 13 mostra que quando  $\ell \leq 2LP$ , o coeficiente de transmissão  $T_L$  de buracos pesados é próximo de  $T_F$ , enquanto  $T_W$  e  $T_S$  são próximos de  $T_A$ . Se a largura da interface é grande,  $T_A$  torna-se o menor dos coeficientes de transmissão para uma dada energia dos buracos pesados, e tanto  $T_W$  como  $T_F$  apresentam ressonâncias a partir de  $\ell \sim 3LP$ .

Como consequência da dependência espacial da massa efetiva dos buracos pesados na região interfacial, as suas propriedades de transmissão são mais dependentes do tipo de variação da fração molar de alumínio do que as dos elétrons. O perfil suave parece ser o mais indicado para o crescimento de interfaces GaAs- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  de hetero-estruturas a serem utilizadas em experimentos com buracos pesados. Pode se considerar que, com um perfil suave, as propriedades de transmissão de buracos pesados através de uma heterojunção real GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pode ser descrita teoricamente com uma representação abrupta quando a largura da interface real  $\ell \sim 2LP$ . Todos os outros perfis de crescimento originam propriedades de transmissão que possuem importantes diferenças quando comparadas com aquelas obtidas com um perfil abrupto.

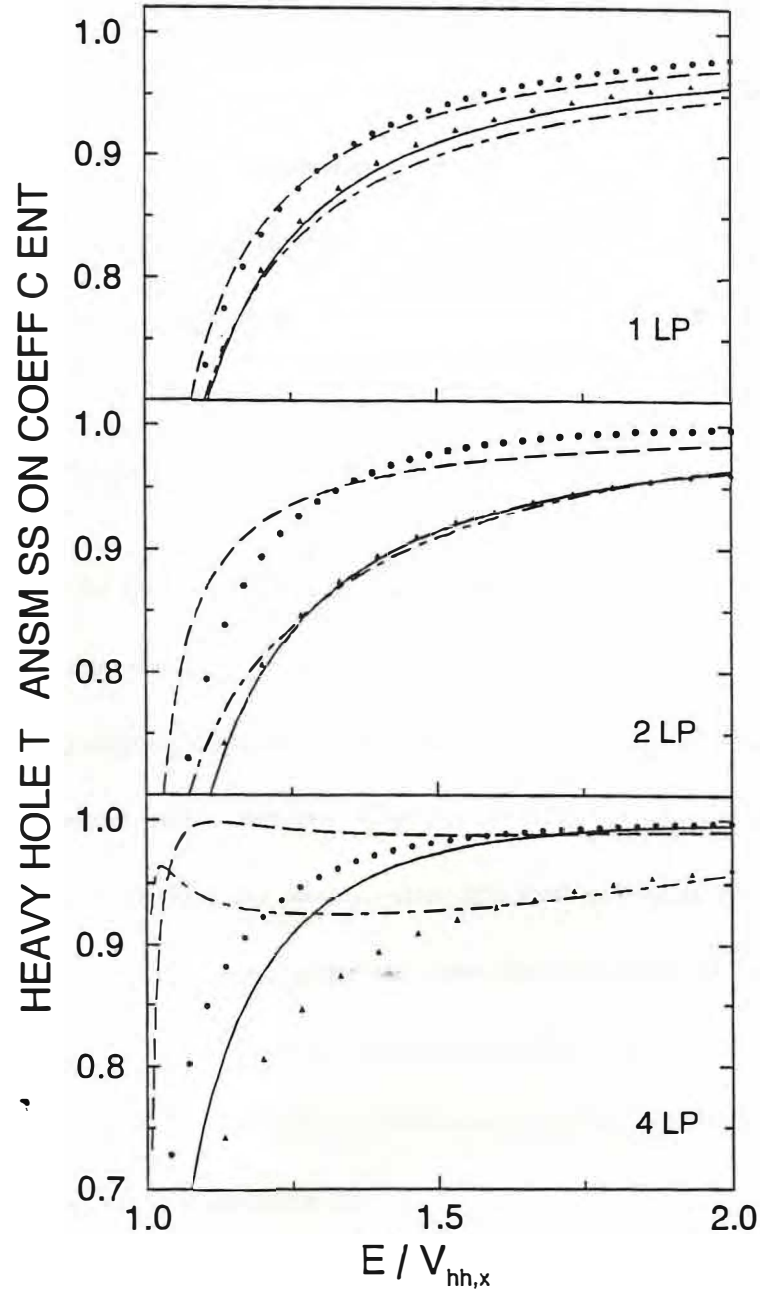


FIGURA 13 - Coeficientes de transmissão de buracos pesados através de hetero-junções não-abruptas GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  com larguras interfaciais de 1 LP, 2 LP e 4 LP:  $T_A$  é calculado com o padrão de crescimento abrupto  $\mathcal{X}_A(z)$  (triângulos);  $T_L$  é calculado com o padrão de crescimento linear  $\mathcal{X}_L(z)$  (círculos);  $T_S$  é calculado com o padrão de crescimento suave  $\mathcal{X}_S(z)$  (contínua);  $T_W$  é calculado com o padrão de crescimento lento no início da região interfacial, e rápido no final da região interfacial -  $\mathcal{X}_W(z)$  (pontuada tracejada);  $T_F$  é calculado com o padrão de crescimento rápido no início da região interfacial, e lento no final da região interfacial -  $\mathcal{X}_F(z)$  (tracejada).

### 3.3 Rugosidades e Transmissão

Uma série de resultados experimentais tem mostrado a importância de rugosidades nas propriedades de transmissão de poços quânticos [12-21]. Os resultados teóricos existentes em geral descrevem as rugosidades como variações nos comprimentos característicos das hetero-estruturas abruptas (como a largura do poço, por exemplo) [72-75]. A existência de ilhas nas interfaces está diretamente relacionada a este tipo de variação.

Considerando que as interfaces de hetero-estruturas são graduais, a existência de ilhas e sua associação a rugosidades pode de sobrepôr e competir a existência de interfaces graduais rugosas. Uma não elimina a existência da outra, e ambas podem mesmo ser complementares. O gráfico tridimensional colorido que foi apresentado na Fig. 3 do Capítulo 1 apresenta uma imagem artística do que seria interfaces graduais rugosas em um poço quântico. Resultados menos artísticos, contudo ainda com beleza inerente, são aqueles apresentados na Fig. 14, que mostra interfaces GaAs-Al<sub>0.37</sub>Ga<sub>0.63</sub>As obtidas através de mapeamento químico das interfaces semicondutoras em resolução próxima à atômica [10].

Nesta Seção, será investigada brevemente a relação entre rugosidades em interfaces graduais e as propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas. O modelo para descrever as rugosidades é aquele que foi apresentado no Capítulo 2.

As Figs. 15-18 apresentam perfis da variação molar de alumínio  $\chi_{ld}$  na interface de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de largura  $\ell = 2a$ , assim como o potencial e a massa interfacial. Eles foram obtidos através da contribuição de uma componente aleatória  $P(z)$  e de forma gaussiana  $G_d$  a perfis suaves  $S_l(z)$  do tipo  $\mathcal{X}_L(z)$  (Fig. 15),  $\mathcal{X}_S(z)$  (Fig. 16),  $\mathcal{X}_W(z)$  (Fig. 17), e  $F_L(z)$  (Fig. 18) [ver Seção anterior]. Em todas estas Figuras,  $d = 0.02$  (tracejada),  $d = 0.08$  (pontuada) e  $d = 0.14$  (contínua).  $d$  está associado à amplitude da gaussiana. Para se calcular os coeficientes de transmissão de elétrons através das heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, utilizou-se  $x = 0.3$  e  $Q_e = 0.6$ .

A Fig. 19 foi obtida para o maior grau de rugosidade,  $d = 0.14$ . Ela mostra que rugosidades são responsáveis por um aumento na transmissão para todos os quatro tipos de perfis  $\chi(z)$  apresentados na Fig. 5 (Capítulo 2). O perfil de crescimento  $\chi_W(z)$  é o que proporciona o maior crescimento na transmissão. Por outro lado, pode se observar que tanto o grau de rugosidade quanto sua localização parecem exercer influência menor do que a largura interfacial no aumento da transmissão (Figs. 20 e 21, respectivamente). Finalmente, a Fig. 22 mostra que a aproximação da massa efetiva constante na interface, usada frequentemente em muitas descrições de mecanismos de espalhamento por interfaces rugosas [76, 77] sempre superestima a transmissão em heterojunções não-abruptas com rugosidade interfacial.

Os resultados aqui apresentados são preliminares, e uma investigação mais detalhada dos efeitos das rugosidades será continuada posteriormente.

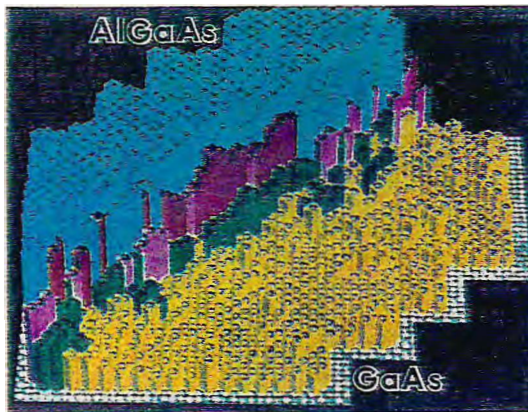


FIG. 3. Three-dimensional representation of the analyzed lattice image of  $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$  grown on GaAs after a 2-min interruption. The unit cells are 2.8-Å squares. The height of each cell represents the angular position of its vector  $\mathbf{R}$  with respect to the template vectors, which are about  $12\sigma$  apart. Yellow and blue mark those cells which fall within  $3\sigma$  of GaAs and  $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$  templates, respectively. Green, magenta, and red represent  $3\sigma$  bands centered about  $3\sigma$ ,  $6\sigma$ , and  $9\sigma$  points from GaAs. Outside the yellow and blue regions, the Al content of each unit cell is intermediate between GaAs and  $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$ , with confidence levels given by normal statistics.

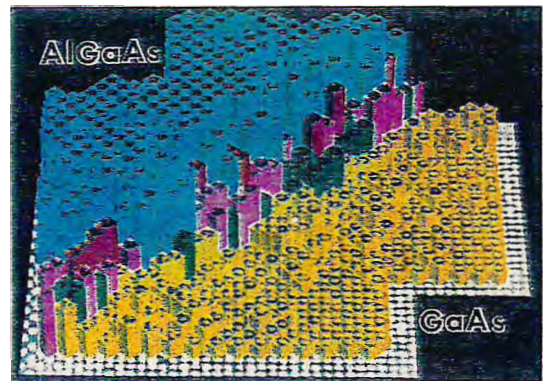


FIG. 4. Three-dimensional representation of the analyzed chemical image of  $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$  grown on GaAs without interruption. Color-coding and unit-cell size are the same as Fig. 3. Note the presence of small, disjointed clusters of color, indicating finer scale roughness.

FIGURA 14 - Representações tridimensionais de interfaces GaAs- $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$ . As legendas originais das figuras foram também incluídas (extraída de Ourmazd *et al.* [10]).

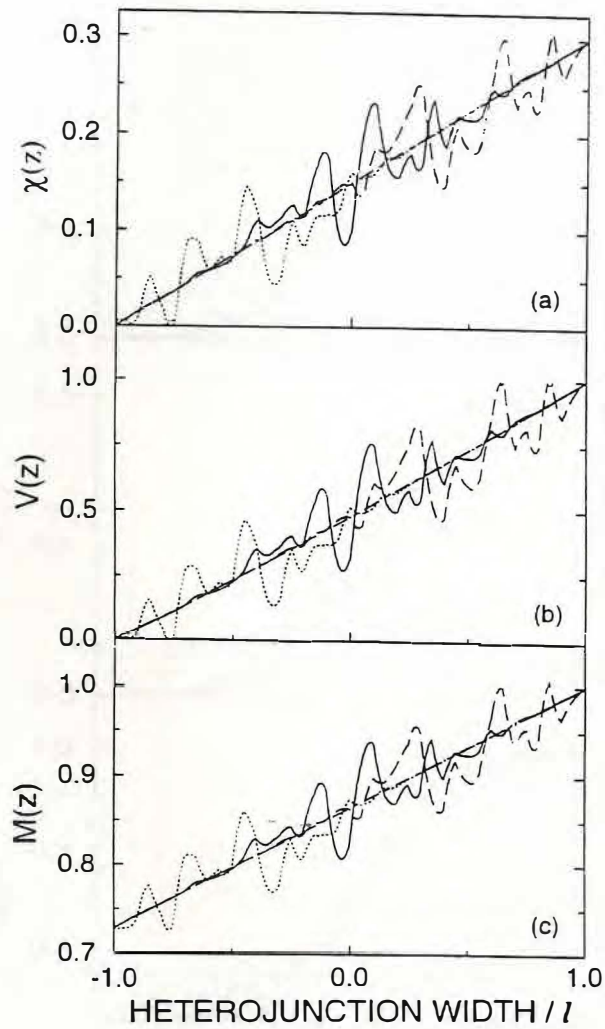


FIGURA 15 - Variações da fração molar de alumínio  $\chi_L(z)$ , do potencial e da massa efetiva do elétron a ela relacionada:  $d = 0.02$  (tracejada);  $d = 0.08$  (pontuada);  $d = 0.14$  (contínua).

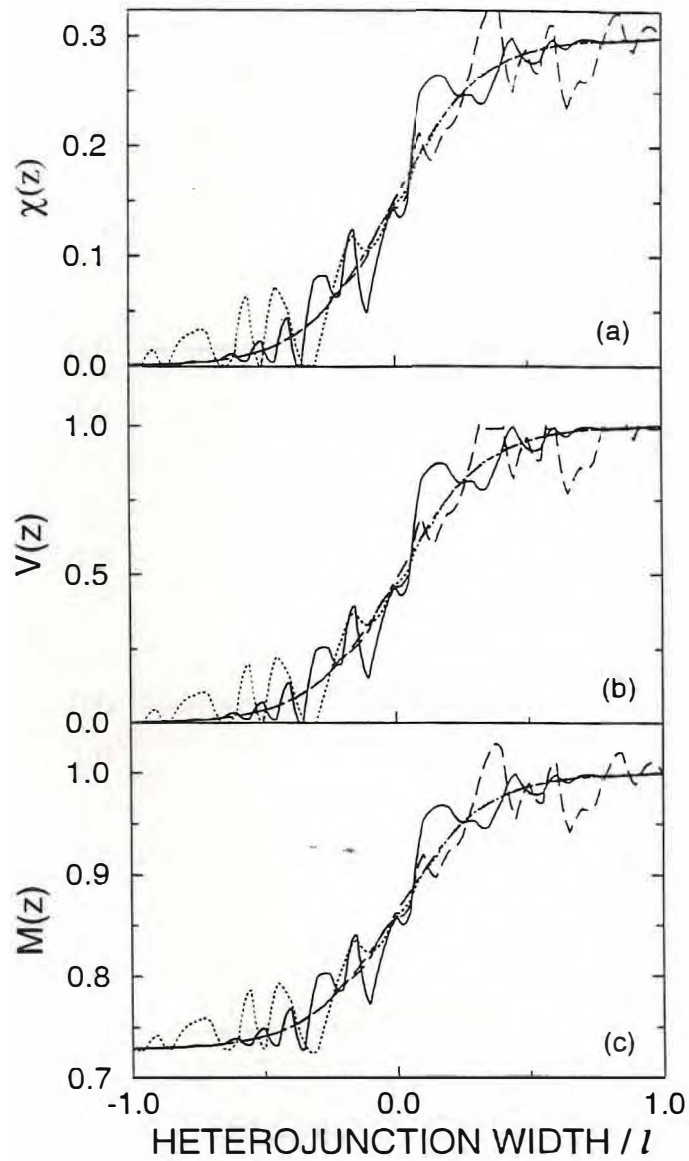


FIGURA 16 - Variações da fração molar de alumínio  $\chi_S(z)$ , do potencial e da massa efetiva do elétron a ela relacionada:  $d = 0.02$  (tracejada);  $d = 0.08$  (pontuada);  $d = 0.14$  (contínua).

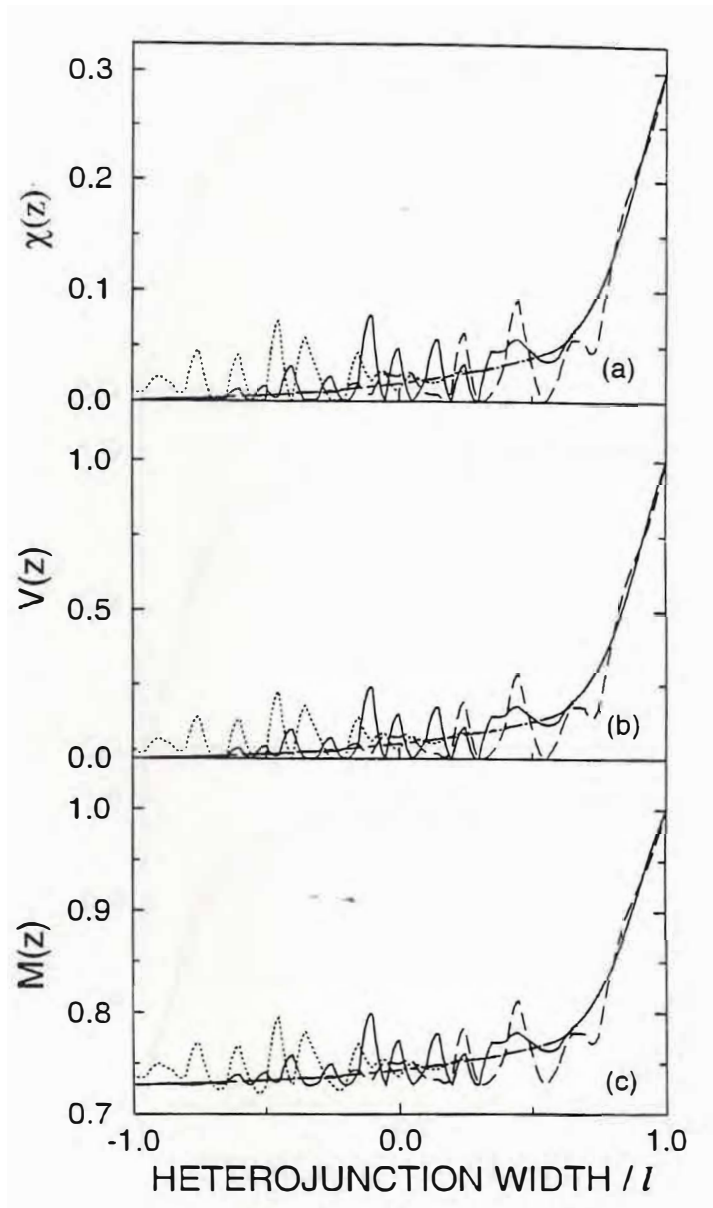


FIGURA 17 - Variações da fração molar de alumínio  $\chi_w(z)$ , do potencial e da massa efetiva do elétron a ela relacionada:  $d = 0.02$  (tracejada);  $d = 0.08$  (pontuada);  $d = 0.14$  (contínua).

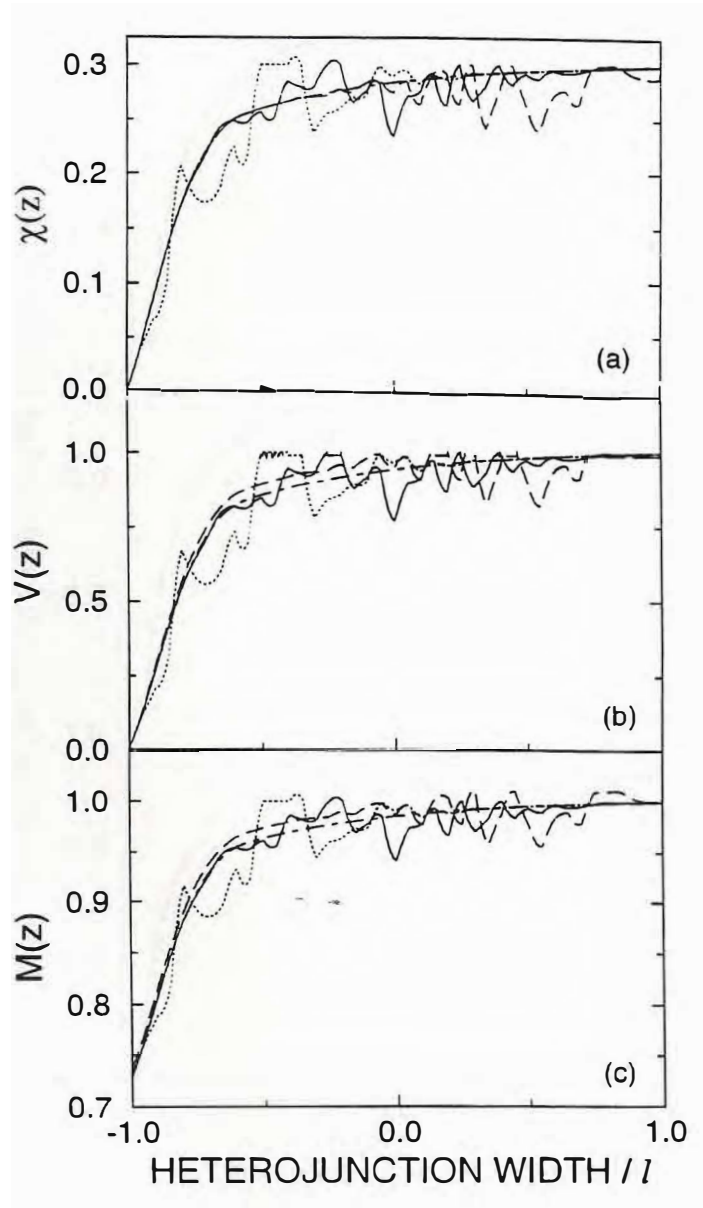


FIGURA 18 - Variações da fração molar de alumínio  $\chi_F(z)$ , do potencial e massa efetiva do elétron a ela relacionada:  $d = 0.02$  (tracejada);  $d = 0.08$  (pontuada);  $d = 0.14$  (contínua).

