UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Estrutura eletrônica e efeitos magneto-quânticos em super-redes semicondutoras degeneradas

Luiz Carlos Donizetti Gonçalves

Banca examinadora:

Dra. Ana Maria de Paula

Dr. André Bohomoletz Henriques (orientador) *Andre Bohomoletz*

Dr. Nelson Studart

Dr. Paulus Maria Koenraad

Dr. Valdir Bindilatti

SBI-IFUSP

305M810T2801

Tese apresentada ao
Instituto de Física da
Universidade de São Paulo
para a obtenção do título
de Doutor em Ciências

Sylvio Canuto
Prof. Sylvio Roberto Accioly Canuto
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

SÃO PAULO
1998

537.5
G 635.2
D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Gonçalves, Luiz Carlos Donizetti

Estrutura Eletrônica e Efeitos Magneto-Quânticos em
Super-Redes Semicondutoras Degeneradas.
São Paulo, 1998.

Tese (Doutoramento) Universidade de São Paulo.
Instituto de Física - Departamento de Física dos Materiais
e Mecânica.

Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof. Dr. André Bohomoletz Henriques

Unitermos: 1. Estrutura Eletrônica; 2. Super Redes;
3. Mobilidade Eletrônica; 4. Shubnikov de Haas;
5. Capacitância-Voltagem.

USP/IF/SBI-016/98

" [...] pedi que os quatro homens arrancassem os arbustos com as raízes [...] onde, suponho, deveria encontrar-se a maravilhosa oliveira, da qual Ulisses preparou sua cama e, em torno desse local, construiu seu quarto de dormir (*Od.* XXI, 183-204).

'Na parte interna do pátio cresceu uma oliveira alta [...]. Em torno dela, construí [...] o aposento conjugal, [...] cortei os galhos da frondosa oliveira e aparei a superfície do tronco a partir das raízes. [...] construí toda a cama, cobri com ouro, prata e marfim, e na parte interna estiquei correias de couro de boi, tingido de cor púrpura brilhante.'

Porém, encontramos somente escombros de telhas e painéis. Numa profundidade de 66 cm resolvemos deixar de lado esse rochedo. Nele havia muitas fendas, nas quais as raízes de oliveira poderiam ter penetrado. Mas todas as minhas esperanças de encontrar ali objetos arqueológicos desapareceram.

Pedi para escavarem o chão logo ao lado, pois havia descoberto dois blocos de pedra, os quais, pelo que me parece, tinham pertencido a um muro. Após três horas de trabalho, os ajudantes trouxeram à luz do dia as duas lajes inferiores de um pequeno edifício com 3 m de largura e 4,75 m de comprimento. A abertura da porta tinha uma largura de 1 m. As pedras estavam bem talhadas e tinham 33 cm de comprimento e de largura. Elas estavam unidas com bastante cimento, branco como a neve, do qual levei alguns pedaços para casa. Mesmo abaixo da camada inferior de pedras, havia uma espessa laje de cimento, que, por estar ali, não deixa dúvidas que esse edifício foi construído no mínimo sete séculos depois da Guerra de Tróia, pois eu nunca havia percebido a presença de cimento nas construções da época dos heróis.

No local escavado encontramos ainda muitos destroços de telhas tortas, levemente queimadas, e até uma telha inteira com 66 cm de comprimento e de mesma largura, bem como muitos outros cacos.

Enquanto meus ajudantes estavam ocupados com essa escavação, pesquisei com muita atenção todo o terreno do palácio, e quando encontrei uma grande pedra, cuja extremidade parecia descrever uma curva, aproximadamente a centésima parte de uma circunferência, tirei com uma faca a terra que estava na pedra e vi que formava uma semi-circunferência. Quando continuei a escavar com a faca, percebi logo que era possível completar a outra metade da circunferência empilhando camadas de pedras, que formava um muro ao pedaços, por assim dizer. A princípio, eu queria tirar essas camadas com a faca, mas, não atingi o meu objetivo, pois a terra estava misturada com uma substância branca, que reconheci como sendo cinzas de ossos carbonizados, e que estava tão dura quanto a própria pedra. Então comecei a escavar com a picareta. Mas mal tinha escavado 10 cm de profundidade, quando quebrei um lindo vaso, bem pequeno, cheio de cinzas humanas. Continuei a escavar com o maior cuidado e encontrei cerca de 20 vasos diferentes e de formas bizarras. Alguns estavam deitados e outros, em pé. Infelizmente, quebrei a maioria ao retirá-los devido à dureza da terra e à falta de boas ferramentas. Consegui levar somente cinco a salvo. O maior deles não tinha mais de 11 cm de altura. O diâmetro da sua abertura é de 1 cm. Um outro tem a abertura de apenas 6 mm. Dois desses vasos tinham uma pintura realmente bonita ao puxá-los da terra, mas ficaram praticamente irreconhecíveis, assim que os expus ao sol. Espero que esfregando com álcool e água elas voltem a aparecer rapidamente.

Todos esses vasos estão preenchidos com as cinzas de ossadas humanas.

Além disso, encontrei nesse pequeno cemitério familiar a lâmina torta de uma faca de sacrifícios, com 13 cm de comprimento, bem enferrujada, mas, de um modo geral, razoavelmente bem conservada. Tinha também um ídolo de barro que representa uma deusa com duas flautas na boca, os destroços de uma espada de ferro, um dente de um javali, muitos ossos pequenos de animais e por fim, um motivo de fios de bronze batidos uns aos outros. Daria cinco anos da minha vida por uma inscrição mas, infelizmente, não havia nenhuma!

Embora seja difícil determinar a idade desses objetos, tenho certeza de que os vasos são bem mais velhos que os mais antigos vasos de Cumae, no museu de Nápoles, e é bem possível, que eu guarde nas minhas cinco pequenas urnas as cinzas de Ulisses, de Penélope ou seus descendentes.

Depois que escavei a abertura redonda até o fundo, comprovei através de medições que sua profundidade no lado sul é de 76 cm, do lado norte, 92,5 cm e seu diâmetro é de 1,25 m.

Nada provoca mais sede que o árduo trabalho de escavar sob um calor de 52°C. Na verdade, tínhamos levado três jarras enormes cheias de água e uma garrafa grande com quatro litros de vinho. O vinho foi o suficiente para nós, pois o vinho de Ítaca, como eu já havia dito, é três vezes mais forte que o vinho Bordeaux, mas a nossa provisão de água logo foi esgotada e por duas vezes fomos obrigados a renová-las.

Meus quatro ajudantes tinham terminado a escavação da casa pós-homérica, ao mesmo tempo em que eu terminei a escavação do pequeno cemitério circular. Com certeza tive mais sucesso do que eles. Mas não os repreendi por isso, visto que eles tinham trabalhado para valer, e mais mil anos podem passar antes que o espaço escavado seja novamente preenchido com pó atmosférico.

O meio-dia chegou e nós não tínhamos comido nada desde as 5 horas da manhã. Fizemos então nossa refeição sob uma oliveira entre os dois muros, uns 15 m para baixo do topo. Nossa refeição era composta de pão seco, vinho e água, cuja temperatura não estava abaixo dos 30°C. Mas eram produtos do solo de Ítaca, os quais eu saboreava e precisamente no pátio do palácio de Ulisses, talvez no mesmo lugar onde ele derramou lágrimas quando viu novamente o seu cachorro predileto, Argos, que morreu de felicidade ao reconhecer o seu dono após vinte anos de ausência. Também onde o divino pastor de porcos disse as famosas palavras: 'Pois Júpiter, o todo-poderoso, retira a metade do valor do homem, assim que os dias de servidão o alcançam'.

Posso bem dizer que nunca na minha vida comi com tanto apetite como nessa refeição frugal no palácio de Ulisses.

Após a refeição, os meus ajudantes descansaram uma hora e meia, enquanto eu, com a picareta na mão, pesquisava o terreno da construção do palácio entre os muros, para fazer novas descobertas. Em todos os lugares onde a aparência do solo mostrava a possibilidade de encontrar algo, eu fazia uma marcação, para continuar uma escavação depois. Às duas horas começaram novamente a trabalhar e foram até às cinco horas; mas sem o mínimo sucesso. Como queria recomeçar as escavações na manhã do dia seguinte, deixamos as ferramentas no local e voltamos para Vathy, onde chegamos às sete horas da noite.

As cordiais senhoritas Triantafyllides cuidaram de preparar um almoço para mim. Mas, quão grande foi minha consternação, quando colocaram à mesa nada mais que batatas cozidas, sal e pão. Então perguntei a elas se não estavam brincando comigo. Com espanto, responderam: O senhor é cristão e quer comer carne na sexta-feira? - Mas por todos os deuses da Grécia, repliquei, se as senhoritas, com cuidado com a salvação da minha alma, não querem servir carne, por que não me servem ao menos peixe? - Alguém já viu alguma vez? responderam elas - um cristão que no dia de jejum comeu peixe? E mesmo se quiséssemos servir peixe, não poderíamos, pois, nenhum pescador joga a sua rede às sextas ou às quartas-feiras, porque ninguém iria comprar os seus peixes. E nenhum açougueiro abre a sua loja nestes dias, pois seria maltratado pela população.

As caras sérias com as quais elas me deram esta explicação, provou claramente que exprimiam a sua inteira convicção e que consideravam um crime contra os mandamentos de Deus que alguém comesse carne nos dias de jejum. Fiquei quieto e saí para conseguir presunto ou manteiga, mas embora perguntasse em diversas lojas, não havia nada disso na ilha de Ítaca. Com muito esforço recebi um pouco de óleo para untar as batatas. Essa mais do que modesta refeição não produziu, de modo algum, mal-estar. E nunca me senti tão bem nas viagens, mesmo quando tinha que me contentar com pão e água."

Heinrich Schliemann em *Ítaca, o Peloponeso e Tróia*

Resumo

É apresentado um estudo da estrutura eletrônica e de processos de espalhamento em super-redes semicondutoras degeneradas. Os processos de espalhamento foram estudados em termos do seu efeito sobre os fenômenos magneto-oscilatórios (em particular, o efeito Shubnikov-de Haas), tanto no aspecto teórico como no experimental.

Foi desenvolvida uma metodologia que permite a extração dos parâmetros fundamentais para super-redes δ -dopadas (o período d , a densidade de dopagem por período, N_d , e a espessura das camadas dopadas Δ_d) com base em medidas de Shubnikov-de Haas (SdH) com o campo magnético aplicado paralelamente aos eixos de crescimento das super-redes e em medidas de Capacitância-Voltagem (CV). Foi demonstrado que os períodos de oscilação CV correspondem aos períodos de dopagem d . A partir da transformada de Fourier das oscilações de SdH são obtidas as áreas extremas da superfície de Fermi que, via a estrutura eletrônica calculada, fornecem os demais parâmetros N_d e Δ_d .

As oscilações de SdH devidas a cada uma das minibandas populadas foram isoladas do restante do espectro através de técnicas de transformada de Fourier. A partir de um modelo desenvolvido recentemente, o qual inclui a estrutura eletrônica das super-redes na forma de linha das oscilações de SdH, as mobilidades quânticas associadas aos tempos de meia vida no nível de Fermi nas várias minibandas eletrônicas foram determinadas. Os estudos foram efetuados em função do período da super-rede, os quais determinam o grau de acoplamento entre poços vizinhos. Uma posterior comparação das mobilidades quânticas obtidas a partir do espectro de SdH com a teoria *Random Phase Approximation* (RPA) desenvolvida para o espalhamento por centros coulombianos blindados em sistemas periodicamente δ -dopados, com espessura das camadas dopadas praticamente nula, mostrou um acordo bastante bom.

Adicionalmente, cálculos teóricos em sistemas δ -dopados indicam que as mobilidades quântica e de transporte são sensíveis à espessura e distribuição espacial da camada dopada e à concentração de aceitadores residuais em sistemas realísticos. Também foram efetuados cálculos teóricos para as mobilidades quântica e de transporte em estruturas δ -dopadas submetidas à aplicação de um potencial externo as quais mostram que, no estado atual da teoria na literatura para sistemas com múltiplas subbandas, a teoria RPA é aquela de escolha para a descrição dos fenômenos de espalhamento por impurezas ionizadas em sistemas bi-dimensionais.

Por fim, alguns tópicos que abordam a obtenção das mobilidades de transporte em sistemas δ -dopados são discutidos.

Abstract

It is presented a study of the electronic structure and scattering processes in degenerate semiconductor superlattices. The scattering processes were studied in terms of their effect on the magneto-oscillatory phenomena (in particular, the Shubnikov-de Haas effect), both theoretical and experimentally.

An approach was developed to allow the extraction of the fundamental parameters for δ -doped superlattices (the period d , the doping density per period, N_d , and the doped layers thicknesses Δ_d) from Shubnikov-de Haas(SdH) measurements with magnetic field applied along the superlattice growth axis and from Capacitance-Voltage(CV) measurements. It was demonstrated that the CV oscillation periods correspond to the doping period d . From the Fourier transform of SdH oscillations the extremal cross sectional areas of the Fermi surface are obtained and, together with the calculated electronic structure, provide the additional parameters N_d and Δ_d .

The oscillations due to each populated miniband were isolated from the rest of the spectrum by Fourier transform techniques. By means of a recently developed model, which includes the superlattice electronic structure in the lineshape of the SdH oscillations, the quantum mobilities associated to the quantum lifetimes at the Fermi level for each miniband were determined. The behaviour of the quantum mobilities were studied as a function of the superlattice period, which determines the coupling strength between adjacent wells. The comparison between the quantum mobilities obtained from the SdH spectrum and the Random Phase Approximation(RPA) theory developed for the screened Coulomb centers in systems periodically δ -doped, with vanishing thickness of the doped layers, showed a very good agreement.

Furthermore, theoretical calculations in δ -doped systems show that the quantum and the transport mobilities are sensible to the thickness and to the spatial profile of the doped layer, and to the concentration of residual acceptors in realistic systems. The quantum and the transport mobilities were calculated for gated δ -doped structures and it's shown that, in the actual state-of-art of the theory for systems with multiple subbands, the RPA theory is that of choice to describe the scattering phenomena by ionized impurities in two-dimensional systems.

Finally, some topics involving the extraction of transport mobilities for multiple subbands systems are discussed.

Agradecimentos

Como não poderia faltar em qualquer tese, enumerem-se e atribuam-se aqui os agradecimentos às pessoas que contribuíram direta ou indiretamente para o desenvolvimento desta tese de doutorado. A ordem em que as pessoas são citadas não necessariamente representa a ordem de importância para este trabalho ou de qualquer outro critério logicamente estabelecido.

Primeiramente, e principalmente, agradeço aos meus pais pois sem eles eu não conseguiria nem ter começado a fazer esta tese.

Agradeço novamente ao meu orientador por sua paciência infinita e por todos estes anos de 'diversão' prolongada. Afinal, *Work is much more fun than fun*.

Ao Nestor Pestana *in memoriam*, ao Barney, que encheram de alegria os eventuais momentos de minha vida.

Aos meus colegas da pós-graduação pelas suas úteis sugestões e atitudes cooperativas.

Ao Marcelo e ao Renato pela sua disponibilidade para o meu enriquecimento de cultura eletrônica, Windows e de redes.

Aos Profs. Nei de Oliveira e Valdir Bindilatti, ao pessoal da criogenia pela assistência prestada a esclarecimentos sobre a correta utilização da linha de Hélio. Em particular, ao Rui e Paulão pela colaboração prestada e pela espirituosidade de praxe. Igualmente, a todo o pessoal da oficina mecânica do Departamento, aos técnicos Eronides e Olímpio. À Carla e ao Iran pela prestatividade e eficiência.

À Profa. Patrícia Lustoza de Souza, do Centro de Estudos em Telecomunicações da PUC-RJ, pela hospitalidade e discussões elucidativas proporcionadas e pelo fornecimento das amostras utilizadas neste trabalho. Ao Dr. Koenraad, da Eindhoven University of Technology, pelo fabrico de uma máscara e pelas medidas efetuadas em uma das amostras analisadas neste trabalho.

À Natácha pelo bom humor e cooperação prestada no trabalho no que diz respeito a sua celeridade.

Aos meus irmãos.

Aos meus colegas de apartamento pela sua cordialidade, hospitalidade e fraternidade.

Igualmente importante, os cálculos de mobilidade constantes neste trabalho foram efetuados utilizando-se os recursos do Laboratório Central de Computação Avançada da Universidade de São Paulo (LCCA-USP).

Os recursos utilizados para as medidas envolvendo campos magnéticos efetuadas (e a bolsa) contaram com o apoio indispensável do PRONEX, FAPESP, CNPq e CAPES.

Enfim, a todos que acharam que seus nomes aqui não constam e deveriam estar: a esses agradeço duas vezes.

Índice

Resumo	1
Abstract	2
Agradecimentos	3
Introdução	6
1 Detalhes experimentais	9
1.1 Obtenção do tensor de resistividade	12
2 A estrutura eletrônica de poços e super-redes δ	15
2.1 Estrutura eletrônica autoconsistente de poços δ	16
2.1.1 Condições de contorno no cálculo autoconsistente	20
2.2 Estrutura eletrônica semi-clássica de poços δ	20
2.2.1 Uma dedução simples para perfis de potencial de Thomas-Fermi	21
2.2.2 O poço δ dopado a $T=0K$	22
2.3 Estrutura eletrônica de super-redes δ periódicas	23
2.4 Procedimento numérico para o cálculo da estrutura eletrônica	24
3 Determinação do período de super-redes por medidas CV	28
3.1 Resultados	32
3.2 Conclusões	35
4 Determinação experimental dos parâmetros característicos de poços e super-redes δ	36
4.1 Resultados numéricos	37
4.2 Resultados experimentais e discussão	40
4.3 Medidas CV	43
4.4 Conclusões	44
5 Teoria para a blindagem e mobilidades eletrônicas em sistemas 2D e quasi-3D	45
5.1 Teoria RPA para a mobilidade de sistemas 2D	46
5.1.1 Blindagem eletrostática em um sistema 2D	47
5.1.2 O tensor dielétrico $\epsilon_{mm',nn'}(q)$	49
5.1.3 Simetrias e propriedades de $T_{nn',mm'}$	49
5.1.4 O potencial externo para N impurezas	50
5.1.5 Média configuracional	50
5.1.6 O fator de forma $F_d(z, z', q)$	51

5.1.7	Resumo	53
5.1.8	Cálculo das mobilidades na aproximação RPA	54
5.1.9	Resultados para $T=0$	55
5.2	Teoria TF-2D para a blindagem e mobilidades eletrônicas	56
5.3	Teoria RPA para a blindagem e mobilidades quânticas em super-redes periódicas	58
5.4	Detalhes dos cálculos numéricos efetuados	59
5.5	Teoria para a obtenção experimental das mobilidades quânticas	59
6	Mobilidades quântica e de transporte em poços δ	61
6.1	Mobilidades em um poço δ com espessura nula	62
6.1.1	Resultados e Discussão	63
6.1.2	Conclusões	68
6.2	Influência do perfil de dopantes e aceitadores residuais	68
6.2.1	Resultados e Discussão	69
6.2.2	Conclusões	76
7	Comparação das mobilidades em sistemas 2D-3D com a teoria	77
7.1	Resultados	77
7.1.1	Caracterização CV das super-redes	77
7.1.2	Determinação da população de portadores e parâmetros das minibandas	78
7.1.3	Isolamento das contribuições individuais das minibandas à magnetoresistência	81
7.1.4	Estimativa experimental para as mobilidades quânticas	83
7.1.5	Comparação com a teoria e discussão	83
7.2	Conclusões	86
8	Mobilidades de transporte em sistemas δ dopados	87
8.1	Populações e mobilidades individuais de transporte via medidas Hall	88
8.2	Transformação do tensor de magnetoresistividade	89
8.3	O espectro de mobilidade	92
8.4	A região clássica da magnetoresistência	94
8.5	O efeito da posição e do tamanho dos contatos na obtenção do tensor de resistividade	95
8.6	O tensor de condutividade em sistemas 2D	97
8.6.1	A interpretação do espectro de mobilidade em sistemas 2D	98
8.6.2	Resultados e discussão	98
8.6.3	Conclusões	102
	Apêndice - Apêndice - Sistema atômico efetivo	103
	Apêndice - Determinação das componentes de ρ em geometria retangular	105
	Bibliografia	108
	Trabalhos publicados	112

Introdução

A técnica de dopagem δ foi originalmente idealizada[1] como um meio de fornecer elétrons livres em estruturas semicondutoras crescidas epitaxialmente de modo a maximizar a mobilidade dos portadores. Desde então, a tecnologia de crescimento foi otimizada de modo a serem obtidas estruturas δ -dopadas que permitissem a fabricação de transistores com alto desempenho em relação à frequência de operação[2] ou que possuísem planos de dopagem de Si extremamente finos como canal de fornecimento de elétrons para estruturas do tipo HEMT (*High Electron Mobility Transistor*) ou transistores HBT (*Heterojunction Bipolar Transistor*)[3]. Mais recentemente, estruturas de InP δ -dopadas extremamente finas, com espessura da camada de dopantes de cerca de 8 Å foram crescidas pela técnica LP-MOVPE (*Low Pressure-Metal-Organic Vapour Pressure Epitaxy*)[4]. As estruturas δ -dopadas exibem interessantes propriedades físicas que tem sido estudadas nestas últimas duas décadas [5, 6]. Vários estudos nestes tipos de sistema visam o entendimento da dependência dos mecanismos de transporte. Num estudo recente, Schmidt *et al*[7], analisaram o transporte em estruturas δ - *nipi* de modo incluir correções locais de troca-correlação na teoria RPA para esses sistemas, de modo a melhor comparar os seus resultados experimentais de magnetotransporte com a teoria.

Num semicondutor com um único poço δ dopado com doadores rasos do tipo n, tipicamente localizados dentro de algumas monocamadas do cristal hospedeiro, os elétrons são liberados pelas impurezas e ficam confinados por um potencial autoconsistente em formato de V. Esse potencial desdobra a banda de condução em um conjunto de subbandas eletrônicas descritas por funções de onda cuja localização em torno da camada δ decresce com o índice da subbanda. À medida em que várias dessas camadas de impureza são justapostas de maneira igualmente espaçada obtém-se uma super-rede δ periódica. Analogamente ao caso do poço isolado, os elétrons são liberados pelas impurezas mas, devido ao fato da sobreposição das várias subbandas de poços vizinhos, dá-se origem às minibandas eletrônicas.

O surgimento de populações distintas de portadores com comportamento bi ou tri-dimensional em uma mesma amostra pôde ser constatado a partir da observação do comportamento das frequências de oscilação na magnetoresistência (ou oscilações de Shubnikov-de Haas), em amostras de GaAs periodicamente δ -dopadas, quando o campo magnético era orientado obliquamente em relação ao eixo de crescimento [8, 9]. A sobreposição das várias subbandas de poços adjacentes depende, por um lado, da própria distância entre poços. Por outro lado, a energia de ligação do elétron à camada dopada depende também da densidade planar de impurezas depositadas: quanto maior a densidade, mais próximo aos poços estarão os elétrons das várias minibandas. Um terceiro fator determinante nas propriedades de uma super-rede periodicamente δ -dopada é a espessura das camadas: quanto maior a espessura, para uma dada concentração de dopantes, mais fracamente o elétron estará ligado ao particular plano dopado.

O acoplamento entre as várias funções de onda de planos adjacentes, em amostras perio-

dicamente δ -dopadas, é então determinado essencialmente pela densidade de portadores por período, N_S , pela espessura das camadas Δ_d e pelo período d da estrutura. É de se esperar também que a maior ou menor proximidade dos elétrons em relação aos planos de impurezas determine assim uma maior ou menor probabilidade de espalhamento desses portadores, por exemplo, conforme determinado teoricamente por Hai *et al.*[10] no âmbito da aproximação RPA e experimentalmente por Yamada e Makimoto [11] em estruturas com um único poço δ . O mesmo efeito de redução ou aumento de mobilidade é de se esperar quando os elétrons são afastados das impurezas por uma polarização da amostra, ou seja, quando parte dos elétrons são transferidos para a superfície por um potencial externo aplicado. Na literatura, o efeito de polarização foi estudado dentro de uma ótica semi-clássica[12] que, no nível de aproximação envolvido, despreza os efeitos de localização das funções de onda. Posteriormente foram comparados por Gonzalez *et al.*[13] vários enfoques que conduzissem à obtenção das mobilidades eletrônicas, havendo esses autores concluído que a aproximação semi-clássica, a um nível semelhante àquela utilizada por Mezrin e Shik[12], conduz a uma super-estimação dos efeitos de blindagem, fornecendo assim valores menores para as mobilidades eletrônicas do que aqueles obtidos experimentalmente e pela aproximação RPA.

De modo a preencher algumas lacunas existentes na literatura, este trabalho propõe-se a dar um passo inicial no entendimento dos mecanismos que determinam as mobilidades quânticas para as várias minibandas em uma super-rede δ -dopada e complementar alguns resultados para estruturas com um único poço δ .

Para tanto, podemos dividir o presente texto em duas partes:

- apresentar uma metodologia para a caracterização experimental da estrutura eletrônica de super-redes e poços δ dopados, ou equivalentemente, dos parâmetros característicos desse tipo de estrutura: a densidade de portadores N_S , a espessura da camada dopada Δ_d e o período da estrutura d . Essa metodologia de caracterização baseia-se na análise das oscilações de SdH em campo paralelo ao eixo de crescimento da super-rede e na análise de resultados de medidas CV;
- a partir do conhecimento da estrutura eletrônica dessas amostras, modelar o comportamento das mobilidades quânticas e de transporte, com a posterior comparação aos respectivos valores obtidos experimentalmente.

Na primeira parte desta tese serão incluídos alguns resultados bem conhecidos da literatura, de maneira a que o leitor entre em contato com a informação condensada a respeito do cálculo da estrutura eletrônica de super-redes e poços δ e obtenção de seus perfis de potencial e de suas funções de onda, o que é primário para o entendimento das propriedades desses sistemas.

No Capítulo 1, alguns detalhes experimentais do crescimento das amostras e das respectivas caracterizações são colocados.

No Capítulo 2 é apresentado o formalismo para a obtenção da estrutura eletrônica de poços e super-redes δ e são discutidos alguns aspectos técnicos da obtenção numérica dessa estrutura.

No Capítulo 3 apresenta-se a metodologia para a obtenção dos períodos de dopagem e a interpretação de medidas de Capacitância-Voltagem (CV) de super-redes δ -dopadas.

No Capítulo 4 é apresentada uma metodologia para a obtenção dos parâmetros característicos de uma amostra. N_d , Δ e d , a partir do emprego da análise das oscilações de Shubnikov-de Haas e de medidas CV.

Na segunda parte do trabalho, a partir da estrutura eletrônica obtida para amostras com constantes características N_d , Δ e d , serão obtidas as mobilidades quânticas e de transporte numérica e experimentalmente, para sistemas bi e quasi bi-dimensionais.

No Capítulo 5 é desenvolvido o formalismo para a obtenção teórica das mobilidades quântica e de transporte para sistemas bi-dimensionais, em função da estrutura eletrônica obtida para estes sistemas, na aproximação RPA e numa teoria do tipo Thomas-Fermi. A determinação teórica para as mobilidades quântica e de transporte em super-redes na aproximação RPA é apresentada como também a teoria necessária para a extração das mobilidades quânticas da parte oscilatória da magnetoresistência.

No Capítulo 6 é avaliado teoricamente o impacto que os parâmetros característicos das amostras exercem sobre as mobilidades quânticas e de transporte em sistemas com um único poço, como passo preliminar para o entendimento do comportamento das mobilidades quânticas em estruturas periódicas.

No Capítulo 7, os resultados obtidos experimentalmente para as mobilidades quântica em super-redes de InP são apresentados e discutidos segundo os resultados teóricos obtidos.

No Capítulo 8, alguns tópicos apresentados mostram as dificuldades enfrentadas para a obtenção das mobilidades de transporte em sistemas δ -dopados.

Capítulo 1

Detalhes experimentais

As estruturas δ -dopadas de InP, utilizadas neste trabalho, foram crescidas pela técnica LP-MOVPE (*Low Pressure-Metal-Organic Vapour Pressure Epitaxy*) e pré-caracterizadas por medidas CV no Centro de Estudos em Telecomunicações da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, pelo grupo da Profa. Patrícia Lustoza de Souza.

As estruturas foram crescidas a 640 °C num reator AIX 200, sob pressões de 20 mbar. As fontes utilizadas eram fosfina (PH_3 , a 100%), trimetil Índio (TMIn) e 1% de silano (SiH_4) diluído em H_2 . A taxa total de fluxo, a fração molar de TMIn e a fração V/III utilizada eram de 7 l/min, $2,5 \times 10^{-6}$ e 360, respectivamente. A conjunção desses fatores (pressão, temperatura e proporções entre fontes de organo-metálicos) produziram uma taxa de crescimento de 4,5 Å/s. O fluxo de SiH_4 foi escolhido de modo a produzir o máximo nível de dopagem para uma amostra-teste homogeneamente dopada sem que o regime de saturação fosse atingido.

As amostras foram crescidas em substratos de InP isolantes dopados com Fe, na direção (100). Antes dos planos de silício serem depositados, uma camada espessa não dopada de InP de 3000 Å foi crescida em cima do substrato, de modo a que as imperfeições do substrato (de menor qualidade que o material crescido por MOVPE) não se propagassem para as super-redes δ . Após o crescimento da super-redes, estruturas com 5 a 10 poços δ com períodos de 100 a 300 Å, uma camada de 550 Å foi depositada seja para que as estruturas ficassem protegidas mecanicamente, seja para minimizar suas degradações por oxidação ou para minimizar os efeitos de superfície.

As medidas CV realizadas para as estruturas δ -dopadas foram efetuadas utilizando-se um medidor eletroquímico de perfis CV PN4300, onde um contato Schottky é formado entre o semicondutor e o eletrólito (HCl 0,5 molar). Para as estruturas periódicas, os perfis CV foram obtidos alternando-se medidas com corrosão da superfície de modo a que os poços mais profundos pudessem ser detectados. O resultados das medidas CV indicam que a largura a meia altura da distribuição de dopantes, Δ_d , para as super-redes consideradas neste trabalho, é de aproximadamente 7,8 Å. Maiores detalhes a respeito do crescimento e da caracterização CV podem ser encontrados na Ref. [4].

As amostras contendo as super-redes crescidas por MOVPE foram cortadas em quadrados, com lados de aproximadamente 4mm, e submetidas a um tratamento químico a base de acetona e de álcool metílico para a limpeza de suas superfícies. Posteriormente, foram feitos contatos nos cantos das amostras. Esses contatos possuíam áreas menores que 1% da área total das amostras e foram fabricados difundindo-se Índio a 400°C num forno Biorad RC2400 durante

4 minutos, em atmosfera de Hélio sem oxigênio.

Figura 1.1: Diagrama da montagem experimental.

Na Fig. 1.1 é apresentada, de modo esquematizado, a montagem para as medidas Shubnikov-de Haas realizadas nas amostras estudadas. Para a determinação experimental da magneto-resistência das amostras foi projetado e construído um porta amostra que permitia o acesso aos contatos das amostras, situadas em um banho de Hélio líquido que as conservava à temperatura constante de 4,2 K, obtida a partir de uma resistência de carbono colocada próxima a amostra. Essa resistência de carbono era alimentada por uma fonte de corrente de fabricação caseira que, a despeito de sua simplicidade e baixo custo, tem alta rejeição a ruído e é muito estável, com variação menor que 0,01% na corrente de saída. Os detalhes dessa fonte podem ser encontrados na Ref. [8].

Figura 1.2: Criostato utilizado para as medidas de magneto-resistência.

Anteriormente ao início das medidas de magneto-resistência, já no banho de Hélio líquido, as amostras eram iluminadas por um led vermelho, de comprimento de onda inferior à banda proibida do InP, de modo a que a influência dos aceitadores ionizados fosse minimizada. As medidas de magneto-resistência eram efetuadas após o desligamento do led, quando a voltagem medida nas amostras, devida a passagem de uma corrente externa pelas mesmas, atingia um patamar constante.

As medidas de magneto-resistência foram efetuadas em uma bobina supercondutora Janis modelo 20CNRD/SC, imersa em Hélio líquido, capaz de fornecer campos de 0 a 14 Teslas. A

voltagem nos terminais das amostras e a intensidade do campo magnético puderam ser lidas respectivamente a partir de um Nano-Voltímetro Keithley K181 e de um Multímetro Keithley 2000.

A corrente nas amostras, fornecida por uma fonte de corrente constante Keithley programável K220, era mantida constante no decorrer das experiências de magneto-resistência. Adicionalmente, a fim de que efeitos não lineares, como o aquecimento das minibandas ("hot electron effects"), não fossem observados nas amplitudes das oscilações SdH, utilizaram-se correntes de no máximo $8 \mu\text{A}$ por poço[14].

Os contatos por onde eram passadas as correntes e lidas as voltagens eram chaveados por um aparelho de chaveamento Keithley 7001.

Por fim, as medidas de magneto-resistividade foram efetuadas de maneira automatizada, utilizando-se uma interface GPIB entre os instrumentos de medição e o computador. Todas as ferramentas de tratamento de dados, aquisição e cálculos de estrutura eletrônica foram desenvolvidas nos últimos 8 anos e compiladas no programa SIMP, escrito em Turbo Pascal e recentemente adaptado para Delphi 3.

1.1 Obtenção do tensor de resistividade

A magneto-resistência das amostras foi extraída utilizando-se a montagem da Fig. 1.3, passando-se uma corrente constante por dois contatos (fornecida pela fonte Keithley K220) e lendo-se a voltagem por outros dois (pelo Nanovoltímetro K181). Todas as amostras utilizadas neste trabalho eram aproximadamente quadradas, e em seu vértices foram difundidos contatos de Índio.

Figura 1.3: Diagrama simplificado da montagem utilizada para a obtenção da magneto-resistência.

De acordo com Perloff[15] e Chwang[16], essa montagem garante que o valor da resistência obtido seja, com boa precisão, proporcional à componente $\rho_{xx}(B)$ do tensor de resistividade desde que os contatos não excedam 1% da área total da amostra. Essa proporção pode ser obtida a partir de campo nulo com a metodologia de van der Pauw[17], a qual elimina o problema da geometria da amostra na obtenção do tensor de resistividade se os contatos estiverem na periferia, ou obtida a partir do conhecimento da posição dos contatos na amostra (como é mostrado no Apêndice).

Para testar a precisão do método da obtenção do tensor de resistividade em amostras com quatro contatos, utilizou-se uma amostra (118), preparada pelo grupo do Dr. Koenraad, da Eindhoven University of Technology, Holanda, aonde foi feita uma Hall bar[18].