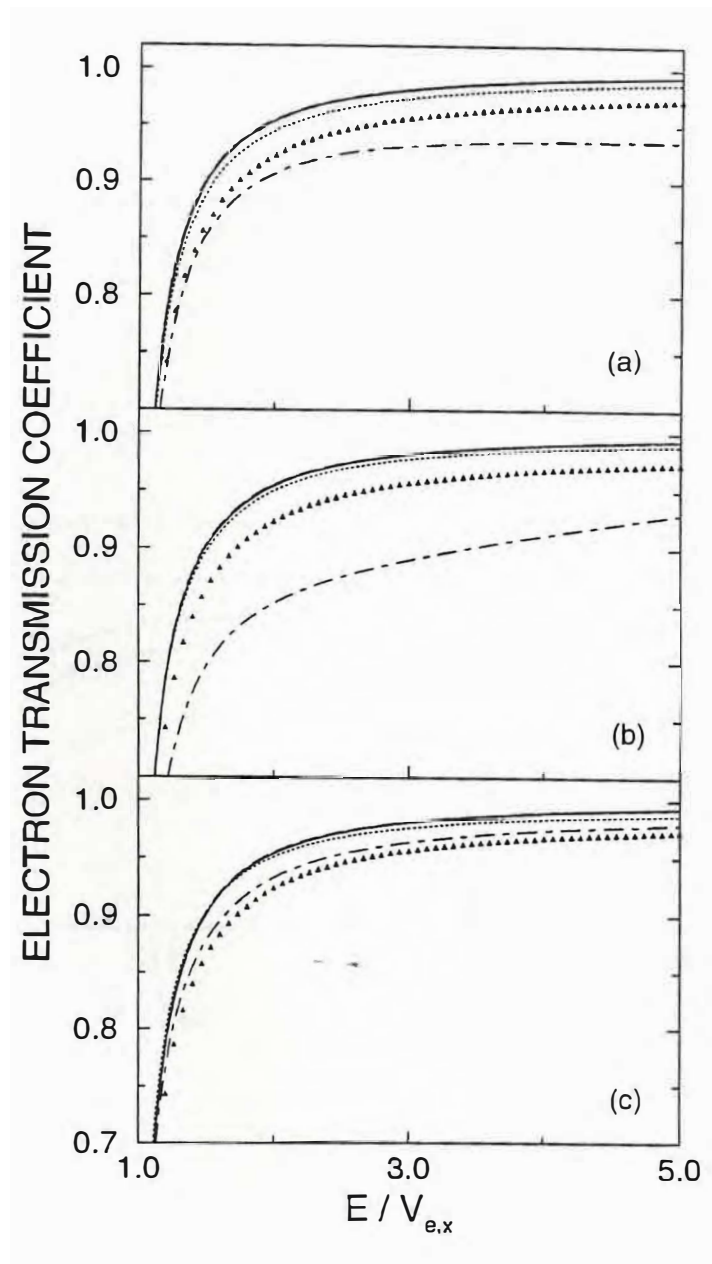


FIGURA 19 - Coeficientes de transmissão para heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com interfaces não-abruptas com larguras de dois parâmetros de rede GaAs para vários perfis  $\chi_{ld}(dz)$ , sem e com rugosidade  $d = 0.14$ : abrupta (triângulos), linear sem rugosidade (contínua), linear rugosa (tracejada). (a)  $\chi'_S(z)$  (tracejada pontuada),  $\chi_S(z)$  (pontuada); (b)  $\chi'_W(z)$  (tracejada pontuada),  $\chi_W(z)$  (pontuada); (c)  $\chi'_F(z)$  (tracejada pontuada),  $\chi_F(z)$  (pontuada).

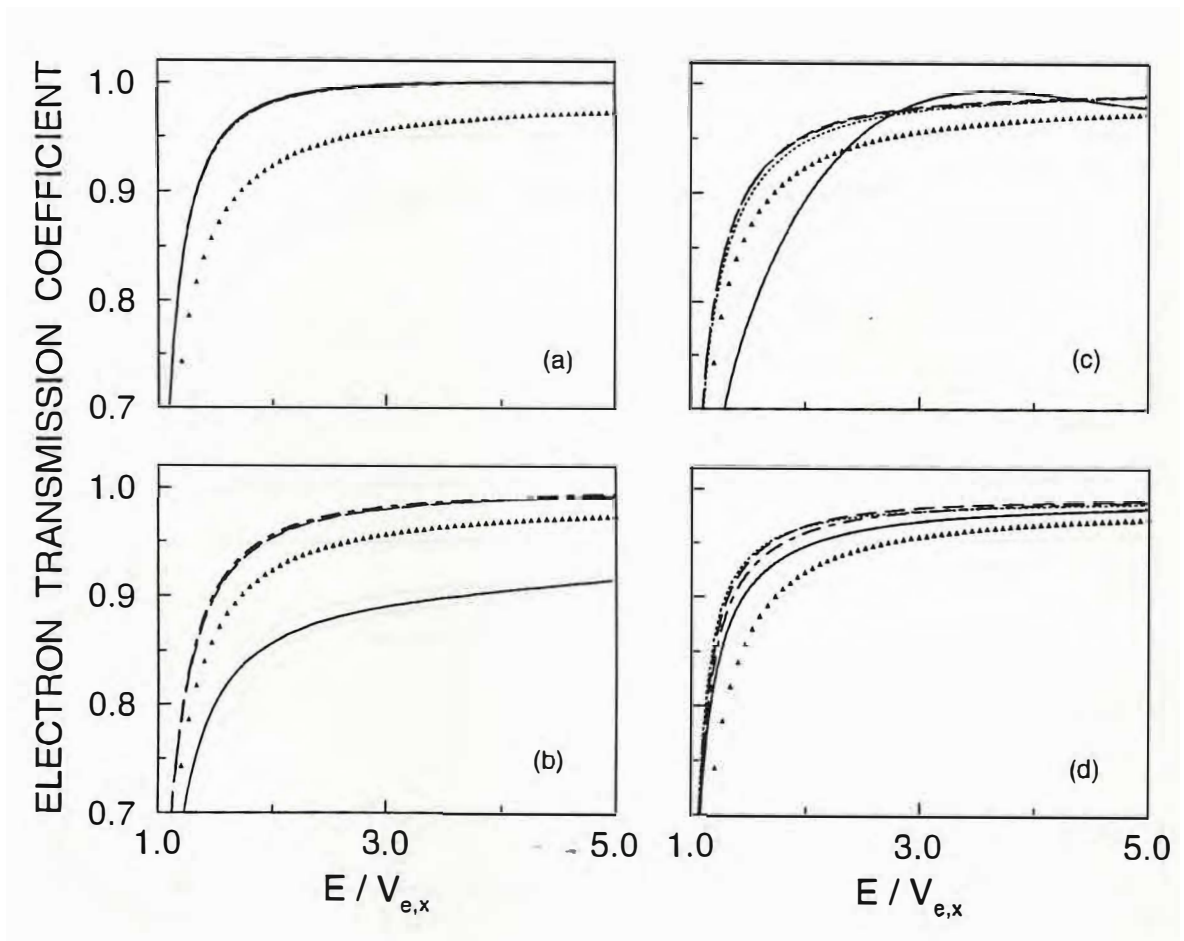


FIGURA 20 - Coeficiente de transmissão para heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com interfaces não-abruptas com larguras de quatro parâmetros de rede GaAs para os perfis (a)  $\chi_{id}^L(dz)$ , (b)  $\chi_{id}^S(dz)$ , (c)  $\chi_{id}^W(dz)$ , e (d)  $\chi_{id}^F(dz)$ , com  $d=0.14$  e localização do máximo de rugosidade: no centro da interface (tracejada); limite esquerdo da interface (tracejada pontuada); limite direito da interface (pontuada). Os coeficientes de transmissão para os casos abrupto (triângulos) e perfis sem rugosidade (contínua) são também apresentados para comparação.

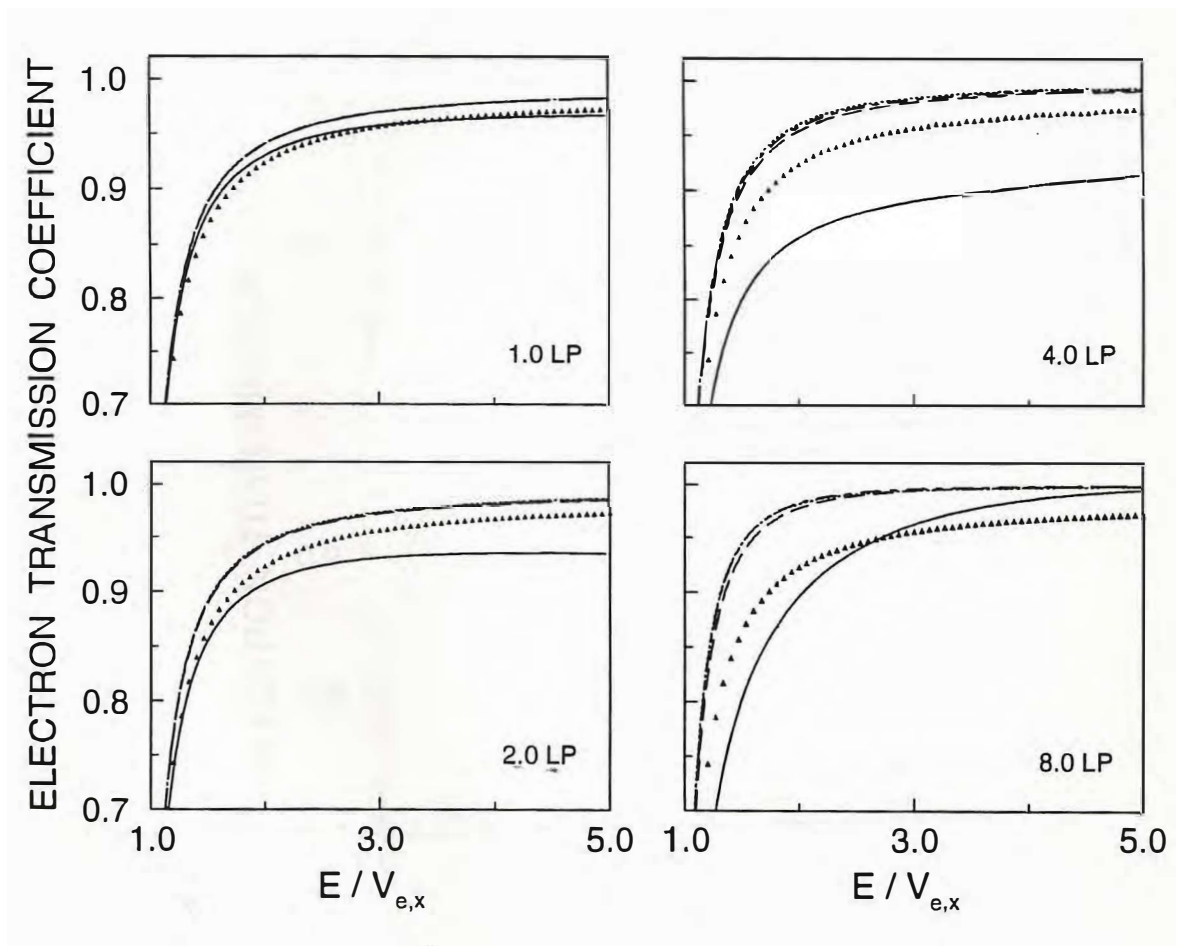


FIGURA 21 - Variação da transmissão em heterojunções GaAs/ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  com larguras interfaciais de 1, 2, 4, e 8 parâmetros de rede GaAs para perfis suaves e níveis de rugosidade  $d = 0$  (contínua),  $d=0.02$  (tracejada),  $d=0.08$  (tracejada pontuada), e  $d = 0.14$  (pontuada). A transmissão de uma heterojunção abrupta é também apresentada (triângulos) para possibilitar comparações.

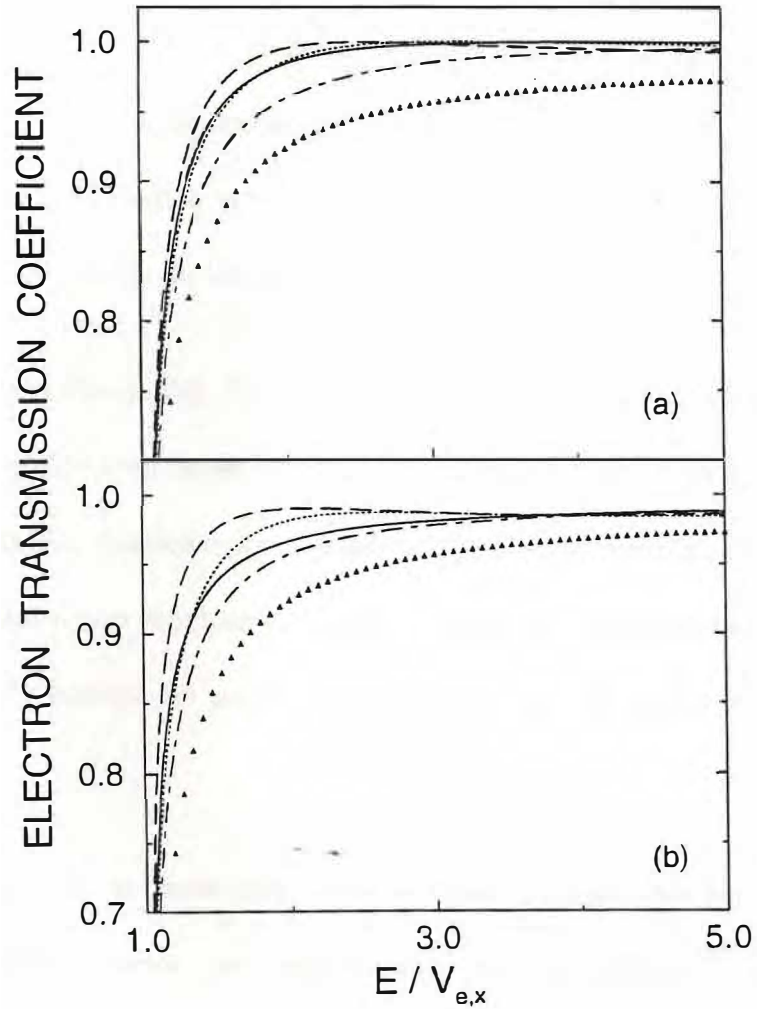


FIGURA 22 - Coeficientes de transmissão para heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com interfaces não-abruptas com larguras de quatro parâmetros de rede GaAs e grau de rugosidade  $d = 0.14$ , para os perfis: (a) abrupto (triângulos),  $\chi_{id}^L(dz)$  (contínua),  $\chi_{id}^L(dz)$  com massa interfacial constante (tracejada),  $\chi_{id}^S(dz)$  (tracejada pontuada),  $\chi_{id}^S(dz)$  com massa interfacial constante (pontuada); (b) abrupto (triângulos),  $\chi_{id}^F(dz)$  (contínua),  $\chi_{id}^F(dz)$  com massa interfacial constante (tracejada),  $\chi_{id}^W(dz)$  (tracejada pontuada),  $\chi_{id}^W(dz)$  com massa interfacial constante (pontuada).

### 3.4 Operador Energia Cinética e Transmissão

Como foi destacado na Seção 2.2, há muitas controvérsias atualmente sobre a forma que o operador energia cinética deve ter quando, na aproximação da massa efetiva, a massa passa a depender da posição [26, 41-46, 60-63]. Contudo, poucos trabalhos foram publicados sobre a influência que as formas possíveis poderiam exercer nas propriedades de hetero-estruturas semicondutoras.

Csavinszky e Elaby [60], Li e Kuhn [26], Fu e Chau [63], e Hagston *et al.* mais recentemente, todos abordaram de uma forma ou de outra a ligação entre os tipos de operador energia cinética e propriedades de poços quânticos semicondutores. Seus resultados, embora não conclusivos quanto a forma do operador, mostraram contudo que os níveis de energia de poços dependem do tipo de operador energia cinética utilizado.

Nesta seção, irá se investigar como a forma do operador energia cinética influencia as propriedades de transmissão de portadores em heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Para isto, o operador energia cinética  $T = (-\hbar^2/2)[m_\delta(z)]^\alpha(d/dz)[m_\delta(z)]^\beta(d/dz)[m_\delta(z)]^\alpha$  com  $2\alpha + \beta = -1$  será utilizado (ver Seção 2.2). Os autovalores dos Hamiltonianos obtidos com a utilização deste tipo de operador foram obtidos pelo método de multisteps de Ando e Itoh [48], que foi apresentado na Seção 2.3. O perfil escolhido para a variação interfacial da fração molar de alumínio, com  $x = 0.30$  foi o linear, enquanto para os *band offsets*  $C_e = 0.60$

e  $C_{hh} = 0.40$ .

A variação da transmissão na heterojunção abrupta é apresentada na Fig. 5.23. Pode ser observado que enormes diferenças ocorrem entre os coeficientes quando  $\alpha$  se afasta do valor nulo, que é o mais utilizado na literatura. De fato, quando  $\alpha$  se torna cada vez mais negativo [Fig. 5.23.(a)], um pico de ressonância se forma, e o coeficiente de transmissão só volta a se aproximar do valor unitário para energias elevadas do elétron (esta aproximação não é mostrada na figura). Por outro lado, quando  $\alpha$  se torna cada vez mais positivo [Fig. 5.23(b)], há um decréscimo regular dos coeficientes de transmissão em relação àquele obtido com  $\alpha = 0$ , embora a forma e o comportamento assintótico dos mesmos sejam mantidas.

Quando interfaces não-abruptas são consideradas, Figs. 5.24 e 5.25, as modificações na transmissão devido a variação  $\alpha \neq 0$  ficam bem menores. De fato, já para larguras interfaciais de  $4 LP$ , todos os coeficientes de transmissão obtidos com  $\alpha = -2.0, -1.0, -0.5, 0.0, +0.5, +1.0, +2.0$  são praticamente idênticos quando  $E/V_{e,x} = 5.0$ .

A importância do efeito associado da massa efetiva interfacial dependente da posição e do operador energia cinética é mais aparente no caso de buracos pesados. De fato, enquanto para interfaces abruptas, as transmissões obtidas com diferentes valores de  $\alpha$  exibem diferenças consideráveis (Fig. 2.26) - mas bem menores do que aquelas obtidas para os elétrons, estas diferenças decrescem fortemente com a existência de interfaces, chegando praticamente a desaparecer quando  $l=4 LP$ .

O estudo da influência das diferentes formas do operador energia nas propriedades de transmissão de heterojunções GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  abruptas e não-abruptas, mostram claramente a importância da escolha do operador no cálculo teórico das propriedades de hetero-estruturas.

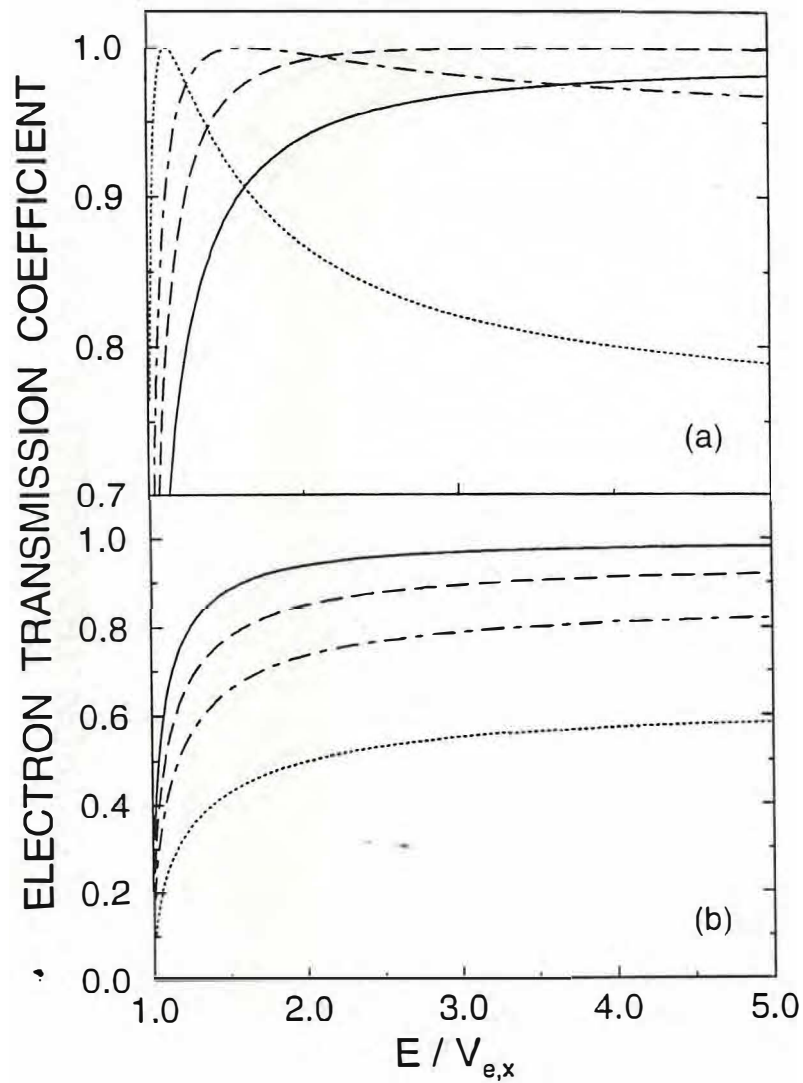


Figura 23 - Coeficiente de transmissão de um elétron em uma hetero-estrutura abrupta quando (a)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = -0.5$  (tracejada),  $\alpha = -1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = -2.0$  (pontuada); (b)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = +0.5$  (tracejada),  $\alpha = +1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = +2.0$  (pontuada);

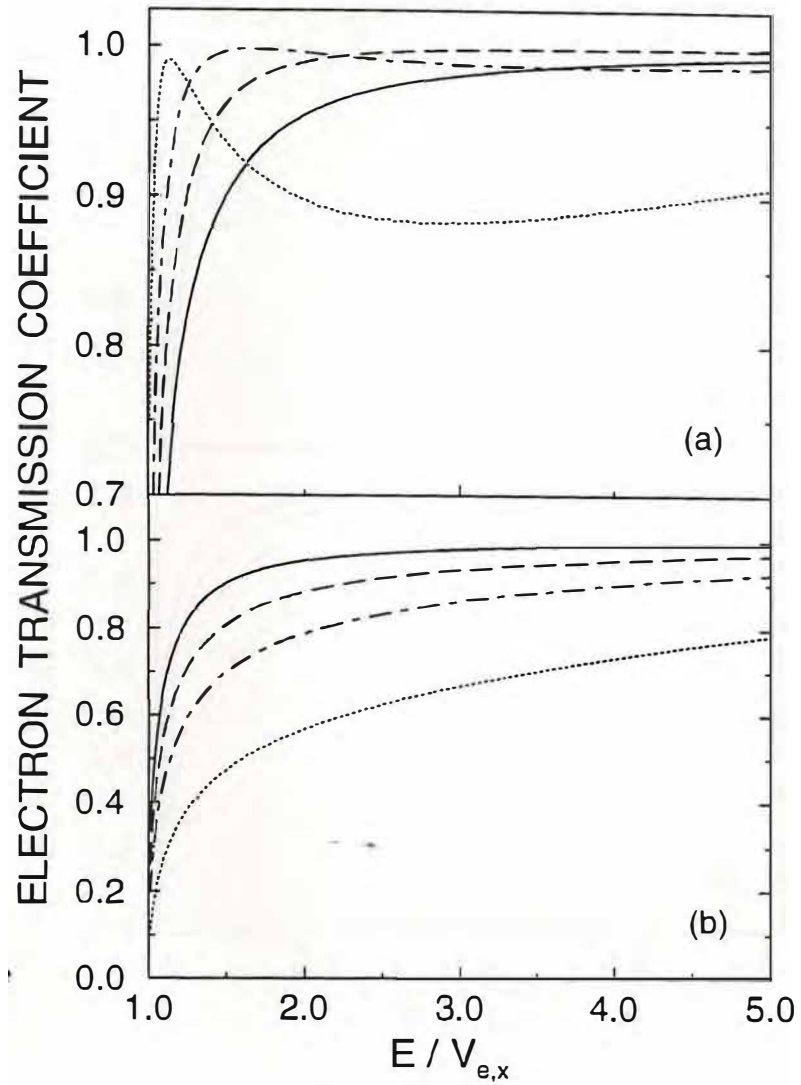


Figura 24 - Coeficiente de transmissão de um elétron em uma hetero-estrutura não-abrupta com  $\ell = 2 LP$  quando (a)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = -0.5$  (tracejada),  $\alpha = -1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = -2.0$  (pontuada); (b)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = +0.5$  (tracejada),  $\alpha = +1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = +2.0$  (pontuada);

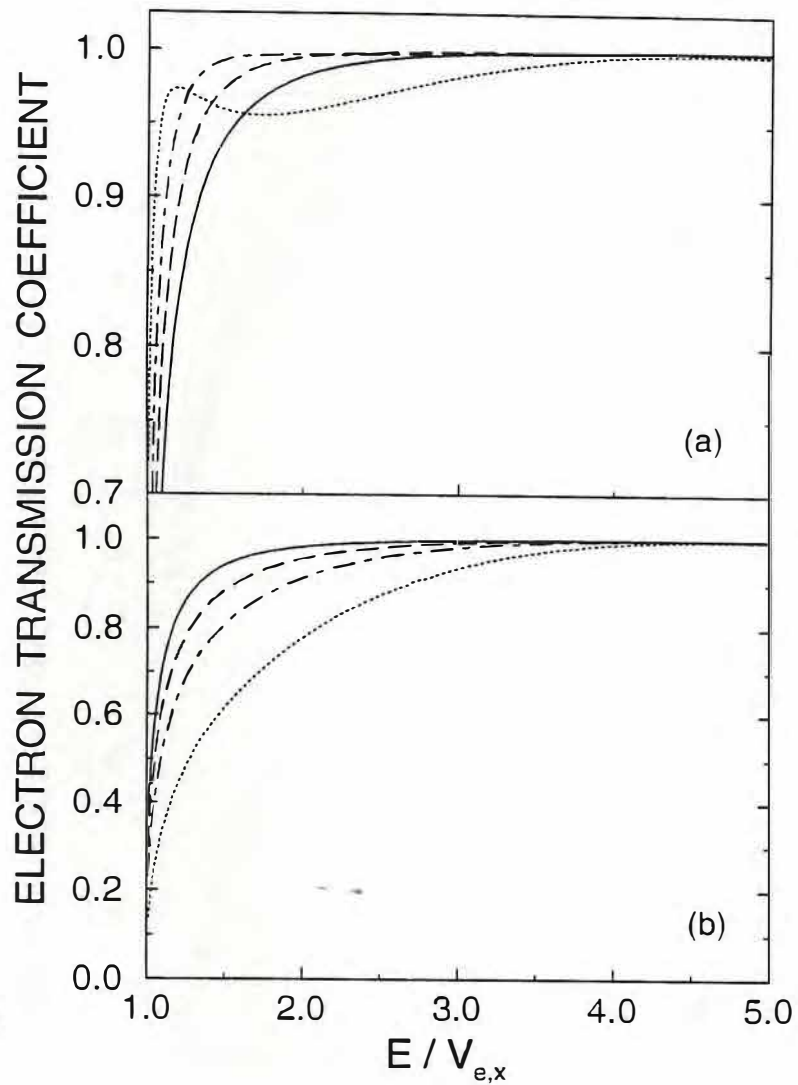


Figura 25 - Coeficiente de transmissão de um elétron em uma hetero-estrutura não-abrupta com  $\ell = 4 LP$  quando (a)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = -0.5$  (tracejada),  $\alpha = -1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = -2.0$  (pontuada); (b)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = +0.5$  (tracejada),  $\alpha = +1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = +2.0$  (pontuada);

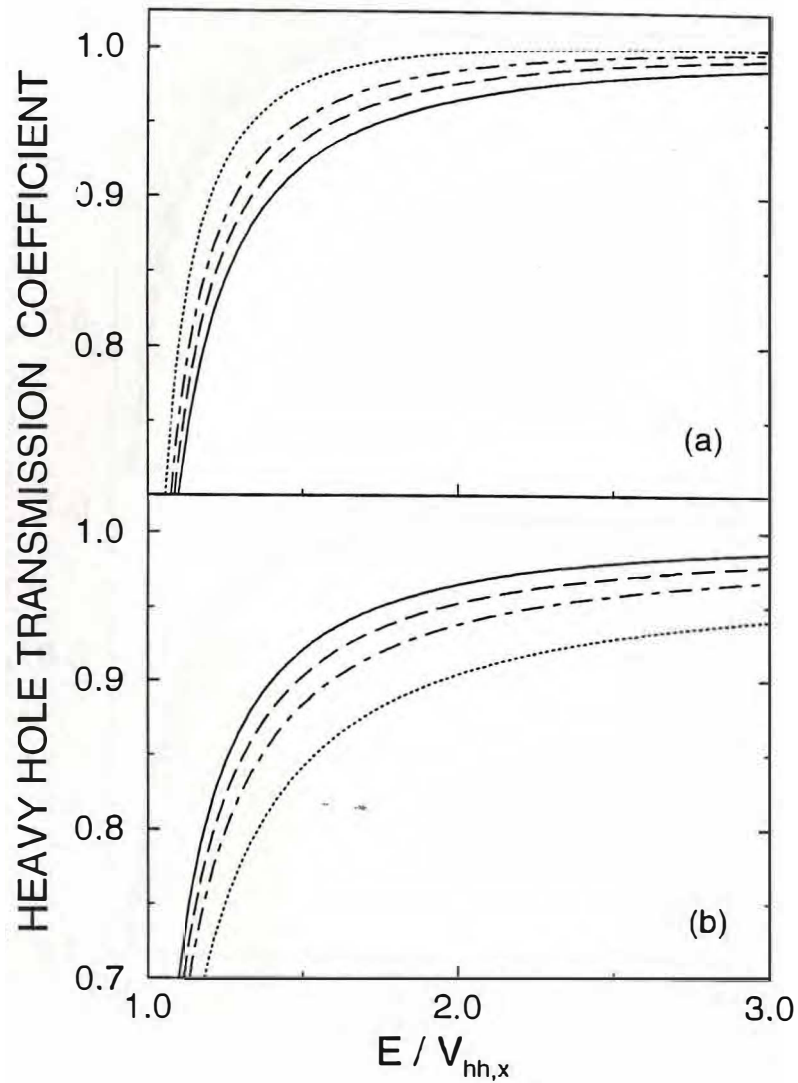


Figura 26 - Coeficiente de transmissão de um buraco pesado em uma hetero-estrutura abrupta quando (a)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = -0.5$  (tracejada),  $\alpha = -1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = -2.0$  (pontuada); (b)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = +0.5$  (tracejada),  $\alpha = +1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = +2.0$  (pontuada);

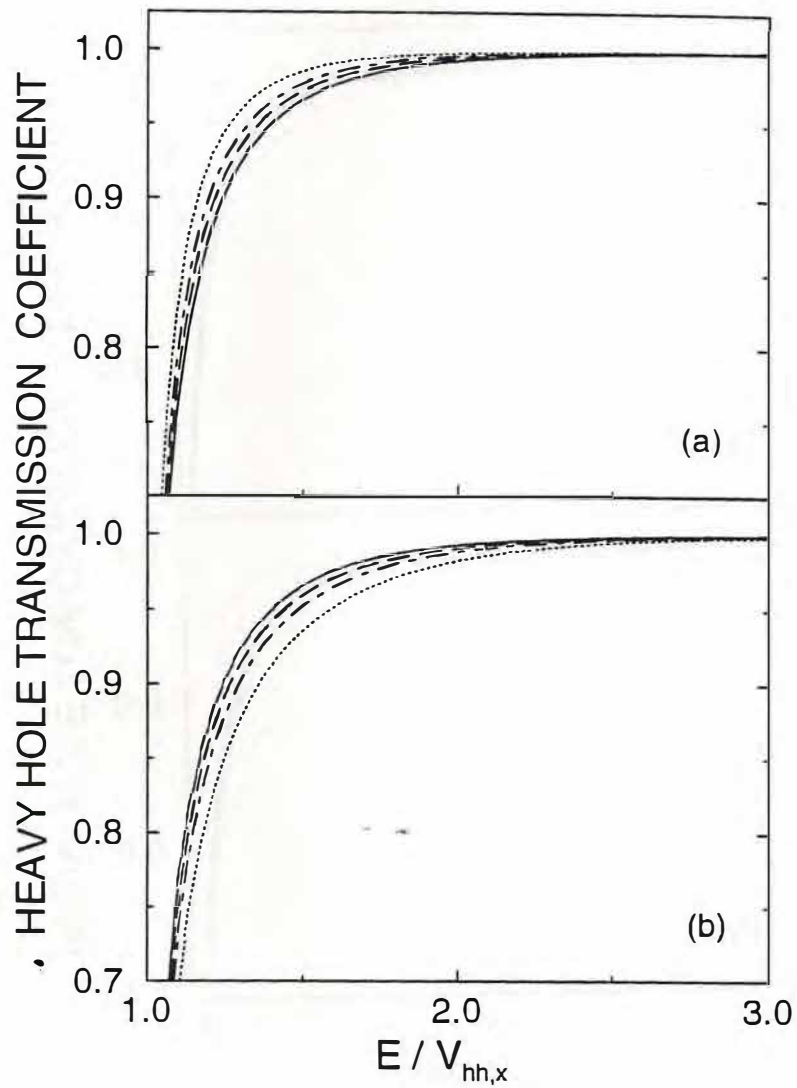


Figura 24 - Coeficiente de transmissão de um buraco em uma hetero-estrutura não-abrupta com  $\ell = 2 LP$  quando (a)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = -0.5$  (tracejada),  $\alpha = -1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = -2.0$  (pontuada); (b)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = +0.5$  (tracejada),  $\alpha = +1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = +2.0$  (pontuada);

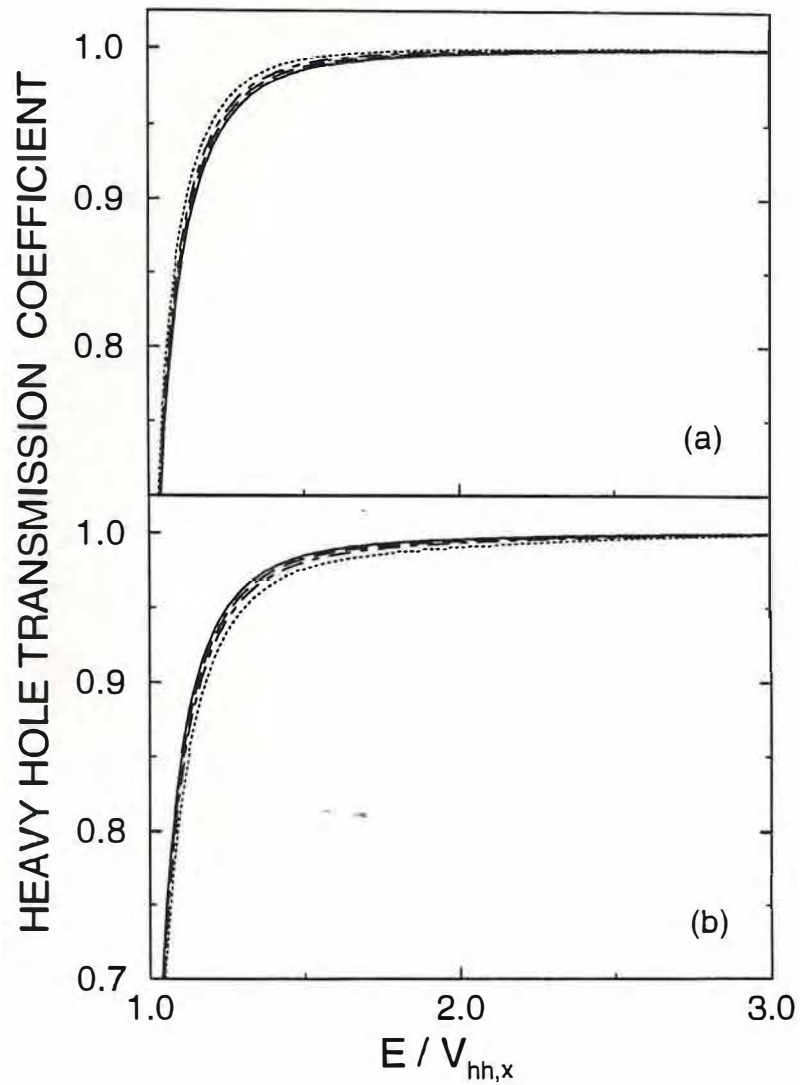


Figura 25 - Coeficiente de transmissão de um buraco em uma hetero-estrutura não-abrupta com  $\ell = 4 LP$  quando (a)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = -0.5$  (tracejada),  $\alpha = -1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = -2.0$  (pontuada); (b)  $\alpha = 0.0$  (contínua),  $\alpha = +0.5$  (tracejada),  $\alpha = +1.0$  (tracejada pontuada),  $\alpha = +2.0$  (pontuada);

## **CAPITULO 4**

## CONCLUSOES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho foi realizado um estudo da influência de interfaces nas propriedades de transmissão de heterojunções semicondutoras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas.

Inicialmente buscou-se fornecer uma visão de como o tema está relacionado com a área de pesquisa mais geral e imediata, que é a Física de Hetero-Estruturas de Baixa Dimensionalidade. Foi realizado um breve apanhado histórico do surgimento da área de pesquisa, suas virtudes e seus problemas básicos. Atenção considerável foi dada a interfaces semicondutoras, aspectos de sua descrição teórica e os problemas que iriam ser abordados no presente trabalho. Em particular, foi focalizado o problema da não-abrupticidade das interfaces semicondutoras, de modelos existentes para as mesmas, e a dependência espacial do operador energia cinética.

Logo a seguir, uma generalização do modelo de Freire, Auto e Farias [30, 31] foi realizada, incluindo variações outras da fração molar de alumínio que a linear, inclusive possibilitando variações aleatórias na mesma. Os potenciais e, principalmente, a dependência espacial da massa obtida a partir de  $\chi(z)$ , indicaram fortemente a necessidade de resolver numericamente as equações de autovalores para Hamiltonianos cujo operador energia cinética é dependente da posição. O método de *multisteps* de Ando e Itoh [48] foi então generalizado, para incluir outros operadores energia cinética que não o de Ben Daniel e Duke [49].

O modelo e o método obtidos foram então utilizados para o cálculo de propriedades de heterojunções semicondutoras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas.

Inicialmente abordou-se o problema da influência da massa efetiva dos portadores nas suas propriedades de transmissão. Foi mostrado que não somente o potencial, mas também a massa efetiva dos portadores é importante para o cálculo das propriedades de transmissão. Embora a aproximação da massa constante na interface forneça um modo de se obter resultados analíticos, em geral ela deve ser considerada de forma muito crítica quando se está interessado em detalhes importantes das propriedades de transmissão. Os resultados obtidos na presente tese indicam as limitações de trabalhos que consideram uma representação abrupta para as interfaces, assim como aqueles onde a massa efetiva na interface é considerada como sendo constante.

Os picos de ressonância no coeficiente de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, que foram previstos por Freire, Auto e Farias [30, 31] considerando a aproximação da massa efetiva constante na interface, desaparecem quando a dependência espacial é levada em conta. Entretanto, um limite de dois parâmetros de rede GaAs para elétrons e buracos leves (menor que um parâmetro de rede GaAs no caso de buracos pesados) para a largura interfacial foi obtido para que heterojunções não-abruptas sejam reconhecidas como tendo propriedades comparáveis àquelas das abruptas.

A seguir, propriedades de transmissão também foram calculadas para elétrons e buracos pesados para a investigação da relação de diferentes padrões de crescimento

interfacial com as mesmas. Foi demonstrado que efeitos do padrão de crescimento são mais importantes para buracos pesados do que para elétrons como consequência da maior massa do buraco pesado. A existência de ressonâncias na transmissão foi mostrada depender do tipo de perfil de crescimento interfacial da fração molar de alumínio. Elas podem ocorrer no caso de elétrons (buracos pesados) quando a largura interfacial é tão pequena quanto quatro (três) parâmetros de rede GaAs se um perfil como  $\chi_W(z)$ , ( $\chi_F(z)$  ou  $\chi_W(z)$ ) é usado como padrão de crescimento para a fração molar de alumínio.

O esquema desenvolvido para descrever interfaces rugosas em heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As foi utilizado para o estudo da influência das mesmas nas propriedades de transmissão. Mostrou-se que rugosidades podem modificar razoavelmente a transmissão, fazendo-a crescer. Os resultados mostram que efeitos de interface relacionados a rugosidades têm que ser introduzidos com cautela em qualquer teoria de tunelamento, desde que as propriedades de transmissão mudam com o esquema utilizado para descrever as interfaces e suas rugosidades.

Finalmente, o estudo da influência dos tipos de operadores energia cinética com massa dependente da posição mostrou que sua escolha pode alterar consideravelmente as propriedades de transmissão. As alterações são maiores para interfaces abruptas, e decrescem tanto com a largura da interface quanto com o aumento da massa dos portadores. No entanto, face às incertezas existentes atualmente na escolha do operador energia cinética com massa dependente da posição, é sugerido aqui que tanto

a comparação de propriedades calculadas com medições experimentais, e a pesquisa da forma do operador energia cinética baseada em primeiros princípios, são ainda necessárias para clarificar as limitações da teoria da massa efetiva.

O resultado das pesquisas desenvolvidas nesta tese já geraram uma publicação na revista *Superlattices and Microstructures*, um outro trabalho já foi submetido para publicação em *Physical Review Letters*, e um outro foi aceito para apresentação na *The Eighth International Conference on Superlattices, Microstructures and Microdevices*, a se realizar em Cincinnati, Ohio, USA, em março 20-25 1995 (os *Proceedings* da conferência serão publicados em *Superlattices and Microstructures*. Um trabalho foi submetido para a conferência *Brazilian School on Semiconductor Physics*, que se realizará no Rio de Janeiro, em julho 16-21 1995.

Ainda cerca de duas publicações devem ainda serem realizadas com os resultados que fazem parte do corpo da presente tese, e mais duas outras com resultados obtidos e/ou pendentes que estão sendo obtidos e analisados.

As perspectivas da presente tese são importantes e já se encontram em desenvolvimento. Dopagem de heterojunções, introdução de impurezas localizadas, um modelo par fônons interfaciais estreitamente relacionados com o modelo aqui desenvolvido são temas cujos resultados iniciais já foram todos submetidos para apresentação em congressos internacionais, tendo um deles inclusive já sido aceito (o de dopagem).

Cópias das publicações diretamente relacionadas com o desenvolvimento desta tese podem ser encontradas no Apêndice.