Figura 1.4: Obtenção do tensor de resistividade. (a) Diagrama da amostra 118 preparada com uma máscara Hall bar; (b1) e (b2) configurações utilizadas para a obtenção de ρ_{xx} e ρ_{yx} , respectivamente, a partir de duas leituras em campo; (c1) e (c2) configurações utilizadas para a obtenção de ρ_{xx} e ρ_{yx} , respectivamente, a partir de uma leitura em campo, utilizando-se uma configuração geométrica ótima.

Na Figura 1.5 são comparados os resultados obtidos para a amostra 118 (um poço δ isolado) utilizando-se uma geometria otimizada do tipo Hall bar ou a partir de duas varreduras de campo (Fig. 1.4), estando ambas as medidas em bom acordo.

Figura 1.5: Componentes do tensor de magnetoresistividade obtidos para a amostra 118 (poço δ isolado) utilizando-se uma máscara do tipo Hall bar (linhas) e através do método de van der Pauw, considerando-se os contatos pontuais e na periferia da amostra[17]. A diferença é mínima e é observada apenas para a componente xy .

A vantagem da utilização da geometria Hall bar para a obtenção das componentes do tensor de resistividade é a necessidade de apenas uma varredura em campo magnético, ao contrário da medida de van der Pauw que necessita de duas varreduras[18].

Na maior parte dos casos deste trabalho, entretanto, apenas os períodos de oscilação e as mobilidades extraídas a partir do espectro de Fourier de campo inverso eram de interesse. Como essas grandezas independem do valor absoluto da resistividade em campo nulo, a magnetoresistência das amostras foram obtidas apenas com uma varredura a partir de amostras com quatro contatos, como mostrado na Fig. 1.3. Este procedimento torna mais eficiente o procedimento experimental já que, na montagem utilizada, leva-se em torno de 40 minutos para uma varredura de 0 a 14 Teslas.

Capítulo 2

A estrutura eletrônica de poços e super-redes δ

Em sistemas bi-dimensionais, dentro da aproximação de massa efetiva, a equação para os estados de uma super-rede é dada por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(z) \right] \psi_{nk_z k_\perp}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_{nk_z k_\perp} \psi_{nk_z k_\perp}(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

onde n , k_z e $k_\perp$ representam os três números quânticos mais convenientes para esses tipos de sistemas: o índice da minibanda ou subbanda n , o vetor de onda paralelo ao eixo de crescimento k_z e o vetor de onda perpendicular a esse eixo $k_\perp$. $\mathcal{E}_{nk_z k_\perp}$ representa os autovalores da hamiltoniana e $V_{\text{eff}}(z)$ é o potencial confinante dos portadores.

As funções de onda mais gerais para esse tipo de sistema bi-dimensional podem ser definidas segundo o *ansatz*

$$\psi_{nk_z k_\perp}(\mathbf{r}) = \psi_{nk_z k_\perp}(\boldsymbol{\varrho}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_\perp \cdot \boldsymbol{\varrho}} \chi_{nk_z}(z) \quad (2.2)$$

sendo normalizadas pela área da amostra S . $\boldsymbol{\varrho}$ é o vetor de posição no plano xy , $\boldsymbol{\varrho} = (x, y)$, e $k_\perp$ é o vetor de onda desse mesmo plano $k_\perp = (k_x, k_y)$.

O *ansatz* escolhido separa a Eq. (2.1), sendo apenas necessária a resolução da equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{eff}}(z) \right] \chi_{nk_z}(z) = \left[\mathcal{E}_{nk_z k_\perp} - \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} \right] \chi_{nk_z}(z)$$

sendo k_z independente de $k_\perp$.

Definindo, por conveniência E_{nk_z} , tal que

$$\mathcal{E}_{nk_z k_\perp} = E_{nk_z} + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} \quad (2.3)$$

tem-se finalmente que

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{eff}}(z) \right] \chi_{nk_z}(z) = E_{nk_z} \chi_{nk_z}(z) \quad (2.4)$$

A formulação dada pelas Equações (2.2)-(2.4) é a mais geral possível, dentro da aproximação de massa efetiva, para sistemas com dopagem planar num cristal hospedeiro sem variação de composição. Nas seções que se seguem, essa formulação será particularizada para a descrição dos estados e espectro energético de super-redes e poços δ -dopados.

2.1 Estrutura eletrônica autoconsistente de poços δ

A estrutura eletrônica de poços δ pode ser calculada a partir da simplificação da Eq. (2.4) no sentido de que o elétron não possui *a priori* o grau de liberdade do deslocamento na direção z . Isso quer dizer que os elétrons possuirão apenas movimentação livre ao longo do plano de impurezas e estarão confinados no eixo perpendicular a esse plano. Ou seja, a função de onda não possuirá qualquer dependência no vetor de onda k_z . Logo, a equação de onda genérica (2.4) simplifica-se em

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_H(z) + V_{xc}(z) \right] \chi_n(z) = E_n \chi_n(z) \quad (2.5)$$

onde $V_H(z)$ é o potencial autoconsistente de Hartree e $V_{xc}(z)$ é a correção de troca-correlação ao potencial confinante. A relação de dispersão para as subbandas é dada, a partir da equação (2.3), por

$$\mathcal{E}_{nk_\perp} = E_n + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} \quad (2.6)$$

As funções de onda na n -ésima subbanda podem ser escritas como

$$\psi_{nk_\perp}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_\perp \cdot \mathbf{r}} \chi_n(z) \quad (2.7)$$

O potencial autoconsistente de Hartree é obtido pela solução da equação de Poisson

$$\frac{d^2 V_H}{dz^2} = -\frac{4\pi\kappa e}{\epsilon} \rho(z) \quad (2.8)$$

onde

$$\rho(z) = e[-n(z) + n_I(z)]$$

é a distribuição espacial total composta pela nuvem eletrônica dos portadores

$$n(z) = \sum_n N_n |\chi_n(z)|^2 \quad (2.9)$$

$$N_n = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right] \quad (2.10)$$

sendo N_n o número de elétrons por unidade de área na n -ésima subbanda, E_F é o potencial químico. $n_I(z)$ é a densidade espacial de impurezas ionizadas dada por

$$n_I(z) = n_d(z) - n_a(z) \quad (2.11)$$

sendo $n_d(z)$ a densidade espacial de doadores e $n_a(z)$ a densidade espacial de aceitadores ionizados.

Distribuição de aceitadores ionizados

Nos estudos que serão feitos, quando considerados, os aceitadores serão residuais, homogeneamente distribuídos no cristal. Em estruturas levemente do tipo p , como em GaAs crescido por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*), esses aceitadores residuais podem ser considerados ionizados dentro de uma região de depleção de comprimento Δ_a .

Esse comprimento de depleção pode ser estimado[19] primeiramente considerando-se que, como um semiconductor em questão esteja em equilíbrio termodinâmico, o potencial químico deva ser constante em todo o semiconductor. Por um lado, para aceitadores residuais do tipo p , o potencial químico deve coincidir com os níveis aceitadores em regiões afastadas da modulação imposta pela dopagem intencional de impurezas doadoras. Por outro lado, na região de modulação de dopagem o potencial químico deve coincidir com aquele obtido pelo resultado do cálculo auto-consistente.

Figura 2.1: Deformação do potencial devido à presença de aceitadores residuais ionizados na região de depleção de tamanho Δ_a . O potencial químico, na região de modulação é E_F enquanto em regiões afastadas coincide com a energia de aceitadores E_a .

Na aproximação do comprimento de depleção, considera-se que as mudanças introduzidas pelos aceitadores nos níveis de energia e nas funções de onda dos elétrons sejam pequenas. Formalmente, deduz-se que a variação do potencial autoconsistente, devido à contribuição dos aceitadores, é o próprio potencial dos aceitadores, ou

$$V_H(z)|_{n_a(z) \neq 0} \approx V_H(z)|_{n_a(z)=0} + V_{ac}(z) \quad (2.12)$$

onde $V_{ac}(z)$ é o potencial gerado pelos aceitadores.

Resolvendo-se o problema eletrostático resultante, utilizando-se a origem $z = 0$ como referência de campo elétrico nulo de $V_{ac}(z)$, obtém-se,

$$\frac{dV_{ac}(z)}{dz} = \frac{4\pi\kappa e^2}{\epsilon} z$$

para $z < \Delta_a/2$, ou seja, dentro da região de depleção. Essa última equação, integrada novamente, fornece

$$V_{ac}(z)|_0^z = \frac{2\pi\kappa e^2}{\epsilon} z^2 \quad (2.13)$$

A Eq. (2.13) avalizada entre 0 e $z = \Delta_a/2$ reflete diferença de potencial entre regiões afastadas da região de modulação de dopagem e a região de modulação de dopagem. Conforme dito anteriormente, essa diferença deve equivaler à diferença entre potenciais químicos entre ambas as regiões para que um potencial químico constante no semiconductor possa ser estabelecido. Ou seja, para $T=0K$, a diferença em energia das duas regiões deve ser aproximadamente $E_G + E_F - E_a$, onde E_G é a largura da faixa proibida do semiconductor hospedeiro, E_a é o nível de energia para aceitadores e E_F é a energia de Fermi na região de modulação. Isso pode ser traduzido por

$$V_{ac}(z)|_0^{\Delta_a/2} = E_G + E_F - E_a = \frac{\pi\kappa e^2}{2\epsilon} \Delta_a^2$$

Para semicondutores de banda proibida larga com dopagens típicas, $E_G \approx 1,4$ eV, $E_F \approx 0,15$ eV e $E_a \approx 5$ meV. Portanto, em boa aproximação, obtém-se para a largura da região de depleção,

$$\Delta_a = \sqrt{\frac{2E_G}{\pi N_a} \frac{1}{a_B H}}$$

onde N_a é a concentração volumétrica de aceitadores, a_B é o raio de Bohr efetivo e H é o Hartree efetivo. Este valor para Δ_a está tipicamente na faixa de 1 a 10 μm , considerando-se densidades de dopagem residuais na ordem de 10^{14} cm^{-3} , ou seja, a região de depleção é da ordem do tamanho de uma amostra real.

Adicionalmente, a neutralidade elétrica do semiconductor é garantida fazendo-se a carga total nula

$$e \int_{-\infty}^{+\infty} dz [-n(z) + n_d(z) - n_a(z)] = 0$$

o que conduz a

$$N_S = N_d - N_a \Delta_a = N_d - \sqrt{\frac{2E_G N_a a_B}{\pi} \frac{1}{H}} \approx N_d$$

sendo N_d a concentração areal de doadores ionizados e N_S o número total de impurezas ionizadas.

Distribuição de doadores ionizados

As distribuições de doadores ionizados podem assumir vários formatos aproximados caracterizados pelas distribuições espaciais unitárias $g_d(z)$. Em particular, para os cálculos auto-consistentes que serão efetuados neste trabalho, serão considerados três tipos de distribuições unitárias:

- Distribuição gaussiana[20]:

$$g_d(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi\beta^2}} e^{-z^2/\beta^2}$$

onde $\Delta_d = 2\beta\sqrt{\ln 2}$ é a largura total da gaussiana a meia altura (FWHM),

- Distribuição uniforme no intervalo $[\Delta_d/2, -\Delta_d/2]$:

$$g_d(z) = \begin{cases} 1/\Delta_d & |z| < \Delta_d/2 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- Distribuição de espessura nula ou δ

$$g_d(z) = \delta(z)$$

onde $\delta(z)$ é a função δ de Dirac.

A partir das distribuições unitárias, a distribuição de doadores $n_d(z)$ é calculada por

$$n_d(z) = N_d g_d(z)$$

Potencial de troca-correlação

Para a obtenção do potencial de troca-correlação, esquemas locais ou não-locais podem ser utilizados. Nos cálculos que serão efetuados será utilizada uma correção local, parametrizada na literatura para um gás de elétrons tri-dimensional por vários autores.

No caso dos estudos que serão apresentados, a parametrização de escolha é aquela de Hedin e Lundqvist[21]

$$V_{xc}(z) = -\frac{H}{\pi\alpha r_s(z)} [1 + 0,7734x \ln(1 + x^{-1})] \quad (2.14)$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha &= \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} \\ r_s(z) &= \left(\frac{4\pi n(z)}{3}\right)^{1/3} a_B \\ x &= \frac{r_s(z)}{23} \end{aligned}$$

onde H é o Hartree efetivo e $n(z)$ é a densidade total eletrônica local.

2.1.1 Condições de contorno no cálculo autoconsistente

Finalmente, para os cálculos que serão efetuados no presente texto, serão consideradas as condições de contorno para um poço com e sem a aplicação de um potencial externo, ou seja, quando parte de sua carga eletrônica é ou não transferida para a superfície.

Numa *estrutura polarizada* (*biased structure*), uma fração $s \neq 0$ da carga total N_d é transferida para a porta (*gate*) situada na superfície da amostra, por exemplo, em $z = -L$. Neste caso, a solução das equações (2.5)-(2.8) serão sujeitas à condição de contorno

$$\left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=-d} = -4\pi s N_d \quad (2.15)$$

devida ao campo elétrico gerado pela acumulação de sN_d elétrons por unidade de área na porta.

No caso de uma *estrutura não polarizada* (*unbiased structure*), $s = 0$ e, portanto, a equação anterior fica

$$\left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=-d} = 0$$

por não haver elétrons na porta, ou seja, o campo elétrico é nulo na superfície.

Adicionalmente, para os casos de estruturas polarizadas ou não, uma condição de contorno extra é considerada para uma única camada de doadores de espessura nula:

$$\left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=z'+\epsilon} - \left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=z'-\epsilon} = 4\pi N_d \quad (2.16)$$

sendo ϵ uma grandeza infinitesimal e z' é a posição da camada planar no eixo de crescimento.

2.2 Estrutura eletrônica semi-clássica de poços δ

A aproximação semi-clássica de Thomas-Fermi, em geral, mostra-se de bastante valia já que consegue fornecer algumas propriedades eletrônicas qualitativa ou mesmo quantitativamente. Em particular, para um sistema δ dopado, um perfil semiclássico de potencial pode ser determinado analiticamente para $T=0K$, evitando-se assim o cálculo auto-consistente ou mesmo utilizando-o como uma aproximação inicial de boa qualidade que diminua o número de iterações necessárias para a obtenção do perfil quântico do cálculo auto-consistente. Foi mostrado por Ioriatti[22] que a estrutura de bandas para concentrações suficientemente elevadas de portadores é praticamente equivalente àquela fornecida pelo cálculo auto-consistente de Hartree sem a inclusão da parte do potencial de troca-correlação. Outros autores estudaram a estrutura eletrônica fornecida pelo cálculo semiclássico em super-redes de composição de modo que as descontinuidades introduzidas pelas diferenças de potencial fossem consideradas[23, 24, 25]. A teoria semiclássica de Thomas-Fermi, que pode ser encarada como a teoria do funcional densidade onde são ignorados termos em ∇V , foi objeto de alguns estudos onde são consideradas correções de gradiente de potencial[26, 27] e correções devidas a quantização da população eletrônica[28], com bons resultados.

Nesta seção, será mostrado o formalismo que conduz à obtenção de perfis de potencial de Thomas-Fermi para o poço δ a $T=0K$.

2.2.1 Uma dedução simples para perfis de potencial de Thomas-Fermi

A literatura a respeito da dedução de perfis de potencial na aproximação de Thomas-Fermi é relativamente vasta, podendo ser encontrada em vários livros-texto (por exemplo, no livro de Davidov[29] ou no livro de Mahan[30]) ou em algumas revisões (como, por exemplo, na revisão de March[31]).

Uma dedução simples pode ser obtida considerando-se primeiramente que podemos preencher o espaço de fase, a partir de estados com menores momentos, colocando dois portadores com spins opostos em cada célula de volume h^3 , onde h é a constante de Planck. O espaço de momentos é então ocupado até o momento máximo $p_o(\mathbf{r})$. Logo, o volume do espaço de fase ocupado correspondente ao volume ocupado no espaço de posições será

$$\frac{4\pi}{3} p_o^3(\mathbf{r})$$

e, portanto, a densidade eletrônica será dada por

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} p_o^3(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

A hamiltoniana clássica para o portador mais rápido pode ser escrita como

$$\frac{p_o^2(\mathbf{r})}{2m} + V(\mathbf{r}) = E_F \quad (2.18)$$

onde $V(\mathbf{r})$ é a energia potencial e E_F é a energia de Fermi. Resolvendo as Eqs. (2.17) e (2.18) em $n(\mathbf{r})$ e $V(\mathbf{r})$, obtém-se

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} (2m)^{3/2} [E_F - V(\mathbf{r})]^{3/2} \Theta[E_F - V(\mathbf{r})] \quad (2.19)$$

que é denominada como densidade eletrônica de Thomas-Fermi. A função $\Theta(x)$ foi introduzida de maneira a que estados acima do nível de Fermi não sejam populados.

Para que a energia potencial seja determinada, o requisito da autoconsistência deve ser invocado, ou seja, a energia potencial deve ser originada por meios eletrostáticos. Ou seja, a energia potencial deve obedecer à equação de Poisson

$$-\nabla^2 \frac{V(\mathbf{r})}{e} = \frac{4\pi\kappa}{\epsilon} \rho(\mathbf{r})$$

onde e é a carga do portador e $\rho(\mathbf{r})$ é a densidade espacial de cargas dada por $\rho(\mathbf{r}) = en(\mathbf{r})$. Ou seja,

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi\kappa e^2}{\epsilon} n(\mathbf{r})$$

Combinando este resultado com a Eq. (2.19) resulta na equação de Thomas-Fermi para a energia potencial

$$\nabla^2 [E_F - V(\mathbf{r})] = \frac{8\sqrt{2}\kappa e^2}{3\pi \epsilon \hbar^3} m^{3/2} [E_F - V(\mathbf{r})]^{3/2} \Theta[E_F - V(\mathbf{r})] \quad (2.20)$$

Como explicado na Seção 2.1, em estruturas com dopagem planar, a densidade eletrônica de carga é dada por

$$\rho(z) = -en(z) + en_d(z) - en_a(z)$$

e a equação de Thomas-Fermi (2.20) fica

$$\frac{d^2}{dz^2}[E_F - V(z)] = \frac{8\sqrt{2}\kappa e^2}{3\pi\epsilon\hbar^3} m^{3/2} [E_F - V(z)]^{3/2} \Theta[E_F - V(z)] - 4\pi e^2 n_d(z) + 4\pi e^2 n_a(z)$$

Finalmente, os resultados da aproximação semiclássica obtidos para sistemas bi-dimensionais podem ser sumarizados como

$$\frac{d^2}{dz^2}[E_F - V(z)] = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} [E_F - V(z)]^{3/2} \Theta[E_F - V(z)] - 4\pi n_d(z) + 4\pi n_a(z) \quad (2.21)$$

e

$$n(z) = \frac{1}{3\pi^2} [E_F - V(z)]^{3/2} \Theta[E_F - V(z)] \quad (2.22)$$

em unidades atômicas efetivas.

2.2.2 O poço δ dopado a $T=0K$

Como já mencionado, os perfis do potencial de poços δ podem ser determinados utilizando a aproximação semi-clássica de Thomas-Fermi. Será mostrada aqui a solução da equação de Thomas-Fermi para poços δ de espessura nula, a $T=0K$, na ausência de aceitadores residuais.

Utilizando como origem da escala de energia o nível de Fermi, E_F , a equação diferencial (2.21) de Thomas-Fermi para o potencial confinante ficará dada por[22]

$$\frac{d^2}{dz^2} [-V(z)] = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} [-V(z)]^{3/2} \Theta[-V(z)] - 4\pi N_d \delta(z) \quad (2.23)$$

Em estruturas onde uma fração s da carga eletrônica foi transferida para a superfície, situada em $z = -d$, a solução da equação diferencial (2.23) para $z > 0$ é dada por

$$V(z) = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + \beta)^4} \quad (2.24)$$

com $\alpha = 2/15\pi$ e

$$\beta = \left(\frac{\alpha^3}{\pi N_d} \right)^{1/5} (1 - s^2)^{-1/5} \quad (2.25)$$

A profundidade do poço de potencial, V_0 , é dada por

$$V_0 = \bar{V}_0 (1 - s^2)^{4/5} \quad (2.26)$$

onde $\overline{V}_0$ representa a profundidade do potencial do poço para uma estrutura sem polarização (i.e. $s = 0$)

$$\overline{V}_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi^2 N_d^2}{\alpha} \right)^{2/5} \quad (2.27)$$

Para $z < 0$, o potencial é determinado numericamente pela equação diferencial

$$\frac{dV(z)}{dz} = -\sqrt{16\sqrt{2}\alpha|V(z)|^{5/2}\Theta[-V(z)] + (4\pi s N_d)^2} \quad (2.28)$$

Figura 2.2: Perfil de um poço δ dopado sujeito a um potencial externo aplicado, onde uma fração s da carga eletrônica foi transferida para a superfície em $z = -d$. O potencial de TF é obtido a partir das relações (2.24) e (2.28), $z > 0$ e para $z < 0$, respectivamente. O potencial de TF para $z < z_0$ possui uma variação linear de $-4\pi s N_d$. A figura inserida mostra as derivadas do potencial em $z = 0$, obtidas a partir das condições de contorno (2.15) e (2.16).

Para estruturas sem polarização, o perfil de potencial de Thomas-Fermi será dado pela equação (2.24) para todo o z , fazendo-se $s = 0$.

2.3 Estrutura eletrônica de super-redes δ periódicas

Quando os elétrons são confinados num potencial periódico ao longo de um eixo (a direção de crescimento z), os estados eletrônicos são quantizados em minibandas de energias $\mathcal{E}_{nk_z k_\perp}$

$$\mathcal{E}_{nk_z k_\perp} = E_{nk_z} + \frac{\hbar k_\perp^2}{2m} \quad (2.29)$$

onde $k_{\perp}$ e k_z são, respectivamente, os vetores de onda perpendicular e paralelo aos poços confinantes e E_{nk_z} é a relação de dispersão da n -ésima minibanda. Os estados eletrônicos correspondentes às energias E_{nk_z} são descritos pelas funções de onda

$$\psi_{nk_z k_{\perp}}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \chi_{nk_z}(z) \quad (2.30)$$

onde $\chi_{nk_z}(z) = u_{nk_z}(z)e^{ik_z z}$ e $u_{nk_z}(z)$ são funções de Bloch normalizadas no tamanho da super-rede. As funções $\chi_{nk_z}(z)$ são soluções da equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_H(z) + V_{xc}(z) \right] \chi_{nk_z}(z) = E_{nk_z} \chi_{nk_z}(z) \quad (2.31)$$

$V_H(z)$ é o potencial auto-consistente de Hartree, obtido pela solução numérica da equação de Poisson (2.8) com

$$n(z) = \sum_n N_{nk_z} |u_{nk_z}(z)|^2$$

$$N_{nk_z} = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_{nk_z}}{k_B T} \right) \right]$$

sendo $n(z)$ a densidade de portadores livres e E_F a energia de Fermi.

O restante do cálculo da estrutura eletrônica de super-rede periódicas segue raciocínio análogo ao cálculo da estrutura eletrônica de poços δ . É de mencionar-se que a distribuição de doadores ionizados $n_d(z)$, assumindo-se o formato de uma camada dopada como sendo uma função normalizada $g_d(z)$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz g_d(z) = 1$$

é calculada a partir de

$$n_d(z) = N_d \sum_{n=-\infty}^{+\infty} g_d(z - nd)$$

onde d é o período da super-rede e N_d é a densidade planar de doadores em cada plano δ -dopado.

2.4 Procedimento numérico para o cálculo da estrutura eletrônica

A estrutura eletrônica quântica de super-redes δ -dopadas e poços δ é obtida a partir do cálculo auto-consistente das equações de Poisson e Schrödinger, utilizando-se, por exemplo, o potencial de Thomas-Fermi como ponto de partida.

Na implementação do procedimento auto-consistente, três métodos diferentes podem ser utilizados para se resolver a equação de Schrödinger:

- Expandindo-se o potencial confinante e as funções de onda envoltórias em série de Fourier e resolvendo-se o problema de auto-valores resultante; (por exemplo, como descrito na Ref. [32]).
- Utilizando-se o método da matriz de transferência, considerando-se o potencial constante por intervalos (Ref. [33]);
- Resolvendo-se a equação de Schrödinger pelo método das diferenças finitas.

Figura 2.3: Energia de Fermi relativa ao mínimo da subbanda E_1 , calculada em função do número de ondas planas utilizadas para a expansão do potencial confinante por uma série discreta de Fourier (+) para uma super-rede com parâmetros $N_d = 5a_B^{-2}$, $d = 12a_B$ e $\Delta = 0,1a_B$. Os círculos cheios representam os resultados obtidos pelo método das diferenças finitas.

Os dois últimos métodos produzem resultados equivalentes, sendo que a utilização do método de diferenças finitas é vantajosa, no que diz respeito à velocidade da obtenção do potencial, para o cálculo da estrutura eletrônica de poços isolados.

No caso dos dois primeiros métodos, o potencial periódico e a função de distribuição de doadores são amostradas em N_z pontos equidistantes em cada período da super-rede; para o método (1), N_z será também o número de ondas planas utilizadas na expansão de Fourier do potencial confinante. Na medida em que N_z cresce, o potencial numérico e a função de distribuição dos doadores são melhor aproximadas pelos valores da amostragem, e os resultados dos cálculos convergem.

Estudou-se a convergência em função de N_z para uma situação numérica extrema: uma super-rede com alta dopagem por período ($N_d = 5 a_B^{-2}$) com período muito grande ($d = 12 a_B$) e com uma distribuição de doadores gaussiana bastante aguda ($\Delta = 0,1 a_B$). Para tais

parâmetros, somente os elétrons em minibandas acima da quinta estarão acoplados com os poços adjacentes; esses elétrons perfazem apenas 0,5% do total, portanto os poços são efetivamente desacoplados. A energia de Fermi E_F foi escolhida como o parâmetro de convergência; esta escolha foi baseada no fato de que E_F é muito sensível a qualquer mudança no formato dos perfis dos poços, sendo assim uma escolha ideal para o teste de convergência. A posição calculada do nível de Fermi a partir do mínimo da primeira subbanda, E_1 , como função de N_d é mostrada na Fig. 2.3. As cruzeiros na Fig. 2.3 indicam a solução obtida utilizando-se o método de Fourier de expansão em ondas planas, enquanto os círculos representam os resultados obtidos pelo método da matriz de transferência. A Fig. 2.3 mostra que o método de solução que emprega a expansão de Fourier converge mais rapidamente que aquele da matriz de transferência; isto pode ser atribuído ao fato de que a expansão com N_x ondas planas representa melhor o potencial do que uma aproximação do mesmo por N_x segmentos constantes (que é o caso do método da matriz de transferência).

Figura 2.4: Energia de Fermi calculada para uma super-rede com parâmetros $d = 2a_B$ em função de N_d (+). A linha cheia é a dependência de E_F para um gás de elétrons 3D. Os círculos representam dependência de E_F na aproximação bi-dimensional de Thomas-Fermi, obtida da solução numérica do potencial dado pela Eq. (2.24)

Para os parâmetros considerados na obtenção da Fig. 2.3, uma expansão com 128 ondas planas fornece uma energia de Fermi com um desvio de menos de 0,3% do valor obtido 512 ondas planas. Para um forte acoplamento entre poços adjacentes, um baixo nível de dopagem ou uma distribuição de doadores mais larga, o potencial confinante será mais suave que aquele considerado na Fig. 2.3, e será melhor aproximado pelo mesmo número de ondas planas. Portanto, para o cálculo dos potenciais de super-redes, utilizaremos um número máximo de 128 ondas planas. Como mostrado, isto produzirá uma estrutura eletrônica de boa qualidade numérica

para sua posterior utilização na obtenção de propriedades derivadas como as mobilidades das mini-bandas e espectros CV.

A Fig. 2.4 mostra a dependência da energia de Fermi em função da dopagem planar assumida, N_d , calculada para uma super-rede de período $d = 2 a_B$ e $\Delta = 0,2 a_B$ (cruzes). Na Fig. 2.4 também é mostrada a dependência da energia de Fermi em N_d para um gás de elétrons livres, $E_F^{3D} = \frac{1}{2}(3\pi^2 N_d/d)^{2/3}$ (linha cheia), e a dependência da energia de Fermi em N_d obtida da solução numérica da equação de Schrödinger utilizando-se o potencial de Thomas-Fermi (Eq. (2.24)) (círculos). Para pequenos valores de N_d , os poços são rasos e o acoplamento entre poços adjacentes é forte; portanto E_F segue a dependência do gás de elétrons livres E_F^{3D} . Em alta concentração, o acoplamento entre poços adjacentes diminui e a dependência de E_F em N_d torna-se linear como a aproximação de Thomas-Fermi para um poço isolado. O comportamento bi-dimensional em alta concentração N_d ilustra o fato de que em altos níveis de dopagem, os poços δ são desacoplados mesmo para super-redes com períodos muito curtos, como mostrado por cálculos *ab initio* [34].

Capítulo 3

Determinação do período de super-redes por medidas CV

A técnica de caracterização CV (capacitância-voltagem) foi originalmente desenvolvida para determinar a distribuição espacial de impurezas em heterojunções semicondutoras e é descrita em alguns livros texto, como por exemplo na Ref. [35].

Figura 3.1: Representação esquemática de uma experiência CV. Uma amostra é submetida a uma tensão de polarização V e a uma pequena tensão alternada V_{AC} . A capacitância pode ser obtida, para cada valor de V por $i_{AC} = C \frac{dV_{AC}}{dt}$.

A técnica CV pode também ser aplicada em sistemas semicondutores bidimensionais[36, 37] tais como sistemas δ -dopados. Para um único poço δ mostra-se que a análise do espectro CV

pode ser utilizada para determinar a localização das impurezas do plano δ com uma precisão da ordem do tamanho da constante de rede do cristal hospedeiro[38].

A fim de que se obtenha um espectro CV, uma tensão de polarização V é aplicada no contato Schottky feito na superfície do semiconductor e a capacitância diferencial C é medida adicionando-se uma pequena voltagem alternada à tensão de polarização, como esquematizado na Figura 3.1.

Utilizando-se o sistema adimensional de unidades, onde as unidades de comprimento, energia e massa são, respectivamente, o raio de Bohr efetivo, o Hartree efetivo e a massa efetiva, o espectro CV é definido como sendo a *concentração CV* definida por

$$N_{CV} = 4\pi C^3 \frac{dV}{dC} \quad (3.1)$$

versus a *profundidade CV* definida por

$$z_{CV} = \frac{1}{4\pi C} \quad (3.2)$$

Para sistemas com um único poço δ , o gráfico $N_{CV} \times z_{CV}$ é caracterizado por ser uma curva em forma de sino.

Figura 3.2: Representação da localização espacial das cargas envolvidas na medida CV. A capacitância total C pode ser obtida por $\frac{1}{C} = \frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2}$ ou, equivalentemente, $z_{CV} \approx L + \bar{z}$

O processo físico que determina o formato do espectro CV pode ser entendido a partir de uma breve discussão. Quando da aplicação de uma tensão de polarização, parte da carga eletrônica é transferida do poço para o contato Schottky. Como mostrado na Figura 3.2, se tomarmos como aproximadamente constante a intensidade do campo elétrico existente entre o contato Schottky e o poço δ , a capacitância total será

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2}$$

com $1/C = 4\pi z_{CV}$, $1/C_1 = 4\pi L$ e $1/C_2 \approx 4\pi \bar{z}$. Substituindo-se esses resultados na relação (3.2) tem-se, portanto,

$$z_{CV} \approx L + \bar{z}$$

onde L é a distância entre a superfície e o poço δ e $\bar{z}$ é a posição esperada da carga eletrônica, medida a partir do centro do plano de impurezas. Portanto, o espectro CV será determinado pela dependência de $\frac{dz}{dV}$ na tensão de polarização V .

Para pequenos valores de V , $\bar{z}$ aumenta rapidamente devido às contribuições das subbandas de energia mais altas (Fig. 3.3a e 3.3b), posto que estas são caracterizadas por um comprimento de ligação grande (ou seja, fracamente ligadas ao plano de carga positiva) e que são extremamente sensíveis à intensidade do campo elétrico externo aplicado. Em valores intermediários de V (Fig. 3.3c), apenas subbandas fortemente ligadas ao plano δ permanecem populadas e a dependência de $\bar{z}$ em V torna-se mais fraca. Finalmente, para valores mais altos de V , a força de ligação do potencial de confinamento diminui (Figura 3.3d), devido ao aumento de importância da repulsão da carga confinada pelas cargas superficiais, o que se reflete novamente num rápido aumento de $\bar{z}$ com V . Essa dependência em forma de degrau de $\bar{z}$ em V conduz a um espectro CV em forma de sino (Fig. 3.3e e 3.3f). Já que as mudanças em $\bar{z}$ são muito menores que o valor de L , a posição do pico CV será aproximadamente a distância da superfície ao plano δ .

Como mostrado por Schubert, a largura do pico CV é proporcional à extensão espacial da função de onda de uma partícula do estado fundamental (ou seja, do sistema sem campo elétrico aplicado), $\Delta_{x_{E1}}$. Já que $\Delta_{x_{E1}}$ depende da largura do plano δ , segue-se que a largura do espectro CV de um semicondutor δ -dopado reflete a dispersão das impurezas ao redor do plano δ . Se a densidade planar dos átomos da impureza é conhecida, a largura do plano δ pode ser estimada calculando-se auto-consistentemente o espectro CV teórico[38]. Num cálculo deste tipo, a largura do plano δ é a variável de entrada; a largura real do plano δ é tomada como sendo igual ao valor do parâmetro que conduz ao espectro CV teórico que esteja em melhor acordo com o experimental[4, 6, 20].

Neste capítulo, mostramos como a análise do espectro CV pode ser estendida a semicondutores periodicamente δ -dopados. O espectro CV foi medido para super-redes InP:Si periodicamente dopadas e foram observadas oscilações. Os espectros CV teóricos foram calculados, demonstrando que os períodos das oscilações constituem uma medida precisa da periodicidade de dopagem. A gama de parâmetros, nível de dopagem e período, nos quais a técnica CV é de valia para a determinação do período d , também foi avaliada.

Figura 3.3: (a)-(d) Evolução do potencial confinante de um poço δ com a voltagem externa aplicada, a $4 a_B$ abaixo da superfície da amostra. São mostrados as funções de onda e os níveis energéticos correspondentes às subbandas E_1 a E_4 (linhas tracejadas) e a fração de carga situada na superfície (s). As linhas pontilhadas vertical e horizontal indicam a posição do plano de impurezas e ao nível de Fermi para $s = 0$, respectivamente. (e) z_{CV} em função da voltagem $\mathcal{V}$ aplicada. (f) Espectro CV. Entre as setas é indicado o número de subbandas ocupadas.

3.1 Resultados

A Fig. 3.4 mostra o espectro CV experimental para três amostras de InP estudadas. Os espectros CV são caracterizados por possuírem uma sequência de picos com um espaçamento constante que é aproximadamente igual ao espaçamento nominal entre os planos δ . Pela figura, pode-se observar também que para espaçamentos menores entre os planos δ , os picos vistos no espectro CV são menos bem resolvidos.

Figura 3.4: Espectros CV experimentais super-redes δ periódicas com períodos de 280Å (linha cheia), 250Å (linha pontilhada) e 100Å (linha tracejada), medidos a 300K. A densidade de portadores é aproximadamente igual a $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, por período de dopagem, para todas as amostras. As amostras continham, respectivamente, 5, 10 e 10 poços δ .

Para que os espectros CV experimentais possam ser interpretados, espectros CV teóricos foram gerados resolvendo-se auto-consistentemente as equações de Schrödinger e Poisson para super-redes δ dopadas submetidas à tensões de polarização (os detalhes do cálculo auto-consistente podem ser apreciados no Capítulo 2)[39]. As estruturas teóricas consistiam em cinco poços δ igualmente espaçados e foram utilizadas 25 subbandas para o cálculo auto-consistente. Assumiu-se também que as impurezas estavam distribuídas de acordo com uma distribuição gaussiana com FWHM de $0.2 a_B$ (aproximadamente 15 Å para o InP). Os parâmetros de entrada nos cálculos foram o período de dopagem d e a densidade planar de átomos da impureza em cada plano dopado N_d . Foram estudados também os efeitos de impurezas aceitadoras residuais com concentrações na faixa de $N_a < 10^{-4} a_B^{-3}$ ($N_a < 2.1 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3}$ para o InP). Entretanto, os espectros CV calculados mostraram uma pequena dependência na densidade de aceitadores residuais e nos cálculos que serão mostrados, será desprezado esse efeito. Finalmente, os espectros CV teóricos foram calculados utilizando-se as equações Eqs. (3.1) e (3.2).

Na Figura Fig. 3.5 é mostrado o potencial confinante e a distribuição eletrônica de carga obtidos a partir do cálculo auto-consistente das equações de Schrödinger e Poisson em função da tensão de polarização aplicada para uma estrutura periodicamente δ -dopada com parâmetros $N_d = 2.5 a_B^{-2}$ ($4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para o InP), $d = a_B$ (79 Å para o InP) e $T=300\text{K}$.

Figura 3.5: (a) Dependência do potencial confinante auto-consistente de um semiconductor periodicamente δ -dopado pela polarização aplicada; a curva abaixo de todas corresponde à situação de polarização nula e a acima de todas corresponde à situação de polarização máxima. Os parâmetros foram tomados como sendo $N_d = 2.5a_B^{-2}$, $d = a_B$ e $T=300K$. O contato Schottky está localizado em $z = 0$; (b) A mesma dependência da densidade de carga eletrônica confinada na estrutura; (c) O espectro CV calculado para a mesma estrutura (curva cheia). A curva tracejada representa a soma de espectros CV teóricos associados com amostras contendo uma única camada δ com os mesmos parâmetros, mas com as camadas localizadas a distâncias L , $L + d$, $L + 2d$, ... abaixo da superfície.

As figuras Fig. 3.5a e 3.5b mostram que a medida em que a polarização externa aumenta a estrutura semicondutora é progressivamente depletada. Essa depleção progressiva acontece.

entretanto, primeiramente no poço δ mais próximo da superfície sendo que o próximo começará a ser depletado somente quando que o anterior já estiver completamente vazio. Isto sugere que o espectro CV de um sistema periodicamente δ -dopado possa ser aproximado pela sobreposição de curvas CV associadas à estruturas δ -dopadas com um único plano de impurezas localizados às distâncias $L, L + d, L + 2d, \dots$ da superfície da amostra. Portanto, o espaçamento entre picos CV será igual à distância entre planos δ adjacentes. Como pode ser visto pela Fig. 3.5c, a sobreposição de curvas CV associadas a planos δ aproxima-se bastante bem o espectro CV para a estrutura periodicamente δ -dopada.

Entretanto, a resolução dos picos CV será possível somente se o espaçamento entre planos for maior que a largura a meia altura (FWHM) do pico CV de um plano δ individual. Assumindo que o espaçamento entre picos seja igual ao período de dopagem d e a FWHM de um pico CV individual igual a localização espacial da subbanda do estado fundamental Δz_{E1} [6, 20], para observarem-se oscilações no espectro CV a condição que deve ser satisfeita é

$$d > \Delta z_{E1}$$

Cabe ressaltar que, nesta gama de períodos de dopagem, o acoplamento entre elétrons localizados em poços adjacentes e pertencentes à minibanda fundamental é fraco. Neste caso, a depleção de carga da estrutura sobre polarização é um processo seqüencial (ou seja, um dado poço começa a ser depletado somente quando todos os poços mais próximos da porta já o foram), o que, pelos argumentos já expostos, garante que a distância entre picos CV é uma boa medida do período de dopagem da estrutura de um semiconductor periodicamente δ -dopado.

A extensão espacial da função de onda do estado fundamental, Δz_{E1} , depende principalmente de dois parâmetros da amostra: da densidade planar eletrônica em cada poço, N_d , e da espessura da camada dopada por átomos doadores, Δ_d . Para um poço δ ideal, ou seja, com camada dopada de espessura nula, $\Delta_d = 0$, a extensão espacial Δz_{E1} pode ser estimada a partir da regra de quantização de Bohr-Sommerfeld,

$$\int dz p(z) = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

escrita em unidades atômicas efetivas.

A energia de um estado ligado, E_n , pode ser obtida pela substituição

$$p(z) = \sqrt{2[E_n - V(z)]}$$

onde $V(z)$ é a equação conhecida para o potencial confinante. A extensão espacial do n -ésimo estado é igual à distância entre os pontos de retorno clássicos, sendo assim determinados pela condição $V(z) = E_n$. Nas proximidades do plano de impurezas, o potencial confinante pode ser aproximado por

$$V(z) \approx 2\pi N_d |z|$$

Nessa aproximação a extensão espacial do estado fundamental ($n = 0$, que foi denotado por $E1$) é dada por

$$\Delta z_{E1} = \left(\frac{3\pi^{1/2}}{2^{5/2}} \right)^{2/3} N_d^{-1/3}$$

Portanto, para planos δ muito estreitos, a condição para que o espectro CV apresente uma estrutura oscilatória, cujo período seja igual ao espaçamento entre os planos de dopante, será

$$d > \left(\frac{3\pi^{1/2}}{2^{5/2}} \right)^{2/3} N_d^{-1/3}$$

3.2 Conclusões

Em suma, foi mostrado que o espectro CV de uma estrutura periodicamente δ -dopada pode ser descrito, em boa aproximação como uma combinação linear de espectros CV associados com uma sequência de poços δ individuais igualmente deslocados espacialmente da superfície da amostra. Para três super-redes reais de InP:Si consideradas, com dopagens planares de $4, 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, os períodos de dopagem obtidos dos espectros CV foram de 92, 225 e 280 Å, os quais em concordância excelente com o períodos intencionais de 100, 250 e 280 Å, respectivamente.

A técnica CV pode ser útil para que sejam determinados os períodos de dopagem somente nos casos em que o período de dopagem seja maior que a FWHM do espectro CV associado com um plano individual de impurezas.

A técnica pode ser aplicada a uma estrutura com um número arbitrário de períodos e densidades planares. A avalanche elétrica (*electric breakdown*) pode ser evitada se as medidas CV forem feitas no modo de corrosão (*etching mode*), ou seja, se a superfície da amostra for sendo corroída gradativamente. Entretanto, o procedimento de corrosão introduz um alargamento dos picos CV (cujos detalhes podem ser vistos, por exemplo, na Ref. [40]), e, como consequência, o espectro CV experimental mostrará apenas um número finito de oscilações associadas com os planos δ mais próximos da superfície da amostra.

Capítulo 4

Determinação experimental dos parâmetros característicos de poços e super-redes δ

Os parâmetros característicos de uma super-rede δ dopada ideal são a densidade de átomos doadores nas camadas dopadas, N_d , e o período de dopagem, d . Estes dois parâmetros determinam inteiramente as propriedades optoeletrônicas de um semicondutor com dopagem periódica e espessura nula da camada de dopagem. Em amostras reais, entretanto, os átomos doadores estão difundidos em torno do plano idealizado e a distribuição desses átomos pode ser aproximada, por exemplo, por uma função gaussiana com largura a meia altura Δ_d [20]. Recentemente, a partir de medidas de difractometria de raios-X foi possível a determinação da flutuação no período de super-redes δ -GaAs, além de ter sido deduzido por esta técnica que todos os átomos de Si ocupam posições substituindo o Ga[41], em concentrações de Si muito menores que aquela de saturação. A dopagem de saturação é aquela na qual não é observada um aumento proporcional na concentração de portadores e, para o GaAs, está na faixa de $2 \times 10^{-13} \text{cm}^{-2}$, conforme verificado por Droopad *et al.* [42] a partir de medidas de magnetotransporte. Conforme verificado experimentalmente por Droopad *et al.* e teoricamente por [43], a espessura não nula das camadas dopadas reflete-se no espectro energético e no preenchimento das minibandas de uma super-rede[43]. Adicionalmente, a presença de aceitadores residuais ionizados também tem uma pequena influência na estrutura eletrônica das subbandas mais excitadas; estas impurezas podem ser neutralizadas iluminando-se a amostra em baixas temperaturas; [44]. Portanto, para a gama de densidades abaixo do limite crítico determinado por Droopad *et al.*, pode-se tomar como boa aproximação que a densidade planar de portadores livres por período da super-rede seja igual à densidade de doadores, ou seja, $N_s = N_d$.

Os parâmetros característicos de uma super-rede δ têm grande influência nas propriedades ópticas e elétricas. Por exemplo, em GaAs com uma densidade planar fixa de $1.2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, quando o período de dopagem decresce de 500 para 100 Å, o espectro de fotoluminescência associado com a presença das camadas δ muda de uma banda de emissão estreita com uma energia de corte próxima ao topo da banda para uma banda de emissão larga com energia de corte cerca de 60 meV acima do *gap* renormalizado do GaAs [45, 46]. Similarmente, para um período fixo de dopagem, o limiar de absorção é aumentado quando o período da super-rede diminui[9]. Estas observações estão em bom acordo com os resultados teóricos efetuados dentro

da aproximação de massa efetiva e utilizando-se os parâmetros característicos das amostras como entrada[47]. Medidas de SdH em ângulo oblíquo mostraram o efeito de acoplamento entre poços δ adjacentes no formato da Superfície de Fermi [42]; as áreas extremas de corte da Superfície de Fermi em campo magnético oblíquo são também reproduzidas pelo mesmo modelo teórico[48]. Portanto, os parâmetros d , N_d e Δ_d formam a base para a modelagem da estrutura eletrônica de uma super-rede δ e o conhecimento dos mesmos é um pré-requisito para o entendimento das propriedades ópticas e eletrônicas de uma dada amostra.

Apresentaremos neste capítulo uma maneira de conectar resultados experimentais com a estrutura eletrônica de uma amostra δ -dopada. Em particular, a conexão entre os resultados do cálculo auto-consistente, de medidas CV e os resultados de medidas de Shubnikov-de Haas transversais (quando o campo magnético é aplicado paralelamente à direção de crescimento da super-rede).

4.1 Resultados numéricos

Quando graficada em função do inverso de campo magnético aplicado, a parte oscilatória da magnetoresistência de uma super-rede δ -dopada apresentará um conjunto de frequências superpostas, B_i , em unidades atômicas efetivas,

$$B_i = E_F - E_i \quad (4.1)$$

onde i é o índice da minibanda e E_i é a limiar da i -ésima minibanda[49], no sistema adimensional. Portanto, a cada minibanda preenchida corresponderá um período nas oscilações da magnetoresistência. Os parâmetros N_d , d e Δ_d de uma dada amostra são aqueles que fornecem melhor acordo simultâneo entre as frequências de SdH calculadas e as medidas.

Figura 4.1: Frequências das oscilações de SdH (B_i) calculadas para um poço δ isolado. As linhas cheias correspondem a $\Delta_d = 0,1 a_B$ e as linhas tracejadas a $\Delta_d = 1,0 a_B$.

Para um poço isolado, a Eq. (4.1) assume a forma usual, em unidades atômicas efetivas,

$$B_i = \pi N_i$$

onde N_i é a densidade planar de portadores na i -ésima subbanda. Ajustando-se os parâmetros de entrada, N_d e Δ_d , no modelo teórico até que as frequências previstas coincidissem com as obtidas experimentalmente, Koenraad determinou ambos os parâmetros de entrada para uma amostra de GaAs com um único poço δ [44].

A Fig. 4.1 mostra a dependência de B_i em função da densidade planar de portadores para uma amostra com um único poço δ com $\Delta_d = 0,1 a_B$ (linha cheia) e $\Delta_d = 1,0 a_B$ (linha tracejada). Quando a largura do plano de impurezas é aumentada, o poço δ torna-se mais largo; conseqüentemente, a diferença em energia entre os mínimos das subbandas decresce, resultando em uma transferência de elétrons da subbanda E1 para E2 e E3. Observa-se que frequências das oscilações SdH calculadas mostram uma substancial sensibilidade à largura Δ_d : para uma variação de Δ_d de $0,1 a_B$ para $1,0 a_B$ para $N_d = 2,0 a_B$ a mudança nas frequências $B1$ calculadas é maior do que $0,7$ u.a. Considerando que B_i pode ser detectada experimentalmente com uma precisão de $\pm 0,2$ T [44], e tomando a massa efetiva e a constante dielétrica do GaAs respectivamente como $m = 0,0665 m_o$ e $\epsilon = 12,6$, espera-se que a análise das oscilações SdH forneçam valores de Δ_d com uma incerteza de cerca de $\pm 5 \text{\AA}$.

No caso do poço isolado, calculamos numericamente a relação entre Bi e N_d para uma distribuição gaussiana de impurezas. Verificamos que essa relação numérica pode ser muito bem aproximada pela simples relação empírica, em unidades atômicas efetivas,

$$Bi(N_d) = ai(\Delta_d) [N_d - bi(\Delta_d)]^{ci(\Delta_d)} \quad (4.2)$$

onde ai , bi e ci são polinômios de segundo grau dados pela Tabela 4.1

$$\begin{aligned} a1(x) &= 2,53113 - 3,77296 \cdot 10^{-1}x + 2,57351 \cdot 10^{-2}x^2 \\ b1(x) &= 0 \\ c1(x) &= 8,60743 \cdot 10^{-1} - 5,17878 \cdot 10^{-2}x + 3,21415 \cdot 10^{-3}x^2 \\ a2(x) &= 6,73469 \cdot 10^{-1} + 3,11760 \cdot 10^{-1}x - 6,37959 \cdot 10^{-2}x^2 \\ b2(x) &= 1,85360 \cdot 10^{-1} - 5,20661 \cdot 10^{-2}x + 5,52679 \cdot 10^{-3}x^2 \\ c2(x) &= 1,08469 - 9,74060 \cdot 10^{-2}x + 6,67422 \cdot 10^{-3}x^2 \\ a3(x) &= 2,84099 \cdot 10^{-1} + 2,04100 \cdot 10^{-2}x + 3,94370 \cdot 10^{-2}x^2 \\ b3(x) &= 6,64766 \cdot 10^{-1} - 3,34956 \cdot 10^{-1}x + 7,90960 \cdot 10^{-2}x^2 \\ c3(x) &= 1,13174 + 1,35237 \cdot 10^{-1}x - 6,78180 \cdot 10^{-2}x^2 \end{aligned}$$

Tabela 4.1: Polinômios utilizados para gerar a Fig. 4.1 através da relação (4.2)

A Fig. 4.2 apresenta as frequências de SdH calculadas em função de N_d utilizando um valor fixo da largura do plano de dopantes, $\Delta_d=0,2a_B$, para períodos de super-rede $d=1,5a_B$ e $d=2,0a_B$. Na medida em que o período da super-rede torna-se mais curto, um maior valor de dopagem N_d é necessário para popular as minibandas excitadas; por esta razão, na medida em que d diminui, as funções $Bi(N_d)$ para as minibandas excitadas intersectam o eixo horizontal em valores mais altos de N_d .

Figura 4.2: Freqüências das oscilações de SdH (Bi) calculadas para uma super-rede $d = 2,0 a_B$ (curva cheia) e $d = 1,5 a_B$ (curva tracejada). Os cálculos foram feitos tomando-se $\Delta_d = 0,2 a_B$.

4.2 Resultados experimentais e discussão

Apresentamos nesta seção, como exemplo para o cálculo dos parâmetros característicos da amostra, três amostras δ -dopadas de InP. Essas amostras foram sujeitas a campos magnéticos variando de 0 a 14 Teslas, a 4.2 K, e foram efetuadas medidas de magnetoresistência com o campo magnético paralelo aos planos de doadores. Anteriormente à medição da magnetoresistência, as amostras foram iluminadas com um led vermelho de modo a que as impurezas residuais ionizadas fossem neutralizadas.

Uma dessas amostras (No 124) continha um único poço δ . As outras duas amostras continham 20 poços δ (No 120 e 121). As amostras foram crescidas de tal modo que a densidade nominal de doadores na amostra No 121 fosse a mesma que a da amostra No 124, e que a amostra No 120 possuísse uma dopagem menor.

Figura 4.3: Espectro de SdH (a) e sua transformada de Fourier de campo inverso (b) para a amostra No. 124; igualmente, (c) e (d) para a amostra No. 120; (e) e (f) para a amostra No. 121.

A Figura 4.3(a) mostra o espectro de Shubnikov-de Haas para a amostra No 124 e a Figura 4.3(b) mostra a transformada de Fourier de (a) em campo inverso. Os picos vistos em 9,5, 22,6 e em 65,6 T correspondem respectivamente à ocupação das subbandas E3, E2 e E1. Como mostrado por Skuras *et al* [50], a largura a meia altura de um pico de Fourier pode ser associado à mobilidade quântica dos portadores na subbanda correspondente: o decréscimo gradativo na largura quando observa-se a sequência a partir de E3 até E1 reflete uma mobilidade crescente dos portadores, em concordância com observações prévias de alguns autores [11, 44]. Esse efeito é responsável por uma pequena incerteza nas posições medidas para os picos na transformada de Fourier associados às minibandas mais excitadas, conforme pode ser visto na Tabela 4.2.

Amostra	Camadas	d (Å)	Medidos			Calculados			N_d (10^{12} cm^{-2})	Δ_d (Å)
			B1 (T)	B2 (T)	B3 (T)	B1 (T)	B2 (T)	B3 (T)		
124	1	-	$65,6 \pm 1,0$	$22,6 \pm 0,5$	$9,5 \pm 0,1$	65,2	25,4	9,3	$4,94 \pm 0,05$	30 ± 6
120	20	270	$19,6 \pm 1,1$	$8,1 \pm 0,3$	-	19,6	8,1	-	$1,14 \pm 0,06$	53 ± 15
121	20	400	$64,4 \pm 1,9$	$23,6 \pm 1,2$	$11,3 \pm 0,3$	64,4	25,7	11,0	$4,89 \pm 0,01$	39 ± 7

Tabela 4.2: *Frequências das oscilações na magnetoresistência de estruturas δ -dopadas InP:Si. Os valores experimentais são médias experimentais de cinco medidas efetuadas a 4,2 K. Os valores de N_d e Δ_d e suas incertezas foram estimados de cada valor medido para Bi*

Nas super-redes, entretanto, os elétrons nas minibandas mais excitadas estão deslocalizados podendo ocorrer uma maior sobreposição das funções de onda com os planos de impureza adjacentes. Isso pode implicar numa diminuição da mobilidade da eventual minibanda comparativamente ao caso do poço isolado [51, 52]. Nos casos analisados aqui, os picos de Fourier são mais alargados comparativamente ao poço isolado e conseqüentemente a incerteza relativa comparada para as minibandas é maior, como pode ser visto na tabela 4.2.

De modo a comparar os resultados experimentais às predições teóricas, a massa efetiva e a constante dielétrica para o InP foram tomados da literatura como sendo $m = 0,08m_0$ [53] e $\epsilon = 11,8$ [54], respectivamente. Utilizando a densidade de portadores por período da super-rede N_d e a dispersão característica dos dopantes ao redor do plano de dopagem Δ_d como parâmetros de entrada, as frequências teóricas previstas para o espectro de Shubnikov-de Haas Bi foram calculadas numericamente. Os parâmetros de entrada (N_d e Δ_d) nos cálculos numéricos foram variadas até que as frequências de SdH calculadas concordassem com as frequências observadas experimentalmente. Os valores para N_d e Δ_d para cada amostra foram tomados como sendo aqueles que forneciam a melhor concordância, no sentido de mínimos quadrados, entre as frequências experimentais e teóricas. Ou seja, dada a função

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{B_{iF}^{\text{EXP}} - B_{iF}^{\text{TEO}}}{\Delta B_{iF}^{\text{EXP}}} \right)^2$$

os valores de N_d e Δ_d ideais para descreverem o espectro energético de uma certa estrutura são aqueles que minimizam χ^2 .

As incertezas nos valores de N_d e Δ_d foram estimadas a partir das incertezas experimentais para os valores Bi. A Tabela 4.2 resume os resultados da experiência e dos cálculos para as amostras em questão: uma comparação entre as frequências de oscilação de SdH medidas e calculadas, e os melhores valores ajustados para N_d e Δ_d .

A espessura característica para os planos δ -dopados estimada da análise do espectro SdH é consistente para todas as amostras. O valor ligeiramente maior de δ e a maior incerteza obtida foram para a amostra No 120, se comparados às amostras No 121 e No 124, é provavelmente devido a que, para essa amostra, apenas dois picos são observados na transformada de Fourier das oscilações de SdH. Isso torna o procedimento de ajuste para a extração de N_d e Δ_d menos confiável se comparado ao procedimento para as amostras No 121 e No 124.

4.3 Medidas CV

A Figura 4.4(a) mostra o perfil CV para a amostras No 121 obtido pela medida CV com corrosão. Do perfil CV, o período da super-rede foi determinado como sendo $400 \pm 15 \text{ \AA}$.

Figura 4.4: Espectro CV para a amostra No. 121: (a) é o resultado obtido alternando corrosão da amostra e a tomada de dados CV. (b) é o espectro CV, sem a corrosão da amostra, o qual permite visualizar a distribuição de carga ao redor do primeiro plano de dopante; a linha tracejada é resultado do cálculo teórico utilizando os valores de N_d e Δ_d obtidos do espectro de SdH

O espectro CV mostrado pela linha cheia foi obtido de um varrimento CV da amostra a qual foi corroída anteriormente ao começo da medida. A curva tracejada na Figura 4.4 é o espectro CV teórico para a amostra No. 121, gerado com os parâmetros dados na Tabela 4.2, utilizando-se a relação

$$N_{CV} = 4\pi C^3 \frac{dV}{dC}$$

A discrepância entre os valores absolutos teórico e experimental de N_{CV} , como pode ser observado na Fig. 4.4(b) tem como origem provável o fato de que as medidas CV serem realizadas à temperatura ambiente, enquanto que as medidas de SdH foram realizadas a 4.2 K, e também que N_d possa exibir alguma dependência com a temperatura. Essa discrepância pode ter origem também no fato de que o espectro CV é obtido a partir de uma corrosão prévia da superfície: essa técnica de corrosão introduz uma incerteza na área do contato Schottky entre o semiconductor e o eletrólito líquido. Como consequência da incerteza da área do contato

Schottky, uma incerteza experimental no valor de N_{CV} é introduzida[18]. Apesar disso, a largura a meia altura do espectro CV não deve ser dependente dessas fontes de erro, e o mesmo pode fornecer uma estimativa independente da espessura do plano de doadores, que por sua vez pode ser utilizada para avaliar a precisão de Δ_d extraído a partir da análise do espectro de SdH da amostra.

A largura a meia altura do pico CV da Fig. 4.4(b) é de 70 Å; a largura do espectro teórico, mostrado na Fig. 4.4 pela linha tracejada, reproduz esse resultado. Portanto, a largura característica da camada de doadores estimada do espectro SdH está em excelente acordo com aquela obtida a partir do espectro CV.

4.4 Conclusões

Foi mostrado que a experiência de SdH pode servir para o propósito de determinar os parâmetros característicos de uma super-rede: a distribuição de portadores pelas várias minibandas eletrônicas, a espessura da camada dopada e o período da super-rede. Neste Capítulo, a análise do espectro de SdH foi restringida à estimativa da densidade de portadores N_d e à estimativa da espessura da camada dopada, Δ_d , sendo o período da super-rede o valor obtido a partir das medidas CV. O valor de Δ_d obtido da análise do espectro de SdH está em bom acordo com o valor predito pela técnica CV.

Capítulo 5

Teoria para a blindagem e mobilidades eletrônicas em sistemas 2D e quasi-3D

Admita-se, inicialmente, que uma partícula positivamente carregada é posta em um gás de elétrons: ela atrairá os elétrons para a sua vizinhança, criando assim uma região de excesso de carga negativa em seu redor, o qual irá diminuir a intensidade do campo da carga positiva em regiões mais afastadas. A essa diminuição da intensidade do campo por acúmulo de cargas chama-se blindagem eletrostática.

Quando o potencial em sistemas semicondutores degenerados é bi-dimensional, ocorre uma distribuição da população eletrônica, liberada pelas impurezas, em minibandas ou subbandas. Devido ao caráter quantizante do potencial, é esperado que a posição média das funções de onda correspondentes às populações distintas de portadores varie em relação aos centros espalhadores. Por outro lado, a própria atenuação do potencial coulombiano dos centros espalhadores por populações mais localizadas em suas proximidades (menos energéticas) reflete-se em populações menos localizadas (mais energéticas).

A observação deste tipo de fenômeno é relativamente recente em semicondutores e foi praticamente possível de ser observado a partir do advento das técnicas de dopagem planar. Até então, em sistemas com dopagem uniforme, somente era esperado que o espalhamento de um portador fosse dependente de sua energia e não da sua localização espacial, já que as funções de onda nesses sistemas tri-dimensionais são totalmente deslocalizadas na rede cristalina.

O fenômeno de blindagem eletrostática em sistemas tri-dimensionais foi bastante estudado e hoje faz parte da maioria dos livros textos de Estado Sólido (por exemplo, o livro de Ashcroft e Mermin[55]). Esse assunto é geralmente tratado a partir de um enfoque semi-clássico, como a aproximação de Thomas-Fermi, ou a partir de um enfoque quântico, como a aproximação de Lindhardt ou RPA (*Random-phase approximation*).

Em sistemas bi-dimensionais, comparativamente aos tri-dimensionais, tanto a literatura como a quantidade de dados experimentais acumulados é relativamente escassa, sendo que as obras de referência são o livro de Bastard[19] e a revisão de Ando, Fowler e Stern[56].

O objetivo do presente capítulo é apresentar uma síntese das duas teorias citadas. Tanto a teoria de Thomas-Fermi quanto a teoria RPA conduzem a formatos de blindagem eletrostática bastante diferentes. Os resultados obtidos para ambas as teorias serão então comparados nos capítulos posteriores.

5.1 Teoria RPA para a mobilidade de sistemas 2D

O formato do potencial blindado devido a uma impureza, $\varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$, pode ser separado em duas componentes: a primeira, que se chama de potencial externo e que é o potencial devido apenas à carga positiva isolada, $\varphi^{\text{EXT}}(\mathbf{r})$, e a segunda, que chama-se de potencial induzido, $\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r})$, tal que

$$\varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) = \varphi^{\text{EXT}}(\mathbf{r}) + \varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r})$$

O potencial externo satisfaz a equação de Poisson

$$-\nabla^2 \varphi^{\text{EXT}}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\kappa}{\epsilon} \rho^{\text{EXT}}(\mathbf{r})$$

onde $\rho^{\text{EXT}}(\mathbf{r})$ é a densidade de carga positiva. O potencial total, $\varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$, produzido pela carga positiva e cargas negativas, analogamente, satisfaz

$$-\nabla^2 \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\kappa}{\epsilon} \rho^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$$

com

$$\rho^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) = \rho^{\text{EXT}}(\mathbf{r}) + \rho^{\text{IND}}(\mathbf{r})$$

sendo $\rho^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$ a carga total e $\rho^{\text{IND}}(\mathbf{r})$ a carga induzida.

O potencial blindado $\varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$ pode ser obtido através da solução da hamiltoniana total

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{\text{sc}}(\mathbf{r}) + V^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) \right] \Xi_{\xi}^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) = E_{\xi}^{\text{TOT}} \Xi_{\xi}^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$$

onde $V^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) = -e\varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$ e $V_{\text{sc}}(\mathbf{r})$ é o potencial autoconsistente bi-dimensional no qual a impureza está imersa. O potencial autoconsistente $V_{\text{sc}}(\mathbf{r})$ possui como hamiltoniana

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{\text{sc}}(\mathbf{r}) \right] \Xi_{\xi}(\mathbf{r}) = E_{\xi} \Xi_{\xi}(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

As autofunções $\Xi_{\xi}^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$, em termos das autofunções $\Xi_{\xi}(\mathbf{r})$, soluções da hamiltoniana do potencial autoconsistente, em série perturbativa até primeira ordem, serão dadas por

$$\Xi_{\xi}^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) = \Xi_{\xi}(\mathbf{r}) + \sum_{\xi' \neq \xi} \frac{\langle \xi' | V^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | \xi \rangle}{E_{\xi} - E_{\xi'}} \Xi_{\xi'}(\mathbf{r}) \quad (5.2)$$

onde $\Xi_{\xi}(\mathbf{r}) = |\xi\rangle$

A carga induzida será dada pela diferença entre a carga total e a carga externa

$$\rho^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = -\epsilon \sum_{\xi} \left(|\Xi_{\xi}^{\text{TOT}}(\mathbf{r})|^2 - |\Xi_{\xi}(\mathbf{r})|^2 \right) f(E_{\xi})$$

Substituindo $\Xi_{\xi}^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$ pelo resultado da Eq. (5.2), e ignorando os termos de ordem superior ou igual a dois em $V^{\text{TOT}}(\mathbf{r})$, obtém-se

$$\rho^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = e^2 \sum_{\xi, \xi', \xi \neq \xi'} < \xi' | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | \xi > \Xi_{\xi'}(\mathbf{r}) \Xi_{\xi}^*(\mathbf{r}) \frac{f(E_{\xi}) - f(E_{\xi'})}{E_{\xi} - E_{\xi'}} \quad (5.3)$$

A partir da relação eletrostática entre o potencial induzido e a carga induzida

$$\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = \kappa \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\rho^{\text{IND}}(\mathbf{r}')}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (5.4)$$

estabelece-se a relação genérica entre φ^{TOT} e φ^{IND} , pela substituição da Eq. (5.3) na Eq. (5.4)

$$\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = \kappa e^2 \sum_{\xi, \xi', \xi \neq \xi'} < \xi' | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | \xi > \frac{f(E_{\xi}) - f(E_{\xi'})}{E_{\xi} - E_{\xi'}} \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\Xi_{\xi'}(\mathbf{r}) \Xi_{\xi}^*(\mathbf{r})}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (5.5)$$

5.1.1 Blindagem eletrostática em um sistema 2D

Na introdução deste capítulo calculou-se genericamente a relação entre o potencial induzido e o potencial total. Nesta seção aplicaremos os resultados obtidos para o caso particular de um sistema bi-dimendional. Num sistema 2D, as funções de onda, soluções de uma hamiltoniana do tipo (5.1), podem ser escritas como

$$|\xi\rangle = |n, \mathbf{k}_{\perp}, \sigma\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{S}} \chi_n(z) \quad (5.6)$$

e, a relação de dispersão de energia é dada por

$$E_{\xi} = E_n(k_{\perp}) = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m}$$

Substituindo estas relações na Eq. (5.5), obtém-se para o potencial induzido a expressão

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) &= \kappa e^2 \sum_{n, \mathbf{k}_{\perp}, \sigma} \sum_{n', \mathbf{k}'_{\perp}, \sigma'} < n' \mathbf{k}'_{\perp} \sigma' | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | n \mathbf{k}_{\perp} \sigma > \frac{f[E_n(k_{\perp})] - f[E_{n'}(k'_{\perp})]}{E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2}{2m}(k_{\perp}^2 - k'_{\perp}{}^2)} \\ &\times \int \frac{d^3 \mathbf{r}'}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}'}}{\sqrt{S}} \chi_n(z') \frac{e^{-i\mathbf{k}'_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}'}}{\sqrt{S}} \chi_{n'}^*(z') \end{aligned}$$

Re-arranjando a expressão, levando em conta que $< \sigma | \sigma' > = \delta_{\sigma\sigma'}$, tem-se que

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) &= 2 \frac{\kappa e^2}{\epsilon} \sum_{n, \mathbf{k}_{\perp}} \sum_{n', \mathbf{k}'_{\perp}} < n' \mathbf{k}'_{\perp} | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | n \mathbf{k}_{\perp} > \frac{f[E_n(k_{\perp})] - f[E_{n'}(k'_{\perp})]}{E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2}{2m}(k_{\perp}^2 - k'_{\perp}{}^2)} \\ &\times \int dz' \chi_n(z') \chi_{n'}^*(z') \times \frac{1}{S} \int d^2 \boldsymbol{\rho}' \frac{e^{-i(\mathbf{k}_{\perp} - \mathbf{k}'_{\perp}) \cdot \boldsymbol{\rho}'}}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')^2 + (z - z')^2}} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Introduzindo a variável $\mathbf{q} = \mathbf{k}_{\perp} - \mathbf{k}'_{\perp}$ juntamente com a notação

$$A_{nn'}(\mathbf{k}_{\perp}, \mathbf{q}) = \frac{2}{S} \frac{f[E_n(k_{\perp})] - f[E_{n'}(k_{\perp} - \mathbf{q})]}{E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2}{2m}[k_{\perp}^2 - (\mathbf{k}_{\perp} + \mathbf{q})^2]}$$

e com o resultado

$$\int d^2 \rho' \frac{e^{-i(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}'_\perp) \cdot \boldsymbol{\rho}'}}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')^2 + (z - z')^2}} = \frac{2\pi}{q} e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} e^{-q|z - z'|} \quad (5.8)$$

a Eq. (5.7) reduz-se a

$$\begin{aligned} \varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) &= \frac{2\kappa e^2}{\epsilon S} \sum_{n\mathbf{k}_\perp} \sum_{n'\mathbf{q}} \langle n'\mathbf{k}_\perp + \mathbf{q} | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | n\mathbf{k}_\perp \rangle A_{nn'}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} \times \\ &\times \int dz' \frac{2\pi}{q} e^{-q|z - z'|} \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') \end{aligned} \quad (5.9)$$

O elemento de matriz

$$\varphi_{nn'}^{\text{TOT}} = \langle n'\mathbf{k}_\perp + \mathbf{q} | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | n\mathbf{k}_\perp \rangle \quad (5.10)$$

pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q) &= \int d^2 \boldsymbol{\rho} \, dz \, \chi_{n'}^*(z) \frac{e^{-i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{S}} \varphi^{\text{TOT}}(\boldsymbol{\rho}, z) \chi_n(z) \frac{e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{S}} \\ &= \int dz \, \chi_{n'}^*(z) \chi_n(z) \varphi^{\text{TOT}}(q, z) \end{aligned} \quad (5.11)$$

onde

$$\varphi^{\text{TOT}}(q, z) = \frac{1}{S} \int d^2 \boldsymbol{\rho} \, e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} \varphi^{\text{TOT}}(\boldsymbol{\rho}, z)$$

Substituindo o resultado da equação Eq. (5.11) na Eq. (5.9), obtém-se que

$$\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = \frac{\kappa e^2}{\epsilon} \sum_{n\mathbf{k}_\perp} \sum_{n'\mathbf{q}} \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q) A_{nn'}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{q}) \frac{2\pi}{q} e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') e^{-q|z - z'|}$$

ou

$$\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} \frac{2\pi \kappa e^2}{\epsilon q} \sum_{nn'} \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q) A_{nn'}(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{\infty} dz' \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') e^{-q|z - z'|} \quad (5.12)$$

onde

$$A_{nn'}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}_\perp} A_{nn'}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{q})$$

Introduzindo aqui a transformada de Fourier bi-dimensional de $\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r})$

$$\varphi^{\text{IND}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \varphi^{\text{IND}}(\mathbf{q}, z) e^{i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}$$

e comparando esta relação com a Eq. (5.12) obtemos

$$\varphi^{\text{IND}}(q, z) = \frac{2\pi\kappa e^2}{\epsilon q} \sum_{nn'} \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q) A_{nn'}(q) \int_{-\infty}^{\infty} dz' \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') e^{-q|z-z'|}$$

Definindo-se $\varphi_{mm'}^{\text{IND}}(q)$ por

$$\varphi_{mm'}^{\text{IND}}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \chi_{m'}^*(z) \chi_m(z) \varphi^{\text{IND}}(q, z)$$

e introduzindo o *fator de forma coulombiano* $T_{mm',nn'}(q)$ como

$$T_{mm',nn'}(q) = \frac{2\pi\kappa e^2}{\epsilon q} \int_{-\infty}^{\infty} dz dz' \chi_{m'}^*(z) \chi_m(z) \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') e^{-q|z-z'|} \quad (5.13)$$

obtem-se

$$\varphi_{mm'}^{\text{IND}}(q) = \sum_{nn'} A_{nn'}(q) T_{mm',nn'}(q) \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)$$

5.1.2 O tensor dielétrico $\epsilon_{mm',nn'}(q)$

Tendo em conta que

$$\varphi_{mm'}^{\text{TOT}}(q) = \varphi_{mm'}^{\text{EXT}}(q) + \varphi_{mm'}^{\text{IND}}(q)$$

é conveniente introduzir-se a noção e definição do *tensor dielétrico* $\epsilon_{mm',nn'}(q)$,

$$\varphi_{mm'}^{\text{EXT}}(q) = \sum_{nn'} \epsilon_{mm',nn'}(q) \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)$$

onde $\epsilon_{mm',nn'}(q)$ é dado por

$$\begin{aligned} \epsilon_{mm',nn'}(q) &= \delta_{nn',mm'} - A_{nn'}(q) T_{mm',nn'}(q) \\ \delta_{nn',mm'} &= \delta_{nm} \delta_{n'm'} \end{aligned} \quad (5.14)$$

onde $\delta_{\alpha\beta}$ é o símbolo de Kronecker.