## **REFERÊNCIAS**

- [1] L. Esaki and R. Tsu, *IBM Res. Note*, RC-2418 (1969).
- [2] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.*, pp. 61-65 (1970).
- [3] L. Esaki, *IEEE J. Quantum Electron.* QE-**22**, 1611 (1986).
- [4] L. Esaki, L. L. Chang, W. E. Howard, and V. L. Rideout, in *Proc. 11th Int. Conf. Phys. Semiconductors*, Warsaw, Poland, pp. 431-436 (1972).
- [5] L. Esaki and L. L. Chang, *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- [6] G. Bauer, F. Kuchar, and H. Heinrich, editores, *Two-dimensional Systems: Physics and New Devices* (Springer, Berlin, 1986).
- [7] F. Kuchar, H. Heinrich, G. Bauer, editores, *Localization and Confinement of Electrons in Semiconductors* (Springer, Berlin, 1990).
- [8] A. C. Gossard, *IEEE J. Quantum Electron.* QE-**22**, 1649 (1986).
- [9] K. Ploog, in *Semiconductor Interfaces: Formation and Properties*, editado por G. Le Lay, J. Derrien, and N. Boccaro (Springer, Berlin, 1987).
- [10] A. Ourmazd, D. W. Taylor, J. Cunningham, and C. W. Tu, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 933 (1989).
- [11] O. Albrechtsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 31 (1990).
- [12] C. A. Warwick, W. Y. Jan, A. Ourmazd, and T. D. Harris, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 2666 (1990).
- [13] N. Ikarashi, A. Sakai, T. Baba, K. Ishida, J. Motohisa, and H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1983 (1990).
- [14] D. Gammon, B. V. Shanabrook, and D. S. Katzer, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2710 (1991).
- [15] R. F. Kopf, E. F. Schubert, T. D. Harris, and R. S. Becker, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 631 (1991).
- [16] M. A. Herman, D. Bimberg, and J. Christen, *J. Appl. Phys.* **70**, 158 (1991).
- [17] M. Gurioli, A. Vinattieri, M. Colocci, A. Bosachi, and S. Franchi, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 2150 (1991).

- [18] D. Gammon, B. V. Shanabrook, and D. S. Katzer, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1547 (1991).
- [19] Y. S. Fatt, *J. Appl. Phys.* **71**, 158 (1992).
- [20] B. Orschel, G. Oelgart, and R. Houdré, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 843 (1993).
- [21] M. B. Johnson, U. Maier, H.-P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1273 (1993).
- [22] D. S. Chemla, *Phys. Today* **6**, 23 (1993).
- [23] J. N. Schulman, *J. Vac. Sci. Technol.* **B1**, 644 (1983).
- [24] H. X. Jiang, J. Y. Lin, *Superlattices and Microstructures* **3**, 689 (1987).
- [25] J. Thomsen, G. T. Einevoll, and P. C. Hemmer, *Phys. Rev.* **B47**, 12760 (1993).
- [26] T. L. Liu and K. J. Kuhn, *Phys. Rev.* **B47**, 12760 (1993).
- [27] M. Proctor, G. Oelgart, H. Rhan, and F.-K. Reinhart, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 843 (1993).
- [28] D. F. Nelson, R. C. Miller, C. W. Tu, and S. K. Sputz, *Phys. Rev.* **B36**, 8063 (1987).
- [29] T. L. Li and K. K. Kuhn, *Phys. Rev.* **B47**, 12760 (1993).
- [30] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, in *Proceedings of the 5th Brazilian School on Semiconductor Physics*, editado por J. R. Leite A. Fazzio, and A. S. Chaves, p. 356 (World Scientific, Singapore, 1991).
- [31] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* **1**, 17 (1992).
- [32] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **52**, 191 (1957).
- [33] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **76**, 1592 (1949).
- [34] T. Gora and F. Williams, *Phys. Rev.* **177**, 1179 (1969).
- [35] L. Leibler, *Phys. Rev.* **B12**, 4443 (1975).
- [36] C. M. van Vliet and A. H. Marshak, *Phys. Rev.* **B26**, 6734 (1982).

- [37] O. von Roos, *Phys. Rev.* **B27**, 7547 (1983).
- [38] M. G. Burt, *Semic. Sci. Technol.* **2**, 460 (1987).
- [39] M. G. Burt, *Semic. Sci. Technol.* **3**, 739 (1988).
- [40] M. G. Burt, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 717 (1994).
- [41] R. A. Morrow and K. R. Browstein, *Phys. Rev.* **B30**, 678 (1984).
- [42] R. A. Morrow, *Phys. Rev.* **B35**, 8074 (1987).
- [43] K. Young, *Phys. Rev.* **B39**, 13434 (1989).
- [44] B. Laikhtan, *Phys. Rev.* **B46**, 4769 (1992).
- [45] C. Schnittler and M. Kirilov, *Phys. Stat. Sol. (b)* **176**, 143 (1993).
- [46] W. E. Hagston, P. Harrison, T. Piorek and T. Stirner, *Superlattices and Microstructures* **15**, 199 (1994).
- [47] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and N. Freire, submetido a *Phys. Rev. Lett.* (1995)
- [48] Y. Ando and T. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).
- [49] D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
- [50] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and N. Freire, aceito para publicação em *Superlattices and Microstructures* (1995).
- [51] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and N. Freire, aceito para apresentação no *The Eighth International Conference on Superlattices, Microstructures and Microdevices*, Cincinnati, Ohio, USA, August 20-25 (1995).
- [52] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- [53] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *J. Appl. Phys.* **71**, 4076 (1992).
- [54] R. Renan, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Phys. Rev.* **B48**, 8446 (1993).
- [55] R. Renan, J. M. Pereira, J. Ribeiro, V. N. Freire, and G. A. Farias, *Braz. J. Phys.* **24**, 192 (1994).

- [56] R. R. L. de Carvalho, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* (em impressão 1995).
- [57] S. M. Wang, G. Treideris, W. Q. Chen, and T. G. Andersson, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 61 (1993).
- [58] G. Duggan, *J. Vac. Sci. Technol.* **B3**, 1224 (1985).
- [59] H. Kroemer, *Surf. Sci.* **174**, 299 (1986).
- [60] P. Csavinszky and A. M. Elabsy, *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 1010 (1988).
- [61] I. Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev.* **B38**, 10057 (1988).
- [62] A. Brezini and M. Sebbani, *Phys. Stat. Sol. (b)* **178**, 141 (1993).
- [63] Y. Fu and K. A. Chao, *Phys. Rev.* **B40**, 8349 (1988).
- [64] R. Wait and A. R. Mitchell, *Finite Element Analysis and Applications* (Wiley, Great Britain, 1986).
- [65] W. W. Lui and M. Fukuma, *J. Appl. Phys.* **60**, 1555 (1986).
- [66] R. A. Davies, *GEC J. Res.* **5**, 65 (1987).
- [67] R. R. L. de Carvalho, V. N. Freire, M. M. Auto, e G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* **14**, 221 (1993).
- [68] B. K. Ridley, *Quantum Process in Semiconductors* (Clarendon, Oxford 1993).
- [69] M. P. Houn, Y. C. Chang, W. I. Wang, *J. Appl. Phys.* **64**, 4609 (1988).
- [70] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias (submetido para publicação em *Phys. Rev. Lett.* 1995).
- [71] P. J. Price, *Superlattices and Microstructures* **2**, 213 (1986).
- [72] P. A. Schulz, C. E. T. Gonçalves da Silva, *Phys. Rev.* **B38**, 10718 (1988).
- [73] W. Tan, J. C. Inkson, and G. P. Srivastava, *Phys. Rev.* **B47**, 4372 (1993).
- [74] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 1934 (1987).

- [75] D. Z.-Y. Ting, S. K. Kirby, and T. C. McGill, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2004 (1994).
- [76] P. Johansson, *Phys. Rev.* B**48**, 8939 (1993).
- [77] G. Q. Hai, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, *Phys. Rev.* **48**, 4666 (1993).

**APENDICE**

**TRANSMISSION IN COMPOSITIONALLY NONABRUPT GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As  
HETEROJUNCTIONS: BEYOND THE CONSTANT INTERFACIAL  
EFFECTIVE-MASS APPROXIMATION**

J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire  
Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará  
Centro de Ciências, Campus do Pici, Caixa Postal 6030  
60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received November 28, 1994)

The transmission properties of compositionally nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions are calculated by taking into account the spatial dependence of the carrier effective mass through the nonabrupt interface. The description of the nonabrupt heterojunctions is obtained with the assumption of a linear aluminium molar fraction variation in the interface. A multistep technique is used for the numerical solution of the Hamiltonian with a space dependent effective mass. The linear spatial dependence of the effective mass through the interface changes the transmission properties of compositionally nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions in comparison with those obtained with the constant effective mass approximation. The absence of resonant peaks for large interface widths is shown for electrons and holes, in disagreement with a prior prediction of their existence.

### 1. Introduction

To describe the spatial dependence of semiconductor heterostructures on alloy composition, one considers in general an effective mass for carriers that is position dependent,  $m = m(z)$ . However, even today most of the theoretical models assume an abrupt picture for semiconductor heterointerfaces, although experimental results have shown that interfacial regions extend over two unit cells in the best cases [1]. Consequently, the spatial dependence of the carrier effective mass is in fact limited to step discontinuities at semiconductor heterointerfaces, and it is used only to assure continuity of the wave function and current density through interfaces. A clear picture of the role of a position dependent effective mass will be achieved only by considering smooth transitions of the effective mass.

Few works have been published concerning nonabrupt semiconductor interfaces. Schulman [2] studied the influence of a nonabrupt interface on the energy levels of a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well, and Jiang and Lin [3] described the band structure of

nonabrupt superlattices. Both of the models assumed linear potentials through the interfaces, and supposed the interfacial effective mass to be constant. Despite their limitations, they show theoretical indications of the role of smooth interfaces on the properties of heterostructures.

Recently, Freire, Auto, and Farias [4,5] developed a model to obtain the spatial dependence of the potential and carrier effective mass through the interface region. The model is based on the assumption of a linear aluminium molar fraction variation through the interface width, and generates an interfacial potential that is parabolic, and an effective mass that is a linear function of the growth direction coordinate in the interface region. They applied the model to nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions, and obtained analytical expressions for the transmission coefficient by using a constant interfacial effective mass approximation in the interface, *i.e.*, by disregarding the linear dependence of  $m(z)$ . With this approximation, they concluded that abrupt models for interfaces can describe transmission properties of heterojunctions measured in

experiments only when the actual sample interfaces are smaller than two lattice parameters ( $LP$ ). They showed also the possible existence of resonant peaks in the transmission coefficient of nonabrupt GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunctions when the interface widths are bigger or of the same order as  $4 LP$ . Later, the model was used for the calculation of the properties of heterojunctions under an electric field [6], and to study transmission of electrons through single [7] and double [8] barriers.

In this work, we consider the linear dependence of the effective mass through the interface to study its influence on the transmission properties of nonabrupt GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunctions.

## 2. Beyond the Constant Interfacial Effective Mass Approximation

A nonabrupt GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunction with a linear aluminium molar fraction variation between  $-a < z < +a$ , the limits of the transition region, can be described by the following expressions [4,5]:

GaAs Region ( $z < -a$ )

$$V_{x,\delta}(z)/C_\delta = 0 \quad (1)$$

$$m_{x,\delta}(z)/m^* = \mu_{1,\delta} \quad (2)$$

Mixed Alloy Region ( $-a < z < +a$ )

$$V_{x,\delta}(z)/C_\delta = V_0 + (V_1/2a)z + (V_2/a^2)z^2, \quad (3)$$

$$m_{x,\delta}(z)/m^* = m_{0,\delta} + (m_{1,\delta}/2a)z \quad (4)$$

where

$$V_0 = (x/2)[\varepsilon_1 + \varepsilon_2(x/2)] \quad (5.1)$$

$$V_1 = x[\varepsilon_1 + \varepsilon_2 x] \quad (5.2)$$

$$V_2 = \varepsilon_2(x/2)^2 \quad (5.3)$$

$$m_{0,\delta} = \mu_{1,\delta} + \mu_{2,\delta}(x/2) \quad (6.1)$$

$$m_{1,\delta} = \mu_{2,\delta}x \quad (6.2)$$

$Al_xGa_{1-x}$ As Region ( $z > +a$ )

$$V_{x,\delta}(z)/C_\delta = x[\varepsilon_1 + \varepsilon_2 x] \quad (7)$$

$$m_{x,\delta}(z)/m^* = \mu_{1,\delta} + \mu_{2,\delta}x \quad (8)$$

where  $z$  is the coordinate associated with the growth direction,  $x$  is the aluminium molar fraction in the

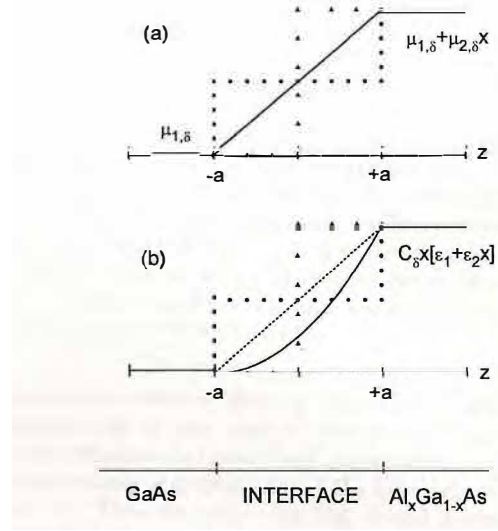


Fig. 1. (a) Carrier effective mass profile of a GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunction: abrupt variation ( $\blacktriangle \blacktriangle \blacktriangle$ ), constant mass approximation ( $\bullet \bullet \bullet$ ), linear function (—); (b) potential profile of a GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunction: abrupt variation ( $\blacktriangle \blacktriangle \blacktriangle$ ), constant interface potential approximation ( $\bullet \bullet \bullet$ ), linear approximation (---), complete parabolic potential (—).  $2a$  is the width of the interface region, and  $z$  is the heterojunction growth direction.

$Al_xGa_{1-x}$ As region,  $C_\delta$  is the band offset for the  $\delta$ -type carrier ( $\delta = e$  when electron,  $\delta = hh$  when heavy hole,  $\delta = lh$  when light hole),  $m^*$  is the electron mass in free space, and  $\varepsilon_i(\mu_{i,\delta})$  are constants obtained from experiments associated with the type of semiconductor alloy that give the dependence of its energy gap in the  $\Gamma$ -direction (carrier effective mass) on  $x$ . Figure 1 shows a graphical representation of the nonabrupt GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunction.

To study the influence of the spatial dependence of the effective mass through the interface (Eq. (5)) on the transmission properties of a nonabrupt GaAs/ $Al_xGa_{1-x}$ As heterojunction, an effective mass theory for slowly graded, mixed semiconductors has to be used, involving a kinetic energy operator with a space dependent effective mass.

The form of the kinetic energy operator (KEO) is a matter of controversy nowadays [9-11]. It was shown by Csavinszky and Elabasy [12] that the binding energy of a donor atom placed at the center of a quantum well depends in the KEO used. Galbraith and Duggan [13] determined a form for the KEO by comparing model calculations and experimental results

from photoluminescence excitation spectra in GaAs/(Al,Ga)As quantum wells. Brezini and Sebbani [14] obtained a form for the KEO in the asymptotic limit of the energy near the band edge. However, while Fu and Chao [15] showed that subband structures of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As multiple quantum well samples are not sensitive to the KEO form, Ribeiro Filho *et al* [16] obtained that the transmission properties depend more strongly on the form of the KEO than on the semiconductor band offset.

Despite these problems, the most used KEO nowadays seems to be

$$T = -(\hbar^2/2)(d/dz)[m(z)]^{-1}(d/dz) \quad (9)$$

It is used here for calculation of the transmission properties of carriers through nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions with matching conditions on  $\Psi(z)$  and  $[m(z)]^{-1}(d\Psi(z)/dz)$  at  $z = \pm a$ . Because analytical results seem impossible to be obtained in the present case, the multistep potential and effective mass approximation of Ando and Itoh [17] is used for the numerical calculation of the transmission coefficient.

### 3. Numerical Results

Carriers with energy higher than the step potential are considered, and their transmission properties through nonabrupt GaAs/Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>As heterojunctions are calculated. We assume a band offset  $C_e = 0.6$  for electrons, and  $C_{lh} = C_{hh} = 0.4$  for light and heavy holes.

The transmission coefficient of electrons, light and heavy holes are presented in Figs. 2-4, respectively, for several interface widths of the nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions. They were calculated beyond the effective mass approximation, *i.e.*, by considering the linear effective mass (LEM) dependence on  $z$  through the interface, with both the constant interfacial potential (CIP) approximation and the complete parabolic interface potential (PIP). The calculations performed with the linear interface potential approximation are not presented because they give essentially the same transmission coefficient calculated with PIP. In all sets of figures, the transmission coefficient calculated for the abrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunction is included, as well as the transmission coefficient obtained with PIP and the constant effective mass (CEM) approximation through the interface. In the figures, the carrier energy  $E$  is normalized to  $V_{ze} = C_e x[\epsilon_1 + \epsilon_2 x]$ .

For all types of carriers, it is shown that LEM-CIP is not a good approximation, principally when the interface width  $\ell > 4 LP$ . However, one can see in the figures that LEM-CIP is similar to CEM-PIP. Consequently, the influence of the spatial dependence of the interfacial effective mass on the transmission properties is as important as the influence of the spatial dependence of the potential, principally for heavy holes or large interfaces. When  $\ell < 4 LP$ , the transmission coefficient obtained with LEM-PIP is always closer to that calculated for the abrupt case when compared with those obtained with CEM-PIP.

Because the effective mass of electrons in GaAs and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As is very close to that of their light holes, the differences between their transmission coefficients are mainly a consequence of the band offsets,  $C_e$  and  $C_{lh}$ . Thus, by comparing Fig. 2 and 3, one concludes that the interfacial effects on the transmission properties of nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions increase with the band offset, as well as with the aluminium molar fraction in the Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As side. This occurs because both of them act by decreasing the carrier momentum after crossing the interface.

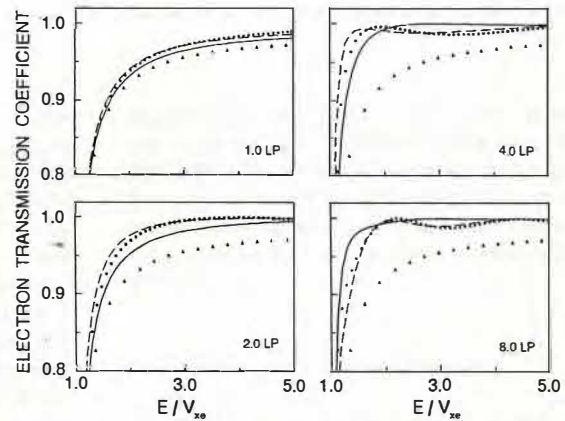


Fig. 2. Transmission coefficients of electrons through nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions with interface widths of 1, 2, 4, and 8 GaAs lattice parameters calculated with: an effective mass with linear dependence on the growth direction  $z$ , and the constant interface potential approximation (---); an effective mass with linear dependence on the growth direction  $z$ , and the complete parabolic potential (—); the constant interfacial effective mass approximation, and the complete parabolic potential (• • •). The transmission coefficient of electrons through an abrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunction (▲ ▲ ▲) is also included for the sake of comparison.

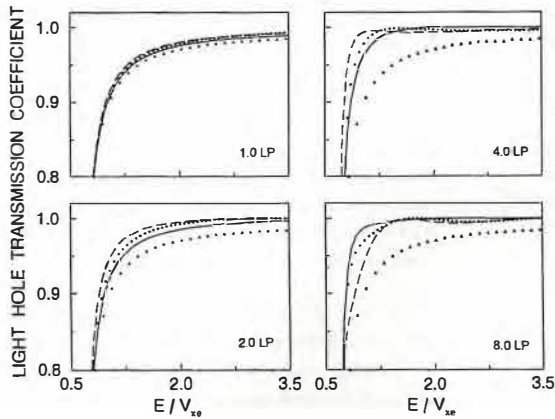


Fig. 3. Transmission coefficients of light holes through nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions with interface widths of 1, 2, 4, and 8 GaAs lattice parameters calculated with: an effective mass with linear dependence on the growth direction  $z$ , and the constant interface potential approximation (---); an effective mass with linear dependence on the growth direction  $z$ , and the complete parabolic potential (—); the constant interfacial effective mass approximation, and the complete parabolic potential (• • •). The transmission coefficient of light holes through an abrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunction (▲ ▲ ▲) is also included for the sake of comparison.

Effects of the carrier effective mass on the transmission properties of nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions are more important than both  $C_8$  and  $x$ . In fact, the transmission coefficients for light and heavy holes presented in Fig. 3 and 4, respectively, show that the latter is more dependent on the interface width than the former. An heterojunction can be considered abrupt for light holes when its interface width is of the same order or greater than two  $LP$ , while for heavy holes this occurs when the interface width is smaller than one  $LP$ . Consequently, one can conclude by going beyond the constant interfacial effective mass approximation that abrupt potential models are able to well describe the transmission properties of electrons and light holes (heavy holes) through actual heterojunctions only when their interfacial widths  $\ell < 2 LP$  ( $\ell < 1 LP$ ). Considerable disagreement between theoretical results obtained with the abrupt picture of the interface, and experimental measurements in samples with actual interface widths  $\ell \gtrsim 2 LP$  will occur, principally those related with heavy holes.

The linear spatial dependence of electron and light hole effective masses through the interface is re-

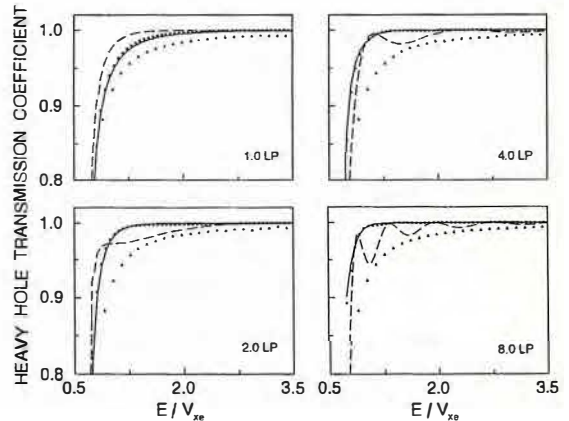


Fig. 4. Transmission coefficients of heavy holes through nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions with interface widths of 1, 2, 4, and 8 GaAs lattice parameters calculated with: an effective mass with linear dependence on the growth direction  $z$ , and the constant interface potential approximation (---); an effective mass with linear dependence on the growth direction  $z$ , and the complete parabolic potential (—); the constant interfacial effective mass approximation, and the complete parabolic potential (• • •). The transmission coefficient of heavy holes through an abrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunction (▲ ▲ ▲) is also included for the sake of comparison.

sponsible for the absence of resonant peaks that occur in the constant interfacial mass approximation for  $\ell \gtrsim 8 LP$  [4,5]. However, they are not present in the transmission coefficient of heavy holes, even with the constant interfacial effective mass approximation. This is because heavy holes are heavier than both electrons and light holes.