5.1.3 Simetrias e propriedades de $T_{nn',mm'}$

Consideraremos nesta seção as simetrias da componente $T_{nn',mm'}$ de $\epsilon_{nn',mm'}$

$$T_{mm',nn'}(q) = \frac{2\pi\kappa e^2}{\epsilon q} \int_{-\infty}^{\infty} dz dz' \chi_{m'}^*(z) \chi_m(z) \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') e^{-q|z-z'|}$$

Por inspeção, T possui as simetrias

$$T_{nn',mm'}(q) = [T_{n'n,m'm}(q)]^* = T_{mm',nn'}(q)$$

Para funções de onda reais, tem-se que $T_{nn',mm'}(q)$ é invariante por trocas entre seus índices. Adicionalmente, para funções de onda reais com paridade em relação a um ponto do eixo z

$$T_{nn',mm'}(q) = 0$$

para $n + n' + m + m' = \text{número ímpar}$.

Estas simetrias e propriedades são importantes levando-se em conta o custo computacional de um cálculo típico para uma estrutura. Em particular, o custo computacional na avaliação de T é significativo já que são calculadas integrais duplas em função do módulo do vetor de onda q .

5.1.4 O potencial externo para N impurezas

Nos cálculos efetuados até então pressupôs-se que o espalhamento era efetuado por um centro espalhador com carga unitária. Esse resultado pode ser generalizado se considerarmos um N impurezas rasas de carga Z , localizadas nas coordenadas $\mathbf{R}_i$. No cálculo de $\varphi^{\text{EXT}}(\mathbf{r}, z)$, ou seja, na ausência de blindagem eletrônica, consideremos então esse conjunto de impurezas rasas. Logo

$$\varphi^{\text{EXT}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \frac{\kappa Z e}{\epsilon \sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)^2 + (z - z_i)^2}}$$

que, utilizando o resultado da Eq. (5.8), transforma-se em

$$\varphi^{\text{EXT}}(q, z) = \frac{2\pi\kappa Z e}{\epsilon q S} \sum_i e^{-iq \cdot \mathbf{r}_i} e^{-q|z - z_i|}$$

5.1.5 Média configuracional

Um resultado que será utilizado quando do cálculo das mobilidades é a grandeza

$$|\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)|^2$$

onde

$$\begin{aligned} \varphi_{mm'}^{\text{TOT}}(q) &= \sum_{nn'} \epsilon_{mm',nn'}^{-1}(q) \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q) \\ \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q) &= \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q, \mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) \end{aligned}$$

e é determinado a partir da localização espacial específica de N impurezas, cada uma com coordenadas $\mathbf{R}_i = (\mathbf{r}, z)_i$.

Pode-se proceder ao cálculo de $|\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)|^2$ utilizando-se o fato de que as impurezas estão aleatoriamente dispostas no cristal hospedeiro segundo uma certa distribuição de probabilidades. Em particular, seja $P(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) d^3\mathbf{R}_1 \cdots d^3\mathbf{R}_N$ a probabilidade da impureza 1 ser encontrada no volume $d^3\mathbf{R}_1$, da impureza 2 no volume $d^3\mathbf{R}_2$ e assim por diante. O integral de uma grandeza $S(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N)$ pode ser calculado "estatisticamente" por

$$\langle S(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) \rangle_{\text{med}} = \overline{S(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N)} = \int d^3\mathbf{R}_1 \cdots d^3\mathbf{R}_N P(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) S(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N)$$

onde $\langle S \rangle_{\text{med}}$ é a *média estatística ou configuracional* de $S(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N)$. Para uma densidade de impurezas suficientemente baixa, de tal modo que possamos considerar que a probabilidade de uma impureza ser colocada num determinado sítio i *independe* da configuração das outras impurezas (*impurezas não correlacionadas*),

$$P(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) = P(\mathbf{R}_1) \cdots P(\mathbf{R}_N)$$

A condição de normalização para uma dopagem do tipo bi-dimensional é

$$P(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) = \frac{1}{S} g(z)$$

$$\int dz g(z) = 1$$

onde S é a área da base do cristal.

Para que o cálculo de $|\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)|^2$ seja efetuado de forma independente das coordenadas espaciais das impurezas, essa grandeza será substituída por sua média estatística. Essa aproximação é justificada em sistemas com uma concentração grande de impurezas[57].

Utilizando-se os resultados desta seção, chega-se a

$$\begin{aligned} \overline{|\varphi_{mm'}^{\text{TOT}}(q)|^2} &= \overline{|\sum_{nn'} \epsilon_{mm',nn'}^{-1}(q) \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q)|^2} \\ &= \sum_{pp'} \sum_{nn'} [\epsilon_{mm',pp'}^{-1}(q)]^* \epsilon_{mm',nn'}^{-1}(q) \overline{[\varphi_{pp'}^{\text{EXT}}(q)]^* \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q)} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Fazendo

$$S(\mathbf{R}_1 \cdots \mathbf{R}_N) = [\varphi_{pp'}^{\text{EXT}}(q)]^* \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q)$$

obtém-se a média estatística para o potencial total

$$\begin{aligned} \overline{[\varphi_{pp'}^{\text{EXT}}(q)]^* \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q)} &= \frac{N_1}{S} \left(\frac{2\pi\kappa Ze}{\epsilon q} \right)^2 \int dz dz' \chi_{nn'}^*(z) \chi_{nn'}(z) \chi_p(z') \chi_{p'}^*(z') \\ &\times F_d(q, z, z') \end{aligned}$$

onde $F_d(q, z, z')$ é o *fator de forma da distribuição de impurezas* definido como

$$F_d(q, z, z') = \int dz_1 g(z_1) e^{-iq|z-z_1|} e^{-iq|z'-z_1|}$$

5.1.6 O fator de forma $F_d(z, z', q)$

Nesta seção, alguns resultados para distribuições de impurezas possíveis em um cristal hospedeiro serão considerados. Em particular, estando os átomos doadores localizados em um plano de espessura nula no cristal, distribuídos segundo uma distribuição gaussiana e segundo uma distribuição uniforme num intervalo finito.

Propriedades de simetria

Como referido na seção anterior, é importante considerarmos todas as possíveis propriedades de simetria das grandezas envolvidas no cálculo numérico das mobilidades devido ao alto custo computacional deste processo. No caso do fator de forma $F_d(q, z, z')$, definido como

$$F_d(q, z, z') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 g(z_1) e^{-q|z-z_1|} e^{-q|z'-z_1|}$$

tem-se, como propriedade geral

$$F_d(q, z, z') = F_d(q, z', z)$$

e, em particular para funções de distribuição $g_d(z)$ pares, como será considerado posteriormente,

$$F_d(q, -z, -z') = F_d(q, z, z')$$

Distribuição δ ideal

Num semiconductor δ -dopado ideal, os átomos doadores estarão localizados num plano no cristal hospedeiro. Neste sistema idealizado, a distribuição unitária das impurezas é dada por

$$g_d(z) = \delta(z) \quad (5.16)$$

que conduz a um fator de forma de impureza

$$F_d(q, z, z') = e^{-q(|z|+|z'|)} \quad (5.17)$$

Distribuição gaussiana

Entretanto, em sistemas reais, o perfil de dopagem será de espessura não nula devido à efeitos de difusão térmica das impurezas quando do crescimento. Uma abordagem realística é distribuir as impurezas em torno do plano $z = 0$ por uma função gaussiana de largura a meia altura (FWHM) $\Delta_d = 2\beta\sqrt{\ln 2}$

$$g_d(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi\beta^2}} e^{-z^2/\beta^2} \quad (5.18)$$

onde $\beta = 2\sqrt{D\tau}$, sendo D o coeficiente e τ o tempo de difusão[6]. Para essa distribuição de doadores, o fator de forma de impureza fica

$$F_d(q, z, z') = \begin{cases} \frac{e^{-q(z+z'-q\beta^2)}}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{q\beta^2-z'}{\beta}\right) + \frac{e^{q(z+z'+q\beta^2)}}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{q\beta^2+z}{\beta}\right) \\ + \frac{e^{-q(z+z')}}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z'}{\beta}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{\beta}\right) \right] \end{cases} \quad z > z'$$

sendo que $F_d(q, z, z')$ para $z < z'$ é obtido comutando-se z com z' .

Distribuição uniforme em um intervalo

Outra abordagem plausível a ser considerada é o perfil de dopagem ser retangular com uma certa espessura, de modo que

$$g_d(z) = \begin{cases} 1/\Delta_d & |z| < \Delta_d/2 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Neste caso, o fator de forma de impureza fica [58]

$$F_d(q, z, z') = \begin{cases} \frac{e^{-q(z+z')}}{q\Delta_d^2} \cosh(q\Delta_d) & z, z' > z_1 \\ e^{-q(z'-z)} & z < z_1 < z' \\ \frac{e^{q(z+z')}}{-q\Delta_d^2} \cosh(-q\Delta_d) & z, z' < z_1 \\ e^{-q(z'-z)} & z' < z_1 < z \end{cases}$$

5.1.7 Resumo

Podemos sumarizar os resultados obtidos até agora como se segue.

Da aproximação RPA:

$$\varphi_{mm'}^{\text{EXT}}(q) = \sum_{nn'} \epsilon_{mm',nn'}(q) \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)$$

onde

$$\begin{aligned} \epsilon_{mm',nn'}(q) &= \delta_{nn',mm'} - A_{nn'}(q) T_{mm',nn'}(q) \\ A_{nn'}(q) &= \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\perp} \frac{f[E_n(\mathbf{k}_\perp)] - f[E_{n'}(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{q})]}{E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}_\perp^2 - (\mathbf{k}_\perp + \mathbf{q})^2)} \\ T_{mm',nn'}(q) &= \frac{2\pi\kappa e^2}{\epsilon q} \int_{-\infty}^{\infty} dz dz' \chi_{m'}^*(z) \chi_m(z) \chi_{n'}^*(z') \chi_n(z') e^{-q|z-z'|} \end{aligned} \quad (5.19)$$

e

$$\begin{aligned} \varphi_{mm'}(q) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \chi_{m'}^*(z) \chi_m(z) \varphi(q, z) \\ \varphi_{mm'}(q, z) &= \frac{1}{S} \int d^2 \varrho e^{-iq \cdot \varrho} \varphi(\varrho, z) \end{aligned}$$

onde φ pode ser φ^{TOT} , φ^{IND} ou φ^{EXT} .

Da aproximação estatística:

$$|\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)|^2 = \overline{|\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)|^2}$$

com

$$\begin{aligned} \overline{[\varphi_{pp'}^{\text{EXT}}(q)]^* \varphi_{nn'}^{\text{EXT}}(q)} &= \frac{N_1}{S} \left(\frac{2\pi\kappa Z e}{\epsilon q} \right)^2 \int dz dz' \chi_{n'}^*(z) \chi_{n'}(z) \chi_p(z') \chi_p^*(z') \\ &\times F_d(q, z, z') \end{aligned}$$

e

$$F_d(q, z, z') = \int dz_1 g_d(z_1) e^{-q|z-z_1|} e^{-q|z'-z_1|}$$

5.1.8 Cálculo das mobilidades na aproximação RPA

Utilizando a regra de ouro de Fermi, o tempo de meia-vida de um estado eletrônico pertencente à n -ésima subbanda com momento $\mathbf{k}_\perp$ é dado por [29, 57]

$$\tau_Q^{-1}(n, \mathbf{k}_\perp) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n' \mathbf{k}'_\perp \sigma'} |\langle n' \mathbf{k}'_\perp \sigma' | -e\varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | n \mathbf{k}_\perp \sigma \rangle|^2 \delta[E_n(k_\perp) - E_{n'}(k'_\perp)]$$

Como anteriormente, efetuando a mudança de variável $\mathbf{q} = \mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}'_\perp$, teremos

$$\tau_Q^{-1}(n, \mathbf{k}_\perp) = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \sum_{n' \mathbf{q}} |\langle n' \mathbf{k}_\perp + \mathbf{q} | \varphi^{\text{TOT}}(\mathbf{r}) | n \mathbf{k}_\perp \rangle|^2 \delta[E_n(k_\perp) - E_{n'}(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{q})]$$

Pelas Eqs. (5.10) e (5.11), isto pode ser escrito como

$$\tau_Q^{-1}(n, \mathbf{k}_\perp) = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \sum_{n' \mathbf{q}} |\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(\mathbf{q})|^2 \delta[E_n(k_\perp) - E_{n'}(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{q})]$$

ou, equivalentemente,

$$\tau_Q^{-1}(n, \mathbf{k}_\perp) = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \sum_{n' \mathbf{k}'_\perp} \varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}'_\perp|) \varphi_{n'n}^{\text{TOT}}(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}'_\perp|) \delta[E_n(k_\perp) - E_{n'}(k'_\perp)] \quad (5.20)$$

onde levou-se em conta o resultado advindo da Eq. (5.11)

$$[\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(\mathbf{q})]^* = \varphi_{n'n}^{\text{TOT}}(\mathbf{q})$$

A soma em $\mathbf{k}'_\perp$ pode ser substituída por

$$\sum_{\mathbf{k}'_\perp} \rightarrow \int \frac{d^2 \mathbf{k}'_\perp}{(2\pi/S)^2}$$

e $\delta[E_n(k_\perp) - E_{n'}(k'_\perp)]$ por

$$\delta[E_n(k_\perp) - E_{n'}(k'_\perp)] = \frac{mk'_{\perp o}}{\hbar^2} \delta(k'_\perp - k'_{\perp o})$$

onde $k'_{\perp o}$ é a raiz positiva da equação

$$E_n(k_\perp) = E_{n'}(k'_\perp)$$

Substituindo estes resultados na Eq. (5.20), teremos

$$\tau_Q^{-1}(n, \mathbf{k}_\perp) = \frac{e^2 m S}{2\pi \hbar^3} \frac{1}{k'_{\perp o}} \sum_{n'} \int d^2 \mathbf{k}'_\perp |\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(|\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}'_\perp|)|^2 \delta(k'_\perp - k'_{\perp o}) \quad (5.21)$$

5.1.9 Resultados para $T=0$

Até agora os resultados obtidos, dentro das aproximações efetuadas, são os mais gerais possíveis e serão particularizados para $T=0$. Essa particularização é importante devido ao fato de que a obtenção das mobilidades quânticas é praticamente possível em baixas temperaturas a partir da análise da parte oscilatória da magneto-resistência. Esse fenômeno quântico, como tantos outros, dependem da densidade de estados na energia de Fermi com o campo magnético: quanto mais fortes forem as singularidades de van Hove originadas pela quantização proveniente do campo magnético mais fortes serão os efeitos magneto-oscilatórios.

Em sistemas bi-dimensionais, os elétrons que contribuem para a condução são aqueles da superfície de Fermi. Portanto, doravante, o vetor de onda k_{Fn} e energia E_{Fn} serão denominados como, respectivamente, *vetor de onda de Fermi e energia de Fermi da enésima subbanda*. Definindo-se o ângulo entre os vetores k_{Fn} e $k_{Fn'}$ por ϕ , teremos finalmente que

$$\tau_Q^{-1}(n, k_{\perp}) = \frac{e^2 m S}{2\pi \hbar^3} \sum_{n'} \int_0^{2\pi} d\phi |\varphi_{nn'}^{\text{TOT}}(q)|^2 \quad (5.22)$$

onde

$$q = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \left[E_{Fn} + E_{Fn'} - 2\sqrt{E_{Fn}E_{Fn'}} \cos \phi \right]^{1/2}$$

ou

$$q = (k_{Fn}^2 + k_{Fn'}^2 - 2k_{Fn}k_{Fn'} \cos \phi)^{1/2} \quad (5.23)$$

As mobilidades de transporte das subbandas eletrônicas, $\tau_T(i)$, são obtidas, de acordo com Siggia e Kwok [58], da solução do sistema de equações

$$\sum_{i'} \mathcal{K}_{ii'} \tau_T(i') = E_{Fi} \quad (5.24)$$

onde

$$\mathcal{K}_{ii'} = \delta_{ii'} \sum_j \mathcal{K}_{ij}^{(1)} - \mathcal{K}_{ii'}^{(2)} \quad (5.25)$$

com

$$\mathcal{K}_{ii'}^{(1)} = \frac{e^2 m S}{2\pi \hbar^3} k_{Fi}^2 \int_0^{\pi} d\phi |\varphi_{ii'}^{\text{TOT}}(q_{ii'})|^2 \quad (5.26)$$

e

$$\mathcal{K}_{ii'}^{(2)} = \frac{e^2 m S}{2\pi \hbar^3} k_{Fi} k_{Fi'} \int_0^{\pi} d\phi |\varphi_{ii'}^{\text{TOT}}(q_{ii'})|^2 \cos \phi \quad (5.27)$$

onde $q_{ii'}$ é dado pela equação (5.23).

Cálculo de $A_{nn'}(q)$ para $T = 0$

É fácil a verificação de que $A_{nn'}(q) = A_{nn'}(q)$. Parte-se da relação

$$A_{nn'}(q') = \frac{2}{S} \sum_{k_{\perp}} \frac{f[E_n(k_{\perp})] - f[E_{n'}(k_{\perp} - q')]}{E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2}{2m}(k_{\perp}^2 - (k_{\perp} + q')^2)} \quad (5.28)$$

onde $q' = \mathcal{O} \cdot q$, sendo $\mathcal{O}$ uma operação unitária de rotação do vetor q . Fazendo-se a transformação arbitrária da variável muda $k_{\perp} = \mathcal{O} \cdot k'_{\perp}$, obtém-se que

$$A_{nn'}(q') = A_{nn'}(q)$$

para qualquer que seja a transformação $\mathcal{O}$, ficando assim provado que $A_{nn'}(q) = A_{nn'}(q)$.

Outro resultado importante é obtido transformando-se a Eq. (5.28) em

$$A_{nn'}(q) = \frac{2}{S} \left\{ \sum_{k_{\perp}} \frac{f[E_n(k_{\perp})]}{E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} k_{\perp} \cdot q} + \frac{f[E_{n'}(k_{\perp})]}{E_{n'} - E_n + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} k_{\perp} \cdot q} \right\}$$

Por inspeção, deste resultado temos que

$$A_{n'n}(q) = A_{nn'}(q)$$

O cálculo de $A_{nn'}(q)$ fornece, para $T=0K$, quando

$$f[E_n(k_{\perp})] = \Theta \left(E_{Fn} - \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} \right),$$

um resultado exato[59]:

$$A_{nn'}(q) = -\frac{m}{\pi \hbar^2} \times \begin{cases} 0 & k_{Fn}, k_{Fn'} < 0 \\ \frac{1}{2} + \frac{k_{Fn'}^2 - k_{Fn}^2}{2q^2} - \frac{1}{2q^2} \sqrt{(q^2 + k_{Fn'}^2 - k_{Fn}^2)^2 - (2qk_{Fn})^2} & k_{Fn'} < 0, k_{Fn} > 0 \\ 1 - \Theta[q - (k_{Fn} + k_{Fn'})] \sqrt{\left(1 - \frac{k_{Fn'}^2 + k_{Fn}^2}{q^2}\right) \left(1 - \frac{k_{Fn'}^2 - k_{Fn}^2}{q^2}\right)} & k_{Fn}, k_{Fn'} > 0 \end{cases} \quad (5.29)$$

5.2 Teoria TF-2D para a blindagem e mobilidades eletrônicas

Na aproximação TF-2D, o potencial blindado de uma impureza com carga positiva, situada em $(\rho_i, 0)$ pode ser calculada para uma carga de blindagem, localizada em $z = 0$ e o resultado é[60, 56, 19]

$$V^{TOT}(q, z, \rho_i) = \frac{e^{-q \cdot \rho_i}}{S} \frac{2\pi}{q + q_s} e^{-q|z|}$$

onde $q_s = 2$ é o vetor de onda de blindagem de Thomas-Fermi, o qual caracteriza uma resposta de blindagem independente da densidade de uma carga eletrônica estritamente bi-dimendional.

De modo a calcular as mobilidades nas subbandas utilizando a Eq. (5.22) e as Eqs. (5.24)-(5.27), é necessário definir as funções de onda das subbandas $\chi_i(z)$ e respectivas energias E_i . Nos estudos que serão feitos das mobilidades no Cap. 6 para poços isolados, as funções de onda e energias, serão obtidas resolvendo-se numericamente a equação (2.5) com o potencial confinante sendo aquele obtido da aproximação de Thomas-Fermi (2.24). Utilizando-se as funções de onda obtidas desta maneira, a média estatística do potencial eletrostático blindado na distribuição de doadores de carga positiva pode ser calculada como

$$\overline{|V_{ii'}^{TOT}(q)|^2} = \frac{N_S}{S} \left(\frac{2\pi}{q+q_s} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dz \chi_{i'}^*(z) \chi_i(z) e^{-q|z|} \right|^2 \quad (5.30)$$

Substituindo as Eqs. (5.30) na Eq. (5.24), obtém-se para $i \neq i'$

$$\mathcal{K}_{ii'} = -2\pi N_S \int_{|k_{Fi}-k_{Fi'}|}^{k_{Fi}+k_{Fi'}} dq \frac{(k_{Fi}^2 + k_{Fi'}^2 - q^2) |Q_{ii'}(q)|^2}{(q+q_s)^2 \left[4k_i^2 - \left(q + \frac{k_{Fi}^2 - k_{Fi'}^2}{q} \right)^2 \right]^{1/2}} \quad (5.31)$$

e para os elementos diagonais

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{ii} = & 2\pi N_S \int_0^{2k_{Fi}} dq \frac{q^2 |Q_{ii}(q)|^2}{(q+q_s)^2 [4k_{Fi}^2 - q^2]^{1/2}} + \\ & 4\pi N_S k_{Fi}^2 \sum_{i' \neq i} \int_{|k_{Fi}-k_{Fi'}|}^{k_{Fi}+k_{Fi'}} dq \frac{(q+q_s)^{-2} |Q_{ii'}(q)|^2}{\left[4k_{Fi}^2 - \left(q + \frac{k_{Fi}^2 - k_{Fi'}^2}{q} \right)^2 \right]^{1/2}} \end{aligned} \quad (5.32)$$

onde

$$Q_{ij}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \chi_i^*(z) \chi_j(z) e^{-q|z|}$$

As equações (5.31) e (5.32) estão na forma obtida por Mezrin e Shik [61], e são convenientes para o cálculo numérico das mobilidades quântica e de transporte de uma subbanda pelo uso das relações (5.24)-(5.27) e (5.22)

Na aproximação TF-2D, a largura não nula da carga de blindagem não é levada em conta, ao contrário do que ocorre na aproximação RPA. Esta diferença pode ser apreciada pelo exame da equação (5.30), a qual conduz a um tensor dielétrico diagonal

$$\epsilon_{ii'mm'}^{TF}(q) = \left(1 + \frac{2\pi}{q} \frac{dN_S}{dE_F} \right) \delta_{im} \delta_{i'm'} \quad (5.33)$$

A Eq. (5.33) é independente do formato da carga de blindagem, em contraste ao tensor dielétrico RPA dado pela Eq. (5.14). É bem conhecido que o limite $q \rightarrow 0$ da aproximação RPA para um sistema quântico confinado conduz a uma aproximação de Thomas-Fermi para um sistema bi-dimensional estrito. A Eq.(5.33) pode ser obtida tomando-se o limite $q \rightarrow 0$ das equações RPA que conduzem à Eq. (5.14) (mas não da Eq. (5.14) diretamente) e assumindo $N_d = E_F/\pi$, o que é válido para um sistema estritamente bi-dimensional, o qual é caracterizado por possuir a carga de blindagem restrita a ocupar o plano das impurezas.

Quando comparados os dois modelos, será visto então a não adequação do modelo TF-2D, apesar de sua simplicidade, para a determinação das mobilidades quântica e de transporte, justamente pelo fato de que o modelo TF-2D não leva em conta a espessura finita da camada de blindagem e subestima a localização das funções de onda das subbandas, prevendo assim mobilidades muito menores do que aquelas obtidas experimentalmente.

5.3 Teoria RPA para a blindagem e mobilidades quânticas em super-redes periódicas

Os resultados da teoria RPA para a blindagem e mobilidades eletrônicas em super-redes periódicas assemelham-se bastante àqueles para sistemas bi dimensionais.

A taxa de espalhamento de elétrons de um dado estado quântico, para $T = 0K$, pode ser obtida da regra de ouro de Fermi, assumindo que a interação coulombiana entre elétrons e impurezas ionizadas como sendo o único processo de espalhamento. Utilizando as funções de onda para uma super-rede periódica, $\chi_{nk}(z)$, e considerando os processos de espalhamento de portadores como ocorrendo na superfície de Fermi, obtém-se para o tempo de meia vida do estado k da enésima minibanda (em unidades atômicas efetivas, o tempo de meia-vida quântico é igual à mobilidade quântica μ_Q):

$$\mu_Q^{-1}(n, k) = \frac{S}{\pi} \sum_{n', k'} \int_0^\pi d\varphi \overline{|V_{nk, n'k'}^{\text{TOT}}(q_{nk, n'k'})|^2} \quad (5.34)$$

onde o somatório estende-se sobre os estados quânticos (n', k') abaixo do nível de Fermi (i.e. $\phi_{n'k'} > 0$).

O vetor de onda $q_{nk, n'k'}$ é dado por

$$q_{nk, n'k'} = 2^{1/2} \left[\phi_{nk} + \phi_{n'k'} - 2\sqrt{\phi_{nk}\phi_{n'k'}} \cos \varphi \right]^{1/2},$$

A variável de integração φ é o ângulo de espalhamento entre os vetores $\mathbf{k}_\perp$ e $\mathbf{k}'_\perp$, e

$$\overline{|V_{nk, n'k'}^{\text{TOT}}(q)|^2} = \left(\frac{2\pi}{q} \right)^2 \frac{N_d}{S} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \left| \sum_{mlm'l'} \epsilon_{nkn'k', mlm'l'}^{-1}(q) \times \int_0^{N \cdot d} dz \chi_{ml}(z) \chi_{m'l'}^*(z) e^{-\eta|z-td|} \right|^2$$

representa a média estatística dos elementos de matriz da transformada bi-dimensional de Fourier do potencial espalhador; os índices das funções de onda $\chi_{nk}(z)$ representam o índice da minibanda e o vetor de onda perpendicular à direção de crescimento, respectivamente. Na última equação, a soma estende-se sobre todos os níveis de energia eletrônicos, N_d é a densidade por unidade de área de átomos doadores com uma carga ionizada em cada período de dopagem, com distribuição de espessura nula na direção z , d é o período da super-rede, $N \cdot d$ é o período de Born-von Karman e $\epsilon_{nkn'k', mlm'l'}(q)$ é o tensor dielétrico dado por

$$\epsilon_{nkn'k', mlm'l'}(q) = \delta_{nkn'k', mlm'l'} - A_{ml, m'l'}(q) T_{nkn'k', mlm'l'}(q),$$

sendo $A_{ml, m'l'}(q)$ o tensor de resposta independente, dado pela Eq. (5.29)[59], $\delta_{nkn'k', mlm'l'}$ é o símbolo de Kronecker e $T_{nkn'k', mlm'l'}(q)$ é o fator de forma coulombiano

$$T_{nkn'k', mlm'l'}(q) = \frac{2\pi}{q} \int_0^{N \cdot d} \chi_{nk}(z) \chi_{n'k'}^*(z) \chi_{ml}^*(z') \chi_{m'l'}(z') e^{-\eta|z-z'|} dz dz'.$$

5.4 Detalhes dos cálculos numéricos efetuados

Para o cálculo das mobilidades que serão efetuados nos capítulos posteriores, serão utilizadas as funções de onda e estrutura de minibandas de energia numéricas obtidas a partir dos parâmetros de uma amostra δ -dopada, como visto no Capítulo 2. A partir dessas funções de onda, para o cálculo das mobilidades, a teoria apresentada no Capítulo 5 será utilizada, com a simplificação que se segue. O tensor dielétrico contém contribuições de subbandas acima do nível de Fermi. Tais contribuições foram estudadas por Hai *et al.*[10], em sistemas com um único poço δ , e foi mostrado que essas contribuições afetam apenas um pouco a mobilidade da subbanda mais energética, a qual acomoda cerca de 5% do total da população eletrônica. Os resultados experimentais para as mobilidades quânticas em super-redes δ -dopadas, como será visto, mostram um bom acordo com a previsão teórica e não houve a necessidade de tal correção. Em sistemas com um único poço, os resultados obtidos por nós para as mobilidades de transporte sugerem que tal correção deva ser investigada novamente juntamente com os efeitos de temperatura nesses sistemas, como será mostrado no capítulo final.

5.5 Teoria para a obtenção experimental das mobilidades quânticas

De modo a testar a teoria desenvolvida nas seções anteriores, uma comparação com a mobilidade quântica obtida experimentalmente é necessária. A mobilidade quântica dos portadores nas minibandas pode ser extraída do espectro de SdH. Como mostrado nas Refs. [47, 49], numa super-rede semicondutora, cada minibanda manifesta-se na experiência de SdH como um conjunto de componentes oscilatórias independentes. Cada minibanda pode ser classificada em uma das três categorias: aquelas de caráter bi-dimensional, com largura de banda nula, $W_n = 0$; aquelas de caráter quasi bi-dimensional, descritas por uma pequena dispersão e com banda estreita, $W_n < \phi_n$; e aquelas que são efetivamente tri-dimensionais, $W_n > \phi_n$, onde ϕ_n representa a distância em energia entre o nível de Fermi e o limiar da minibanda.

A contribuição à magnetoresistência de uma minibanda cuja largura de banda é menor que a sua energia de Fermi, ou seja, $W_n < \phi_n$, será descrita por[49]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim -\frac{X}{\sinh X} e^{-\alpha_n u} \{ 2J_0(\beta_n u) \cos \omega_n u + 8\epsilon_n \Im [e^{-i\beta_n u} \Phi(1/2, 2, 2i\beta_n u)] \sin \omega_n u \}, \quad (5.35)$$

onde $X = 2\pi^2 T/B$, T é a temperatura em unidades de $\hbar^2/k_B m^* a_B^2$, $u = 1/B$, $\alpha_n = \pi/\mu_Q(n)$, $\mu_Q(n)$ é a mobilidade quântica na n -ésima minibanda, J_0 é a função de Bessel de primeiro tipo, Φ é a função hipergeométrica degenerada[62], $\beta_n = \pi\Delta_n$, $\omega_n = 2\pi(\phi_n - \Delta_n)$ e ϵ_n é um parâmetro adimensional o qual é obtido ajustando-se a relação de dispersão numérica da minibanda, $E_n(k)$, à expressão

$$E_n(k) = \frac{\Delta_n}{2}(1 - \cos kd) - \epsilon_n \frac{\Delta_n}{2}(1 - \cos 2kd). \quad (5.36)$$

A Equação (5.35) foi obtida assumindo-se que a mobilidade quântica é constante numa minibanda.

Quando o espaçamento entre os planos dopados aumenta muito ($d \rightarrow \infty$), a largura das minibandas vai a zero ($\Delta_n \rightarrow 0$), e a Eq. (5.35) assume a forma familiar associada a um gás de elétrons confinado em duas dimensões [59]:

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim -2 \frac{X}{\sinh X} e^{-\alpha_n u} \cos 2\pi\phi_n u. \quad (5.37)$$

No caso mais geral, a Eq. (5.35) será caracterizada por duas componentes oscilatórias, correspondentes às órbitas extremas de cintura e de pescoço da mini superfície de Fermi associada à minibanda. Entretanto, como mostrado na Ref.[49], em sistemas periodicamente δ -dopados a órbita de pescoço não é detectada. Esta conclusão é baseada na observação de que a fim de que a órbita de pescoço seja detectada o alargamento dos níveis de energia deve ser menor que a largura da minibanda e também menor que o mini faixa de energia proibida entre a minibanda atual e a próxima em ordem de energia. Entretanto, em sistemas δ -dopados estas duas condições não são simultaneamente satisfeitas e, portanto, cada minibanda manifesta-se através de uma única componente oscilatória, devida à órbita de cintura. Esta asserção leva a concluir-se que, no caso de semicondutores periodicamente δ -dopados, a mobilidade quântica que comparece na Eq. (5.35) é aquela da órbita de cintura. Portanto, se se desejar testar a teoria da mobilidade quântica desenvolvida nas seções anteriores, a mobilidade quântica obtida pelo ajuste da Eq. (5.35) aos dados experimentais deve ser comparada com o valor de saída da Eq. (5.22) no vetor de onda associado à órbita de cintura (ou seja, $k = 0$ para as minibandas $E1, E3, \dots$ e $k = \pi/d$ para as minibandas $E2, E4, \dots$).

Para aquelas minibandas cuja largura de banda é maior que a energia de Fermi, ou seja quando $W_n > \phi_n$, as oscilações na magnetoresistência podem ser aproximadas pela expressão usual associada a um gás de elétrons livres em três dimensões[63]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim -2 \frac{X}{\sinh X} \frac{e^{-\alpha_n u}}{\sqrt{u}} \cos \left(2\pi\phi_n u - \frac{\pi}{4} \right). \quad (5.38)$$

A mobilidade quântica, neste caso, pode ser similarmente obtida pelo ajuste da Eq. (5.38) à componente magneto-oscilatória isolada.

Capítulo 6

Mobilidades quântica e de transporte em poços δ

Neste capítulo tenta-se estabelecer um procedimento de cálculo teórico confiável para as mobilidades quântica e de transporte em super-redes.

Vários níveis de aproximação são possíveis para a obtenção das mobilidades eletrônicas em estruturas de modulação de dopagem: desde o uso de um modelo do tipo Thomas-Fermi para a blindagem que ignore totalmente a espessura da camada de blindagem até um modelo que inclua todos os ingredientes da estrutura eletrônica de uma super-rede, como a espessura e perfil do plano de dopagem, a espessura não nula da camada de dopagem via suas funções de onda e a deformação imposta ao potencial pela presença de aceitadores ionizados. Com o aumento de complexidade introduzido por um modelo particular e pelo grau de aproximação envolvido aumenta o custo computacional devido à complexidade do cálculo numérico necessário para a obtenção das mobilidades eletrônicas de uma estrutura.

Para que as mobilidades eletrônicas possam ser obtidas numericamente e comparadas com a experiência é necessário que se conheçam os parâmetros característicos desses tipos de sistemas, os quais podem ser obtidos, por exemplo, a partir da análise das oscilações de Shubnikov-de Haas como já discutido.

A partir dos períodos de SdH foi mostrado que é possível a determinação dos parâmetros N_d e Δ_d . Embora o formato da distribuição dos dopantes não seja univocamente conhecido, outras técnicas como a microscopia de tunelamento[64] são eficazes na determinação do perfil da distribuição dos dopantes. A partir de medidas de reflectividade de raios-X mostrou-se possível a determinação dos perfis de distribuição de dopagem, além da concentração nos planos de Si em amostras de GaAs[65].

Vários autores modelaram o cálculo das mobilidades quânticas e de transporte nas subbandas individuais e a mobilidade Hall em estruturas contendo um único poço δ utilizando vários graus de aproximação[10, 13, 61]

Na Ref. [13] foi mostrado que o modelo no qual a mobilidade é limitada pelo espalhamento coulombiano dos doadores ionizados, incluindo a blindagem do potencial espalhador na aproximação RPA, fornece valores para a mobilidade compatíveis em uma ordem de magnitude com os valores experimentais. Em seus cálculos, os autores da Ref. [13] desprezaram a largura finita do plano de dopantes e as funções de onda envoltórias para as subbandas foram obtidas por um princípio variacional.

Recentemente [10], um cálculo mais realístico das mobilidades eletrônicas das subbandas foi efetuado onde os autores utilizaram as funções de onda obtidas pela solução auto-consistente das equações de Schrödinger e de Poisson para a estrutura δ e a largura da camada de dopantes foi incorporada no modelo teórico. A distribuição dos átomos doadores na direção de crescimento foi considerada uniforme num determinado intervalo.

Em outro artigo[66], o autor determina a influência do tipo de distribuição dos átomos dopantes, além do efeito dos aceitadores residuais ionizados. A presença de aceitadores ionizados apropriada para descrever cristais hospedeiros com características de tipo p (como ocorre em GaAs crescido por MBE) foi levada em conta no que diz respeito ao seu efeito na mudança do formato do poço δ . As mobilidades obtidas teoricamente desta maneira estão em bom acordo com as medidas obtidas experimentalmente, embora alguns desacordos entre a teoria e a experiência existam para as mobilidades das subbandas excitadas.

Neste capítulo serão discutidos os resultados teóricos para as mobilidades quântica e de transporte baseadas na solução auto-consistente das equações de Schrödinger e de Poisson para um semiconductor δ -dopado utilizando-se a aproximação RPA para descrever os efeitos de blindagem. O perfil da distribuição dos átomos doadores será considerada e serão comparados os resultados obtidos para a distribuição uniforme e retangular. A presença de aceitadores de fundo foi incorporada nos cálculos das mobilidades das subbandas. Juntamente ao efeito dos aceitadores ionizados no formato do potencial confinante, o espalhamento por esses centros foi incluído no cálculo teórico das mobilidades.

Em resumo, serão comparados alguns fatores importantes na determinação das mobilidades quântica e de transporte:

- o perfil de dopagem, caracterizado por Δ_d
- o modelo para a blindagem mais adequado para a reprodução dos dados experimentais
- a influência dos aceitadores residuais na determinação das mobilidades

6.1 Mobilidades em um poço δ com espessura nula

Para uma estrutura δ -dopada polarizada, a mobilidade dos portadores nas subbandas eletrônicas foi estudada, num primeiro momento, dentro da aproximação de Thomas-Fermi [12]. O interesse nas propriedades de transporte de estruturas polarizadas vem de suas aplicações tecnológicas, como por exemplo o transistor δ -FET [67]. A estrutura δ -dopada polarizada é também um sistema conveniente para o estudo de efeitos da proximidade da superfície nas propriedades do gás de elétrons confinados [68], já que aplicando-se a polarização ao sistema com a porta, a região próxima à superfície pode ser depletada de portadores. Por esses motivos, parece apropriado que o tratamento quântico completo seja aplicado a estruturas δ -dopadas com polarização, o que será visto nesta seção.

As mobilidades dos portadores foram calculadas utilizando-se o modelo de Thomas-Fermi para o potencial juntamente com a descrição prevista pelo modelo TF-2D para a carga de blindagem, e a partir do tratamento quântico da carga de blindagem e do potencial.

A confiabilidade do cálculo quântico apresentado está baseada no fato do seu sucesso para a descrição de estruturas δ não polarizadas. Os resultados mostrarão que embora o modelo

TF-2D apresente grande simplicidade e requeira um pequeno esforço computacional, ele consegue apenas prever adequadamente a mobilidade dos portadores pertencentes à subbanda fundamental.

6.1.1 Resultados e Discussão

As mobilidades quântica e de transporte para as subbandas individuais numa estrutura δ -dopada com uma porta em função da voltagem de polarização aplicada foram calculadas na aproximação RPA e na aproximação de Thomas-Fermi. Os cálculos foram efetuados para uma estrutura δ -dopada com concentrações de doadores $N_S = 2, 5$ e 10 a_B^{-2} . O efeito da polarização é apresentado através da fração s do número total de elétrons na estrutura N_S que é transferida para a superfície da amostra quando uma diferença de potencial é aplicada entre a porta e o substrato. Os resultados para as mobilidades quânticas e de transporte em função de s são apresentados na Fig. 6.1.

Resultados em polarização nula

Primeiramente discutiremos os resultados quando a voltagem de polarização é nula à luz das teorias RPA e TF-2D. A diferença mais patente entre as duas teorias é o aumento das mobilidades com o índice da subbanda na teoria RPA enquanto na teoria TF-2D as mobilidades são quantitativamente similares. Por outro lado, a mobilidade obtida para os portadores da subbanda fundamental, E_1 , é aproximadamente a mesma para ambas as teorias. O resultado do tratamento quântico para polarização nula está em acordo quantitativo com os resultados experimentais de Koenraad *et al.*[69]. Os autores dessa referência obtiveram para as mobilidades quânticas na i -ésima subbanda, $\mu_Q(E_i)$, $\mu_Q(E_2) \sim 4\mu_Q(E_1)$ para $N_S \sim 2$ e $\mu_Q(E_2) \sim 3\mu_Q(E_1)$ para $N_S \sim 5$. Esses resultados são bem reproduzidos pelos nossos cálculos RPA, e indicam o cálculo RPA como a teoria de escolha.

Os cálculos baseiam-se em duas quantidades de entrada: o espectro eletrônico e potencial eletrostático blindado de um plano de impurezas ionizadas de espessura nula. Para um plano de doadores com espessura nula, o espectro eletrônico obtido pela solução auto-consistente das equações de Schrödinger e de Poisson (Eqs. 2.5 e 2.8) é praticamente idêntico àquele obtido pela solução da equação de Schrödinger utilizando-se o potencial de Thomas-Fermi (Eq. 2.24). Este resultado está em acordo com a conclusão da Ref. [22], onde é mostrado que, em polarização nula, o potencial confinante de TF conduz a resultados que são equivalentes àqueles obtidos pela solução autoconsistente das equações de Schrödinger e de Poisson.

Portanto, as diferenças entre as mobilidades das subbandas obtidas pelos cálculos RPA e TF-2D não podem ser explicadas pelas diferenças entre os espectros eletrônicos e devem ser analisadas segundo as diferenças nos modelos utilizados para o potencial eletrostático blindado utilizado em cada caso. No modelo RPA, a espessura não nula da camada de blindagem é levada em conta. Isto implica que a intensidade do campo elétrico do plano de impurezas carregadas enfraquecerá rapidamente à medida em que nos afastamos de $z = 0$. Portanto, elétrons ocupando estados em subbandas mais energéticas, descritos por funções de onda menos localizadas em torno de $z = 0$, serão espalhados menos eficientemente e, portanto, terão mobilidades maiores. Em contrapartida, no modelo TF-2D a carga de blindagem é assumida como possuindo espessura nula e, por conseguinte, o campo elétrico da placa de impurezas carregada

varia muito mais lentamente a medida em que nos afastamos de $z = 0$ do que pelo modelo RPA.

Figura 6.1: Mobilidades quântica e de transporte calculadas para $N_S = 2$ ((a) e (b)); $N_S = 5$ ((c) e (d)); e $N_S = 10$ ((e) e (f)) em função da fração s do número total de portadores da estrutura transferidos para a porta. As linhas cheias correspondem ao resultado da teoria RPA, enquanto as linhas tracejadas representam o resultado da aproximação TF-2D. Os rótulos indicam o índice da subbanda correspondente a cada curva.

Isso é equivalente também ao fato de que os elétrons em todas as subbandas são espalhados com quase igual eficiência e, por isso, exibirão mobilidades parecidas. Em outras palavras,

a distância média entre a carga eletrônica e a placa de impurezas carregada mostra-se de fundamental importância no modelo RPA mas não no modelo TF-2D. De fato, como pode ser observado na Fig. 6.1, a teoria TF-2D prediz algumas vezes que a mobilidade *decrece* com o índice da subbanda, o que é uma consequência de um vetor de onda de Fermi que decresce, o que favorece uma taxa de probabilidade de espalhamento maior.

Resultados em polarização não nula

Quando um potencial externo é aplicado, uma parte da carga eletrônica é transferida do poço δ para a superfície. A subbanda mais excitada é esvaziada até que para $s \sim 0,95$ somente a subbanda fundamental permanece populada. Sempre quando uma subbanda é esvaziada completamente, as mobilidades nas subbandas restantes, que permanecem populadas, experimentam um salto, o que é consequência de uma brusca mudança na densidade de estados na energia de Fermi; tais saltos serão atenuados em temperaturas finitas, quando a faixa de energia dos elétrons de condução é alargada.

Figura 6.2: Poço δ obtido da aproximação de Thomas-Fermi (linha cheia) para $s = 0$ (a) e $s = 0,25$ (b). A origem da escala de energia foi escolhida como sendo a energia de Fermi. As linhas tracejadas representam a carga eletrônica correspondente à subbanda indicada por um rótulo.

Com o aumento da polarização, a densidade dos elétrons que permanecem confinados no poço, $(1 - s)N_s$, decresce. Segundo o modelo RPA, isso quer dizer que a capacidade de blindagem dos elétrons confinados no poço δ decresce e, portanto, o potencial eletrostático das impurezas carregadas torna-se mais intenso implicando numa maior eficiência de espalhamento e numa menor mobilidade do portador. Este comportamento (uma mobilidade decrescente com a polarização) é vista nas mobilidades quântica e de transporte obtidas do cálculo RPA no

limite de pequenas polarizações. Entretanto, para valores grandes da voltagem de polarização, as mobilidades RPA nas subbandas excitadas aumentam. Quando a polarização é aplicada, as subbandas mais energéticas afastam-se do plano de impurezas devido ao fato a carga eletrônica é repelida pela carga negativa situada na superfície da amostra.

Isto é ilustrado na Fig. 6.2, a qual mostra o poço δ com $N_S = 2.0$ e as funções de onda das subbandas em polarização nula e para $s = 0,25$. Em polarização nula, os valores esperados são $\langle z \rangle = 0$ para todas as subbandas. Em $s = 0,25$, o valor esperado para os elétrons fortemente ligados da subbanda E1 cresce ligeiramente para $\langle z \rangle_{E1} = 0,05$; para as subbandas E2 e E3, uma mudança grande para $\langle z \rangle_{E2} = 0,53$ e $\langle z \rangle_{E3} = 1,82$, respectivamente, é obtida. Portanto, com o aumento da polarização, os elétrons ocupando estados em subbandas mais energéticas distanciar-se-ão para longe do plano de impurezas. No modelo RPA, tal separação espacial dos elétrons e impurezas implica que a mobilidade nas subbandas excitadas aumentará com a polarização.

Na Ref. [66] foi mostrado que a mobilidade eletrônica numa subbanda E_i correlaciona-se com o recobrimento da densidade de uma partícula, $|\chi_{Ei}(z)|^2$, com uma função de distribuição que caracteriza o perfil de dopagem do poço δ . Para um perfil de dopagem de largura nula, como apresentado, tal recobrimento será dado simplesmente por $|\chi_{Ei}(0)|^2$.

Figura 6.3: Recobrimento $|\chi_i(0)|^2$ em função da tensão de polarização para $N_S = 2$. Os rótulos indicam o índice da subbanda correspondente a cada curva. O fator pelo qual o recobrimento calculado é multiplicado é apresentado ao lado dos rótulos.

A figura 6.3 mostra os recobrimentos calculados em função da polarização para um poço δ com $N_S = 2,0$. Uma comparação da Fig. 6.3 com as Figs. 6.1(a) e 6.1(b) mostra que

existe correlação entre o recobrimento e a polarização aplicada e a mobilidade obtida pela teoria RPA para as subbandas E_i : quando o recobrimento aumenta a mobilidade diminui e vice e versa. Essa correlação entre o recobrimento e a mobilidade não é verificada apenas para a subbanda fundamental, a qual está fortemente ligada ao plano de impurezas, não variando de modo significativo a sua posição em relação ao plano de impurezas. Portanto, para a subbanda fundamental, a diminuição de mobilidade com a polarização é praticamente função da diminuição do momento de Fermi, analogamente ao que acontece no modelo de Thomas Fermi. A correlação entre as subbandas mais energéticas com o recobrimento prova que as mobilidades obtidas pelo modelo RPA são sensíveis à distância média entre a carga eletrônica e o plano dopado.

Em contraste, como a Fig. 6.1 mostra, no modelo TF-2D, as mobilidades individuais nas subbandas sempre decrescem com o polarização aplicada; nesse caso, entretanto, o comprimento de blindagem é independente da densidade e, logo, o decréscimo na mobilidade não pode ser atribuído à mudança na eficiência do espalhamento. Como mencionado acima, as mobilidades TF-2D são também insensíveis à localização da função de onda e, portanto, o entortamento do poço δ tem apenas um pequeno efeito sobre o valor absoluto das mobilidades nas subbandas. O decréscimo das mobilidades nas subbandas com a polarização, obtido pelo modelo TF-2D é dominado pelo decréscimo no vetor de onda de Fermi quando o poço δ é esvaziado de portadores, o que conduz a uma maior probabilidade de espalhamento e, portanto, a mobilidades menores.

Figura 6.4: Mobilidades médias calculadas pelo modelo RPA (linha cheia) e pelo modelo TF-2D (linhas tracejadas) em função da tensão de polarização aplicada. A densidade total de portadores na estrutura é indicada para cada curva.

Um resultado adicional dos cálculos teóricos é a mobilidade média de deriva, μ_{av} , para o transporte paralelo ao plano dopado. A mobilidade média de deriva é dada pela média ponderada das mobilidades de transporte nas subbandas, utilizando-se como peso a densidade de portadores na subbanda correspondente

$$\mu_{av} = \frac{\sum_i \mu_T(i) E_i}{\sum_i E_i}$$

Os resultados dos cálculos são mostrados na Fig. 6.4 em função da polarização aplicada; a linha cheia corresponde ao resultado RPA com $N_S = 5$ (para $N_S = 2,0$ e $N_S = 10$, o modelo RPA conduz a resultados similares àqueles de $N_S = 5$); as mobilidades médias de deriva obtidas pelo modelo TF-2D são mostradas para $N_S = 2, 5$ e 10 por linhas tracejadas.

É interessante observar que a dependência da mobilidade média de deriva em função da polarização é aproximadamente a mesma em ambos os modelos. Já que a maior parte da carga eletrônica no poço ocupa estados da subbanda fundamental, a mobilidade média de deriva será dominada pela mobilidade da subbanda E1, cujo comportamento é similar em ambos os modelos, RPA ou TF-2D. Este fato foi observado na Ref. [61], cujos autores mostram que a mobilidade média de deriva, obtida dentro da aproximação TF-2D, concorda favoravelmente com valores experimentais para estruturas δ não polarizadas.

6.1.2 Conclusões

As mobilidades quânticas e de transporte das subbandas individuais de um semiconductor com dopagem δ foram calculadas nas aproximações RPA e TF-2D em função da polarização externa. Os resultados das teorias TF-2D e RPA mostram concordância apenas nos resultados da subbanda fundamental, o que pode ser explicado pelo pequeno comprimento de blindagem para portadores nessa subbanda. Para subbandas excitadas, as mobilidades aumentam com o índice da subbanda na aproximação RPA, enquanto permanecem praticamente inalteradas pelo modelo TF-2D. Esta diferença baseia-se no fato de que na aproximação RPA, a mobilidade é muito sensível à distância média entre a carga eletrônica e os centros espalhadores, o que não é o caso na teoria TF-2D. Pelo fato de que a mobilidade média de deriva para o transporte paralelo ao plano dopado ser dominada pelos portadores da subbanda fundamental, a mobilidade média de deriva no modelo TF-2D está em razoável acordo com o mesmo valor previsto pela teoria RPA. O resultado dos cálculos RPA, assumido como confiável devido ao sucesso da teoria RPA em descrever estruturas δ não polarizadas, mostra que há correlação entre a mobilidade em função da polarização com o recobrimento entre funções de onda e a região aonde os átomos doadores estão situados.

6.2 Influência do perfil de dopantes e aceitadores residuais

Na literatura, vários autores calcularam teoricamente as mobilidades quântica e de transporte das subbandas eletrônicas e a mobilidade Hall de semicondutores δ -dopados utilizando vários graus de aproximação[10, 13, 61].

Na Ref. [13], foi mostrado que o modelo no qual a mobilidade é limitada pelo espalhamento coulombiano dos doadores ionizados, incluindo a blindagem do potencial espalhador na aproximação RPA, fornece valores de mobilidade que concordam dentro de uma ordem de magnitude com as observações experimentais. Em seus cálculos, os autores dessa referência desprezaram a largura do plano de dopantes e os formatos das funções de onda envoltórias que descrevem as subbandas eletrônicas eram variacionais.

Num cálculo mais realista, os autores da Ref. [10] utilizaram as funções numéricas obtidas da solução auto-consistente das equações de Schrödinger e de Poisson para uma estrutura do tipo δ , onde a espessura não nula da camada de dopante foi levada em consideração no modelo teórico. A distribuição dos doadores foi aproximada por uma função retangular. A presença de aceitadores residuais ionizados, apropriada para descrever um cristal hospedeiro do tipo p (por exemplo, GaAs crescido por MBE), foi levada em conta somente no que respeita ao seu efeito na mudança do perfil do potencial do poço δ . As mobilidades teóricas obtidas desta maneira estão em bom acordo com observações experimentais, embora algum desacordo entre teoria e experiência exista para as mobilidades nas subbandas mais excitadas.

Nesta seção, serão mostrados os resultados do cálculo teórico para as mobilidades quântica e de transporte que utilizam a estrutura eletrônica auto-consistente advinda das equações de Poisson e de Schrödinger, juntamente com a utilização da aproximação RPA para descrever os efeitos de blindagem. Adicionalmente, serão comparados os resultados teóricos obtidos as distribuições retangular e gaussiana. A presença de aceitadores residuais foi incorporada nos cálculos das mobilidades nas subbandas. Juntamente ao efeito dos aceitadores residuais ionizados na mudança do perfil do poço, o espalhamento por eles produzido foi incluído nos cálculos.

6.2.1 Resultados e Discussão

Os cálculos teóricos foram efetuados para três densidades de dopagem, nomeadamente $N_d = 2,0, 5,0$ e $8,0 \text{ } a_B^{-2}$ (aproximadamente $2,0, 5,0$ e $8,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para o GaAs). A densidade de aceitadores residuais foi fixada em $1,0 \times 10^{-4} \text{ } a_B^{-3}$ (aproximadamente 10^{14} cm^{-3} para o GaAs). Para esta densidade de aceitadores residuais, os que estão ionizados estão na faixa de uma densidade areal de aproximadamente $0,05 \text{ } a_B^{-2}$ e, portanto, a densidade de portadores livres será praticamente igual à densidade de doadores N_d .

Os resultados teóricos para as mobilidades quântica e de transporte nas subbandas em função da espessura dos planos de dopante, tomados tanto como tendo distribuição gaussiana como retangular, são mostrados na Figura 6.5 (a)-(f).

Figura 6.5: Mobilidades quântica e de transporte para as subbandas para $N_d=2,0$ (abaixo), $5,0$ (no centro) e $8,0 \text{ } a_B^{-2}$ (acima). As linhas cheias correspondem a perfis gaussianos de dopagem, enquanto as tracejadas a perfis retangulares. A densidade de aceitadores residuais foi fixada em $N_a = 1,0 \times 10^{-4} \text{ } a_B^{-3}$. Os rótulos indicam o índice da subbanda correspondente a cada curva.

A unidade de mobilidade eletrônica é ea_B^2/h , aproximadamente $1500 \text{ cm}^2/\text{V s}$ para o GaAs. O gráfico da mobilidade média de deriva calculada

$$\mu_{av} = \frac{\sum_i \mu_T(i) E_{Fi}}{\sum_i E_{Fi}}$$

em função da largura do plano de dopantes é mostrada na Fig. 6.6

Figura 6.6: Mobilidade média de deriva calculada para $N_d=2,0$ (a), $5,0$ (b) and $8,0$ a_B^{-2} (c). A densidade de aceitadores foi fixa em $1,0 \times 10^{-4}$ a_B^{-3} . As linhas cheias foram obtidas levando-se em conta o perfil de dopagem gaussiano, enquanto que a linha tracejada o perfil foi considerado retangular.

Influência da largura do perfil de dopagem nas mobilidades

A medida em que a largura Δ_d do plano de dopantes torna-se maior, a tendência geral das mobilidades é decrescer, à exceção da subbanda E1. Outra característica notória é a presença de descontinuidades para certos valores de Δ_d . As descontinuidades ocorrem quando o limiar de uma subbanda cruza o nível de Fermi, o que introduz uma mudança brusca na densidade de estados em $E = E_F$ e, portanto, uma mudança na taxa de espalhamento dos portadores responsáveis pela condutividade a $T = 0$ K. Tais descontinuidades serão atenuadas

a temperaturas finitas, quando a gama de energias possíveis para os elétrons de condução é aumentada. As mudanças na mobilidade quando Δ_d aumenta correlaciona-se com as mudanças no recobrimento entre as funções de onda eletrônicas e a região dopada.

É interessante notar que para planos estreitos de dopante, tanto a mobilidade de transporte quanto a quântica correspondente a subbanda E3 tornam-se menores que as respectivas mobilidades da subbanda E2, o que pode ser visto na Figura 6.5(b) e também na Figura 6.9(b). Isto ocorre devido a que a subbanda E2 é descrita por uma função de onda ímpar (anula-se em $z = 0$, portanto), e esse fato acarreta numa redução do recobrimento entre a função de onda e a região dopada. Entretanto, à medida em que Δ_d aumenta, o recobrimento da função de onda E2 com o plano de dopante cresce mais rapidamente que para a subbanda E3 e a mobilidade na subbanda E2 torna-se menor que a da subbanda E3 para perfis de dopagem mais alargados. Por outro lado, é de se notar que as mobilidades eletrônicas na subbanda E3 crescem com Δ_d na região de perfis de dopagem estreitos, o que também respeita ao tamanho do recobrimento entre a função de onda eletrônica desta subbanda com a região dopada.

Influência do perfil de dopagem nas mobilidades

Para perfis de dopagem estreitos, os resultados teóricos obtidos para uma distribuição gaussiana de doadores coincidem com aqueles obtidos para uma distribuição retangular. À medida em que a largura da camada dopada aumenta, as mobilidades eletrônicas calculadas para as distribuições gaussiana e retangular modificam o seu comportamento.

As maiores diferenças entre as distribuições gaussiana e retangular são observadas nas mobilidades quântica e de transporte nas subbandas mais energéticas. Novamente, isto pode ser explicado em termos do recobrimento entre as funções de ondas das subbandas e a distribuição normalizada de doadores. Para uma dada largura Δ_d da camada de doadores, a distribuição gaussiana possui uma extensão espacial maior que a retangular ao redor do centro da distribuição. Portanto, o recobrimento da região dopada com as funções de onda eletrônicas para as subbandas excitadas, as quais estendem-se para longe da camada dopada, é maior para uma distribuição gaussiana do que para uma retangular. Em contrapartida, as subbandas menos energéticas são descritas por funções de onda fortemente localizadas ao redor de $z = 0$ e, portanto, menos sensíveis ao perfil exato da distribuição de doadores.

Ao invés de decrescerem, as mobilidades quântica e de transporte da subbanda fundamental mostram um pequeno aumento quando a espessura da camada dopada aumenta, dado que o recobrimento da função de onda correspondente a esta subbanda com a região dopada torna-se menor quando os átomos doadores estão distribuídos de maneira mais esparsa.

Para ilustrar a correlação entre as mobilidades eletrônicas e o recobrimento entre a função de onda com a camada dopada, o recobrimento calculado $\int dz g_d(z) |\chi_i(z)|^2$ é mostrado na Figura 6.7 para as distribuições gaussiana e retangular em função de Δ_d , no caso onde $N_d = 5.0 \text{ } a_B^{-2}$.

Comparando-se as Figuras 6.5(c) e (d) com a Figura 6.7, verifica-se que para cada subbanda uma mudança no recobrimento com a região dopada é acompanhado por uma mudança oposta na mobilidade: quando $\int dz g_d(z) |\chi_i(z)|^2$ aumenta, $\mu(i)$ diminui e vice versa.

Figura 6.7: Recobrimento $\int_{-\infty}^{+\infty} dz g_d(z) |\chi_i(z)|^2$ em função da espessura da camada dopada calculado para um perfil gaussiano (linhas cheias) e para um retangular (linha pontilhada), para uma densidade de doadores de $N_d = 5,0 a_B^{-2}$. A densidade de aceitadores residuais foi tomada como sendo $N_a = 1,0 \times 10^{-4} a_B^{-3}$. Os rótulos referem-se ao índice da subbanda correspondente a cada curva.

Influência das impurezas aceitadoras nas mobilidades

Outro aspecto importante a ser considerado é o papel das impurezas residuais carregadas que normalmente existem em sistemas reais: GaAs não dopado, crescido por MBE, é normalmente levemente do tipo *p*. Na Ref. [70], os autores demonstraram que os aceitadores residuais tem uma influência significativa no formato do potencial confinante, já que as mobilidades eletrônicas são diminuídas se comparadas aos valores obtidos quando da não consideração da presença dos mesmos aceitadores.

À medida em que a densidade dos doadores torna-se maior, a carga eletrônica contrabalança cada vez menos a carga dos doadores ionizados, conduzindo a um potencial cada vez mais confinante. Conseqüentemente, os elétrons são comprimidos cada vez mais para o centro da região dopada, portanto aumentando a eficiência de espalhamento dos átomos doadores e reduzindo a mobilidade eletrônica. Isto é ilustrado na Figura 6.8 para densidades de fundo de $N_a = 1,0 \times 10^{-4} a_B^{-3}$ (linhas cheias) e $N_a = 5,0 \times 10^{-4} a_B^{-3}$, mostrando que para valores maiores de densidades de aceitadores residuais, as funções de onda das subbandas tornam-se mais localizadas ao redor de $z = 0$, sendo esse efeito maior para subbandas mais energéticas.

Figura 6.8: Potencial confinante e densidades das subbandas eletrônicas para um semiconductor δ -dopado com $N_d = 5,0 \text{ a}_B^{-2}$. As linhas cheia e tracejada correspondem a densidades de aceitadores residuais de $N_a = 1,0 \times 10^{-4}$ e $N_a = 5 \times 10^{-3} \text{ a}_B^{-3}$, respectivamente. A origem da escala de energia foi escolhida como sendo o nível de Fermi. Os rótulos indicam a qual subbanda cada curva corresponde.

Figura 6.9: Mobilidades quânticas para um semiconductor δ -dopado com $N_d = 5,0 \text{ a}_B^{-2}$, $N_a = 1,0 \times 10^{-4} \text{ a}_B^{-3}$ (a) e $N_a = 5,0 \times 10^{-3} \text{ a}_B^{-3}$ (b). As linhas pontilhadas e cheias foram calculadas incluindo e ignorando o espalhamento pelos aceitadores residuais, respectivamente. O índice da subbanda correspondente a cada curva é indicado por um rótulo.

Como resultado da compressão do poço δ , o número de subbandas ocupadas decresce de 4 para 3, neste caso, quando a densidade de aceitadores residuais muda de $N_a = 1,0 \times 10^{-4}$ para

$N_a = 5 \times 10^{-3} a_B^{-3}$, A Figura 6.8 mostra que a função de onda para a subbanda E3 é a mais afetada pela localização induzida pelos aceitadores. As mobilidades nas subbandas, obtidas a partir dos cálculos para os poços δ mostrados na Fig. 6.8, podem ser vistas nas Figs. 6.9(a) e (b).

À medida em que N_a aumenta de $1,0 \times 10^{-4}$ para $5,0 \times 10^{-3} a_B^{-3}$, nenhuma mudança significativa ocorre nas mobilidades quânticas para as subbandas E1 e E2. Entretanto, o efeito de localização induzida por aceitadores na mobilidade da subbanda E3 é dramático: a mobilidade é reduzida por um fator de aproximadamente 2,5 e que a mobilidade de E3 passa a ser menor do que a mobilidade de E2 para perfis de dopagem estreitos.

Adicionalmente à redução das mobilidades eletrônicas através de uma forte localização de portadores livres, a presença de aceitadores residuais ionizados reduz a mobilidade eletrônica total simplesmente pelo acréscimo do número total de centros espalhadores presentes no semicondutor. O efeito de espalhamento por aceitadores nas mobilidades eletrônicas é sabido ser pequeno, já que para níveis de dopagem típicos de impurezas residuais, a *carga de superfície* dos aceitadores e suas densidades são muito menores que os mesmos valores para os doadores. Entretanto, devido à complexidade do modelo teórico, não é possível, à partida, excluir o fato de que a contribuição devida aos aceitadores no espalhamento não forneça correções significativas.

Uma estimativa quantitativa da contribuição dos aceitadores residuais e seu efeito sobre o espalhamento total não foi feita em trabalhos anteriores. O espalhamento por aceitadores ionizados foi levado em conta calculando-se a taxa de espalhamento utilizando-se o formalismo apresentado no Capítulo 5, sendo que sua distribuição é retangular. A Fig. 6.9 mostra as mobilidades quânticas para $N_a = 1,0 \times 10^{-4}$ e $5,0 \times 10^{-3} a_B^{-3}$ (aproximadamente $1,0 \times 10^{14}$ e $5,0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, respectivamente) com e sem a inclusão de do espalhamento por aceitadores residuais na teoria. Da Fig. 6.9 pode ser visto que o espalhamento por aceitadores residuais causa algum impacto nos valores das mobilidades quânticas das subbandas mais energéticas, enquanto que as subbandas de menor energia são praticamente insensíveis a esse efeito. Os resultados dos cálculos mostraram que as propriedades de transporte são menos afetadas que as mobilidades quânticas. Como a Fig. 6.9 mostra, apenas a mobilidade quântica da subbanda E3 mostra alguma sensibilidade à incorporação do espalhamento por aceitadores na teoria. A maior sensibilidade da subbanda E3 vem de seu maior recobrimento com a região depleta, já que a subbanda E3 estende-se por um grande volume ao redor da camada δ , como mostra a Fig. 6.8. As funções de onda das subbandas menos energéticas (E1 e E2) são mais localizadas e suas mobilidades são dominadas em maior grau pelo espalhamento por doadores.