#### 4. Conclusions

It was shown that not only the interface potential, but also the space dependent carrier effective mass, are important for the calculation of the transmission properties of nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions. Although a constant effective mass in the interface provides a way to obtain analytical results, in general it should be considered very critically when important details of the transmission properties of nonabrupt heterojunctions are sought. The results presented here indicate the limitations of works that assume an abrupt picture for interfaces, as well as those where the interfacial effective mass is assumed to be constant.

Resonant peaks in the transmission coefficients of nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions, calculated with the constant interfacial effective mass approximation [4,5], may disappear when the spatial dependence of the effective mass is taken into account. However, a limit of 2 lattice parameters for electrons and light holes, and 1 lattice parameter for heavy holes, for the interface width was obtained if a nonabrupt heterojunction is to be approximated by an abrupt one.

*Acknowledgement* – The authors would like to acknowledge Margarida M. Auto, now retired from Universidade Federal do Ceará, in Fortaleza, Brazil, for her useful comments. This work had partial financial support from the Brazilian National Research Council (CNPq), and the Ministry of Planning (FINEP).

### REFERENCES

- [1] O. Albrektsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 31 (1990).
- [2] J. N. Schulman, *J. Vac. Sci. Technol.* B **1**, 644 (1991).
- [3] H. X. Jiang and J. Y. Lin, *Superlattices and Microstructures* **3**, 689 (1987).
- [4] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, in *Proceedings of the 5th Brazilian School on Semiconductor Physics*, edited by J. R. Leite, A. Fazzio, and A. S. Chaves, pp. 356 (World Scientific, 1991).
- [5] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* **1**, 17 (1992).
- [6] V. N. Freire, G. A. Farias, and M. M. Auto, *J. Appl. Phys.* **71**, 4076 (1992).
- [7] R. Renan, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **48**, 8446 (1993).
- [8] R. R. L. de Carvalho, V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* (in press 1994).
- [9] T. L. Li and K. J. Kuhn, *Phys. Rev.* B **49**, 2608 (1994).
- [10] W. E. Hagston, P. Harrison, T. Piorek, and T. Stirner, *Superlattices and Microstructures* **15**, 199 (1994).
- [11] R. A. Morrow, *Phys. Rev. B* **35**, 8074 (1987).
- [12] P. Csavinszky and A. M. Elabsy, *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 1010 (1988).
- [13] I. Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev.* B **38**, 10057 (1988).
- [14] A. Brezini and M. Sebbani, *Phys. Stat. Sol. (b)* **178**, 141 (1993).
- [15] Y. Fu and K. A. Chao, *Phys. Rev.* B **40**, 8349 (1988).
- [16] J. Ribeiro Filho, V. N. Freire, and G. A. Farias, (unpublished results).
- [17] Y. Ando and S. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).



***The Eighth International Conference on  
Superlattices, Microstructures and Microdevices***

***Cincinnati, Ohio, March 20-25, 1995***

**Organizing Committee**

February 17, 1995

S. Bandyopadhyay  
C. Cahay  
P. Leburton  
R. Melloch

Dr. Gil de Aquino Farias  
Departamento de Fisica  
Universidade Federal do Ceara  
Caixa Postal 6030  
60455-760 Fortaleza, Ceara, Brazil

**Program Committee**

S. Bandyopadhyay  
C. Cahay  
P. Leburton  
R. Melloch  
A. Blackstead  
D. Dow  
E. Kleinsasser

Dear Dr. Farias:

it is my pleasure to inform you that the following papers submitted by your organization have been accepted for ORAL presentation at ICSMM-8:

1. Ferreira, et. al., "Energy levels of single..."
2. Lima, et. al., "The influence of interfacial..."
3. Freire, et. al., "Accumulation layer..."

Please note that the last date for registration is MARCH 1, 1995. Registration can be completed by mailing a certified check for US\$300 for each participant and an accompanying letter indicating the participant's full name and affiliation. This should be mailed to S. Bandyopadhyay, Electrical Engineering, University of Notre Dame, Notre Dame, IN 46556, USA. Students can register at a reduced rate of US\$150 with proof of student status.

Please make your room reservations directly with The Terrace Hotel, 15 West Sixth Street, Cincinnati, Ohio 45202, USA (Tel 513-381-4000) Authors should bring THREE copies of their manuscripts to the Conference where they will be refereed prior to acceptance by the journal Superlattices and Microstructures.

Sincerely,

S. Bandyopadhyay  
Chair, Organizing Committee  
ICSMM-8

# ACCUMULATION LAYER AND INTERFACE EFFECTS IN DOPED NONABRUPT $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ HETEROJUNCTIONS

*Alexander K. Freire, J. Ribeiro Filho, Gil A. Farias, and Valder N. Freire*  
Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici  
Centro de Ciências Exatas, Caixa Postal 6030  
60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received August 21, 1995)

A theoretical model is proposed to describe doped nonabrupt  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions. It is used to study interface effects on the transmission properties and energy levels of electrons in these heterostructures. It is shown that interface effects are important in the case of high doping levels, and wide  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  interfaces.

PACS NUMBERS: 73.20.Dx, 73.20.At, 73.20.Fz

Keywords for Indexing: Doped  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions; nonabrupt interfaces; electron energy levels; transmission properties.

## 1. Introduction

Electron energy levels in doped GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions with graded interfaces (nonabrupt heterojunctions) were studied by Price and Stern [1], and Stern and Das Sarma [2]. In both works, the well in the accumulation layer has a width of the order of 50 nm for doping levels  $\sim 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . The conduction band discontinuity was assumed to be  $\sim 0.3 \text{ eV}$ , and the thickness of the interface as  $\lesssim 1 \text{ nm}$ . With these conditions, they showed that effects of interface transition layers on the energy levels are small. Modifications in the electron energy levels smaller than 0.1 meV were obtained. On the other hand, Freire, Farias and co-workers have calculated transmission properties of carriers through undoped GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions [3-5]. Their results suggest that the abrupt picture of the interface is appropriate to describe experimental results only when it is assured that the interface widths of the undoped GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  samples used in experiments are smaller than one GaAs lattice parameter (LP).

Recent results highlight the relevance of the interface width on the optical properties of semiconductor heterostructures [6]. In the case of undoped GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  multilayers, Albrektsen *et al* [7] have showed that the interfacial region width is at least of the order of two LP. Salemink *et al* [8] have investigated interfaces of GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  multilayers highly doped with Be ( $\gtrsim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ). They have observed an interface region of two to three unit cells in the charge-density contours, and a transition region of six to nine unit cells wide with tunneling spectroscopic measurements. In both cases, the interfaces are wider than those assumed by Price and Stern [1], and Stern and Das Sarma [2]. It is worth mentioning that the heterostructure studied by Salemink [8] had an accumulation layer width and a doping level of the order of 9 nm and  $\gtrsim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , respectively. These values are approximately two times smaller for the width and several times higher for the doping density than those used by Price and Stern [1], and Stern and Das Sarma [2].

Based on the above results, one can argue that the role of graded interfaces on the energy levels of highly doped GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions is worthy of attention. The purpose of this work is to investigate the effects of high doping levels and wide interfaces on the electron transmission properties and energy levels in doped nonabrupt GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions. The model of Freire, Auto and Farias [3] is used to describe the interfaces of doped nonabrupt GaAs/

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions.

## 2. The Doped Nonabrupt Heterojunction

A doped nonabrupt  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunction is described here by the following position dependent potential,  $\mathcal{V}(z)$ , and electron effective mass,  $\mathcal{M}(z)$ :

$$\mathcal{V}(z)/Q = V_I(z) + V_D(z) \quad , \quad (1.1)$$

$$\mathcal{M}(z)/m_0 = m_I(z) + m_D(z) \quad , \quad (1.2)$$

where  $V_I(z)$  ( $m_I(z)$ ) is the graded potential (graded effective mass) related to the influence of the interfacial alloy variation, and  $V_D(z)$  ( $m_D(z)$ ) is the contribution to the potential (effective mass) related to the doping;  $Q$  is the electron band offset, and  $m_0$  is the free electron mass.

By assuming a linear variation of the aluminum molar fraction  $x$  through the interfacial region  $[-a, +a]$ , it is easy to show that  $V_I(z)$  ( $m_I(z)$ ) is a parabolic (linear) function of the growth direction  $z$  in this region [3].  $V_D(z)$  is a sum of contributions of the electrostatic potential  $-e\phi(z)$  for the electron, its image  $V_{IM}(z)$ , and the exchange-correlation potential  $V_{XC}(z)$  [1, 2].

Instead of calculating  $V_D(z)$  with the solution of coupled Poisson and Schroedinger equations [1, 2], an uniform charge density is assumed here [9]. In this case, the doping effects are described by imposing a band bending of width  $b$  and  $c$  in the  $\text{GaAs}$  and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  regions, respectively. The band bending is described by using parabolic expressions for the potential in the regions  $[-b - a, -a]$  and  $[a, a + c]$ , with maximum  $V_p$  and minimum  $V_q$ , respectively [9]. The extrema and the profile of the band bending potential are related with the type and level of doping. It is assumed that the doping does not modify the electron effective mass. Consequently,  $m_D(z)$  is constant and equal to the electron effective mass of  $\text{GaAs}$  or  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  when the electron is in one of these regions. Finally, the influence of doping in the graded interface region is disregarded.

Accordingly the above assumptions, the potential and electron effective mass of a doped nonabrupt  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunction is given by the following expressions:

GaAs Pure Region ( $z < -b - a$ )

$$V_I(z) = 0, \quad (2.1)$$

$$m_I(z) = 0, \quad (2.2)$$

$$V_D(z) = V_p, \quad (2.3)$$

$$m_D(z) = \mu_1. \quad (2.4)$$

GaAs Doped Region ( $-b - a < z < -a$ )

$$V_I(z) = 0, \quad (3.1)$$

$$m_I(z) = 0, \quad (3.2)$$

$$V_D(z) = -\frac{V_p}{b^2} \left[ z^2 + 2z(+a + b) + a^2 + 2ab \right], \quad (3.3)$$

$$m_D(z) = \mu_1, \quad (3.4)$$

Mixed Alloy Region ( $-a < z < +a$ )

$$V_I(z) = V_{0,x} + (V_{1,x}/2a)z + (V_{2,x}/a^2)z^2, \quad (4.1)$$

$$m_I(z) = m_{0,x} + (m_{1,x}/2a)z, \quad (4.2)$$

$$V_D(z) = 0, \quad (4.3)$$

$$m_D(z) = \mu_1, \quad (4.4)$$

• where

$$V_{0,x} = (x/2) \left[ \varepsilon_1 + \varepsilon_2(x/2) \right], \quad (5.1)$$

$$V_{1,x} = V_{MAX} = x \left[ \varepsilon_1 + \varepsilon_2 x \right], \quad (5.2)$$

$$V_{2,x} = \varepsilon_2(x/2)^2; \quad (5.3)$$

$$m_{0,x} = \mu_1 + \mu_2(x/2), \quad (5.4)$$

$$m_{1,x} = \mu_2 x. \quad (5.5)$$

Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Doped Region ( $+a < z < +a + c$ )

$$V_I(z) = 0, \quad (6.1)$$

$$m_I(z) = 0, \quad (6.2)$$

$$V_D(z) = \frac{V_g}{c^2} [z^2 - 2z(a + c) + a^2 + 2ac] + x(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 x), \quad (6.3)$$

$$m_D(z) = \mu_1 + \mu_2 x, \quad (6.4)$$

Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Pure Region ( $z > +a + c$ )

$$V_I(z) = 0, \quad (7.1)$$

$$m_I(z) = 0, \quad (7.2)$$

$$V_D(z) = x(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 x) - V_g, \quad (7.3)$$

$$m_D(z) = \mu_1 + \mu_2 x. \quad (7.4)$$

In the above equations,  $\varepsilon_i$  ( $\mu_i$ ) are experimental parameters obtained from the compositional dependence of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As on  $x$  [10].

### 3. Results and Discussions

Transmission properties and electron energy levels in doped nonabrupt GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As heterojunctions are calculated by solving the Schroedinger equations for the potential and electron effective mass of Eqs. (1-7). Continuity conditions are imposed on  $\Psi(z)$  and  $[m(z)]^{-1}(d\Psi(z)/dz)$  at  $z = \mp(a + b), \mp a$ . The position dependent kinetic energy operator of BenDaniel and Duke [11],  $(-\hbar^2/2)(d/dz)[m(z)]^{-1}(d/dz)$ , is used to take into account the spatial dependence of the electron effective mass through the interface. Numerical solutions are obtained by using the multistep method of Ando and Itoh [12]. The electron band offset is taken as 0.6, doping levels of the order of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , and band bending widths  $\sim 10 \text{ nm}$ , *i.e.* values similar those of the papers of Salemink *et al* [8], and Ando and Mori [13].

Figure 1 shows the influence of the nonabrupt interfaces on the transmission properties of electrons through doped GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As heterojunctions. For a given level of doping, the electron transmission is enhanced when the interface width increases. The electron transmission properties also change with the variation of the type and level of doping. These results suggest that nonabrupt interfaces could

modify the electron energy levels in doped GaAs/ $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  heterojunctions.

The behavior of the transfer matrix element  $M_{11}$  is presented in Fig. 2 and Fig. 3. It is well known that their extrema give the energy levels of quantum wells [14].

One can see in Fig. 2 the interface effects on the energy levels when three different doping densities are considered. The growth of the interface width shifts the electron energy levels toward low energies. These displacements increase with the doping level, and are at least of the order of 4 meV even for an interface width of only two GaAs lattice parameters. Nonabrupt interfaces can be responsible for the existence of energy levels if the doping level is reduced considerably (see Fig. 2(c)).

The increase of the accumulation layer width also shifts the energy levels toward low energies (see Fig. 3), and can be responsible for the existence of a second electron energy level. However, it is interesting to observe that an interface width of only two GaAs lattice parameters can be responsible for the existence of energy levels otherwise precluded if abrupt interfaces are considered (see Fig. 3(c)).

Interfacial effects on the electron energy levels of doped nonabrupt GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions are more (less) important for high doping levels (small band bending widths). Table 1 shows that an interface width of only two LP can decrease the energy of the electron in the fundamental state as much as 4 meV or 3 meV if the band bending width is of 11 nm or 23 nm, respectively. This variation is one order higher than that obtained by Stern and Das Sarma [2] in the case of wide accumulation layers and small thickness of the GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  interfaces.

In conclusion, it was shown that accumulation layer and interface effects on doped nonabrupt GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunctions are important in the case of high doping levels and wide interfaces. Although the absence of  $V_D(z)$  self-consistent calculations is a shortcoming of this work, the assumption of homogeneous distributed carriers should be responsible for energy differences smaller than 1 meV in comparison with the energy levels otherwise obtained with self-consistent calculations [9].

Acknowledgement - This work was supported by the Brazilian National Research Council (CNPq), and the Ministry of Planning (FINEP). Additional financial support was given by CNPq and the Fundação Cearense de Amparo a Pesquisa (FUNCAP) to one of the authors, V. N. Freire, to participate in the Eighth International Conference on Superlattices, Microstructures

and Microdevices, held in Cincinnati, Ohio, USA, 20-25 August 1995, where this work was presented.

## References

- [1] P. J. Price and F. Stern, *Surf. Sci.* **132**, 577 (1983).
- [2] F. Stern and S. das Sarma, *Phys. Rev.* **B30**, 840 (1984).
- [3] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlatt. Microstruct.* **1**, 17 (1992)
- [4] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *J. Appl. Phys.* **71**, 4076 (1992).
- [5] J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlatt. Microstruct.* **17**, 1 (1995)
- [6] M. A. Herman, D. Bimberg, and J. Christen, *J. Appl. Phys.* **70**, R1 (1991).
- [7] O. Albrektsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 31 (1990).
- [8] H. W. M. Salemink, O. Albrektsen, and P. Koernd, *Phys. Rev.* **B45**, 6946 (1992).
- [9] G. Livescu, D. A. B. Miller, D. S. Chemla, M. Ramaswamy, T. Y. Chang, N. Sauer, A. C. Gossard, and J. H. English, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-20**, 1677 (1988).
- [10] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **S8**, R1 (1985).
- [11] D. J. BenDaniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
- [12] Y. Ando and T. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).
- [13] T. Ando and S. Mori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **47**, 1518 (1979).
- [14] E. Merzbacher, in *Quantum Mechanics* (Wiley 1970).

## Figures and Table Caption

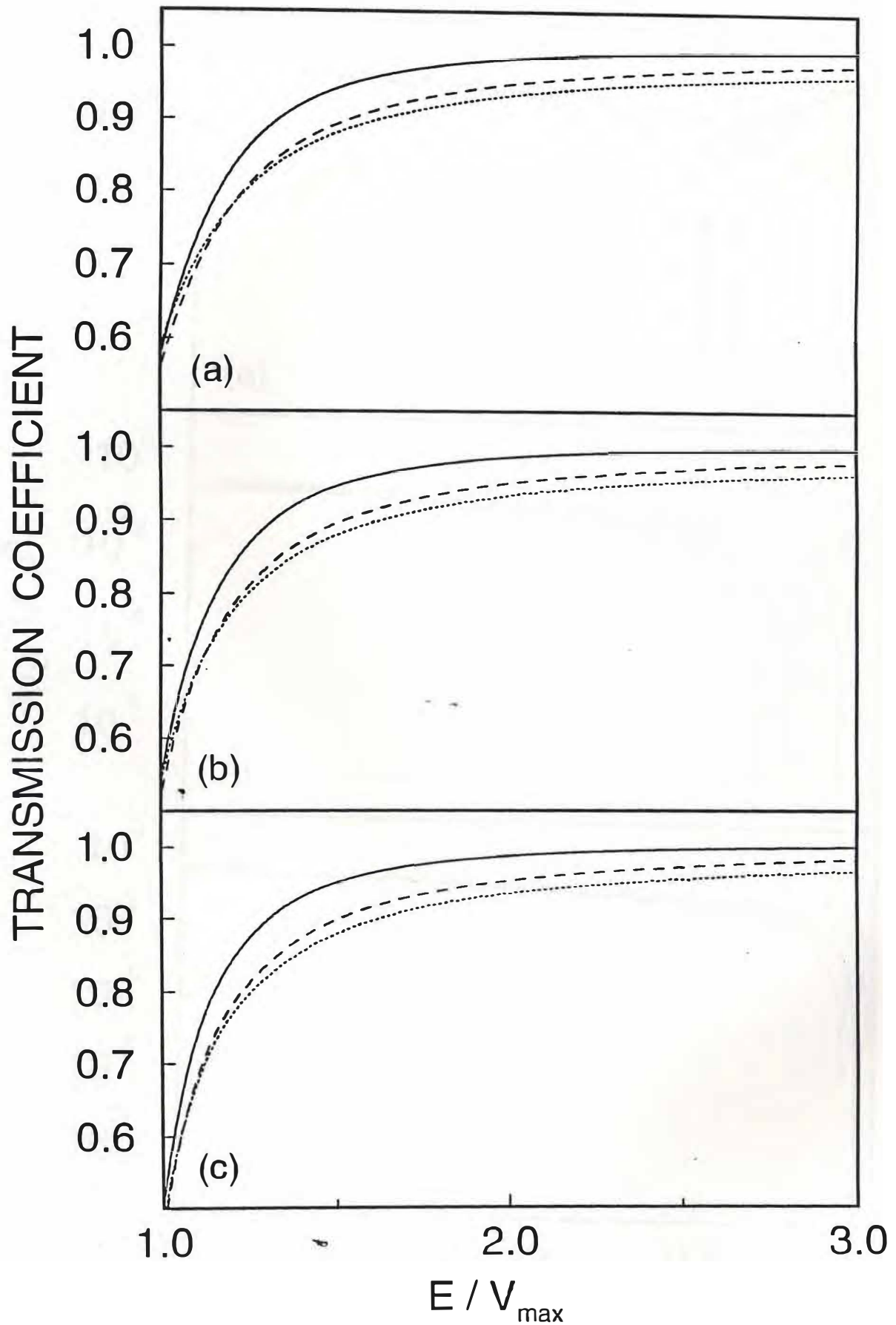
Figure 1. Electron transmission coefficients of doped nonabrupt GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As heterojunctions when: (a)  $V_p = V_q = 90$  meV; (b)  $V_p = V_q = 60$  meV; (c)  $V_p = V_q = 40$  meV. The electron band offset is of 0.6, the band bending widths  $b=c=11$  nm, and  $V_{MAX} = 270$  meV. The interface widths are: 0 LP (dotted), 2 LP (solid), and 4 LP (dashed).

Figure 2. Behavior of the transfer matrix element  $M_{11}$  calculated for the band bending well in a doped nonabrupt GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As heterojunction when: (a)  $V_p = V_q = 90$  meV; (b)  $V_p = V_q = 60$  meV; (c)  $V_p = V_q = 40$  meV. The electron band offset is of 0.6, the band bending widths  $b=c=11$  nm, and  $V_{MAX} = 270$  meV. The interface widths are: 0 LP (dotted), 2 LP (dashed), 4 LP (solid), and 6 LP (dotted dashed).