Digno de nota é o fato de que a contribuição por aceitadores carregados na taxa de espalhamento dos elétrons de E3 cresce muito lentamente com a densidade de aceitadores: na Fig. 6.9(b), a densidade de aceitadores foi tomada como sendo 50 vezes maior que na Fig. 6.9(a); de qualquer modo, as mobilidades teóricas obtidas com e sem a inclusão do espalhamento por aceitadores residuais carregados permanece praticamente iguais. A pequena sensibilidade mostrada pela taxa de espalhamento eletrônica nesse aumento de 50 vezes na densidade de aceitadores residuais é devido a dois fatores:

- primeiramente, a densidade planar de aceitadores, a qual representa o número total de centros espalhadores incluídos na teoria, é proporcional à raiz quadrada da densidade volumétrica de aceitadores, portanto com crescimento sub-linear com N_a .
- em segundo lugar, devido ao fato de que para um maior valor de N_a , o poço quântico

torna-se mais confinante.

Portanto, enquanto a densidade de portadores aumenta, o recobrimento da função de onda de E3 com o volume ocupado pelos aceitadores ionizados decresce; conseqüentemente, a eficiência de espalhamento dos aceitadores ionizados não aumenta à mesma proporção da densidade planar de carga.

6.2.2 Conclusões

A dependência das mobilidades das subbandas eletrônicas pelo formato das distribuições de doadores correlaciona-se com o recobrimento entre as funções de onda e a região espacial na qual os átomos doadores estão situados. Foi mostrado que o formato da distribuição de doadores é um ingrediente importante num cálculo realístico das mobilidades quântica e de transporte para um semicondutor δ -dopado.

A dependência da mobilidade pela espessura da região dopada nas subbandas menos energéticas, E1 e E2, não mostra uma sensibilidade acentuada com o formato exato da distribuição de doadores. Em contrapartida, a dependência das mobilidades com Δ_d para as subbandas excitadas é fortemente afetada pelo perfil exato da distribuição de doadores. Para a distribuição gaussiana, as mobilidades das subbandas E3 ou mais energéticas, decrescem mais rapidamente com Δ_d que para uma distribuição retangular, o que pode ser um ingrediente importante para um melhor acordo entre a teoria e a experiência. Porém, para distribuições de dopagem suficientemente estreitas (menos que $0,5 a_B$), o que pode ser obtido pelas técnicas modernas de crescimento epitaxial, o perfil exato da distribuição de dopantes é de pouca relevância, podendo ser aproximado por um plano ideal.

O efeito do espalhamento por aceitadores residuais carregados foi igualmente examinado e uma estimativa qualitativa foi feita, demonstrando que para níveis típicos de dopagem residual por aceitadores, o espalhamento contribui somente com uma correção pequena para a mobilidade quântica nas subbandas mais energéticas. A inclusão do espalhamento por aceitadores na teoria aumenta o custo computacional e deve ser somente justificado quando uma pequena correção à mobilidade quântica nas subbandas mais excitadas for relevante.

Capítulo 7

Comparação das mobilidades em sistemas 2D-3D com a teoria

Do ponto de vista teórico, os cálculos das mobilidades eletrônicas em amostras com um único poço δ foram feitos utilizando-se o modelo de Thomas-Fermi [12, 13, 61] ou a aproximação RPA [10, 13, 69, 66, 70] para descrever a interação blindada entre os portadores confinados e as impurezas ionizadas. Os cálculos teóricos feitos utilizando-se a aproximação RPA mostram um bom acordo com as estimativas experimentais [10, 69], enquanto o acordo é ruim quando o modelo de Thomas-Fermi é utilizado. Neste capítulo, o tratamento RPA, aplicado a poços isolados, será estendido a super-redes de modulação de dopagem.

Até a publicação do artigo de Henriques *et al.* [51], cálculos para as mobilidades em sistemas δ -dopados periódicos ainda não haviam sido feitos. Nesse tipo de sistemas, as mobilidades teóricas são calculadas a partir das mesmas grandezas das quais são extraídas as mobilidades para sistemas com um único poço δ , ou seja, a partir de seus espectros energéticos e funções de onda juntamente a um modelo para o potencial eletrostático das impurezas ionizadas.

Neste capítulo serão apresentados os resultados teóricos para as mobilidades eletrônicas das minibandas de super-redes δ -dopadas, descritas por estados de Bloch em contraste ao poço isolado, cujas funções de onda são espacialmente localizadas ao redor da camada dopada.

7.1 Resultados

7.1.1 Caracterização CV das super-redes

Foi mostrado por Ulrich *et al.* [38] que o espectro CV de um semicondutor δ -dopado é muito sensível à dispersão dos átomos da impureza. De modo a estimar a largura característica da camada dopada em nossas amostras, procedeu-se de acordo com o que segue. A amostra No. 187, contendo um único poço δ de Si, foi crescida nas mesmas condições utilizadas para o crescimento das amostras que continham super-redes. De modo a tomar vantagem do fato de que a técnica CV apresenta uma resolução maior para maiores concentrações na camada dopada, a amostra No. 187 foi mais fortemente dopada que as outras amostras utilizadas neste trabalho. A densidade por unidade de área dos portadores confinados nesta amostra foi obtida do espectro de SdH, segundo a prescrição do Capítulo 4. Utilizando a densidade de portadores obtidas do espectro de SdH, perfis teóricos CV foram gerados resolvendo-se

auto-consistentemente as equações de Schrödinger e Poisson para a estrutura sob polarização; nos cálculos do espectro CV, o perfil de distribuição de impurezas foi assumido como sendo gaussiano e a FWHM da gaussiana foi variada até que o espectro CV teórico obtido estivesse no melhor acordo com o espectro CV experimental.

Figura 7.1: (a) Perfil de capacitância-voltagem medido para a amostra 187 (quadrados) para $T=300\text{K}$. O espectro CV teórico (linha cheia) foi gerado assumindo $N_S = 8,3 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ e os átomos de Si distribuídos de acordo com uma função gaussiana de largura a meia altura de $8\text{\AA}$. (b) Perfil de capacitância-voltagem para a amostra 200. A periodicidade dos picos indica que o período de dopagem para essa estrutura é $176\text{\AA}$.

A Figura 7.1(a) mostra o espectro CV para a amostra No. 187. A curva teórica mostrada na Figura 7.1(a) foi calculada assumindo que a FWHM do poço fosse igual a $8\text{\AA}$, e reproduz bastante bem o espectro CV experimental. Isto demonstra que os átomos de Si nas amostras que utilizamos para esse trabalho estão limitadas a uma dispersão de apenas 2 monocamadas de InP.

Para determinarem-se os períodos de dopagem da várias amostras, seus espectros CV foram medidos. Como exemplo, o espectro CV para a amostra No. 200 é mostrado na Figura 7.1(b). A concentração CV, N_{CV} , apresenta oscilações em função da profundidade CV, z_{CV} . As oscilações vistas na Figura 7.1(b) mostram uma periodicidade de $176\text{\AA}$, a qual tomamos como sendo igual ao período de dopagem desta estrutura, de acordo com o apresentado no Capítulo 3; os períodos de dopagem obtidos para todas as amostras, do mesmo modo, são mostrados na Tabela 7.1.

7.1.2 Determinação da população de portadores e parâmetros das minibandas

A concentração planar total de portadores N_S para cada amostra foi extraída a partir do espectro SdH. A Figura 7.2(a) mostra o espectro de magnetoresistência para a amostra No. 196

e a Figura 7.2(b) mostra a transformada de Fourier das oscilações SdH tomadas em campo inverso.

Figura 7.2: (a) Espectro de Shubnikov-de Haas para a amostra 196 (b) Transformada de Fourier do espectro de Shubnikov-de Haas tomado em campo inverso $1/B$ e derivado, para a amostra 196. As frequências da oscilação associadas às órbitas de cintura são indicadas.

Antes de se efetuar a transformada de Fourier, e com o objetivo de reduzir a influência do fundo magnetoresistivo no qual as oscilações de SdH estão superpostas, as curvas de magnetoresistência foram derivadas. Cada um dos picos vistos na Fig. 7.2 corresponde a uma órbita de cintura de uma das minibandas populadas; a posição do pico determina as seções de corte extremas da mini superfície de Fermi, em unidades de $\hbar/2\pi e$.

Para determinarem-se os valores de N_s , foi necessário resolverem-se auto-consistentemente as equações de Schrödinger e Poisson (como visto no Capítulo 2) para cada amostra. No cálculo, o período de dopagem foi fixado como sendo o valor obtido pelas medidas CV, e os átomos de Si foram tomados como sendo distribuídos de acordo com uma função gaussiana com

FWHM de 8 Å, como deduzido do espectro CV. O único parâmetro adicional neste cálculo, a concentração de portadores N_S , foi variado até que todas as frequências de oscilação calculadas, ou seja, as frequências de oscilação correspondentes às órbitas de cintura, aproximassem-se simultaneamente de todas as frequências obtidas a partir do espectro de SdH, como prescrito em detalhe no Capítulo 4. Os resultados da análise dos espectros CV e das oscilações de SdH estão sumarizados na Tabela 7.1.

Amostra	No. de períodos	d (Å)	SdH Experiência (T)			Calculado (T)			N_S (cm ⁻²)
			B_{E1}^{SdH}	B_{E2}^{SdH}	B_{E3}^{SdH}	B_{E1}^{Teo}	B_{E2}^{Teo}	B_{E3}^{Teo}	
194	5	92,0	85,5	43,1	—	86,3	42,3	—	$4,27 \times 10^{12}$
206	10	107	89,7	47,9	—	90,3	48,7	—	$5,08 \times 10^{12}$
198	5	128	74,9	38,6	—	75,4	40,2	—	$4,50 \times 10^{12}$
207	10	133	80,7	46,0	—	79,2	46,2	—	$5,08 \times 10^{12}$
200	10	176	62,2	32,2	—	63,8	32,4	9,1	$4,27 \times 10^{12}$
197	5	225	73,7	33,8	—	73,7	34,9	17,0	$5,38 \times 10^{12}$
199	10	245	73,1	25,9	11,1	75,6	27,2	11,2	$5,26 \times 10^{12}$
196	5	278	65,4	28,1	15,0	68,2	28,4	15,9	$4,98 \times 10^{12}$
164	single	—	69,6	24,0	6,8	70,8	24,5	6,7	$5,07 \times 10^{12}$

Tabela 7.1: Parâmetros das amostras estudadas. O período de dopagem d foi obtido a partir do espectro CV correspondente a cada amostra. B_{Ei}^{SdH} e B_{Ei}^{Teo} representam as frequências de oscilação experimental e teórica associadas à órbita de cintura no espaço k . A concentração total de portadores N_S mostrada é aquela que fornece o melhor acordo da teoria com a experiência.

Para amostras com períodos menores que 200 Å, as oscilações quânticas associadas com a minibanda E3 não foram observadas. Isto é uma indicação que nesta gama de períodos de dopagem, o minigap entre as minibandas E2 e E3 é menor que o alargamento dos níveis de energia, o que quer dizer que para os fins práticos, as minibandas E3 e E2 são uma só. Nestas circunstâncias, apenas a órbita de cintura associada à minibanda E2 se manifestará através das oscilações na magnetoresistência, o que é uma característica de um comportamento tri-dimensional, como visto na Sec. 5.5. Em períodos ainda menores ($d < 150\text{Å}$), a minibanda E3 é esvaziada de portadores.

Adicionalmente à concentração de portadores livres, os cálculos auto-consistentes fornecem como saída a energia de Fermi Φ_n , a largura W_n e o fator de dispersão ϵ_n para todas as minibandas. Os parâmetros obtidos são mostrados na Tabela 7.2.

Amostra	W_1 (meV)	ϕ_1 (meV)	ϵ_1	W_2 (meV)	ϕ_2 (meV)	ϵ_2	W_3 (meV)	ϕ_3 (meV)	ϵ_3
194	43,7	127,0	0,21	152,9	57,5	—	—	0,0	—
206	26,4	130,2	0,16	105,8	68,8	—	—	0,0	—
198	14,8	107,8	0,12	69,4	56,9	—	—	0,0	—
207	11,0	118,3	0,09	61,0	64,0	—	—	0,0	—
200	3,2	91,4	0,03	31,7	44,7	—	—	0,0	—
197	2,8	107,1	0,00	11,4	45,4	—	—	0,0	—
199	1,4	102,3	0,00	8,1	41,2	—	—	22,4	—
196	0,0	95,5	0,00	4,6	35,9	0,11	19,9	19,0	—
164	0,0	96,7	0,00	0,0	37,2	0,00	0,0	11,4	0,0

Tabela 7.2: Parâmetros para as minibandas obtidas do modelo teórico. A largura em energia e a energia de Fermi para cada minibanda, respectivamente W_n and ϕ_n , são os valores obtidos da solução auto-consistente das equações de Schrödinger e Poisson utilizando-se d e N_S da Tabela 7.1. O parâmetro ϵ_n foi obtido ajustando-se a relação de dispersão numérica, $E_n(k)$, com a Equação (5.36), e é indicado para minibandas que obedecem o comportamento quasi-2D (Eq. (5.35)).

7.1.3 Isolamento das contribuições individuais das minibandas à magnetoresistência

As componentes oscilatórias individuais foram separadas do espectro de magnetoresistência aplicando-se um filtro de banda passante gaussiano no espectro de Fourier. Os parâmetros desse filtro eram a frequência do pico e a largura a meia altura (FWHM). Isso é ilustrado nas Figuras 7.3(a)-(d) para a amostra No. 196. A amostra No. 196 foi escolhida para exemplificar os resultados do procedimento de filtragem devido a que nesta amostra cada minibanda está associada a um tipo de característica que pode ser exibida pelas componentes magneto-oscilatórias em semicondutores periodicamente δ -dopados:

- a minibanda fundamental E1 possui uma largura de banda nula e é, portanto, bi-dimensional, fornecendo uma contribuição à magnetoresistência que obedece a Eq. (5.37);
- a minibanda E2 possui uma largura de banda pequena, $W_2 < \Phi_2$, o que corresponde a uma dimensionalidade intermediária entre 2 e 3, e suas oscilações na magnetoresistência obedecerão a relação Eq. (5.35);
- a minibanda E3, que possui uma grande largura de banda, $W_3 > \Phi_3$, é efetivamente tri-dimensional, o que implica que as oscilações na magnetoresistência serão descritas pela Eq. (5.38)

Portanto, a amostra No. 196 serve ao propósito de ilustrar o procedimento de filtragem utilizado e os procedimentos de ajuste das oscilações individuais à teoria sobre qualquer circunstância que possa ocorrer em qualquer tipo de sistema com dopagem periódica.

Figura 7.3: (a) Transformada de Fourier do espectro de SdH para a amostra 196; as linhas tracejadas mostram a transformada de Fourier filtrada utilizada para isolar cada um dos picos detectados; (b)-(d) mostram as oscilações isoladas correspondentes às minibandas E1, E2, e E3, respectivamente.

A Figura 7.3 mostra a transformada de Fourier da curva de SdH; as linhas tracejadas mostram a transformada de Fourier filtrada, com os parâmetros do filtro de banda passante ajustados para isolar cada um dos picos de Fourier observados. Após a aplicação do filtro, todos os passos que conduziram à transformada de Fourier daquela frequência isolada foram revertidos: a transformada de Fourier inversa foi obtida e as oscilações na magnetoresistência

foram integradas numericamente. As Figuras 7.3(b)-(d) mostram as componentes oscilatórias isoladas obtidas para a amostra No. 196. As componentes oscilatórias abrangem uma gama menor de campos do que o intervalo medido (0-14 T) devido a que um intervalo nas extremidades (cujo comprimento é inversamente proporcional ao FWHM do filtro de Fourier) é perdido devido a efeitos de extremidade (como pode ser visto na Ref. [71]).

7.1.4 Estimativa experimental para as mobilidades quânticas

A mobilidade quântica associada a cada uma das minibandas populadas foi obtida através de um ajuste com a teoria da contribuição das minibandas à magnetoresistência, isoladas do resto do espectro de SdH como descrito na Seção 7.1.3. As oscilações individuais foram ajustadas à Eq. (5.37) quando a largura em energia da minibanda era pequena ($W_n < \phi_n$) ou à Eq. (5.35) quando a largura da minibanda era não nula ($W_n > \phi_n$). Os parâmetros W_n , ϕ_n e ϵ_n utilizados na equação de ajuste foram tomados como sendo aqueles dados na Tabela 7.2, sendo a temperatura fixa em 4,2 K, o mesmo valor da experiência. O único parâmetro restante, μ_Q , foi ajustado de modo a que o melhor acordo fosse obtido com a experiência.

Para ilustrar o procedimento de ajuste, as oscilações individuais e as curvas ajustadas para a amostra No. 196 são mostradas na Figura 7.4.

Um ajuste com a teoria, neste caso, conduziu a $\mu_Q(E1) = 410 \text{ cm}^2/\text{V s}$, $\mu_Q(E2) = 1320 \text{ cm}^2/\text{V s}$ e $\mu_Q(E3) = 3650 \text{ cm}^2/\text{V s}$. Todas as outras amostras receberam o mesmo tratamento e os valores obtidos para as várias mobilidades quânticas graficados contra o período de dopagem podem ser vistos na Figura 7.5

7.1.5 Comparação com a teoria e discussão

Os resultados experimentais mostram que, para um determinado período de dopagem, a mobilidade quântica cresce com o índice da minibanda. As mobilidades quânticas experimentais associadas às minibandas individuais são mostradas por pontos na Figura 7.5 em função do período de dopagem d .

Para valores grandes de d , os poços adjacentes desacoplam-se; as mobilidades quânticas para as minibandas obtidas para a amostra No. 164, a qual contém um único poço, é graficada na Fig. 7.5 em $d = 800 \text{ Å}$.

Quando o período diminui, a mobilidade na minibanda E1 permanece quase que inalterada. A mobilidade quântica experimental para a minibanda E2 não apresenta uma dependência suave com o período de dopagem, o que é atribuído à flutuação na densidade de portadores nas amostras (ver a Tabela 7.1) e à limitada precisão dos valores experimentais das mobilidades. De qualquer modo, os dados experimentais graficados na Figura 7.5 mostram claramente que na região $d < 200 \text{ Å}$, a mobilidade quântica da minibanda E2 decresce à medida em que o período de dopagem torna-se menor. Finalmente, a mobilidade quântica dos portadores na minibanda E3 somente pode ser medida para períodos maiores que 230 Å , onde a mobilidade medida forneceu um valor de aproximadamente $3500 \text{ cm}^2/\text{V s}$.

As mobilidades quânticas teóricas foram calculadas em função do período de dopagem para concentrações de portadores de $N_s = 4,3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N_s = 5,4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; estes valores correspondem aos limites inferior e superior das concentrações de portadores livres nas amostras estudadas. As quantidades de entrada foram a energia de Fermi, o espectro energético das

Figura 7.4: Oscilações na magnetoresistência associadas com as minibandas individuais para a amostra 196. Os pontos representam as oscilações obtidas experimentalmente e as curvas cheias correspondem à teoria. (a) Oscilações isoladas devido à minibanda fundamental, E_1 , e o resultado teórico pelo uso da Eq. (5.35); (b) O mesmo para a minibanda E_2 ; (c) Oscilações devidas à minibanda E_3 e o resultado teórico obtido pelo uso da Eq. (5.38)

minibandas e suas funções de onda, obtidas a partir da solução auto-consistente das equações de Schrödinger e de Poisson. As mobilidades quânticas foram calculadas utilizando os resultados para mobilidades quânticas em sistemas periódicos (Seção 5.3), assumindo condições periódicas de contorno num intervalo de quatro períodos de dopagem, e incorporando nos cálculos apenas estados quânticos pertencentes às três minibandas menos energéticas. Os resultados da teoria são mostrados por linhas cheias na Figura 7.5.

A Figura 7.5 mostra que para a minibanda E_1 , as mobilidades quânticas teóricas estão em excelente acordo com as obtidas experimentalmente. Para as minibandas excitadas E_2 e E_3 , existe uma concordância dentro de uma ordem de magnitude entre a teoria e a experiência, embora o acordo geral não seja tão bom como para a minibanda E_1 . Apesar disso, é notável como a teoria reproduz a característica principal da dependência da mobilidade quântica de E_2 com o período d , ou seja, um decréscimo na direção de períodos da super-rede menores.

Figura 7.5: Mobilidade quântica em função do período de dopagem. Os círculos, cruzes e quadrados representam os resultados experimentais correspondentes às minibandas $E1$, $E2$ e $E3$, respectivamente; as linhas tracejadas e cheias são o resultado teórico para $N_S = 4.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N_S = 5.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente.

Figura 7.6: Distância média entre portadores confinados nas minibandas $E1$, $E2$ e $E3$ em função do período de dopagem para uma super-rede periódica δ -dopada de InP com $N_S = 4.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}/\text{Vs}$. Os cálculos foram efetuados utilizando-se a Eq. (7.1).

Este capítulo pode ser sumarizado estabelecendo que, para um dado período da super-rede,

a mobilidade quântica é maior para as subbandas mais energéticas e, quando o período diminui, as mobilidades quânticas diminuem. O decréscimo nas mobilidades à medida em que o período diminui acontece quando $d \approx 300 \text{ \AA}$ para a minibanda E3, mas somente quando $d \approx 200 \text{ \AA}$ para a minibanda E1; para a minibanda E1, a teoria prediz um comportamento decrescente somente quando $d \approx 50 \text{ \AA}$.

Estes resultados podem se explicados pela dependência do comprimento de blindagem dos portadores com o período de dopagem d . Como mostrado no Capítulo 6 para amostras δ dopadas com uma única camada de doadores e para amostras δ dopadas polarizadas, a mobilidade é muito sensível à distância média entre a camada dopada e os portadores. A distância média entre portadores confinados na minibanda Ei e uma camada dopada colocada em $z = 0$ pode ser estimada, neste caso, por $\sqrt{\langle z^2 \rangle_{Ei}}$, onde

$$\sqrt{\langle z^2 \rangle_{Ei}} = N \int_{-d/2}^{d/2} dz \, z^2 |u_i(k_{\text{cintura}}, z)|^2 \quad (7.1)$$

Um gráfico de $\sqrt{\langle z^2 \rangle_{Ei}}$ para uma densidade de portadores de $N_S = 4,6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ é mostrado na Figura 7.6.

Uma comparação da Figuras 7.6 com a Figura 7.5 revela uma correlação surpreendente entre o andamento da mobilidade quântica em uma minibanda e a distância média entre seus portadores e a camada dopada.

7.2 Conclusões

As oscilações de Shubnikov-de Haas foram medidas para super-redes periodicamente δ -dopadas de InP em função do período de dopagem em amostras com densidades em torno $\sim 4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ por camada dopada e períodos na faixa de 90 a 300 $\text{\AA}$. Foi verificado que cada minibanda manifesta-se no espectro de SdH através de uma única componente oscilatória, a qual corresponde à seção extrema da mini-superfície de Fermi correspondente à órbita de cintura. As oscilações de caráter quântico associadas às minibandas individuais foram isoladas do espectro de magnetoresistividade por técnicas de Fourier. Das componentes oscilatórias individuais, a mobilidade quântica para cada minibanda foi estimada.

O modelo teórico desenvolvido apresentou um bom acordo com os resultados experimentais. As predições teóricas do modelo mostram que as mobilidades crescem com o índice da minibanda e decrescem quando o período de dopagem diminui. O começo dessa diminuição ocorre em $d \sim 200 \text{ \AA}$ para a minibanda E2 e abaixo de $d \sim 50 \text{ \AA}$ para a minibanda E1. A dependência da mobilidade quântica numa minibanda individual em função da distância entre planos de dopantes mostra uma clara correlação com a mesma dependência da função da distância média entre seus portadores e o plano dopado. Isto demonstra que a distância média entre os portadores confinados e as impurezas é determinante no valor absoluto da mobilidade que pode ser obtida em sistemas δ -dopados.

Capítulo 8

Mobilidades de transporte em sistemas δ dopados

Será descrito no corrente texto o formalismo do espectro de mobilidade, baseado num modelo semi-clássico de transporte eletrônico que foi desenvolvido por Beck e Anderson [72], em trabalho original, a partir de um desenvolvimento da equação de transporte de Boltzmann por McClure[73]. Na notação de McClure, as componentes do tensor de magnetocondutividade são expressas em séries infinitas, com termos individuais dependentes do campo magnético, da topologia no espaço de momentos e do tempo de relaxação em função da energia das órbitas ciclotrônicas.

A técnica do espectro de mobilidade foi aplicada com sucesso por Beck e Anderson na determinação aproximada das mobilidades de transporte e população de portadores em amostras de *HgTe* [74] e em hetero-estruturas de *GaAs/AlGaAs* [75]. Em outro trabalho [44], esta técnica é aplicada em sistemas *Si : δ - GaAs* com bons resultados para as mobilidades de transporte.

Esse formalismo constitui-se numa ferramenta para a análise do fundo magnetoresistivo clássico podendo ser útil na determinação do número de portadores N_i e respectivas mobilidades de transporte μ_{Ti} . Conforme será apresentado, a técnica do espectro de mobilidade por si só, não permite avaliar diretamente as mobilidades de transporte em sistemas com múltiplas subbandas e a sua interpretação é dependente dos modelos para o espalhamento. A interpretação do espectro de mobilidade passa a ser importante em altas temperaturas, já que as oscilações de SdH desaparecem quando a temperatura for superior a temperatura de Dingle das subbandas.

A teoria do espectro de mobilidade parte do modelo de Boltzmann para o transporte na aproximação de tempo de relaxação dependente da energia e, portanto, prevê a apenas a possibilidade do comparecimento de efeitos semi-clássicos no tensor de resistividade. O modelo é válido, portanto, em regiões de campo magnético da magnetoresistência aonde não comparecem efeitos quânticos, como as oscilações SdH e magneto-resistividades anômalas.

Neste capítulo é apresentado um trabalho preliminar, ou seja, e são discutidas as dificuldades associadas à determinação das mobilidades de transporte em sistemas δ -dopados. Como será visto, a determinação das mobilidades de transporte individuais nesses sistemas é fortemente dependente da disponibilidade de um equipamento capaz de manter temperaturas controladas acima de 4,2 K para a obtenção das componentes do tensor de magnetoresistividade.

8.1 Populações e mobilidades individuais de transporte via medidas Hall

A partir de medidas das componentes do tensor de resistividade, $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{xy}(B)$, obtém-se as componentes do tensor de condutividade $\sigma_{xx}(B)$ e $\sigma_{xy}(B)$ pelas relações

$$\sigma_{xx}(B) = \frac{\rho_{xx}(B)}{\rho_{xx}^2(B) + \rho_{xy}^2(B)} \quad e \quad \sigma_{xy}(B) = \frac{\rho_{xy}(B)}{\rho_{xx}^2(B) + \rho_{xy}^2(B)}$$

Numa estrutura simples, por exemplo num semiconductor degenerado com dopagem uniforme por impurezas doadoras rasas a $T=0K$, a banda de condução está ocupada até a energia de Fermi. Por simplicidade, assumindo que o semiconductor tem a banda de condução parabólica

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

conduz ao fato de que a superfície de Fermi associada é esférica. Pode-se assumir neste momento que o tempo de relaxação τ_T da população eletrônica na superfície de Fermi é constante, já que a distribuição de impurezas no cristal hospedeiro é uniforme. Portanto, o numero de portadores n e a mobilidade de transporte μ_T podem ser determinados a partir das relações conhecidas

$$N = -\frac{1}{eR_H} \quad e \quad \mu_T = -\frac{R_H}{\rho} = -\frac{e\tau_T}{m}$$

onde N é da densidade eletrônica total e R_H é o fator de Hall.

As componentes do tensor de condutividade serão, neste caso:

$$\sigma_{xx}(B) = \frac{eN\mu_T}{1 + (\mu_T B)^2} \quad e \quad \sigma_{xy}(B) = \frac{eN\mu_T^2 B}{1 + (\mu_T B)^2} \quad (8.1)$$

o que resulta em um fator de Hall R_H e ρ_{xx} independentes de B .

Em geral, os sistemas a serem estudados não são tão simples assim, como apontado por Beck e Anderson [72], podendo ter superfícies de Fermi não esféricas, com condução devido a portadores em mais de uma banda e a relação de dispersão de energia $E \times k$ pode ser não parabólica para as bandas, entre outros fatores.

A prática mais comum encontrada na literatura é, a partir da dependência em B de $\rho_{xy}(B)$ e $\rho_{xx}(B)$, formular-se algumas hipóteses a respeito dos mecanismos de espalhamento, modelar-se μ_T e ajustar-se as componentes do tensor de magnetoresistividade àquelas obtidas da equação de Boltzmann consistentes com as hipóteses sobre μ_T . Beck e Anderson ressaltam ainda que, em geral, ajustam-se varios modelos para o mesmo conjunto de dados do tensor de resistividade e que essa não-unicidade torna difícil a justificativa de um modelo físico particular.

A interpretação das medidas do tensor de resistividade ou condutividade proposta no trabalho de Beck e Anderson, como será mostrado na próxima seção, é feita a partir de uma abordagem independente e conveniente do modelo físico para uma estrutura particular.

8.2 Transformação do tensor de magnetoresistividade

O formalismo do espectro de mobilidade é obtido a partir da reformulação da equação de transporte de Boltzmann dada por McClure[73], a qual produz um resultado explícito para as componentes do tensor de condutividade $\sigma_{xx}(B)$ e $\sigma_{xy}(B)$ em função da estrutura eletrônica de um determinado material e das mobilidades de transporte.

A dedução da expressão final de McClure para as componentes do tensor de condutividade não será apresentada no presente texto, que limitar-se-á a apresentar apenas algumas noções encontradas no artigo da Ref. [73].

Para o entendimento da dedução do formalismo do espectro de mobilidade é necessário que seja introduzida grandezas de origem topológica, B_j , que são obtidas a partir das relações de dispersão da estrutura de bandas de um sistema físico e estão relacionadas com as trajetórias ciclotrônicas nesse sistema. Suponha-se inicialmente que o espectro de energia de um sistema físico, por exemplo, de uma minibanda de uma super-rede 2D, seja dado por

$$\mathcal{E}_{nk_x k_\perp} = E_{nk_z} + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} \quad (8.2)$$

com um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo de crescimento, $B = B\hat{k}_z$. Para definirmos a família de trajetórias no espaço k , neste caso, basta que sejam especificados os vetores de onda $k_\perp^2$ e k_z . A família de trajetórias é definida então pela própria relação de dispersão fornecida anteriormente sendo $\mathcal{E}_{nk_x k_\perp}$ constante.

Para a determinação das componentes do tensor de condutividade é necessário o conhecimento dos coeficientes B_j definidos como

$$B_j = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \left[\frac{dE_j}{dk_\perp} + \frac{j}{k_\perp} E_j \right]$$

onde E_j é obtido a partir da expansão em série de Fourier da relação de dispersão de energia (8.2) como

$$\mathcal{E}_{nk_x k_\perp} = \sum_l E_l(k_\perp, k_z) e^{il\theta}$$

onde θ é o ângulo polar associado a $k_\perp$.

No caso particular de uma super-rede, Eq. (8.2), com o campo magnético aplicado $B = B\hat{k}_z$, os coeficientes de B_j serão, portanto,

$$B_j = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \left[\frac{\hbar^2 k_\perp}{m} \right] \delta_{j0} = \frac{\hbar k_\perp}{\sqrt{2}m}$$

Os coeficientes B_j determinam completamente o formato da órbitas ciclotrônicas e são obtidos a partir da relação de dispersão da banda. No caso particular de um gás de elétrons livres, apenas B_0 não é nulo. Assumindo que o tempo de relaxação τ_T é constante em uma órbita ciclotrônica e que $\tau_T = \tau_T(E, k_z)$, McClure deduziu que o tensor de condutividade[73] pode ser

escrito como

$$\sigma_{xx}(B) = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int d^3k \left(-\frac{\partial f_o}{\partial E} \right) \tau_T \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|\mathcal{B}_{l-1}|^2 + |\mathcal{B}_{-l-1}|^2}{1 + (l\omega_c \tau_T)^2} \quad (8.3)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(B) = & \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int d^3k \left(-\frac{\partial f_o}{\partial E} \right) \tau_T \sum_{l=1}^{\infty} \frac{-i[\mathcal{B}_{l-1}\mathcal{B}_{-l-1} - \mathcal{B}_{-l-1}^* \mathcal{B}_{l-1}^*]}{1 + (l\omega_c \tau_T)^2} + \\ & + \sum_{l=1}^{\infty} l\omega_c \tau_T \frac{|\mathcal{B}_{l-1}|^2 - |\mathcal{B}_{-l-1}|^2}{1 + (l\omega_c \tau_T)^2} \end{aligned} \quad (8.4)$$

onde f_o é a distribuição de Fermi-Dirac para o gás de elétrons no equilíbrio termodinâmico e ω_c é a frequência ciclotrônica do gás.