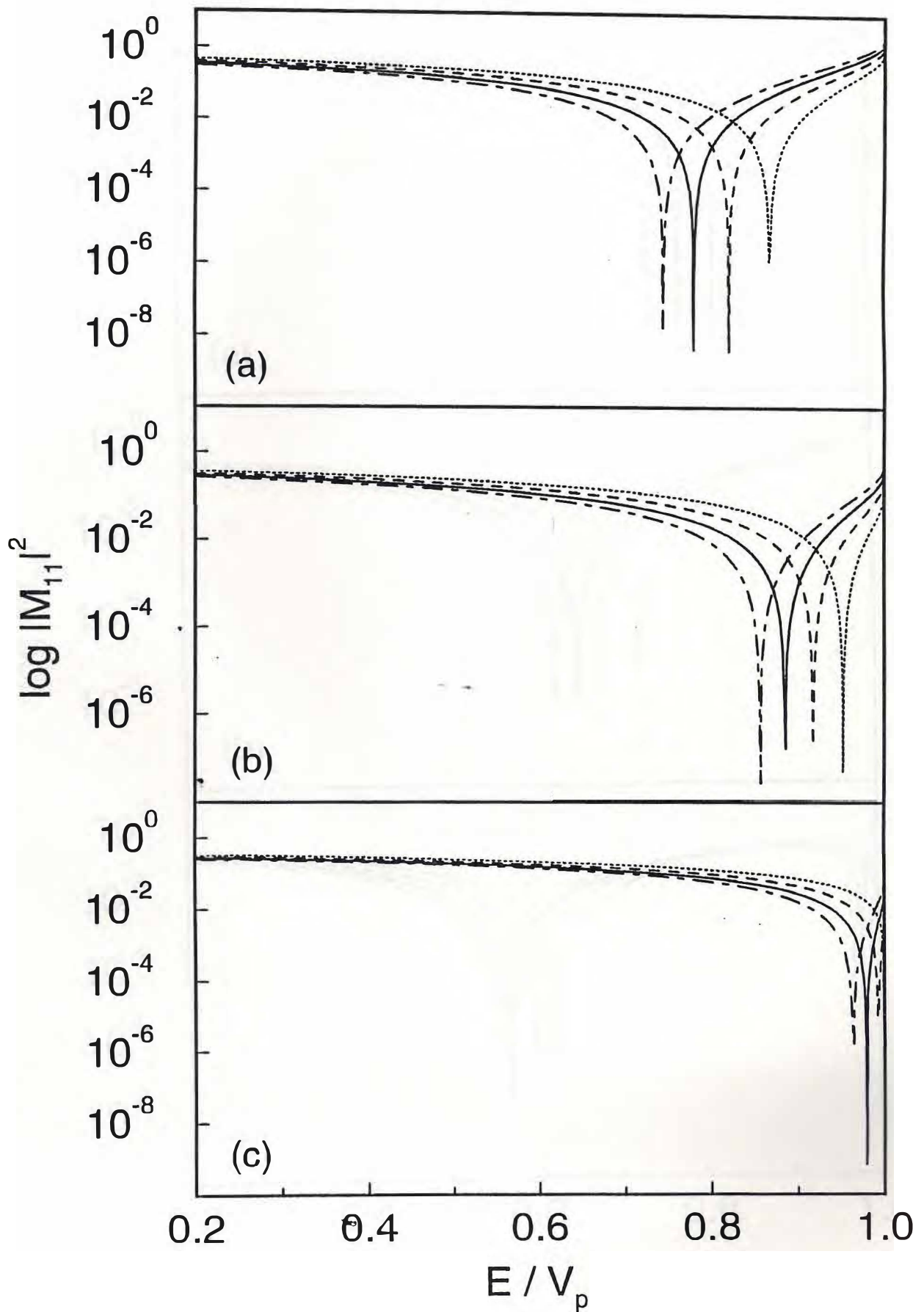
Figure 3. Behavior of the transfer matrix element  $M_{11}$  calculated for the band bending well in a doped nonabrupt GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As heterojunction with band bending widths: (a)  $b = c = 11$  nm; (b)  $b = c = 17$  nm; (c)  $b = c = 23$  nm. The electron band offset is of 0.6,  $V_p = V_q = 90$  meV and  $V_{MAX} = 270$  meV. The interface widths are: 0 LP (dotted), 2 LP (dashed), 4 LP (solid), and 6 LP (dotted dashed).

Table 1. Variation of the fundamental electron energy level of the band bending well in a doped nonabrupt GaAs/Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As heterojunction. The electron band offset is of 0.6, and  $V_{MAX} = 270$  meV, and  $V_p = V_q = 90$  meV.

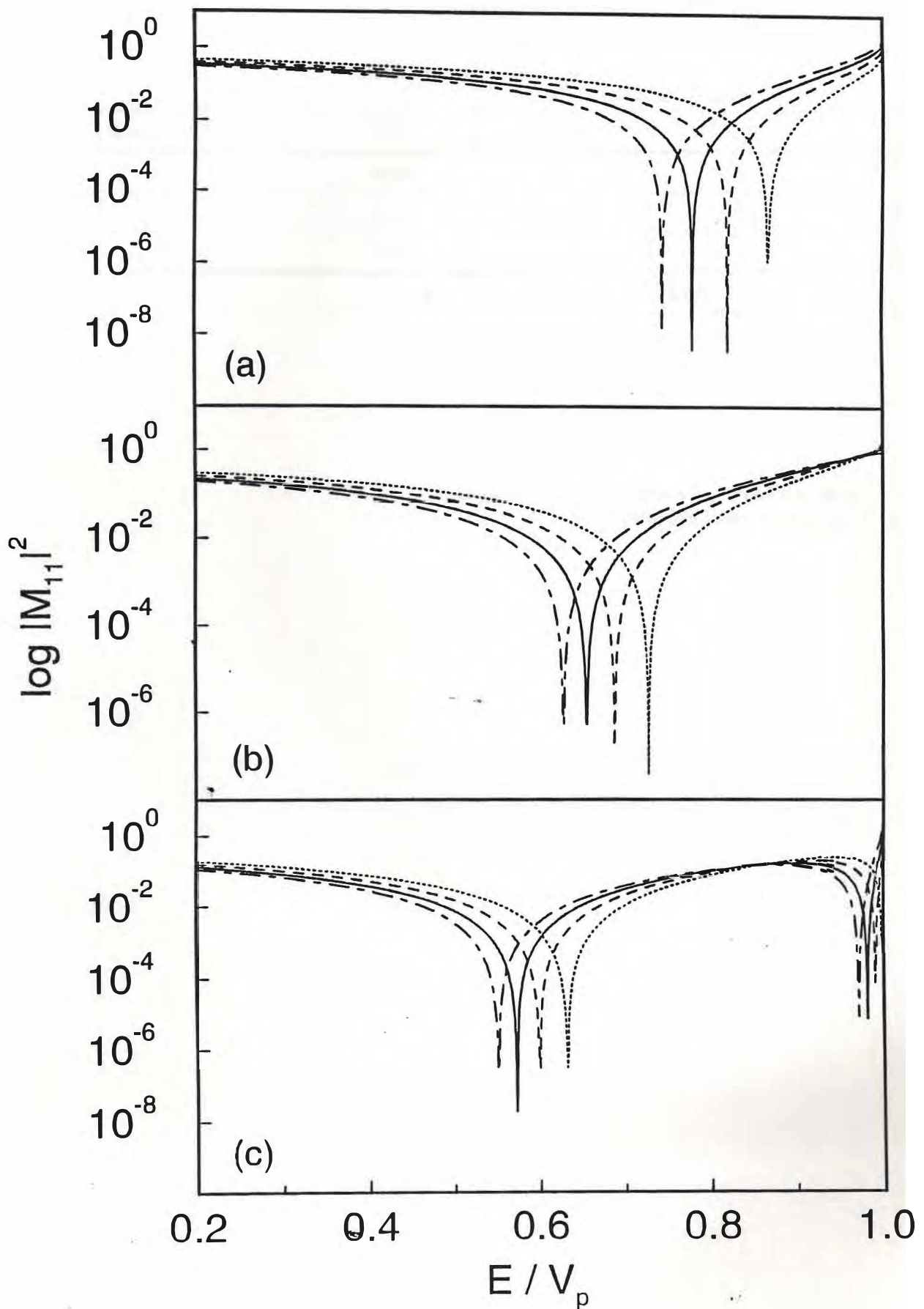
**FIGURE 1**  
Accumulation layer and interface ...  
Freire, Ribeiro Filho, Farias, and Freire



**FIGURE 2**  
Accumulation layer and interface..  
Freire, Ribeiro Filho, Farias, and F



**FIGURE 3**  
Accumulation layer and interface ...  
Freire, Ribeiro Filho, Farias, and Frei



WELL WIDTH (nm)	INTERFACE WIDTH			
	0 LP	2 LP	4 LP	6 LP
11	78.41	74.17	70.41	67.29
17	65.85	62.23	59.33	56.89
23	57.07	54.18	51.74	49.75
↑ FUNDAMENTAL ENERGY LEVEL (meV) ↑				

**TABLE 1**  
**Accumulation layer and interface ...**  
**Freire, Ribeiro Filho, Farias, and Freire**

## SOCIAL PROGRAM

*Opening Ceremony Sunday, July 16<sup>th</sup>, 1994 - 19:00*

All the participants and accompanying persons are invited to the official opening ceremony at the Rio de Janeiro II room at the Conference Hotel and to the reception which will follow.

*Conference Banquet Thursday 20th, 1994 - 20:30*

A banquet will be offered to all registered participants and accompanying persons at the Sol e Mar Restaurant with a spectacular view of the Guanabara Bay. Transportation from the Conference Hotel will be provided.

## PASSPORTS AND VISAS

Brazil adopts the Reciprocity Principle, in other words, citizens of all countries which require a visa for Brazilians are asked to present a visa in order to enter the country. One should contact the local or the closest Brazilian Consulate to inquire about the need for a visa.

## TRANSPORTATION

The official airline for the conference is VARIG - Brazilian Airlines. Those interested in VARIG Congress rates should contact Pasárgada Empresa de Turismo Ltda (address is given below) or fill in the appropriate box in the registration form. It is advised to book your flight in advance.

## TOURIST INFORMATION

For any information about Day- Excursions, Pre and Post Conference Tours as well as extension of the stay in Rio, one should contact the official Conference Travel Agency:

Pasárgada Empresa de Turismo Ltda  
Rua Visconde de Pirajá, 207 Grupo 301  
Ipanema Rio de Janeiro  
Tel +55 21 521 08 96 Fax +55 21 287 45 12

## NATIONAL COMMITTEE

Eudenilson L. de Albuquerque - UFRGN  
Marília J. Caldas - USP, São Paulo  
Fernando Cerdeira - UNICAMP  
Gil A. Farias - UFC  
Oscar Hipólito - USP, São Carlos  
Paulo César Moraes - UnB  
Alfredo G. de Oliveira - UFMG

## PROGRAM COMMITTEE

José Antonio Brum - UNICAMP  
Adalberto Fazzio - USP, São Paulo  
Paulo Sérgio Soares Guimarães - UFMG  
Belita Koiller - UFRJ  
Gilmar E. Marques - UFSCar

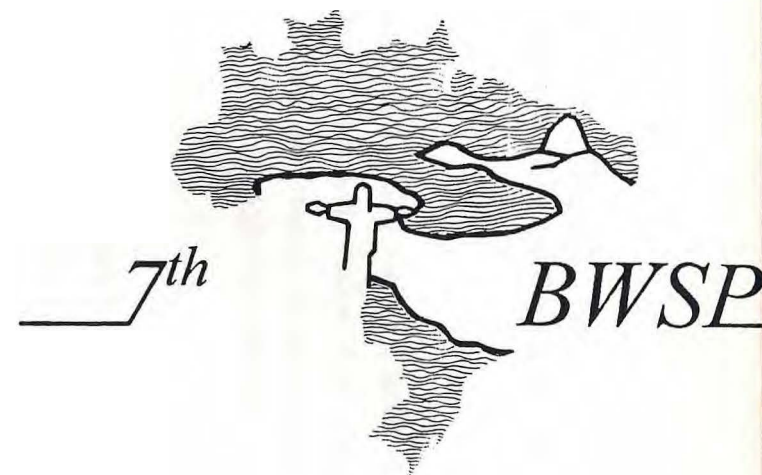
## ORGANIZING COMMITTEE

Chair: Belita Koiller,  
Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Secretary: Patrícia Lustoza de Souza,  
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro  
Sérgio Camargo, COPPE - UFRJ  
Leila Rosa de Oliveira Cruz - IME  
Andréa Latgé - UFF  
Guillermo Solórzano - PUC-Rio  
Amós Troper - CBPF  
Luis Carlos Guedes Valente - CEPTEL

## CONGRESS SECRETARIAT

Mailing Address:  
BWSP-7  
Centro de Estudos em Telecomunicações  
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro  
Rua Marquês de São Vicente 225  
Rio de Janeiro, Brazil 222453-900  
Tel. and fax: +55 21 239 7425  
e-mail: semic95@cetuc.puc-rio.br

# 7<sup>th</sup> Brazilian Workshop on Semiconductor Physics



*Rio de Janeiro - Brazil  
July 16 - 21, 1995*

**SECOND ANNOUNCEMENT  
AND  
CALL FOR PAPERS**

# KINETIC ENERGY OPERATORS AND ELECTRON TRANSMISSION IN NONABRUPT HETEROJUNCTIONS

*J. Ribeiro Filho, Gil A. Farias, and Valder N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

Centro de Ciências, Campus do Pici, Caixa Postal 6030

60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

The most used scheme for calculation of the properties of abrupt and nonabrupt semiconductor heterostructures is the effective-mass theory (EMT). Since it is recognized that EMT is justified only when smooth variations of the alloy composition are considered, one may question about the validity of the abrupt interface picture of semiconductor heterojunctions. On the other hand, if a nonabrupt interface picture is used, the exact form of the kinetic energy operator with a position dependent effective-mass, and the related matching conditions of  $\psi$  and  $d\psi/dz$  at the interfaces, are open problems up to now. In this work, we study the modifications in the transmission properties of electrons through abrupt and nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions when several forms of the kinetic energy operator with a position dependent mass are considered. The nonabrupt interface potential and electron effective-mass are obtained assuming a linear variation of the aluminium molar fraction through the interface. Several forms of kinetic energy operators already proposed (BenDaniel and Duke, Bastard, Zhu and Kroemer, Redistributed etc) are used. For a given interface width, the electron transmission is shown to depend considerably on the form of the kinetic energy operator. We conclude that both comparison of calculated properties with measurements, and research based on first principles for the derivation of the form of the kinetic energy operator, are necessary to clarify the limitations of EMT.

# Kinetic Energy Operators and Electron Transmission in Nonabrupt Heterojunctions

*J. Ribeiro Filho, Gil A. Farias, and Valder N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

Centro de Ciências, Campus do Pici, Caixa Postal 6030

60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received July 16, 1995)

It is studied the modifications in the transmission properties of electrons through abrupt and nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions when several forms of the kinetic energy operator with a position dependent effective mass are considered. The nonabrupt interface potential and electron effective mass are obtained by assuming a linear variation of the aluminum molar fraction through the interface. For a given interface width, the electron transmission is shown to depend considerably on the form of the kinetic energy operator. Different kinetic energy operators are shown to be equivalent when the interface width of the GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunction is of the order of sixteen GaAs lattice parameters.

PACS NUMBERS: 73.40, 73.40.G

Keywords for Indexing: Transmission in heterojunctions; kinetic energy operators; nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As interfaces.

## I. Introduction

The most used scheme for calculation of the properties of abrupt and nonabrupt semiconductor heterostructures is the effective-mass theory (EMT). Since EMT is justified only when smooth variations of the alloy composition are considered, one may question its use in the case of abrupt semiconductor interfaces. If nonabrupt interfaces are taken into account, the exact form of the kinetic energy operator (KEO) with a position dependent effective-mass and the continuity condition of the wave function and its derivative at the interfaces still are open problems.<sup>[1–6]</sup>

Despite the uncertainties related with the form of the KEO, few works have studied its influence on the properties of semiconductor heterostructures. Csavinszky and Elabsy<sup>[7]</sup> considered the influence of the form of the KEO on the binding energy of a hydrogenic donor placed at the centre of a  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum well. They found that the binding energy of the donor is a sensitive function of the form of the KEO. Galbraith and Duggan<sup>[8]</sup> calculated optical transition energies of  $\text{GaAs}/(\text{Al}, \text{Ga})\text{As}$  quantum wells, and showed their dependence on the forms of the KEO that they have used. On the other hand, both Morrow and Browstein<sup>[9]</sup>, as well as Einevoll and Hemmer<sup>[10]</sup> argued that the difference among KEOs is not important when the interface is very smooth. However, they do not have proved their hypothesis, nor obtained indications on how slowly graded have to be the interfaces to the validity of their assumption.

The influence of different KEOs in the transmission properties of electrons through abrupt and nonabrupt GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions is studied in this work. The purpose is to find an indication of the interface width at which different KEOs become equivalent. The GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As interface region is described accordingly the model previously proposed by Freire, Auto, and Farias.<sup>[11,12]</sup> KEOs with  $\gamma = 0$  are used, like those of BenDaniel and Duke,<sup>[13]</sup> and Zhu and Kroemer.<sup>[14]</sup>

A general form for the KEOs is presented in Section II, as well as a description of the potential and electron effective mass through the GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As interface that characterizes the nonabrupt interface model used in this work. In Section III, numerical results show the influence of the interface width and KEO on the electron transmission through GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterojunctions. It is obtained the interface width at which different KEOs become equivalent. Finally, this work finishes in Section IV with comments on its limitations and consequences.

## II. Kinetic energy operators and interface model

After the proposition of the effective-mass theory by Wannier,<sup>[15]</sup> Slater,<sup>[16]</sup> and Luttinger and Kohn,<sup>[17]</sup> several works tried to extend the EMT beyond the constant effective-mass picture to study crystals with graded composition. Several forms were proposed for the KEO with position dependent effective mass,  $m = m(z)$ , including those of: BenDaniel and Duke,<sup>[13]</sup>  $K_{BDD} = p [m(z)]^{-1} p/2$ ; Zhu and Kroemer,<sup>[14]</sup>  $K_{ZK} = [m(z)]^{1/2} p^2 [m(z)]^{1/2}/2$ ; Gora and Williams<sup>[18]</sup> and/or Bastard,<sup>[19]</sup>  $K_{GW(B)} = p^2 [m(z)]^{-1} + [m(z)]^{-1} p^2/4$ ; Liu and Khun,<sup>[20]</sup>  $K_{LK} = p [m(z)]^{-1} p [m(z)]^{-1} + [m(z)]^{-1} p [m(z)]^{-1} p/4$ .

The most general KEO was proposed by von Roos,<sup>[21]</sup> and is given by:

$$K_{vR} = \frac{1}{4} \left[ m(z)^\alpha p m(z)^\beta p m(z)^\gamma + m(z)^\gamma p m(z)^\beta p m(z)^\alpha \right] \quad (1)$$

with  $\alpha + \beta + \gamma = -1$ . The continuity conditions are imposed on  $m^\alpha \psi(z)$  and  $m^{\alpha+\beta} \psi'(z)$ , where  $\psi(z)$  is the envelop function. Morrow and Browstein<sup>[9]</sup> showed that only single-term forms with  $\alpha = \gamma$  are viable candidates to be a KEO in the case of abrupt semiconductor heterojunctions. No restriction seems to exist for  $\gamma$  when graded semiconductor interfaces are considered.

Today it seems that the KEO with  $\beta = -1, \gamma = 0$  (the BenDaniel and Duke<sup>[13]</sup> KEO) is the most used, although not definitively accepted. Recently, Hagston *et*

*al.*<sup>[3]</sup> have argued that the KEO of BenDaniel and Duke<sup>[13]</sup> leads to a violation of the Heisenberg Uncertainty Principle. They suggested that the KEO of Zhu and Kroemer<sup>[14]</sup> does not suffer this deficiency.

Accordingly Eq. (1), the influence of the KEO on the properties of semiconductor heterostructures is determined by the spatial dependence of the effective mass of carriers. Ribeiro Filho *et al.*<sup>[22]</sup> have developed a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As interface model where both the potential and the electron effective mass through the interfacial region is obtained as a function of the growth pattern of the interfacial aluminum molar fraction. In the case of a linear variation of the aluminum molar fraction through the GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As interface localized at the limits  $z = \mp a$ , the interface potential and electron effective mass are given, respectively, by<sup>[11,12,22]</sup>

$$V_{\delta,x}(z) = V_x^{(0)} + V_x^{(1)} \left( \frac{z}{2a} \right) + V_x^{(2)} \left( \frac{z^2}{2a} \right), \quad (2)$$

$$\frac{m_x(z)}{m^*} = m_x^{(0)} + m_x^{(1)} \left( \frac{z}{2a} \right) \mu_{\delta 1}, \quad (3)$$

where

$$V_x^{(0)} = \frac{x}{2} \left( \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \frac{x}{2} \right) Q_e \quad (4)$$

$$V_x^{(1)} = V_x = x \left( \varepsilon_1 + \varepsilon_2 x \right) Q_e \quad (5)$$

$$V_x^{(2)} = \varepsilon_2 \left( \frac{x}{2a} \right)^2 Q_e \quad (6)$$

$$m_x^{(0)} = \mu_1 + \mu_2 \frac{x}{2} \quad (7)$$

$$m_x^{(1)} = \mu \delta_2 x \quad (8)$$

In the above equations,  $Q_e$  is the band offset for electrons,  $\varepsilon_i$  ( $\mu_i$ ) are experimental constants associated with the compositional dependence of the  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  gap energy in the  $\Gamma$ -direction (electron effective mass) at 300 K,<sup>[23]</sup> and  $m^*$  is the electron mass in the free-space.

### III. Effects of KEOs in the electron transmission

To have an indication of how smooth has to be the interfaces to the equivalence of different KEOs with  $\alpha = \gamma$ , transmission properties of electrons through abrupt and nonabrupt GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As heterojunctions of several interface widths are calculated. The interface potential and electron effective mass are described by Eqs. (2, 3). Wave equations with KEOs are obtained by taking  $-2 \leq \alpha \leq +2$ , and solved numerically with the multistep potential approximation of Ando and Itoh.<sup>[24]</sup> It is considered a band offset  $Q_e = 0.6$ .

Figures 1 and 2 shows that the dependence of the electron transmission coefficient  $T_e$  on the form of the KEO is bigger when the interface width is small. This could be seen by comparing the electron transmission through abrupt and nonabrupt interfaces. For a given interface width (curves with the same type of line in the figures),  $T_e$  is highly dependent on the form of the KEO.

$T_e$  changes considerably with  $\alpha$  when the interface width  $\ell$  is as small as four GaAs lattice parameters (LP). However, when  $\ell$  is greater or of the order of sixteen GaAs lattice parameters (see long dashed lines in the figures),  $T_e$  does not change its behavior, being almost independent of  $\alpha$ . Consequently, different KEOs are shown to be equivalent in the case of electrons when the interface width of the GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As heterojunction is  $\gtrsim 16$  LP.

To highlight the importance of the way the spatial dependence of the effective mass is considered,  $T_e$  is also calculated assuming that  $m(z) = m_x^{(0)}$ , *i.e.*,  $m(z)$  is constant through the interface region of width  $\ell = 16$  LP (see continuous line in the figures). The constant mass approximation is responsible for the existence of resonances in the transmission. These resonances increases strongly with the value of  $|\alpha|$ . On the other hand, if the complete spatial dependence of the electron effective mass is considered, the transmission resonances never occur when the interface width is smaller than 4 LP and  $-1 \leq \alpha \leq +1$ .

The KEO of Zhu and Kroemer ( $\alpha = -1/2$ )<sup>[14]</sup> produces the smallest dependence of  $T_e$  on the interface width, as well as the smallest resonances generated with the constant effective mass approximation. The dependence of  $T_e$  calculated with the KEO of BenDaniel and Duke ( $\alpha = 0$ )<sup>[13]</sup> on the interface width is a little stronger than that shown by  $T_e$  when calculated with the KEO of Zhu and Kroemer.<sup>[14]</sup>

It is worth to be observed that if  $\alpha \geq 0$ , the electron transmission decreases with  $\alpha$  for a given interface width. The rate of decreasing is big when the interface width is small.

#### IV. Concluding remarks

In this work, it was obtained that kinetic energy operators with  $-2.0 \leq \alpha \leq +2.0$  are all equivalent when the width of the graded semiconductor interface is of the order of  $100 \text{ \AA}$ . Since the best interface widths of semiconductor samples are nowadays at least of 2 lattice parameters,<sup>[25,26]</sup> one can conclude that more fundamental results are needed to indicate the validity and range of applicability of the effective-mass theory, as well as the correct form of the kinetic energy operator in the domain of the semiconductor physics of reduced dimensionality.

The limit of  $100 \text{ \AA}$  obtained here to the equivalence of several KEOs is a consequence of the semiconductor data used in the calculations, the growth pattern of the interface, and the approximations that were done (for example, the assumption  $\gamma = \alpha$ ). However, the result agrees with that of Wolfe *et al.*<sup>[27]</sup> on the limitations of the effective-mass approximation. Based in simple arguments related with the Heisenberg uncertainty principle, Wolfe *et al.*<sup>[27]</sup> have argued that, in the case of GaAs, the effective-mass approximation is a very reliable tool only when semiconductor dimensions bigger than  $300 \text{ \AA}$  are involved. Consequently, more fundamental results are necessary to explain the considerable success of the effective-mass approximation in the estimation of the properties of semiconductor heterostructures.

Considerable progress has been achieved by Burt toward obtaining an effective-mass equation from first principles, *i.e.*, microscopic Schroedinger equations that are valid even for abrupt semiconductor interfaces.<sup>[28,29]</sup> However, his final version of the

effective-mass equation was obtained by neglecting terms that would contribute to the KEO. Consequently, a comparison between Burt's kinetic energy operator<sup>[28]</sup> and those previously proposed arguing hermiticity<sup>[16]</sup> does not indicate conclusively the form of the KEO with a position dependent effective-mass.

## References

1. M. G. Burt, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 717 (1994).
2. A. Brezini and M. Sebbani, *Phys. Stat. Sol. (b)* **178**, 141 (1993).
3. W. E. Hagston, P. Harrison, T. Piorek, and S. Stirner, *Superlatt. Microstruct.* **15**, 199 (1994).
4. M. R. Geller and W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3103 (1993).
5. C. Schnittler and M. Kirilov, *Phys. Stat. Sol. (b)* **176**, 143 (1993).
6. J. Thomsen, G. T. Einevoll, and P. C. Hemmer, *Phys. Rev.* **B47**, 12760 (1993).
7. P. Csavinszky and A. M. Elabsy, *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 1010 (1988).
8. I. Galbraith and G. Duggan, *Phys. Rev.* **B38**, 10057 (1988).
9. R. A. Morrow and K. R. Browstein, *Phys. Rev.* **B30**, 678 (1984).
10. G. T. Einevoll and P. C. Hemmer, *J. Phys. C* **21**, L1193 (1993).
11. V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, in *Proceedings of the 5th Brazilian School on Semiconductor Physics*, editado por J. R. Leite A. Fazzio, and A. S. Chaves, pp. 356 (World Scientific, Singapore, 1992).

12. V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, *Superlattices and Microstructures* **1**, 17 (1992).
13. D. J. BenDaniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.* **152**, 683 (1966).
14. Q.-G. Zhu and H. Kroemer, *Phys. Rev.* **B27**, 3519 (1983).
15. G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **52**, 191 (1937).
16. J. C. Slater, *Phys. Rev.* **76**, 1592 (1949).
17. J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
28. T. Gora and F. Williams, *Phys. Rev.* **177**, 1179 (1969).
19. G. Bastard, *Phys. Rev.* **B24**, 5693 (1981).
20. T. L. Li and K. J. Kuhn, *Phys. Rev.* **B47**, 12760 (1993).
21. O. von Roos, *Phys. Rev.* **B27**, 7547 (1983).
22. J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, (submitted to *Phys. Lett.* 1995).
23. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **S8**, R1 (1985).
24. Y. Ando and T. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).
25. A. Ourmazd, D. W. Taylor, J. Cunningham, and C. W. Tu, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 933 (1989).

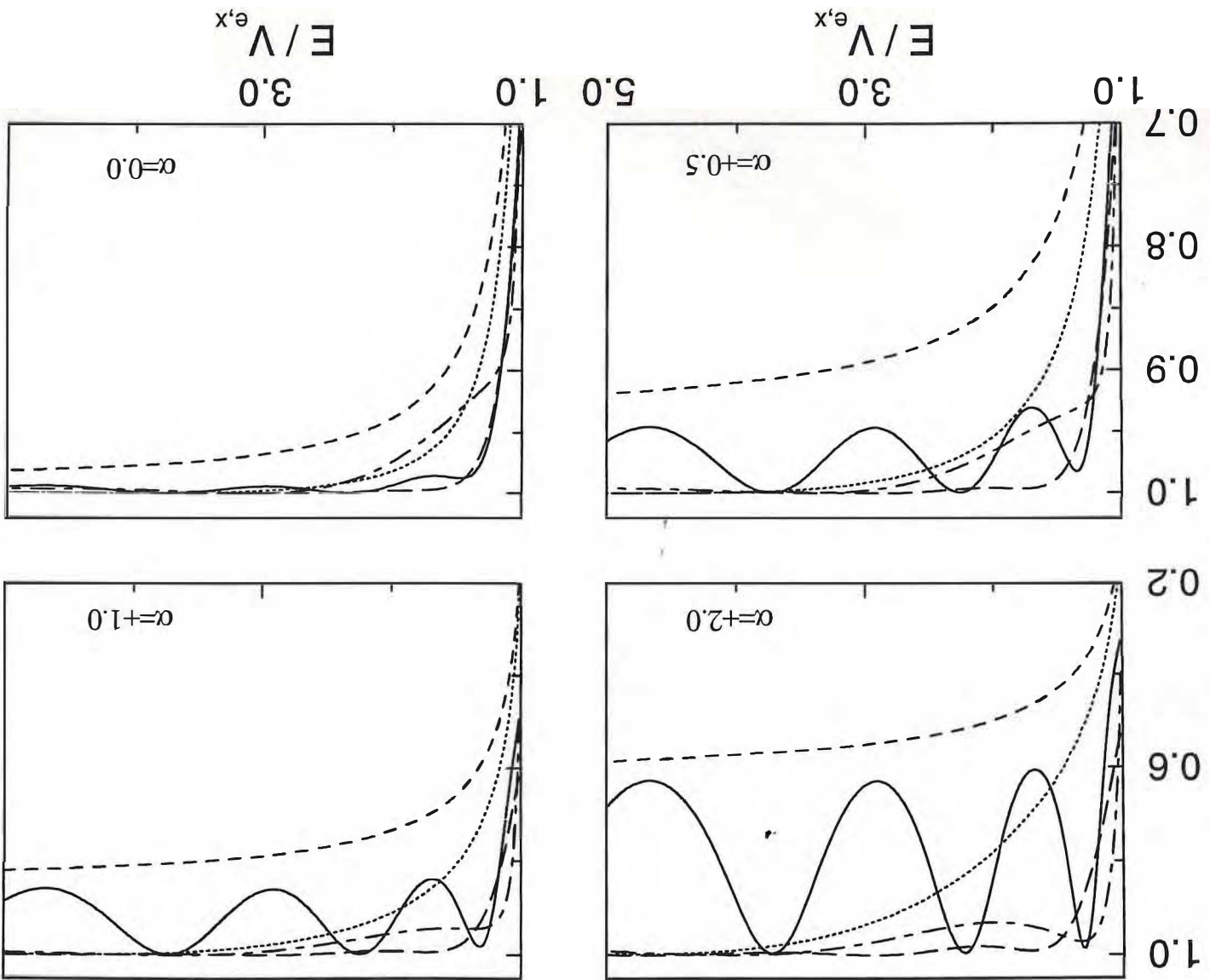
26. O. Albrektsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 31 (1990).
27. C. M. Wolfe, N. Holonyak, Jr., and G. E. Stillman, in *Physical Properties of Semiconductors*, pp. 68 (Prentice-Hall, 1989).
28. M. G. Burt, *J. Phys: Condens. Mater.* **4**, 6651 (1992).
29. M. G. Burt, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 717 (1994).

## Figures caption

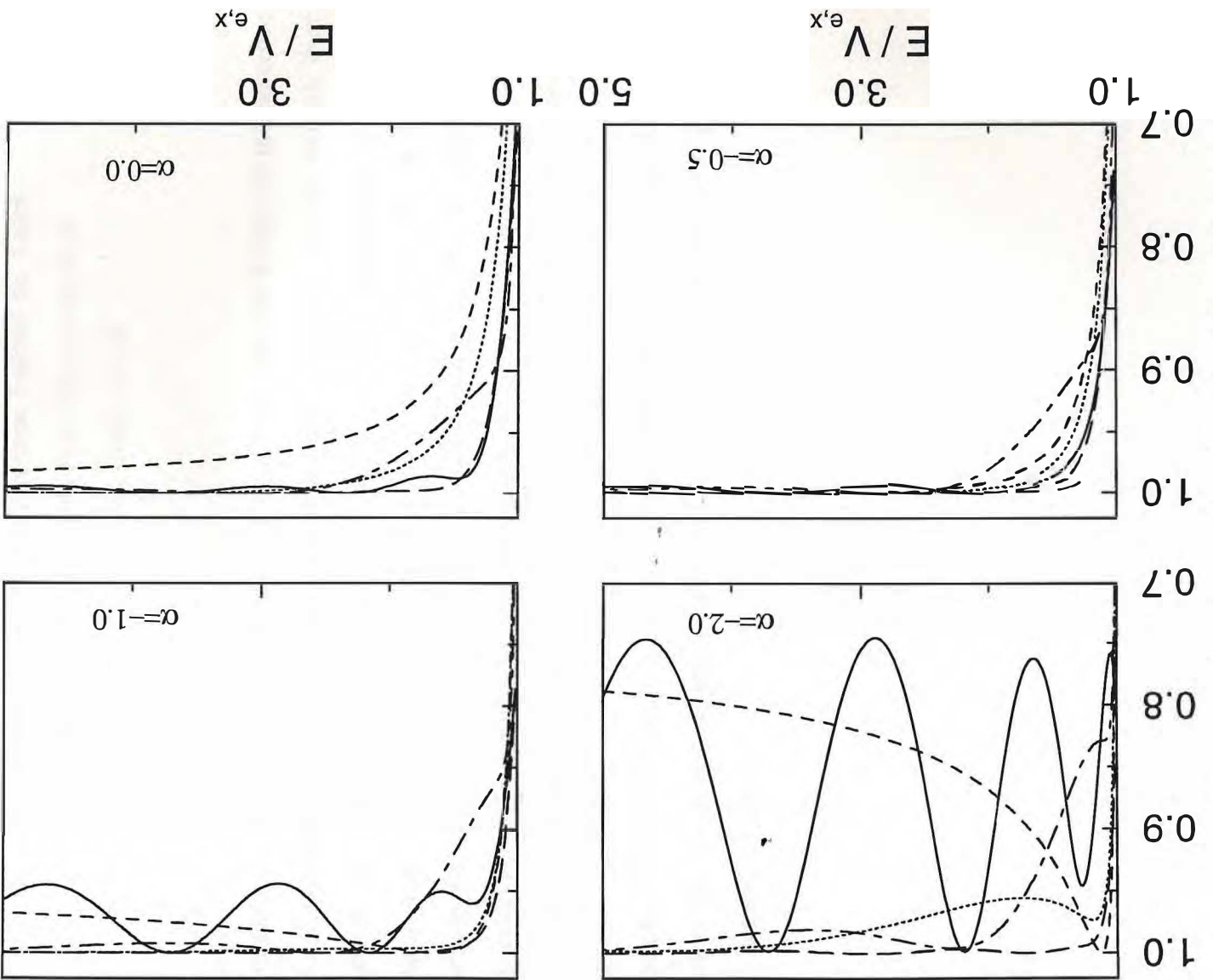
Figure 1: Electron transmission through abrupt and nonabrupt GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As heterojunctions calculated considering the spatial dependence of the interface potential and electron effective mass and a band offset  $Q_e = 0.6$ . Kinetic energy operators with  $\alpha = 0.0, -0.5, -1.0, -2.0$  were used, as well as interface widths of: 0 LP (dashed); 4 LP (dotted); 8 LP (dotted dashed); 16 LP (long dashed). The continuous line shows the electron transmission calculated considering the constant interfacial effective-mass approximation, and an interface width of 16 LP.

Figure 2: Electron transmission through abrupt and nonabrupt GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As heterojunctions calculated considering the spatial dependence of the interface potential and electron effective mass and a band offset  $Q_e = 0.6$ . Kinetic energy operators with  $\alpha = 0.0, +0.5, +1.0, +2.0$  were used, as well as interface widths of: 0 LP (dashed); 4 LP (dotted); 8 LP (dotted dashed); 16 LP (long dashed). The continuous line shows the electron transmission calculated considering the constant interfacial effective-mass approximation, and an interface width of 16 LP.

ELECTRON TRANSMISSION COEFFICIENT



ELECTRON TRANSMISSION COEFFICIENT



**IMPURITY EFFECTS ON THE TRANSMISSION PROPERTIES  
OF GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As HETEROJUNCTIONS**

*Carlos A. C. Feitosa, Raimundo N. Costa Filho, and Valder N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

Centro de Ciências, Campus do Pici, Caixa Postal 6030

60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

One of the most important problems related to real semiconductor barriers is the existence of scattering centers like roughness, impurities, and defects that may modify strongly their transmission properties. The role of localized impurities on the transmission properties of electrons through GaAs/AsGa<sub>1-x</sub>As heterojunctions is considered here. By describing one impurity as a confining potential, we study in this work how its number, localization, form, mean width and depth modify electron transmission. It is shown that the mean width and depth of the confining impurity potential are more important than its form. Localization effects alter significantly transmission properties only when the impurity is close to or inside the interface (when a nonabrupt interface is considered). Effects of the existence of two impurities are also obtained, and are enhanced in comparison with those obtained with a single impurity center.

# INTERFACE PHONONS IN GRADED COMPOSITION SEMICONDUCTOR HETEROJUNCTIONS

*Alexandre M. R. Teixeira, Raimundo N. Costa Filho, and Valder N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará  
Centro de Ciências, Campus do Pici, Caixa Postal 6030  
60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

A model to describe interface phonons in nonabrupt (graded) semiconductor heterojunctions is proposed. It is based on the coupling of two sets of  $n_b$  harmonic oscillators via another set of  $n_i$  harmonic oscillators ( $n_b \gg n_i$ ). Each of the  $n_b$  harmonic oscillators of the first (second) set has a mass  $m_1$  ( $m_3$ ), and interacts with its closest neighbourhood through an elastic constant  $\gamma_1$  ( $\gamma_3$ ). However, at the limit of the interfaces, they are coupled to harmonic oscillators of the interface region of mass  $m_{2j}=m_2(z_j)$  and elastic constants  $\gamma_{2j}=\gamma_{2j}(z_j)$ . Both  $m_{2j}$ ,  $\gamma_{2j}$  are allowed to vary smoothly from  $(m_1, \gamma_{1j})$  to  $(m_3, \gamma_3)$  in the interface region. Phonon dispersion relations are obtained and compared with those of interface phonons in abrupt semiconductor heterojunctions. It is shown that both the interface width and type of  $m_{2j}$ ,  $\gamma_{2j}$  interfacial variation (associated to interfacial growth patterns) are important in the determination of dispersion relations. Modifications of the acoustic branches increase with the interface width. Departures from those of abrupt semiconductor heterojunctions depend on the profile of  $m_{2j}$ ,  $\gamma_{2j}$  interfacial variation. In general, they are important when the interface width is at least of two lattice parameters, *i. e.* of the order of the interface width of the best semiconductor hetero-interfaces grown nowadays.

# PADRÕES DE RUGOSIDADE E TRANSMISSÃO EM HETEROJUNÇÕES GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As NÃO-ABRUPTAS

José Ribeiro Filho, Gil A. Farias, e Valder N. Freire  
Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará  
Centro de Ciências - Campus do Pici, Caixa Postal 6030  
60455-760 Fortaleza, Ceará, Brasil.

Investiga-se as propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas com rugosidade interfacial. Mostra-se que a rugosidade faz crescer a transmissão, embora o grau de rugosidade e sua localização exerçam no crescimento influência menor do que a largura interfacial. A aproximação da massa efetiva constante na interface superestima as propriedades de transmissão em heterojunções não-abruptas.

## 1. Introdução

Efeitos de interface têm que ser introduzidos com cautela em qualquer teoria de tunelamento, desde que as propriedades de transmissão mudam com o esquema utilizado para descrever as interfaces e também com a largura interfacial. Redução das razões pico-a-vale na corrente relacionadas com o espalhamento dos portadores em superfícies rugosas podem ser fortemente dependente do modelo utilizado para descrever a interface, e não no próprio mecanismo de espalhamento.

A influência de variações aleatórias da fração molar de alumínio nas propriedades de heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de composição gradual na interface é investigada no presente trabalho. Cinco padrões de crescimento interfacial com rugosidade superposta são utilizados, todos representativos de variações interfaciais da liga geradas por diferentes técnicas de crescimento.

## 2. O Modelo de Rugosidade Interfacial

A Fig. 1 apresenta perfis de variação da fração molar de alumínio  $\chi_{ld}(z)$  na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de largura  $l = 2a$ . Eles foram obtidos através da contribuição de uma componente aleatória  $P(z)$  e de forma gaussiana  $G_d(z)$  a perfis  $S_l(z)$  do tipo (a) linear, (b) retardado, (c) suave, e (d) avançado da variação da fração molar de alumínio, *i. e.*,

$$\chi_{ld}(z) = [1 + P(z)G_d(z)]S_l(z) \quad , \quad (1)$$

onde o índice  $l$  caracteriza o tipo de perfil suave, e o índice  $d$  caracteriza o grau de rugosidade sobre o perfil suave.

O potencial e a massa efetiva dos portadores na região interfacial são obtidos de  $\chi_{ld}(z)$  na hipótese de que a dependência em  $x$  da estrutura de bandas e da massa efetiva dos portadores seja válida para dimensões da ordem de Angstrom. Eles são dados respectivamente por:

$$V_x(z) / C = \varepsilon_1 \chi_{ld}(z) + \varepsilon_2 \chi_{ld}^2(z) \quad , \quad (2)$$

$$m_x(z) / m_0 = \mu_1 + \mu_2 \chi_{ld}(z) \quad , \quad (3)$$

onde  $C$  é o *band offset* para elétrons,  $m_0$  é a massa do elétron no vácuo, e  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  ( $\mu_1, \mu_2$ ) são parâmetros relacionados com a dependência composicional de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As em  $x$  [1]. Para o cálculo das propriedades de transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas com as interfaces da Fig. 1, o método de *multisteps* de Ando e Itoh [2] foi utilizado para a solução numérica das seguintes equações de autovalores:

$$\underline{z < -a}$$

$$\left( -\hbar^2 / 2m_G \right) \left( d^2 \Psi(z) / dz^2 \right) = E \Psi(z) \quad , \quad (4)$$

$$\underline{-a < z < +a}$$

$$\begin{aligned} & \left( -\hbar / 2 \right) \left[ (d / dz) m_x^{-1}(z) (d / dz) \right] \Psi(z) + \\ & V_x(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{z > +a}{(-\hbar^2 / 2m_A)(d^2\Psi(z) / dz^2) + V_A\Psi(z) = E\Psi(z)} \quad (6)$$

onde  $m_G$  é a massa do elétron em GaAs,  $m_A = \mu_1 + \mu_2 x$  é a massa do elétron em  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , e  $V_A = C[\varepsilon_1 x + \varepsilon_2 x^2]$ .