As equações (8.3) e (8.4) são as mais gerais possíveis para as componentes do tensor de magnetocondutividade. A equação (8.4) pode ser simplificada utilizando-se uma referência conveniente de coordenadas, de forma a que a superfície de Fermi possua simetria de reflexão em relação a um plano de coordenadas no espaço de momentos[73]. Essa simplificação permite, sem perda de generalidade, que a Eq. (8.4) seja escrita como

$$\sigma_{xy}(B) = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int d^3k \left(-\frac{\partial f_o}{\partial E} \right) \tau_T \sum_{l=1}^{\infty} l\omega_c \tau_T \frac{|\mathcal{B}_{l-1}|^2 - |\mathcal{B}_{-l-1}|^2}{1 + (l\omega_c \tau_T)^2} \quad (8.5)$$

Assumindo que a frequência ciclotrônica é proporcional a B , pode-se então definir uma *massa ciclotrônica efetiva* m_c tal que

$$\omega_c(n, E, k_z) = \frac{eB}{m_c(n, E, k_z)} \quad (8.6)$$

e uma *mobilidade* μ_T

$$\mu_T(n, E, k_z) = e \frac{\tau_T(n, E, k_z)}{m_c(n, E, k_z)} \quad (8.7)$$

Em termo das novas variáveis, onde a referência funcional a E , n e k_z não é mais utilizada por simplicidade de notação, as equações (8.3) e (8.5) se transformam em

$$\sigma_{xx}(B) = \frac{e}{(2\pi)^3} \sum_n \int d^3k \left(-\frac{\partial f_o}{\partial E} \right) m_c \mu_T \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|\mathcal{B}_{l-1}|^2 + |\mathcal{B}_{-l-1}|^2}{1 + (l\mu_T B)^2} \quad (8.8)$$

e

$$\sigma_{xy}(B) = \frac{e}{(2\pi)^3} \int d^3k \left(-\frac{\partial f_o}{\partial E} \right) m_c \mu_T^2 B \sum_{l=1}^{\infty} l \frac{|\mathcal{B}_{l-1}|^2 - |\mathcal{B}_{-l-1}|^2}{1 + (l\mu_T B)^2} \quad (8.9)$$

Pode-se agora definir um conjunto de funções de *densidade de condutividade* η_l^+ e η_l^- como

$$\eta_l^{\pm} = \frac{e}{(2\pi)^3} \frac{\partial f_o}{\partial E} m_c(n, E, k_z) \mu_T(n, E, k_z) |\mathcal{B}_{\pm l-1}|^2 \quad (8.10)$$

tal que as equações (8.8) e (8.9) ficam

$$\sigma_{xx}(B) = \sum_n \int d^3k \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta_l^+ + \eta_l^-}{1 + (l\mu_T B)^2} \quad (8.11)$$

$$\sigma_{xy}(B) = \sum_n \int d^3k \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l\mu_T B(\eta_l^+ - \eta_l^-)}{1 + (l\mu_T B)^2} \quad (8.12)$$

A característica essencial do resultado modificado de McClure [equações (8.11) e (8.12)] é que os elementos de condutividade são expressos como somas e integrais sobre termos que tem a dependência de campo simples como expressada em (8.1). Para superfícies de Fermi com regiões côncavas e convexas, η_l^+ e η_l^- serão não nulos, resultando em termos de elétrons e buracos na equação (8.12). De fato, pode-se definir outro par de funções de densidade de condutividade $S^\pm(\mu)$ por

$$S^\pm(\mu) = \sum_n \sum_{l=1}^{\infty} \int d^3k \eta_l^\pm(n, E, k_z) \delta[\mu - l\mu_T(n, E, k_z)] \quad (8.13)$$

tal que

$$\sigma_{xx}(B) = \int_0^\infty d\mu \frac{S^+(\mu) + S^-(\mu)}{1 + (\mu B)^2} \quad (8.14)$$

$$\sigma_{xy}(B) = \int_0^\infty d\mu \mu B \frac{S^+(\mu) - S^-(\mu)}{1 + (\mu B)^2} \quad (8.15)$$

$$(8.16)$$

Finalmente, adotando a convenção de que elétrons têm *mobilidade negativa* e buracos *mobilidade positiva*, de modo a que a condutividade em campo nulo seja positiva para elétrons e buracos, define-se $s(\mu)$ como

$$s(\mu) = \begin{cases} S^+(\mu) & , \mu > 0 \\ S^-(|\mu|) & , \mu < 0 \end{cases} \quad (8.17)$$

e chega-se a

$$\sigma_{xx}(B) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \frac{s(\mu)}{1 + (\mu B)^2} \quad (8.18)$$

$$\sigma_{xy}(B) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \frac{\mu B s(\mu)}{1 + (\mu B)^2} \quad (8.19)$$

ou

$$\hat{\sigma}(B) \simeq \sigma_{xx}(B) + i\sigma_{xy}(B) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu s(\mu) \frac{1 + i\mu B}{1 + (\mu B)^2} \quad (8.20)$$

As Equações (8.18) e (8.19) são o resultado de Beck e Anderson que corresponde à projeção do espaço $\hat{\sigma}(B) \times B$ no espaço $s(\mu) \times \mu$. Como pôde ser apreciado no decorrer do desenvolvimento, essa transformada *depende* da topologia no espaço de momentos, da massa dos elétrons

e da própria temperatura do material envolvido, além do particular modelo para os tempos de relaxação.

Por conseguinte, e como salientado por Beck e Anderson, a função $s(\mu)$ não pode ser determinada univocamente, mas pode-se determinar uma função $S(\mu) = \max[s(\mu)]$ que para cada μ fornece o máximo valor fisicamente aceitável de s compatível com o particular conjunto de dados de $\hat{o}(B)$, como será visto na seção seguinte.

8.3 O espectro de mobilidade

O desenvolvimento matemático para a determinação da função envoltória $S(\mu)$ é bastante simples embora matematicamente extenso, estando bastante claro o desenvolvimento no artigo de Beck e Anderson [72]. O presente texto limita-se apenas ao esclarecimento dos pontos cruciais desse artigo que conduzem ao espectro de mobilidade $S(\mu)$.

O artifício matemático para a obtenção do espectro de mobilidade vem da aplicação do teorema de Krein[72] ao problema presente, o qual afirma que deve haver pelo menos uma solução física $s(\mu)$ (funcionalmente, para todo o μ a função envoltória é tal que $S(\mu) \geq s(\mu)$) se e somente se a matriz associada A , dada por

$$A_{\gamma\beta} = \begin{cases} \sum_{k=1}^N (\sigma_{xx})_k (C_R^{-1})_{k,(\gamma+\beta)/2} & , (\gamma + \beta) \text{ par} \\ \sum_{k=1}^N (\sigma_{xy})_k (C_I^{-1})_{k,(\gamma+\beta-1)/2} & , (\gamma + \beta) \text{ impar} \end{cases} \quad (8.21)$$

não for definida negativa, ou seja, não tenha auto-valores negativos. Na equação (8.21), $(\sigma_{xx})_k$ e $(\sigma_{xy})_k$ são os elementos de condutividade em campos B_k e N é o número de valores de campo magnético onde as medidas foram efetuadas. C_R^{-1} e C_I^{-1} são matrizes $N \times N$ inversas de C_R e C_I .

Considerando que o valor das condutividades não incluem o valor de campo nulo, os elementos de C_R são definidos pela função geratriz

$$\sum_{j=1}^N C_{Rjk} x^{2(j-1)} = \prod_{\rho=1, \rho \neq k} (1 + x^2 B_\rho^2)$$

e os elementos de C_I por

$$C_{Ijk} = -C_{Rjk} B_k$$

Caso o valor para as condutividades em campo nulo seja considerado, e sendo $B_1 = 0$, o algoritmo para a obtenção de C_I é

```

 $N \leftarrow N - 1;$ 
 $C_{Ijk} \leftarrow -C_{j(k+1)}^R B_{k+1};$ 
 $C_I^{-1} \leftarrow \text{inversa}(C_I);$ 
for  $j:=1$  to  $N$  do
begin
 $C_I^{-1}_{1j} \leftarrow 0;$ 
 $C_I^{-1}_{j1} \leftarrow 0$ 
end;
for  $i:=2$  to  $N$  do
for  $j:=1$  to  $N-1$  do
 $C_I^{-1}_{ij} \leftarrow C_I^{-1}_{(i-1)j};$ 

```

O espectro de mobilidade pode ser então gerado a partir da relação

$$S(\mu) = \prod_{i=1}^N [1 + (B_i \mu)^2] \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{\left[\sum_{j=1}^N (-\mu)^{j-1} Q_{ji} \right]^2}{\lambda_i} \right\}^{-1} \quad (8.22)$$

onde λ_i são os autovalores de A e Q é a matriz ortonormal cujas colunas são os autovetores de A .

A idéia básica da inclusão dos autovalores e autovetores da matriz A vem da noção de que o conjunto de dados $\sigma(B) \times B$ ser fisicamente plausível ou não. De acordo com Beck e Anderson[72], para verificar-se se um conjunto de dados é fisicamente plausível ou não, subtraem-se uma contribuição elementar de condutividade, associada à densidade de mobilidade

$$s(\mu') = s' \delta(\mu - \mu')$$

das componentes do tensor de condutividade. Ou seja, dos pontos originais $\sigma_{xx}(B)$ e $\sigma_{xy}(B)$ subtrai-se as respectivas contribuições elementares de condutividade

$$\begin{aligned} \sigma'_{xx}(B) &= \sigma_{xx}(B) - \frac{s'}{1 + (\mu' B)^2} \\ \sigma'_{xy}(B) &= \sigma_{xy}(B) - \frac{\mu' s' B}{1 + (\mu' B)^2} \end{aligned}$$

e verifica-se se os dados resultantes $\sigma'_{xx}(B)$ e $\sigma'_{xy}(B)$ são fisicamente plausíveis. Ou seja, assim determina-se matematicamente a função envoltória $S(\mu)$ tida como a função majorante de todos os modelos físicos possíveis para um conjunto de dados $\sigma \times B$, ou seja, se o conjunto de dados $\sigma \times B$ é oriundo de uma função $s(\mu)$, tem-se que $S(\mu) \geq s(\mu)$ para todo o μ . Matematicamente,

o conjunto de dados é fisicamente plausível se e somente se a matriz A não possuir autovalores negativos.

O procedimento numérico para a obtenção do espectro de mobilidade foi incorporado no programa SIMP, havendo sido testado primeiramente com dados gerados para ρ_{xx} e ρ_{xy} a partir de um modelo simples de vários portadores com diferentes mobilidades de transporte e comparado com um ajuste simultâneo das componentes do tensor de magnetoresistividade com o mesmo modelo. Os resultados do espectro de mobilidade, tanto para os dados gerados quanto para uma amostra δ -dopada, são mostrados nas Seções 8.5 e 8.6, respectivamente.

8.4 A região clássica da magnetoresistência

Antes de se passar a discussão das seções seguintes, é mostrado nesta seção a região de campo magnético da qual é possível a extração do espectro de mobilidade. Essa região é denominada de "clássica" já que os resultados para o tensor de magnetoresistividade não apresentam efeitos quânticos como as oscilações de SdH, a magnetoresistência negativa e o efeito Hall quântico, não previstos pela formulação de Boltzmann para o tensor.

Figura 8.1: Componente ρ_{xx} do tensor de resistividade para um poço δ (amostra MAR124). Região I - manifestação da magnetoresistência negativa. Região II - região clássica, aonde não se manifestam os efeitos quânticos das regiões I e III. Região III - manifestação das oscilações SdH.

Essa região está compreendida, em amostras δ -dopadas, entre as regiões de baixo campo onde é visível a manifestação da magnetoresistência negativa e a região de alto campo magnético

aonde se manifestam as oscilações de Shubnikov-de Haas, como visto na Figura 8.1.

A assinatura da magnetoresistência negativa é claramente vista na Região I (Fig. 8.1), caracterizada por um decréscimo da resistividade em função do campo magnético não previsto pela teoria clássica de transporte. O mecanismo que origina a magnetoresistência negativa pode ser determinado, segundo Al'tshuler et al.[76], verificando a dependência em temperatura e em campo magnético da região aonde esse fenômeno se apresenta. A determinação dos mecanismos que ocasionam tal fenômeno é objeto de controvérsia na literatura e não será discutido neste trabalho. Alguma literatura a respeito pode ser encontrada na Ref. [76] e na revisão de Lee[77].

Na região III começam a surgir as oscilações SdH correspondentes, neste caso, à terceira sub-banda ocupada. A determinação das mobilidades de transporte via espectro de mobilidade, como já comentado, terão de ser efetuadas utilizando os dados do tensor de resistividade nos campos da região II.

8.5 O efeito da posição e do tamanho dos contatos na obtenção do tensor de resistividade

A fim de ser testado o efeito da posição de contatos puntiformes na obtenção do tensor de resistividade e o formalismo do espectro de mobilidade, foi simulada uma experiência com uma amostra quadrada com duas populações de elétrons não interagentes. Essa amostra hipotética tem como densidade de portadores $N_1 = 2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $N_2 = 1,5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, e como mobilidades de transporte $\mu_{T1} = 0,1 \text{ m}^2/\text{Vs}$ e $\mu_{T2} = 0,2 \text{ m}^2/\text{Vs}$.

Os dados de ρ_{xx} e ρ_{yx} foram gerados a partir do modelo

$$\begin{aligned}\rho_{xx}(B) &= \frac{\sigma_{xx}(B)}{\sigma_{xx}^2(B) + \sigma_{xy}^2(B)} \\ \rho_{yx}(B) &= -\frac{\sigma_{xy}(B)}{\sigma_{xx}^2(B) + \sigma_{xy}^2(B)} \\ \sigma_{xx}(B) &= \sum_i \frac{eN_i\mu_{Ti}}{1 + (\mu_{Ti}B)^2} \\ \sigma_{xy}(B) &= -\sum_i \frac{eN_i\mu_{Ti}^2 B}{1 + (\mu_{Ti}B)^2}\end{aligned}\quad (8.23)$$

que é uma representação adequada do fundo magnetoresistivo para amostras com duas populações de elétrons não interagentes.

Foi simulada uma experiência onde foram situados quatro contatos na amostra sobre as diagonais do quadrado de lado unitário e equidistantes de seus cantos segundo o parâmetro d (Figura 8.2). É conhecido que o método de van der Pauw para a determinação da componente ρ_{xx} do tensor de resistividade fornece corretamente esse valor desde que os contatos sejam pontuais ou muito menores que as dimensões da amostra, e que estejam situados em sua periferia. Na presente simulação:

- calculam-se as componentes do tensor de resistividade;
- assume-se que os contatos estejam na periferia;

- calculam-se os fatores F geométricos conforme estão descritos no Apêndice, e multiplicam-se as componentes do tensor por esses fatores;
- extraem-se as componentes $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{yx}(B)$ segundo o método de van der Pauw.
- determinam-se μ_T e N ; ajustando-se as componentes do tensor pelas expressões (8.23) e pelo espectro de mobilidade

Figura 8.2: Evolução do formato do espectro de mobilidade com o número de valores de ρ_{xx} e de ρ_{yx} utilizados para a sua obtenção. Os rótulos inseridos na figura representam esse número utilizado, que foram tomados igualmente espaçados de 0 a 3 Teslas. A figura inserida é uma esquematização da amostra aonde é mostrado o parâmetro d

Numa situação extrema, o parâmetro d foi tomado como $d = 0,37$. Se d fosse 0,5, o espectro de mobilidade consistiria de dois picos situados em $\mu_T = 0,1 \text{ m}^2/\text{Vs}$ e $\mu_T = 0,2 \text{ m}^2/\text{Vs}$ com alturas $N = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N = 1,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente.

O espectro de mobilidade fornece o número máximo de portadores em função da mobilidade compatível com os dados do tensor de resistividade fornecido [72], para elétrons não interagentes (veja a Seção 8.6). Pela figura 8.2 vê-se que a medida em que aumentamos o número de pontos (tomados igualmente espaçados no intervalo de 0 a 3 Teslas), os picos correspondentes a ambos os portadores da simulação tornam-se melhor resolvidos. A partir de um certo número de pontos tomados, a resolução do espectro não melhora. Como observado por Beck e Anderson [72], isto é uma limitação da informação contida nos dados Hall dependentes do campo. Por outro lado, com o aumento do número de campos tomados dos dados simulados, a resolução dos picos do espectro oscila (embora o valor do pico permaneça aproximadamente constante) devido ao fato de que [72] para que melhor se resolva um determinado pico num determinado μ , dados em $B = 1/\mu$ devem ser fornecidos. Neste caso, os dados que fornecem a função envoltória mais estreita correspondem a 7 valores igualmente espaçados em B .

No que diz respeito aos valores fornecidos pelo espectro de mobilidade, estes são comparados na tabela abaixo com os valores obtidos por um ajuste de mínimos quadrados simultâneo das equações (8.23), mostrando um bom acordo.

	Densidades ($\times 10^{12} \text{cm}^{-2}$)			Mobilidades (m^2/Vs)	
	N_1	N_2	N_d	μ_{T1}	μ_{T2}
Espectro de mobilidade	2,34	1,43	3,77	0,096	0,19
Mínimos quadrados	2,26	1,57	3,83	0,091	0,19

Na figura 8.3, compararam-se os dois ajustes efetuados mostrando que o espectro de mobilidade fornece um bom acordo com o método de mínimos quadrados empregue.

Figura 8.3: Ajuste dos dados de ρ_{xx} e de ρ_{xy} a partir de μ e n obtidos pelo espectro de mobilidade (círculos) e pelo ajuste de mínimos quadrados (quadrados). A linha cheia corresponde à componente do tensor de resistividade obtida com os contatos na periferia da amostra enquanto a linha tracejada aos dados obtidos a partir da simulação com os contatos fora da periferia da amostra, com parâmetro $d=0,37$.

Como conclusão, o efeito da posição dos contatos deve ser considerado para uma obtenção precisa das componentes do tensor de resistividade quando da utilização da técnica de van der Pauw. Esta dificuldade pode ser contornada utilizando-se a formulação dada no Apêndice.

8.6 O tensor de condutividade em sistemas 2D

Nesta seção serão apresentados os resultados experimentais obtidos para as componentes do tensor de condutividade em uma amostra δ -dopada de InP. Esses resultados serão analisados pela técnica do espectro de mobilidade apresentada neste capítulo.

Os valores obtidos pelo espectro de mobilidade em sistemas 2D serão interpretados de acordo com a formulação de Siggia e Kwok[58] para o transporte em sistemas de múltiplas subbandas.

Os valores teóricos para as mobilidades de transporte foram calculadas pelo modelo RPA apresentado no capítulo 5 e comparados com aqueles fornecidos pelo espectro de mobilidade para a amostra estudada.

8.6.1 A interpretação do espectro de mobilidade em sistemas 2D

As expressões para o tensor de condutividade em sistemas 2D foram obtidas a partir da modelagem das mobilidades de transporte por Zaremba[78] a partir dos resultados de Siggia e Kwok[58] para sistemas com mais de um portador, a $T = 0K$. Zaremba mostra em seu artigo que, em geral, um sistema bi-dimensional com n portadores distintos *interagentes* com mobilidades de transporte μ_{Tj} comporta-se como um sistema de n portadores *não interagentes* com densidades individuais $\hat{N}_j$ e mobilidades de transporte $\hat{\mu}_{Tj}$.

Zaremba deduziu que a matriz $\mathcal{K}$ da formulação teórica do transporte em sistemas de múltiplas subbandas de Siggia e Kwok[58] pode ser diagonalizada e que o tensor de condutividade pode ser escrito como, em unidades atômicas efetivas,

$$\sigma_{xx}(B) = \sum_{j=1}^n \frac{\hat{N}_j \hat{\mu}_{Tj}}{1 + (\hat{\mu}_{Tj} B)^2} \quad (8.24)$$

$$\sigma_{xy}(B) = \sum_{j=1}^n \frac{\hat{N}_j \hat{\mu}_{Tj}^2 B}{1 + (\hat{\mu}_{Tj} B)^2} \quad (8.25)$$

$$\hat{\mu}_{Tj} = \frac{1}{\lambda_j} \quad (8.26)$$

$$\hat{N}_j = (n^{1/2} \cdot \mathbf{u}_j)^2 \quad (8.27)$$

$$n^{1/2} = (N_1^{1/2}, N_2^{1/2}, \dots) \quad (8.28)$$

onde λ_j são os autovalores da matriz $\mathcal{K}$ e $\mathbf{u}_j$ é o autovetor de $\mathcal{K}$ associado ao autovalor λ_j .

Logo, de acordo com o modelo matemático de Siggia e Kwok, o espectro de mobilidade deverá apresentar um número de picos *igual* ao número de populações de portadores presentes e centrados nas mobilidades aparentes $\hat{\mu}_{Tj}$ com altura $\hat{N}_j$. Portanto, para um particular sistema com dois portadores, os elementos de matriz $\mathcal{K}_{jj}$ devem ser calculados se desejar-se obter as mobilidades individuais de transporte.

8.6.2 Resultados e discussão

Para ilustrar a importância do modelo teórico na determinação das mobilidades individuais de transporte, efetuaram-se medidas do tensor de magnetoresistência em uma amostra contendo um único poço a $T = 20$ e $120K$, em campos que iam de 0 a 6 Teslas e a $T = 4,2 K$ em campos que iam de 0 a 14 Teslas. Foi fabricado na amostra uma máscara do tipo Hall bar e as medidas de magnetoresistência a temperaturas altas (20 e 120 K) foram efetuados pelo grupo do Dr. Koenraad.

Inicialmente, a amostra foi caracterizada a 4,2 K a fim de serem extraídos os parâmetros característicos, a densidade total de portadores N e a largura a meia altura da distribuição de doadores Δ_d . A partir desses parâmetros foi obtida a estrutura eletrônica autoconsistente da amostra a 20 e a 120K e calculadas as mobilidades de transporte teóricas. Posteriormente, foram determinadas, a partir do espectro de mobilidade e de um ajuste de mínimos quadrados simultâneo das componentes do tensor de magnetocondutividade à expressão (8.25), as mobilidades e densidades aparentes para a amostra. No caso particular dessa amostra, não foi

possível a obtenção do espectro de mobilidade a 4,2 K porque a região clássica da magnetoresistividade é bastante estreita sendo essa região bastante aumentada para as altas temperaturas. Os resultados estão sumarizados nas Tabelas 8.1 e 8.2, e nas Figuras 8.4, 8.5 e 8.6.

Calculados(Espectro de mobilidade)						
T (K)	$N_1(\hat{N}_1)$	$N_2(\hat{N}_2)$ $\times 10^{12} \text{cm}^{-2}$	$N_3(\hat{N}_3)$	$\mu_{T1}(\hat{\mu}_{T1})$	$\mu_{T2}(\hat{\mu}_{T2})$ m^2/Vs	$\mu_{T3}(\hat{\mu}_{T3})$
4,2	1,48(-)	0,34(-)	0,07(-)	0,182(-)	0,429(-)	1,12(-)
20	1,45(1,50)	0,34(0,41)	0,07(-)	0,182(0,12)	0,427(0,40)	1,10(-)
120	1,11(1,24)	0,26(0,50)	0,11(0,19)	0,220(0,12)	0,445(0,45)	-(0,99)

Tabela 8.1: Amostra 118. A partir das frequências de SdH, $B1 = 30,9$ e $B2 = 7,16$ Teslas, a $T=4,2$ K, os parâmetros característicos dessa amostra foram obtidos como sendo $N = 1,9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $\Delta_d = 2 \text{ Å}$. A partir desses parâmetros, as densidades nas subbandas para as várias temperaturas foram obtidas através do cálculo autoconsistente (Seção 2.1). As densidades e mobilidades aparentes, $\hat{N}_i$ e $\hat{\mu}_{Ti}$, foram extraídas a partir do espectro de mobilidade. As mobilidades de transporte foram calculadas a partir do modelo RPA do Capítulo 5

Espectro de mobilidade (Ajuste de mínimos quadrados)						
T (K)	$\hat{N}_1$	$\hat{N}_2$ $\times 10^{12} \text{cm}^{-2}$	$\hat{N}_3$	$\hat{\mu}_{T1}$	$\hat{\mu}_{T2}$ m^2/Vs	$\hat{\mu}_{T3}$
20	1,50(1,58)	0,41(0,33)	-	0,12(0,13)	0,40(0,48)	-
120	1,24(1,13)	0,50(0,49)	0,19(0,33)	0,12(0,12)	0,45(0,33)	0,99(0,85)

Tabela 8.2: Amostra 118. Tabela comparativa entre os valores determinados pelo ajuste de mínimos quadrados e pela obtenção através do espectro de mobilidade.

Figura 8.4: Ajuste do tensor de magnetocondutividade de um sistema com vários portadores livres utilizando-se um método de mínimos quadrados, a $T=120\text{K}$. Foram utilizados 60 pontos logaritmicamente espaçados para cada componente do tensor entre 0,06 and 6 Teslas. (a1) e (a2) Ajuste limitado a dois portadores livres; (b1) e (b2) O melhor ajuste permitindo três portadores. A soma dos resíduos ao quadrado é de $1,25 \times 10^{-9}$ no primeiro caso e de $6,9 \times 10^{-10}$ no segundo caso.

Figura 8.5: O mesmo ajuste da figura anterior, a $T=20K$, com 60 pontos logaritmicamente espaçados para cada componente do tensor entre 0,6 and 6 Teslas. O ajuste foi limitado a permitir apenas dois portadores. Nenhuma melhora foi observada permitindo mais de dois portadores livres no ajuste.

Figura 8.6: Espectro de mobilidade para a amostra 118 a $T = 20$ e $120K$. As linhas pontilhadas representam o desvio do espectro se for assumido um erro de 1% nas componentes do tensor de resistividade

Os resultados da Tabela 8.1 mostram um bom acordo entre as densidades e mobilidades calculadas e aquelas obtidas pelo espectro de mobilidade, para $T = 20$ K. Isso sugere que tanto as mobilidades e as densidades aparentes devem ser parecidas com as reais, devido a independência linear das funções presentes no somatório da Eq. (8.25). Entretanto, a discrepância entre as mobilidades μ_{T1} e $\hat{\mu}_{T1}$ mostra que existe um forte espalhamento inter-subbandas entre a subbanda fundamental e a terceira subbanda, a qual não é detectada a $T = 20$ K. De fato, as mobilidades para a segunda subbanda permanecem praticamente inalteradas devido a ausência de espalhamento inter-subbanda. Isto é indicativo que as mobilidades de transporte dependem do recobrimento entre funções de onda de subbandas com a mesma paridade. Por outro lado, o acordo entre densidades piora à medida em que a temperatura aumenta. Como fato surpreendente, cabe notar-se o acordo entre as mobilidades na terceira subbanda, que apesar de não serem detectadas a temperaturas mais baixas, a tendência mostrada é de convergência para o valor de $T = 120$ K. A partir dos dados calculados para o tensor de Siggia e Kwok foi possível determinar as mobilidades aparentes, ou seja, aquelas que o espectro de mobilidade apresenta na posição dos picos. Esses dados não são apresentados pois esse procedimento fornece valores não físicos para as mobilidades e densidades individuais, sugerindo este fato que o modelo para o cálculo das mobilidades deva ser re-investigado.

Na Tabela 2 é mostrado que existe um bom acordo entre os resultados fornecidos pelo espectro de mobilidade e aqueles fornecidos pelo ajuste simultâneo das componentes do tensor de magnetocondutividade, mesmo sendo desprezados os efeitos de temperatura na Eq. 8.25.

8.6.3 Conclusões

Foi observado no decorrer de todo o texto que o modelo RPA produz uma descrição adequada para as mobilidades quânticas e seria esperada uma boa descrição para as mobilidades de transporte. Se forem comparados diretamente os resultados obtidos a partir do espectro de mobilidade com os valores calculados para as mobilidades de transporte, ou seja, assumindo que o espalhamento inter-subbandas possa ser desprezado, mesmo assim existe uma concordância aceitável entre os valores experimentais e teóricos.

Foi tentada a obtenção das mobilidades e densidades aparentes a partir dos resultados teóricos obtidos para as mobilidades de transporte. Por um lado, o efeito de temperatura foi desprezado e os resultados teóricos foram calculados tomando-se $T=0$ K. Por outro lado, as contribuições ao espalhamento devidas às populações acima do nível de Fermi foram desprezadas. A soma destes fatores pode ter sido responsável pelo pouco sucesso dessa tentativa e abre perspectivas para a investigação de sistemas δ -dopados em altas temperaturas.

De qualquer modo, foi mostrado neste capítulo que a técnica do espectro de mobilidade é confiável e que a obtenção experimental das mobilidades de transporte em sistemas 2D com múltiplas subbandas não é possível sem um modelo teórico para o espalhamento.

Apêndice - Sistema atômico efetivo

Para o estudo das propriedades eletrônicas de sistemas epitaxiais é conveniente expressarem-se os resultados tomando-se

- a carga do elétron (e) como unidade elementar de carga,
- a massa efetiva do elétron (m) como unidade elementar de massa,
- e o raio de Bohr efetivo (a_B), ou o raio da órbita de menor energia de um “átomo de Hidrogênio” de massa reduzida m num meio com constante dielétrica ϵ ,

$$a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m \kappa e^2}$$

como unidade elementar de comprimento, sendo $\kappa = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ com ϵ_0 a constante dielétrica do vácuo.

- o Hartree efetivo (H), ou a energia total do “átomo de Hidrogênio” acima citado,

$$H = \frac{\hbar^2}{ma_B^2}$$

como unidade elementar de energia,

A motivação dessa escolha deve-se a que, em analogia a sistemas de física atômica e molecular, as equações mantêm-se independentes do tipo de heteroestrutura considerada. Em particular, para sistemas δ -dopados, as propriedades ópticas e de transporte permanecem *invariantes* a menos do escalonamento do sistema de unidades em termos de massa efetiva e da constante dielétrica do cristal hospedeiro.

O sistema atômico efetivo pode ser construído de igual modo, efetuando-se a análise dimensional das grandezas acima definidas, como tendo

- a carga do elétron (e) como unidade elementar de carga,
- a massa efetiva do elétron (m) como unidade elementar de massa,
- o raio de Bohr efetivo (a_B) como unidade elementar de comprimento e
- e o tempo efetivo ($\frac{m a_B}{\hbar}$) como a unidade de tempo.

Na Tabela 8.3, exprimimos algumas unidades no sistema atômico com suas equivalentes mais freqüentes na literatura

Grandeza	Unidade	Dimensão	SI	InP	GaAs
m	massa efetiva	$[M]$	m	$0,08 m_o$ [53]	$0,067 m_o$
ϵ	constante dielétrica	-	-	11,8 [18]	12,56
a_B	raio de Bohr efetivo	$[L]$	$\frac{\epsilon \hbar^2}{m \kappa e^2}$	77,96 Å	99,087 Å
H	Hartree efetivo	$[M][L]^2[T]^{-2}$	$\frac{\hbar^2}{m a_B^2}$	15,67 meV	11,585 meV
μ_o	mobilidade	$[M]^{-1}[T][Q]$	$\frac{e a_B^2}{\hbar}$	923,4 cm ² /Vs	1491,7 cm ² /Vs
B_o	campo magnético	$[M][T]^{-1}[Q]^{-1}$	$\frac{\hbar}{e a_B^2}$	10,8 Teslas	6,7 Teslas

Tabela 8.3: Constantes físicas para o InP e GaAs

Apesar de que todos os resultados que serão apresentados neste trabalho sejam efetuados dentro da aproximação de massa efetiva, vale ressaltar que, em alguns semicondutores do grupo III-V, a invariância de propriedades pode ser estendida se considerarmos também a correção de não parabolicidade do semicondutor hospedeiro, como mostrado por Johnson *et al.*[79]. Os autores da Ref. [79] mostraram que para semicondutores hospedeiros, de gap direto, do grupo III-V (nomeadamente GaAs, GaSb, InSb, InAs e InP), quaisquer propriedades (funções de onda, preenchimento de subbandas ou energias de subbandas) serão independentes do material hospedeiro desde que medidas em unidades apropriadas, mesmo que tenhamos que considerar a não parabolicidade.

Apêndice - Determinação das componentes de ρ em geometria retangular

Como já discutido anteriormente, o valor absoluto de ρ é importante se for desejada a obtenção das mobilidades de transporte de um sistema δ -dopado ou de outro tipo qualquer de sistema, ou seja, a determinação das componentes do tensor é fortemente dependente da geometria da amostra. O problema da geometria é minimizado quando opta-se pelo fabrico de uma máscara na amostra a ser estudada, o que envolve processos de litografia, os quais não são disponíveis a baixo custo. Uma técnica amplamente utilizada na literatura para a obtenção das componentes do tensor de resistividade é a *técnica de van der Pauw* [17], que consiste no fabrico de quatro contatos puntiformes na periferia da amostra e conseqüente eliminação da geometria através de duas medidas.

Duas limitações evidentes da técnica de van der Pauw são a não precisão da localização dos contatos na periferia e sua não puntiformidade. Na literatura, alguns autores abordaram esses problemas de modo a estenderem a técnica de van der Pauw. De acordo com Chwang *et al.*[16], a correção nas componentes do tensor de resistividade para contatos não puntiformes localizados na periferia de uma amostra quadrada é menor que 0,6%, independentemente do formato dos contatos, desde que eles ocupem uma área menor que 1% da área total da amostra. Perloff[15] estudou a dependência da resistividade em campo nulo na posição de contatos puntiformes situados em qualquer sítio de uma amostra retangular.

A dependência das componentes do tensor de magnetoresistência, até onde foi pesquisado na literatura, não foi estudada. Neste Apêndice é calculada a dependência dessas componentes na posição dos contatos em amostras retangulares.

Em uma amostra de formato genérico, sujeita a um determinado campo magnético B , com quatro contatos situados em seu interior, uma corrente I é aplicada entre dois contatos e a diferença de potencial $\Delta V(I, B)$ é medida entre outros dois. A expressão mais geral para a diferença de potencial obtida nesta situação é

$$V(I, B) = \frac{I}{d} \{F^{xx}\rho_{xx}(B) + F^{yx}\rho_{yx}(B)\} \quad (8.29)$$

onde d é a espessura da amostra, $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{yx}(B)$ são as componentes do tensor de resistividade e F^{xx} e F^{yx} são fatores geométricos relativos as respectivas componentes do tensor, dependentes apenas da geometria da amostra e da geometria dos próprios contatos.

Fatores geométricos em amostras retangulares com contatos puntiformes

Para derivar uma expressão particular para os fatores de correção, utilizaremos a técnica de mapeamento conforme utilizada por Perloff[15]. Esse autor determinou o fator de correção geométrico para a componente transversal ρ_{xx} . Nesta seção apresenta-se brevemente o formalismo necessário para a obtenção das correções para essa componente e também o resultado para a correção geométrica de ρ_{xy} .

O mapeamento é escolhido de tal modo que um retângulo situado no plano xy seja conformemente mapeado para o semi-plano superior do plano uv .

As coordenadas (u,v) podem ser expressas em termos de funções de Jacobi elípticas sn , cn e dn [62]

$$\begin{aligned} u(x,y) &= \frac{sn(x',m)dn(y',m_1)}{\Lambda} \\ v(x,y) &= \frac{cn(x',m)dn(x',m)sn(y',m_1)cn(x',m_1)}{\Lambda} \end{aligned}$$

com

$$\Lambda = cn^2(y',m_1) + msn^2(x',m)sn(y',m_1)$$

e

$$x' = 2K(m)\frac{x}{a}y' = 2K(m)\frac{y+b/2}{a}$$

onde a e b são as dimensões do retângulo.