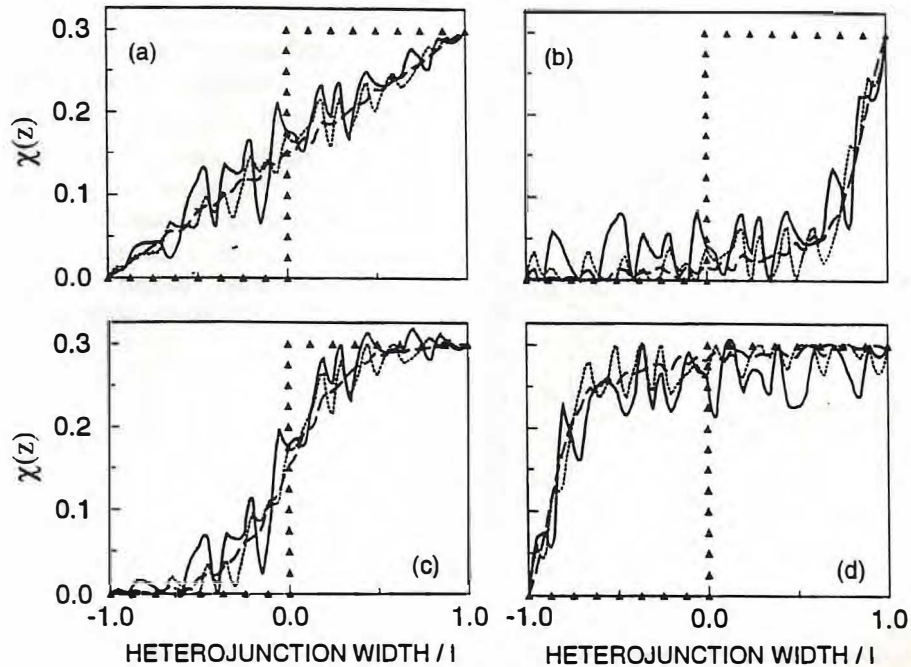


Figura 1 - Perfis interfaciais para a variação interfacial da fração molar de alumínio  $\chi_{id}(z)$  em  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ , com rugosidade superpostas a perfis do tipo  $l$ =linear (a);  $l$ =retardado (b),  $l$ =suave (c); e  $l$ =avançado (d), para:  $d=0.02$  (tracejada);  $d=0.08$  (pontuada); e  $d=0.14$  (contínua).

### 3. Resultados e Discussões

A Fig. 2, que foi obtida utilizando-se  $x = 0.3$ ,  $C = 0.6$  e o maior grau de rugosidade apresentado na Fig. 1, mostra que rugosidades nas interfaces são responsáveis por aumento na transmissão para todos os quatro tipos de perfis. O perfil de crescimento retardado é o que proporciona maior crescimento na transmissão. Por outro lado, pode se observar que tanto o grau de rugosidade quanto sua localização exercem influência menor do que a largura interfacial no aumento da transmissão (ver Figs. 3 e 4). Finalmente, a Fig. 5 mostra que a aproximação da massa efetiva constante na interface, usada frequentemente em muitas descrições de mecanismos de espalhamento por interfaces rugosas, sempre superestima a transmissão em heterojunções não-abruptas com rugosidade interfacial.

### 4. Conclusões

Um modelo que descreve interfaces  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  com rugosidades foi apresentado. Com ele foi mostrado que rugosidades fazem crescer a transmissão em heterojunções  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  não-abruptas. O esquema utilizado para descrever interfaces revelou-se importante pois as propriedades de transmissão modificaram-se consideravelmente com o perfil composicional ou aproximações utilizadas para caracterizar as interfaces.

### Referências

- [1] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).
- [2] Y. Ando and S. Itoh, J. Appl. Phys. **61**, 1497 (1987).

Fig. 2 - Coeficientes de transmissão para heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com interfaces não-abruptas com largura de dois parâmetros de rede GaAs para vários perfis  $\chi_{id}(z)$  lisos e com  $d=0.14$ : abrupta (triângulos), linear liso (contínua), linear rugoso (tracejada); (a) suave liso (tracejada pontuada), suave rugoso (pontuada); (b) retardado liso (tracejada pontuada), retardado rugoso (pontuada); (c) avançado liso (tracejada pontuada), avançado rugoso (pontuada).

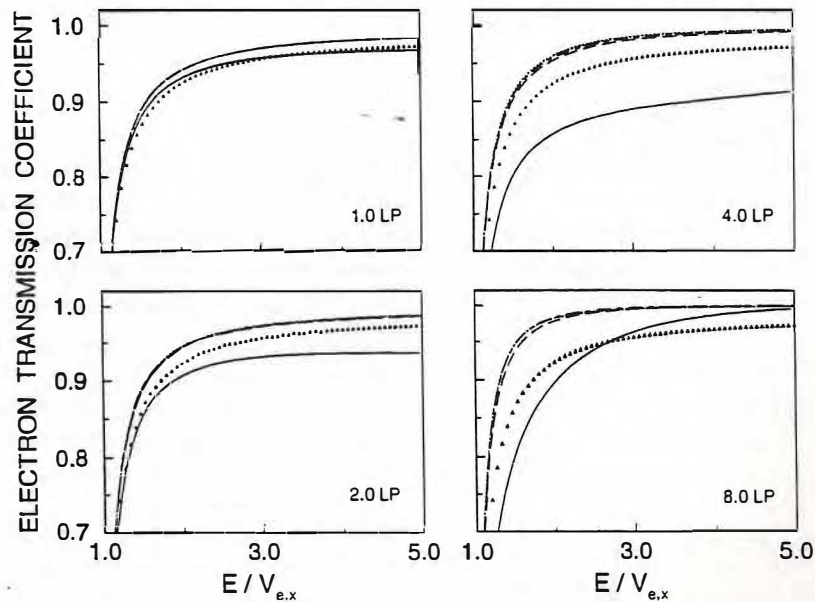
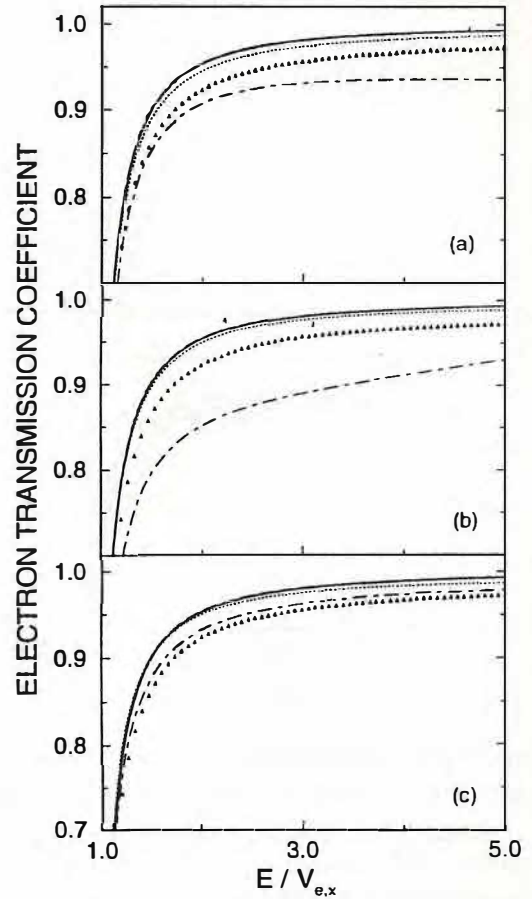


Fig. 3 - Variação da transmissão em heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com larguras interfaciais de 1, 2, 4, e 8 parâmetros de rede GaAs para perfis suaves e níveis de rugosidade  $d=0$  (contínua),  $d=0.02$  (tracejada),  $d=0.08$  (tracejada pontuada), e  $d=0.14$  (pontuada). A transmissão de uma heterojunção abrupta é também apresentada (triângulos) para possibilitar comparações.

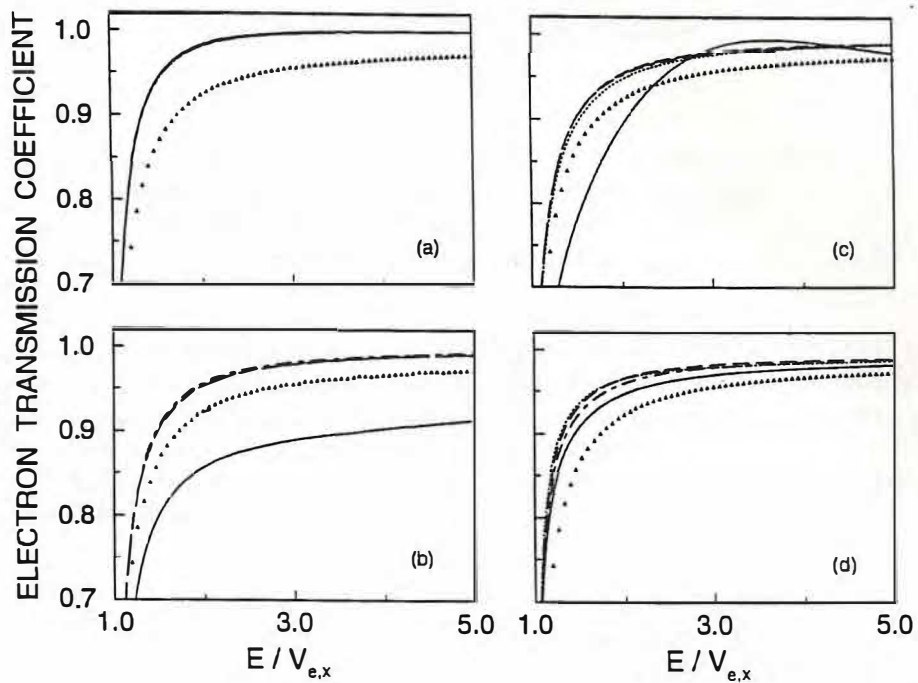
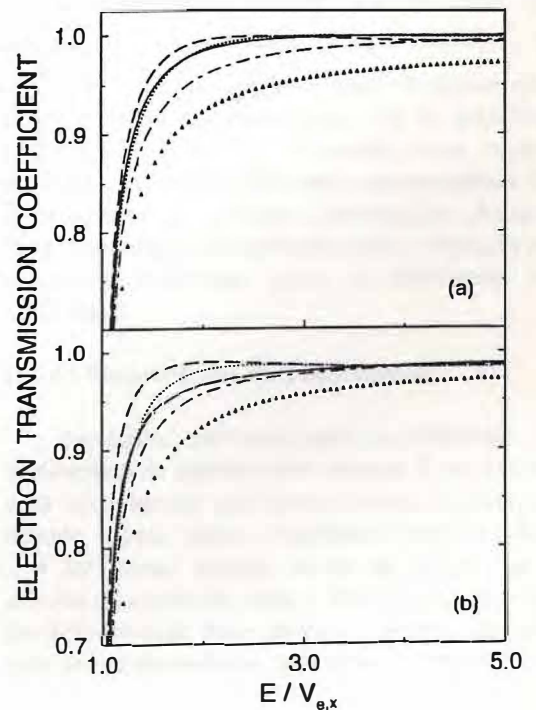


Fig. 4 - Coeficientes de transmissão para heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com interfaces não-abruptas com largura de 4 parâmetros de rede GaAs para os perfis  $\chi_{id}(z)$  (a) linear, (b) suave, (c) retardado e (d) avançado, com  $d=0.14$  e localização do máximo de rugosidade: no centro da interface (tracejada); limite esquerdo da interface (tracejada pontuada), limite direito da interface (pontuada). Os coeficientes de transmissão obtidos para os casos abrupto (triângulos) e perfis sem rugosidade (contínua) são também apresentados para comparação.

Fig. 5 - Coeficientes de transmissão para heterojunções GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As com interfaces não-abruptas, com largura de 4 parâmetros de rede GaAs e grau de rugosidade  $d=0.14$ , para os perfis  $\chi_{id}(z)$ : (a) abrupto (triângulo), linear rugoso (contínua), linear rugoso com massa interfacial constante (tracejada), suave rugoso (tracejada pontuada), suave rugoso com massa constante na interface (pontuada); (b) abrupto (triângulo), avançado rugoso (contínua), avançado rugoso com massa interfacial constante (tracejada), retardado rugoso (tracejada pontuada), retardado rugoso com massa constante na interface (pontuada);



# MODELOS E PROPRIEDADES DE HETEROJUNÇÕES NÃO-ABRUPTAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As COM DOPAGEM

Alexander K. Freire, J. Ribeiro Filho, Gil A. Farias, e Valder N. Freire

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará  
Centro de Ciências, Campus do Pici, Caixa Postal 6030  
60455-760 Fortaleza, Ceará, Brasil.

Um modelo teórico é proposto para descrever heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com dopagem. Ele é utilizado para o estudo de efeitos das camadas de acumulação e das interfaces nas propriedades de transmissão destas heterojunções. Mostra-se que mudanças significantes na transmissão ocorrem quando larguras interfaciais da ordem de duas células unitárias são consideradas. As modificações dependem também do nível de dopagem e da extensão espacial em que a dopagem foi realizada.

## I. Introdução

Stern e Das Sarma [1] argumentaram que a interface entre dois materiais poderiam ser cristalograficamente abrupta, mas que o modo de ligação entre os átomos próximos da interface mudariam pelo menos em escala atômica. Baseados em um modelo no qual os parâmetros de interesse variam rápido mas suavemente na interface, eles calcularam níveis de energia em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com encurvamento nas bandas devido a dopagem.

Recentemente Albrektsen *et al.* [2] mostraram com seus resultados experimentais que hetero-interfaces GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As são cristalograficamente não-abruptas, e sua largura na ausência de dopagem é pelo menos de dois parâmetros de rede GaAs (2 LP) nos casos de melhor crescimento. Posteriormente, Salemink *et al.* [3] obtiveram que, no caso de dopagem com berilo, a região de transição (cristalográfica + eletrônica) na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As pode ser tão larga quanto 6-9 LP.

Neste trabalho, um modelo ainda prospectivo é apresentado para descrever heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas com dopagem, baseado na descrição de interfaces cristalográficas não-abruptas proposta anteriormente por Freire, Auto e Farias [4]. Ele é utilizado para o estudo das camadas de acumulação e dos efeitos de interface nas propriedades de transmissão de heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As não-abruptas dopadas.

## II. Modelo para Heterojunções Não-Abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Dopadas

Supondo uma variação linear da fração molar de alumínio na interface GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, o potencial e a massa efetiva de portadores são descritas por funções parabólicas e lineares na coordenada  $z$  do eixo de crescimento da heterojunção, respectivamente [4]. O encurvamento das bandas em GaAs (Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As) devido a dopagem é descrito por potenciais de perfil parabólico com máximo  $V_p$  (mínimo  $V_q$  e largura  $b$  ( $c$ )) [5]. Supõe-se que a dopagem não altera a massa dos portadores fora da interface cristalográfica. A Fig. 1 mostra uma representação gráfica de potenciais representativos de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As que foram utilizadas neste trabalho para a obtenção de resultados numéricos para o coeficiente de transmissão.

## III. As Propriedades de Transmissão

Resultados numéricos para o coeficiente de transmissão de elétrons com energia  $E$  através de uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, dopada e com largura interfacial cristalográfica  $l = 2a$ , foram obtidos através da solução, pelo método numérico de Ando e Itoh [6], de equações de Schroedinger com operador energia cinética com massa dependente da posição dado por:

$$T = (-\hbar^2 / 2) \left[ (d/dz)m^{-1}(z)(d/dz) \right] \quad (1)$$

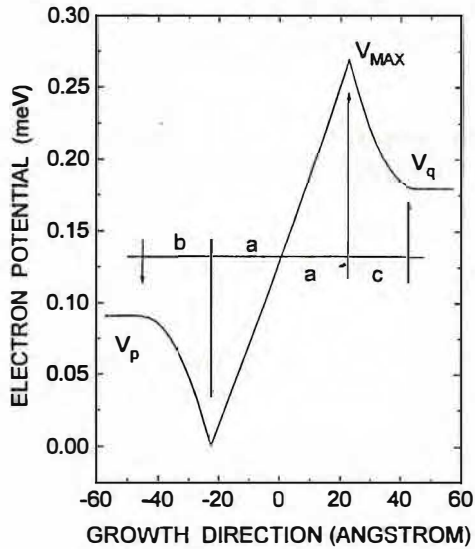


Fig. 1 - Configuração do potencial de uma heterojunção não-abrupta GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dopada, com largura interfacial cristalográfica de 2LP, e  $V_p = V_q = 0.25V_{MAX}$ ,  $V_p = V_q = 0.1V_{MAX}$  e  $V_p = V_q = 0.05V_{MAX}$

Obtida com  $b = c$ ,  $V_p = V_q$ ,  $x = 0.35$ , e *band offset*  $C = 0.6$ , a Fig. 2 mostra a influência da largura interfacial cristalográfica nas propriedades de transmissão. Pode se concluir que o aumento da largura da interface cristalográfica faz crescer a transmissão, mesmo para um nível de dopagem tal que  $V_p = 0.05V_{MAX}$ . A largura das regiões dopadas que originam o encurvamento das bandas também é responsável por modificações na transmissão, de forma mais acentuada quanto maior for a interface cristalográfica.

As modificações na transmissão com o nível de dopagem, descrito neste trabalho pela variação de  $V_p$ , são apresentadas na Fig. 3, que foi obtida para uma largura cristalográfica interfacial fixa de 2LP. Enquanto a largura da faixa dopada é pouco relevante para a transmissão quando o nível de dopagem é baixo ( $V_p = 0.05V_{MAX}$ ), ela

é responsável por importantes mudanças na transmissão quando o nível de dopagem cresce (Fig. 3(c)).

#### IV. Conclusões e Perspectivas

Uma versão inicial de um modelo para heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As com dopagem foi proposto e utilizado para o cálculo das propriedades de transmissão de um elétron através das mesmas. Os resultados sugerem que, ao não se levar em conta a existência de interfaces cristalográficas em hetero-estruturas dopadas, importantes modificações de suas propriedades (transmissão, níveis de energia, etc) devem estar sendo mal descritos.

Atualmente o modelo apresentado neste trabalho está sendo aperfeiçoado para relacionar explicitamente o nível de dopagem  $N$  com o potencial  $V_p$  relacionado ao encurvamento da banda [5]. Planeja-se utilizá-lo para o estudo das propriedades de barreiras, poços quânticos e super-redes não-abruptas com dopagem.

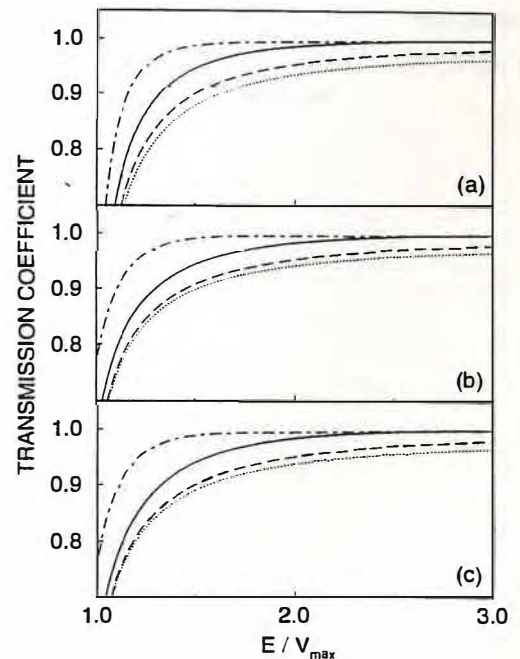


Fig. 2 - Coeficiente de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dopadas com (a)  $b = 0LP$ , (b)  $b = 2LP$ , e (c)  $b = 4LP$ .  $a = 0LP$  (pontuada),  $a = 2LP$  (tracejada),  $a = 4LP$  (contínua), e  $a = 8LP$  (tracejada pontuada).

## Referências

- [1] F. Stern and S. Das Sarma, Phys. Rev. B 30, 840 (1984).
- [2] O. Albrektsen, D. J. Arent, H. P. Meier, and H. W. M. Salemink, Appl. Phys. Lett. 57, 31 (1990).
- [3] H. W. M. Salemink, O. Albrektsen, and P. Koenraad, Phys. Rev. B 45, 6946 (1992).
- [4] V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, Superlattices and Microstructures 1, 17 (1992).
- [5] A. K. Freire, Tese de Mestrado em Física-UFC, em andamento (1995).
- [6] Y. Ando and S. Itoh, J. Appl. Phys. 61, 1497 (1987).

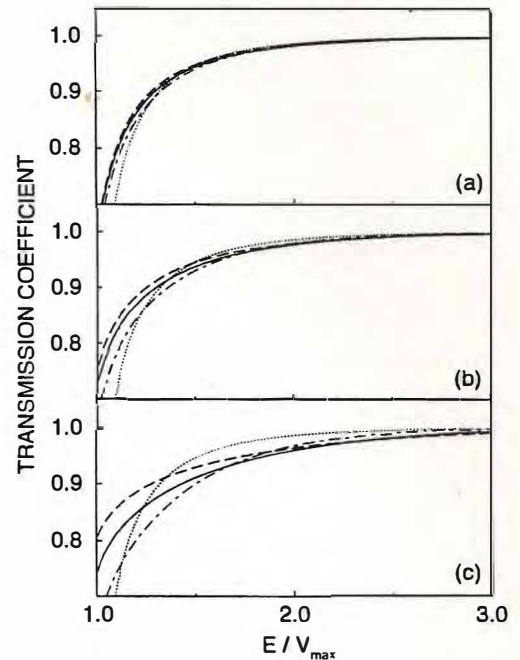


Fig. 3 - Coeficiente de transmissão de heterojunções não-abruptas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dopadas com (a)  $p = 0.05V_{MAX}$ , (b)  $p = 0.1V_{MAX}$ , e (c)  $p = 0.25V_{MAX}$ .  $b = 0LP$  (pontuada),  $b = 1LP$  (tracejada),  $b = 2LP$  (contínua), e  $b = 4LP$  (tracejada pontuada).