O parâmetro m satisfaz

$$\frac{K(m_1)}{K(m)} = 2\frac{b}{a}$$

onde $K(m)$ é a integral elíptica de primeiro tipo, definida por

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - m\sin^2\phi)^{-1/2} d\phi$$

e

$$m_1 = 1 - m$$

O valor de m , função da razão b/a , pode ser obtido através da expansão

$$e^{-2\pi b/a} = \frac{m}{16} + 8\left(\frac{m}{16}\right)^2 + 84\left(\frac{m}{16}\right)^3 + 992\left(\frac{m}{16}\right)^4 + \dots$$

Na discussão a seguir, as coordenadas no espaço conforme de um ponto α são expressas sinteticamente na forma

$$[u(x,y), v(x,y)] = [u_\alpha, v_\alpha]$$

Assumindo que a corrente entra pelo contato β e sai pelo contato α , a voltagem $\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(B)$ é lida entre μ e ν .

$$\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(B) = \frac{I}{d} \{F^{xx}\rho_{xx}(B) + F^{yx}\rho_{yx}(B)\} \quad (8.30)$$

os fatores geométricos da Equação (8.30) F^{xx} e F^{yx} serão dados por

$$F^{xx} = \frac{1}{4\pi} \ln \frac{a_{\nu\alpha}a_{\mu\beta}}{a_{\nu\beta}a_{\mu\alpha}} \quad (8.31)$$

$$F^{xy} = s_{\nu\beta} + s_{\mu\alpha} - s_{\mu\beta} - s_{\nu\alpha} \quad (8.32)$$

onde

$$\begin{aligned} a_{\nu\alpha} &= \{(v_\nu - v_\alpha)^2 + (u_\nu - u_\alpha)^2\} \{(v_\nu + v_\alpha)^2 + (u_\nu - u_\alpha)^2\} \\ s_{\nu\alpha} &= \frac{1}{2}\theta(u_\nu - u_\alpha) - \frac{1}{2\pi} \left[\text{atan} \left(\frac{v_\nu - v_\alpha}{u_\nu - u_\alpha} \right) + \text{atan} \left(\frac{v_\nu + v_\alpha}{u_\nu - u_\alpha} \right) \right] \end{aligned}$$

sendo Θ a função de Heaviside.

A componente F_{xx} obtida é idêntica àquela obtida por Perloff para campo magnético nulo. Adicionalmente, uma componente F_{yx} é obtida quando da aplicação de um campo magnético uniforme.

A partir das propriedades de simetria do tensor de resistividade,

$$\begin{aligned} \rho_{xx}(B) &= \rho_{xx}(-B) \\ \rho_{xy}(B) &= -\rho_{xy}(-B) \end{aligned}$$

e partir da expressão de $\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\beta\alpha}(B)$ dada pela Equação (8.30), isolam-se finalmente as componentes do tensor como:

$$\begin{aligned} \rho_{yx}(B) &= \frac{\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(B) + \mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(-B)}{2I} (s_{\nu\beta} + s_{\mu\alpha} - s_{\mu\beta} - s_{\nu\alpha})^{-1} \\ \rho_{xx}(B) &= \frac{\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(B) - \mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(-B)}{2I} \frac{4\pi}{\ln \frac{a_{\nu\alpha}a_{\mu\beta}}{a_{\nu\beta}a_{\mu\alpha}}} \end{aligned}$$

Este resultado estabelece que, para amostra com quatro contatos são necessárias duas medidas para que as componentes do tensor de resistividade sejam isoladas. As expressões acima fornecem, para contatos situados na periferia da amostra, os resultados

$$\begin{aligned} \rho_{yx}(B) &= \frac{\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(B) + \mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(-B)}{2I} \\ \rho_{xx}(B) &= \frac{\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(B) - \mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(-B)}{\mathcal{V}_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(0)} \rho_o \end{aligned}$$

onde ρ_o é a resistividade da amostra em campo nulo.

Bibliografia

- [1] CFC WOOD, G METZE, J BERRY, e LF EASTMAN. Complex free-carrier profile synthesis by 'atomic-plane' doping of MBE GaAs. *J. Appl. Phys.* 51, 333 (1980).
- [2] DG BALLEGER, K NUMELLA, I ADESIDA, C CANEAU, e R BHAT. 0-32 μm gate-length InP-channel MODFET with f above 90 GHz. *Electron. Lett.* 29, 1375 (1993).
- [3] C WANG, J WU, S CHAN, C CHANG, SM SZE, e M FENG. *Japan. J. Appl. Phys.* 34, L1107 (1995).
- [4] B YAVICH, PL SOUZA, M PAMPLONA-PIRES, AB HENRIQUES, e LCD GONÇALVES. Single and periodically Si δ -doped InP grown by LP-MOVPE. *Semicond. Sci. Technol.* 12, 481 (1997).
- [5] EF SCHUBERT. *Doping in III-V Semiconductors*. Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [6] EF SCHUBERT. *Semicond. Semimetals* 40, 1 (1994).
- [7] T SCHMIDT, ST G MÜLLER, KH GULDEN, C METZNER, e GH DÖHLER. In-plane transport properties of heavily δ -doped GaAs $n-i-p-i$ superlattices: Metal-insulator transition, weak and strong localization. *Phys. Rev. B* 54, 13980 (1996).
- [8] LCD GONÇALVES. Topologia da Superfície de Fermi em GaAs dopado periodicamente com Si. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo - IFUSP, 1994.
- [9] AB HENRIQUES e LCD GONÇALVES. Crossover from two- to three-dimensional electronic structure in Si spike doped GaAs superlattices. *Surf. Sci.* 305, 343 (1994).
- [10] GQ HAI, N STUDART, e FM PETERS. Multisubband electron transport in δ -doped semiconductor systems. *Phys. Rev. B* 52, 8363 (1995).
- [11] S YAMADA e T MAKIMOTO. Subband mobility of quasi-two-dimensional electrons in Si atomic layer doped GaAs. *Appl. Phys. Lett.* 57, 1022 (1990).
- [12] OA MEZREN, AV SHK, e VO MEZREN. Gated δ -layer structures. *Semicond. Sci. Technol.* 7, 664 (1992).
- [13] LR GONZÁLEZ, J KRUPSKI, e T SZWACKA. Low-temperature electron mobility in a δ -doped semiconductor. *Phys. Rev. B* 49, 11111 (1994).
- [14] G LI, W XU, P HAWKER, AA ALLERMAN, N HAUSER, e C JAGADISH. Nonlinear electron transport in Si δ -doped GaAs. *Superlatt. Microstruct.* 17, 55 (1995).
- [15] DS PERLOFF. Four-point resistance correction factors for thin rectangular samples. *Solid-State Electron.* 20, 681 (1977).
- [16] R CHWANG, BJ SMITH, e CR CROWELL. Contact size effects on the van der Pauw method for resistivity and Hall coefficient measurement. *Solid-State Electron.* 17, 1217 (1974).
- [17] LJ VAN DER PAUW. A method of measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shapes. *Philips Research Reports* 13, 1 (1958).
- [18] DK SCHRODER. *Semiconductor Material and Device Characterization*. Wiley, New York, 1990.
- [19] G BASTARD. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. Les Ulis: Les Éditions de Physique, 1988.
- [20] EF SCHUBERT. *Delta-doping of semiconductors: electronic, optical and structural properties of materials and devices*, volume 40 de *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, New York, 1994.
- [21] L HEDIN e BI LUNDQVIST. Explicit local exchange-correlation potentials. *J. Phys. C* 4, 2064 (1971).

- [22] L IORJATTI. Thomas-Fermi theory of δ -doped semiconductor structures: Exact analytical results in the high-density limit. *Phys. Rev. B* 41, 8340 (1990).
- [23] J KELBER e CH SCHNITTLER. Carrier density in layer structures of microelectronics: A modified local density approximation for semiconductor layers. *Phys. Stat. Sol. (b)* 135, 783 (1986).
- [24] M TROTT e CH SCHNITTLER. Extension of the local density approximation to a new class of potentials. *Phys. Stat. Sol. (b)* 9, K39 (1989).
- [25] M TROTT. Thomas-Fermi treatment of semiconductor superlattices. *Superlatt. Microstruct.* 9, 223 (1991).
- [26] LM SCARFONE. Weizsäcker correction in the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac models of static dielectric screening in undoped semiconductors: Impurity donor ions in silicon and germanium. *Phys. Rev. B* 45, 8348 (1992).
- [27] E ZAREMBA e HC TSG. Thomas-Fermi-von Weizsäcker hydrodynamics in parabolic wells. *Phys. Rev. B* 49, 8147 (1994).
- [28] M CASAS, A PLASTINO, e A PUENTE. Information theory to a new Thomas-Fermi scheme. *Phys. Lett. A* 184, 385 (1994).
- [29] AS DAVIDOV. *Quantum Mechanics*, volume 1 de *International Series in Natural Philosophy*. Pergamon Press, Oxford, 2 edição, 1991.
- [30] GD MAHAN. *Many particle physics*. Plenum, New York, 2a. edição edição, 1990.
- [31] NH MARCH. The Thomas-Fermi approximation in quantum mechanics. *Advances in Physics* 6, Suppl. B (1957).
- [32] FA REHOREDO e C PROETTO. Noncompensated GaAs sawtooth doping superlattices: self-consistent band structure. *Surf. Sci.* 81, 163 (1992).
- [33] L CHICO, F GARCÍA MOLINER, e VR VELASCO. Electronic structure of periodically δ -doped GaAs:Si. *Phys. Rev. B* 48, 11427 (1993).
- [34] TM SCHMIDT e A FAZZIO. *Ab initio* calculation of electronic properties of periodically δ -doped GaAs. *Phys. Rev. B* 51, 7898 (1995).
- [35] SM SZE. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley, New York, 1980.
- [36] P BLOOD. Capacitance-voltage profiling and the characterisation of III-V semiconductors using electrolyte barriers. *Semicond. Sci. Technol.* 1, 7 (1986).
- [37] H KROEMER, WU-YI CHIEN, JS HARRIS, e DD EDWALL. Measurements of isotype heterojunction barriers by C-V profiling. *Appl. Phys. Lett.* 36, 295 (1980).
- [38] B ULRICH, EF SCHUBERT, JB STARK, e JE CUNNINGHAM. Spatial distribution of impurities in delta-doped n-type GaAs. *Appl. Phys. A* 47, 123 (1988).
- [39] LCD GONÇALVES e AB HENRIQUES. Electronic properties of gated δ -doped semiconductors. *Semicond. Sci. Technol.* 12, 203 (1997).
- [40] B YAVICH, PL SOUZA, M PAMPLONA-PIRES, AB HENRIQUES, e LCD GONÇALVES. Electronic and optical properties of periodically Si delta-doped InP grown by low pressure metalorganic vapor phase epitaxy. *J. Appl. Phys.* 82, 1700 (1997).
- [41] L HART, MR FAHY, e RC NEWMAN FF FEWSTER. X-ray characterization of Si δ -doping in GaAs. *Appl. Phys. Lett.* 62, 2218 (1993).
- [42] RA DROOPAD, SD PARKER, E SKURAS, RA STRADLING, RL WILLIAMS, RB BEAL, e JJ HARRIS. in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II, Transport and Optics*. In G LANDWEHR, editor, *Proc. Int. Conf. (Würzburg, Germany, 1988)*, page 199, Berlin, 1989. Springer.
- [43] MH DEGANI. Electronic properties of multiple Si δ doped GaAs. *J. Appl. Phys.* 70, 4352 (1991).
- [44] PM KOENRAAD, BFA VAN HEST, FAP BLOM, R VAN DALEN, M LEYS, JAAJ PERENBOOM, e JH WOLTER. Quantum- and transport electron mobility in the individual subbands of a two-dimensional electron gas in Si - δ -doped GaAs. *Physica B* 177, 485 (1992).
- [45] AC MACIEL, NI TATHAM, JF RYAN, JM WORLOCK, RR NAHORY, JP HARBISON, e LT FLOREZ. Raman scattering from electronic excitations in periodically delta-doped GaAs. *Surf. Sci.* 228, 251 (1990).

- [46] M-L KE, JS RIMMER, B HAMILTON, JH EVANS, M MISSOUS, KE SINGER, e P ZALM. Radiative transitions associated with hole confinement at Si δ -doped planes in GaAs. *Phys. Rev. B* 45, 14114 (1992).
- [47] AB HENRIQUES e LCD GONÇALVES. Theoretical investigation of the photoluminescence and Fermi surface of periodically δ -doped GaAs. *Semicond. Sci. Technol.* 8, 585 (1993).
- [48] AB HENRIQUES, VN MORGOON, PL DE SOUZA, V BINDILATTI, NF OLIVEIRA JR, e SM SHIBLI. Magnetic breakdown in periodically Si-doped GaAs. *Phys. Rev. B* 49, 11248 (1994).
- [49] AB HENRIQUES. Tight-binding model for the transverse Shubnikov-de Haas effect in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B* 50, 8658 (1994).
- [50] E SKURAS, R KUMAR, RL WILLIAMS, RA STRADLING, JE DMOCHOWSKI, EAQ JOHNSON, A MACKENNON, JJ HARRIS, RE BRALL, C SKIERBSZEWski, J SINGLETON, PJ VAN DER WL, e P WISNIEWSKI. Subband dependent mobilities and carrier saturation mechanisms in thin Si doping layers in GaAs in high density limit. *Semicond. Sci. Technol.* 6, 535 (1991).
- [51] AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, NF DE OLIVEIRA JR., PL DE SOUZA, e B YAVICH. Ionized impurity scattering in periodically δ -doped InP. *Phys. Rev. B* 55, 13072 (1997).
- [52] AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, NF DE OLIVEIRA JR, SM SHIBLI, PL DE SOUZA, e B YAVICH. Quantum transport in periodically δ -doped GaAs. *Z. Phys. B* 104, 457 (1997).
- [53] D SCHNEIDER, D RÜRUP, A PLICHTA, H GRUBERT, A SCHLACHETZKI, e K HANSEN. Shubnikov-de Haas effect and effective mass in n-InP in dependence on carrier concentration. *Z. Phys. B* 95, 281 (1994).
- [54] LG MEINERS. Temperature dependence of the dielectric constant of InP. *J. Appl. Phys.* 59, 1611 (1986).
- [55] NW ASHCROFT e ND MERMIN. *Solid State Physics*. Saunders College Edition, 1976.
- [56] T ANDO, A FOWLER, e F STERN. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.* 54, 437 (1982).
- [57] RD MATTUCK. *A guide to Feynmann diagrams in the many-body problem*. Dover Publications, New York, 2nd edition edição, 1992.
- [58] ED SIGGIA e PC KWOK. Properties of electron in semiconductor inversion layers with many occupied electric subbands. I. Screening and impurity scattering. *Phys. Rev. B* 2, 1024 (1970).
- [59] R FLETCHER, E ZAREMBA, M D'IOIO, CT FOXON, e JJ HARRIS. Persistent photoconductivity and two-bands effects in GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunctions. *Phys. Rev. B* 41, 10549 (1990).
- [60] AB HENRIQUES. Screening in modulation-doped quantum wells: Finite-thickness correction. *Phys. Rev. B* 44, 3340 (1991).
- [61] O MBZREN e A SHIK. Theory of single δ -layer. *Superlatt. Microstruct.* 10, 107 (1991).
- [62] M ABRAMOVITZ e I STEGUN. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, New York, 5th printing edição, 1964.
- [63] LM ROTH e PN ARGYRES. *Magnetic quantum effects*, volume 1 de *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, New York, 1966.
- [64] MB JOHNSON, PM KOENRAAD, WC VAN DER VLEUTEN, HWM SALEMENK, e JH WOLTER. Be delta-doped layers in GaAs imaged with atomic resolution using scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. Lett.* 75, 1606 (1995).
- [65] J KEIMEL, A KRUTZENBICHLER, e G FRITSCH. X-ray reflectivity of multiple delta-type doping profiles in silicon. *Physica B* 198, 253 (1994).
- [66] AB HENRIQUES. Quantum and transport mobilities in δ -doped semiconductors. *Phys. Rev. B* 53, 16365 (1996).
- [67] K PLOOG. Delta-(δ -) doping in MBE-grown GaAs: Concept and device application. *J. Crystal Growth* 81, 304 (1987).
- [68] A DE KEYSER, R BOGAERTS, e G BORGHS. Interplay of 2D and 3D charge carriers in Si-delta-doped InSb layers grown epitaxially on GaAs. *Solid-State Electron.* 40, 395 (1996).
- [69] PM KOENRAAD, AFW VAN DE STADT, JM SHI, GQ HAI, N STUDART, P VANSANT, FM PEETERS, JT DEVBRESE, JAAJ PERENBOOM, e JH WOLTER. Electron mobility in Si delta doped GaAs. *Physica B* 211, 462 (1995).
- [70] GQ HAI e N STUDART. Dependence of the electron mobility on the acceptor concentration in Si δ -doped GaAs. *Phys. Rev. B* 52, R2245 (1995).

- [71] WH PRESS, BP FLANNERY, AA TEUKOLSKY, & WT VETTERLING. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, New York, 1987.
- [72] WA BECK & JR ANDERSON. Determination of electrical transport properties using a novel magnetic field dependent Hall technique. *J. Appl. Phys.* **62**, 541 (1987).
- [73] JW MCCLURE. Field Dependence of Magnetoconductivity. *Phys. Rev.* **101**, 1642 (1956).
- [74] WA BECK, F CROWNE, JR ANDERSON, JR GORSKA, & Z DZIUBA. Analysis of multiband conduction in $HgTe$ by magnetic-field-dependent Hall techniques. *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 2772 (1988).
- [75] WA BECK, RA WILSON, & AO GOLDBERG. Determination of heterojunction mobilities using a novel magnetic field-dependent Hall technique. *J. Crystal Growth* **81**, 136 (1987).
- [76] BL AL'TSHULER, AG ARONOV, AI LARKIN, & KHMEL'NITSKII. Anomalous magnetoresistance in semiconductors. *Sov. Phys. JETP* **54**, 411 (1981).
- [77] PA LEE & TV RAMAKRISHNAN. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [78] E ZAREMBA. Transverse magnetoresistance in quantum wells with multiple subband occupancy. *Phys. Rev. B* **45**, 14143 (1992).
- [79] EA JOHNSON, A MACKINNON, EP O'REILLY, & M SILVER. 'Universal' conduction band structure in some common semiconductor compounds. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 752 (1990).

Trabalhos publicados

Os estudos das propriedades eletrônicas em super-redes δ -dopadas, que deram origem a este trabalho, foram publicados nos seguintes periódicos e conferências, estando suas cópias anexadas ao final da tese:

1. AB HENRIQUES E LCD GONÇALVES. Crossover from two- to three-dimensional electronic structure in Si spike doped GaAs superlattices. *Surf. Sci.* **305**, 343 (1994).
2. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, PL DE SOUZA, e B YAVICH. Sample parameters of degenerate semiconductor superlattices. *Brazilian Journal of Physics* **26**, 327 (1996).
3. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, PL DE SOUZA, e B YAVICH. Characterization of δ -doped superlattices by Shubnikov-de Haas measurements. *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 190 (1996).
4. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, V BINDILATTI, NF OLIVEIRA, JR., PL SOUZA, e B YAVICH. Multisubband scattering in periodically delta-doped InP. *Proc. 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors (Berlin, Germany, 1996)*, pág. 2363, vol. 3. World Scientific.
5. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, V BINDILATTI, NF OLIVEIRA, JR., PL SOUZA, e B YAVICH. Photoluminescence of periodically δ -doped InP in high magnetic fields. *Proc. 12th International Conference on Applications of High Magnetic Fields (Würzburg, Germany, 1996)*, pág. 629, vol 2. World Scientific.
6. LCD GONÇALVES e AB HENRIQUES. Electronic properties of gated δ -doped semiconductors. *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 203 (1997).
7. B YAVICH, PL SOUZA, M PAMPLONA-PIRES, AB HENRIQUES, e LCD GONÇALVES. Single and periodically Si δ -doped InP grown by LP-MOVPE. *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 481 (1997).
8. PL SOUZA, B YAVICH, M PAMPLONA-PIRES, AB HENRIQUES, e LCD GONÇALVES. Electronic and optical properties of periodically Si delta-doped InP grown by low pressure metalorganic vapor phase epitaxy. *J. Appl. Phys.* **82**, 1700 (1997).
9. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, PL SOUZA, e B YAVICH. Magnetic quantum effects in degenerate superlattices. *Brazilian Journal of Physics* **27A**, 38 (1997).
10. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, PL SOUZA, e B YAVICH. Capacitance-voltage profiling of periodically δ -doped semiconductors. *Brazilian Journal of Physics* **27A**, 215 (1997).
11. LCD GONÇALVES, AB HENRIQUES, PL SOUZA, e B YAVICH. Characterization of periodically δ -doped semiconductors by capacitance-voltage profiling. *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 1 (1997).
12. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, NF DE OLIVEIRA JR., PL DE SOUZA, e B YAVICH. Ionized impurity scattering in periodically δ -doped InP. *Phys. Rev. B* **55**, 13072 (1997).
13. AB HENRIQUES, LCD GONÇALVES, NF DE OLIVEIRA JR, SM SHIBLI, PL DE SOUZA, e B YAVICH. Quantum transport in periodically δ -doped GaAs. *Z. Phys. B* **104**, 457 (1997).
14. AB HENRIQUES, S OBUKHOV, LCD GONÇALVES, PL DE SOUZA, e B YAVICH. Band gap renormalization in periodically delta-doped semiconductors. *Phys. Stat. Sol. (a)* **164**, 133 (1997).

Crossover from a two- to three-dimensional electronic structure in Si spike doped GaAs superlattices

A.B. Henriques*, L.C.D. Gonçalves

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20516, 01498 São Paulo, Brazil

(Received 21 April 1993; accepted for publication 23 June 1993)

Abstract

Periodically Si spike doped GaAs with the doping period in the range 100–830 Å was studied by magnetoresistance measurements in tilted fields and by photoconductivity. The angular dependence of the Shubnikov–de Haas oscillations, in conjunction with a self-consistent calculation of the miniband structure is used to construct the Fermi surface. When the doping period decreases, the superlattice potential weakens, and the magnetic breakdown of the superlattice Bragg reflection can be detected. Photoconductivity spectra are described by an absorption threshold at the Fermi energy, which is pushed upwards when the superlattice period decreases.

Spike doping is a technique which can be used to obtain carrier confinement in semiconductor microstructures. In spike doped GaAs, a sheet of shallow donor atoms is localized within a few monolayers of the crystal. The carriers, released from the shallow donors, are confined by a V-shaped space charge potential, a δ -well. In periodically Si δ -doped GaAs (δ -superlattice), several equally spaced dopant sheets are introduced in the crystal. By varying the spacing between the dopant sheets, the strength of the interaction between adjacent δ -wells can be tuned, and the system can be taken from a set of disconnected two-dimensional systems for the widely spaced wells to an essentially anisotropic three-dimensional system for the short period superlattice. The effect of an increasing coupling between adjacent wells when the superlattice period is made shorter has been detected by optical and magneto-transport studies of δ -doped GaAs [1–4].

Periodically Si-doped GaAs grown by MBE was studied by Shubnikov–de Haas (SdH) measurements in tilted fields (0–9 Tesla) and by photoconductivity (PC) at 2 K. The samples were grown by MBE by S.M. Shibli of the Instituto de Física da Universidade de São Paulo. The spacing between the dopant sheets was varied from 830 down to 100 Å, while the doping level per period was kept constant at approximately $2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

First, the transverse SdH spectra (field applied parallel to the growth direction) will be discussed. Fig. 1 shows the inverse field Fourier transform for samples with a superlattice period in the range 830–100 Å. For the 830 Å sample, the δ -wells are disconnected, and three peaks are detected, which correspond to the occupancy of three subbands. The occupancy of the ground-state (E_1) subband, which contains most of the electronic charge, is detected only as a weak peak in the Fourier spectrum, because of its relatively lower mobility due to the strong localization, or short binding length, of

* Corresponding author. Fax: +55 (11) 814-0503.

the E1 electrons [5]. When the δ -well spacing is decreased, the binding length rises, and so does the relative strength of the peaks related to the ground-state miniband occupancy; simultaneously, the widths of the minibands increase, while the number of populated minibands is reduced. For the 100 Å sample, most of the electrons are in the ground-state miniband, which gives rise to a strong peak in the high frequency range of the Fourier spectrum.

The peaks B_i in the Fourier spectra are the extremal cross sections A_i of the Fermi surface in a plane perpendicular to the field direction, in units of $\hbar/2\pi e$. In order to interpret quantitatively the SdH data, it is necessary to know the shape of the Fermi surface, which we calculated self-consistently. The self-consistent procedure included the conduction band non-parabolicity and the exchange-correlation correction in the local density approximation. The input parameters were the superlattice period and the sheet carrier density per period. Details of the calculation procedure are given elsewhere [6].

The Fermi surface has the growth direction as its axis of symmetry, and can be represented by its rotationally symmetric cross section. The

Fig. 1. Fourier spectra of the experimental recordings of the inverse field Shubnikov-de Haas oscillations. The nominal spacing between the δ -wells for each curve is indicated.

Fig. 2. Cross section of the Fermi surface of a δ -superlattice in a plane containing the growth axis. The divisions on the axes are in units of π/a (a is the superlattice period, indicated for each structure).

Fermi surface for the 100 Å superlattice is shown in Fig. 2 in the extended zone scheme. The outer curve, recognized as a cylinder with periodically modulated cross section, is the Fermi surface for the E1 miniband, whereas the next miniband (E2) gives the lens-shaped surface centered around the minizone extremum.

If the superlattice period is increased, the Fermi surface for the second miniband gradually swells until it opens at the center of the Brillouin zone, thus changing gradually from lens-like to the periodically modulated cylinder shape, and the third miniband (E3) starts to be populated, which gives rise to a new Fermi lens-like surface at the minizone center, as for the 220 Å superlattice, also shown in Fig. 2. Conversely, if the superlattice period is reduced from 100 Å, electrons are transferred from the second to the first miniband, whose Fermi surface is more strongly modulated, and ultimately closes.

The electronic minibands described by an open Fermi surface will contribute to the transverse SdH oscillations with a "belly" and a "neck" frequency (which become degenerate in the uncoupled δ -well limit) while the minibands described by a closed Fermi surface will be characterized by a single frequency. For an open (cylinder-like) Fermi surface, the extremal cross section in a plane perpendicular to the field direction will increase when the direction of the magnetic field is tilted, and will be finite only below a critical tilt angle, θ_c , above which only open orbits in k -space are allowed. For a closed (lens-like) Fermi surface, the cross

section decreases when the field is tilted.

These opposite tendencies can be observed in Fig. 3, which shows the Fourier transform of the SdH spectra evolution as a function of the angle between the growth direction and the magnetic field (θ). For the 170 and 220 Å samples, a strong peak at low frequencies is displaced to the left when θ increases, whereas a weak peak at high frequency moves to the right. The low frequency peak corresponds to a partially filled second miniband, and the high frequency one is due to a filled ground-state miniband. For the 400 Å structure, two peaks are detected at low frequencies; the lower frequency one, which is displaced to the left when the sample is tilted, is ascribed to a partially filled E3 miniband, and the one that moves to the right is ascribed to a full E2 miniband. In the 830 Å period structure, the peak positions scale as $\cos \theta$, as expected for a set of disconnected 2D systems. The 100 Å structure shows a single peak of constant frequency, which is indicative of a 3D electronic structure.

The angular dependence of the peak positions detected in the spectra of Fig. 3 is shown in Fig. 4. Also shown by solid lines are the theoretical cross sections of the Fermi surface. In the numerical calculations, the superlattice period was taken equal to the nominal value, and the total sheet carrier density, n_s , was adjusted to obtain the best agreement between the calculated extremal cross sections of the Fermi surface and the frequencies (B_i) for $\theta = 0$. With the input parameters thus fixed, the extremal cross sections of the Fermi surfaces were calculated for all tilt angle

interval (0-90°).

The calculated Fermi surface extremal cross section dependence on θ closely match the measured frequencies B_i , however, for some of the samples, described by an open Fermi surface, agreement is only obtained below the critical tilt angle θ_c . This is the case for the E1 Fermi surface cross section of the 100 Å superlattice ($\theta_c \sim 50^\circ$), the E2 of the 220 Å one ($\theta_c \sim 60^\circ$), and the E3 of the 400 Å superlattice ($\theta_c \sim 60^\circ$). Above these θ_c , where no finite extremal cross sections for the corresponding Fermi surface miniband exist, the experimental curve persists.

The appearance of frequencies above the critical angle is interpreted in terms of a magnetic breakdown of Bragg reflection by the superlattice planes. The magnetic field strength required for an electron to cross a Bragg plane and transit between two minibands, separated by a gap of energy Δ , is $\hbar\omega_c E_F > \Delta^2$, where ω_c is the cyclotron frequency and E_F is the Fermi energy. The calculated magnetic fields required for the breakdown of Bragg reflection are shown in Table 1, and clearly support the hypothesis of magnetic breakdown.

The photoconductivity spectra at 2 K for the 170, 220 and 400 Å δ -superlattices in the energy range near the GaAs band-edge were measured and are shown in Fig. 5. The spectra are described by a smooth absorption onset, which blue-shifts when the superlattice period decreases; this is a consequence of the increase of the Fermi energy [6]. The theoretical threshold for absorption from the n th hole miniband, indicated by arrows in Fig. 5, was estimated by

$$\hbar\nu_{\text{threshold}} = E_G + BGR - V_0 + E_F + H_{\text{HF}},$$

where $E_G = 1.519$ eV, V_0 is the potential barrier between the wells, E_F is the Fermi energy measured from the bottom of the well, H_{HF} is the hole energy at the Fermi wave vector, and $BGR \sim -34$ meV, as estimated for a 3D electron gas [7].

In summary, we have studied the magnetoresistance oscillations in GaAs δ -superlattices in tilted magnetic fields. These can be interpreted in terms of the shape of the Fermi surface, which

Table 1
Estimated magnetic field (Tesla) required for the breakdown of Bragg reflection of the electrons in the E1, E2 and E3 minibands

Superlattice period	E1	E2	E3
100 Å	1.7 ^{a,b}	—	—
170 Å	5.9	—	—
220 Å	8.5	< 1.0 ^{a,b}	—
400 Å	16.6	4.8	5.0 ^b

^a Breakdown expected from $\hbar\omega_c E_F > \Delta^2$.

^b Experimental points persist above θ_c .

Fig. 3. Fourier transform on the inverse field Shubnikov-de Haas oscillations. The tilt angle to each curve is obtained by following the spectrum baseline to the right side. The spacing between the δ -wells, corresponding to each set of curves, is indicated.

Fig. 4. Open circles show the frequencies B_c , obtained from the Fourier spectra of Fig. 3. The area of each circle is a measure of the relative intensity of the Fourier peak. Solid lines are the Fermi surface cross sections, obtained from the numerical calculations.

Fig. 5. Photoconductivity spectra of periodically spike doped GaAs. The spacing between the δ -wells is indicated for each curve. Theoretical transition thresholds are indicated by arrows.

evolves progressively from the cylindrical shape in the uncoupled δ -well limit, and approaches a sphere for the short period superlattices. It is shown that the magnetic breakdown of Bragg reflection plays an important role in these systems, and for a doping period below 100 Å the electronic structure is effectively three-dimensional. Photoconductivity spectra were also measured, and the spectra obtained are consistent with the interpretation of the transport data. The model used for the analysis of the experimental results

is simplified, since it does not take proper account of the effect of magnetic depopulation of the minibands [8], and also the effects of light on the self-consistent potential for electrons and holes and its consequences on the photoconductivity spectra [9].

This work is supported by the FAPESP Grant No. 91/3336–9 and the CNPq Grant No. 306335/88.

References

- [1] F. Koch, A. Zrenner and M. Zachau, in: *Two-Dimensional Systems: Physics and New Devices* (Springer, Berlin, 1986) p. 175.
- [2] R. Droopad, S.D. Parker, E. Skuras, R.A. Stradling, R.L. Williams, R.B. Beall and J.J. Harris, in: *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II* (Springer, Berlin, 1989) p. 199.
- [3] A.C. Maciel, M. Tatham, J.F. Ryan, J.M. Worlock, R.E. Nahory, J.P. Harbison and L.T. Florez, *Surf. Sci.* 228 (1990) 251.
- [4] Mao-Long Ke, J.S. Rimmer, B. Hamilton, J.H. Evans, M. Missous, K.E. Singer and P. Zalm, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 14114.
- [5] S. Yamada and T. Makimoto, *Appl. Phys. Lett.* 57 (1990) 1022.
- [6] A.B. Henriques and L.C.D. Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* 8 (1993) 585.
- [7] S. das Sarma, R. Jalabert and S.R.E. Yang, *Phys. Rev. B* 41 (1990) 8288.
- [8] A. Zrenner, H. Reisinger, F. Koch, K. Ploog and J.C. Maan, *Phys. Rev. B* 33 (1986) 5607.
- [9] B. Ulrich, C. Zhang and K. von Klitzing, *Appl. Phys. Lett.* 54 (1989) 1133.

Sample Parameters of Degenerate Semiconductor Superlattices

A.B. Henriques and L.C.D. Gonçalves

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo
Caixa Postal 66318, 05389-970 São Paulo, Brazil*

P.L. de Souza and B. Yavich*

*Centro de Estudos em Telecomunicações
Pontifícia Universidade Católica, 22453 Rio de Janeiro, Brazil*

Received July 21, 1995

The Shubnikov-de Haas oscillations of InP with a periodical planar doping with Si were studied at 4.2K in fields of 0-14T. By confronting the oscillation frequencies detected experimentally with the ones predicted on the basis of the effective mass approximation the carrier population of the superlattice minibands and the characteristic width of the doped layer were obtained. The width of the doped layer obtained in this way is in good agreement with the value obtained from CV profiling measurements on the same structures.

I. Introduction

Semiconductors in which the dopant atoms are confined to a single or a few monolayers of the semiconductor lattice are of much technological importance due to their applications in novel semiconductor devices^[1]. In an ideal δ -doped superlattice (SL) a monolayer of donor impurities is introduced periodically into the host crystal during the epitaxial growth process. The characteristic parameters of a δ -doped superlattice sample are the density of donor atoms in the doping layers, n_D and the period of the doping profile, d . In real samples, thermal diffusion of the donors atoms into the host crystal may occur; in this case the distribution of donor atoms along the growth direction can be approximated by a Gaussian function with a full width at half maximum Δ [1]. The non-zero thickness of the donor layer is reflected upon the energy spectrum and miniband filling of the superlattice^[2]. In addition, the presence of background ionized impurities also has influence on the electronic structure, however, these impurities can be neutralized by illuminating the sample at low temperatures; after illumination the areal density of free

carriers per superlattice period can be taken as a good approximation to be equal to the density of donors, i.e. $n_S = n_D$ [3].

The characteristic parameters of a given δ -doped SL sample determine to a great extent its optical and electrical properties. For instance in GaAs, with an areal carrier density fixed at about $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, when the doping period is decreased from 500 to 100Å the photoluminescence spectrum associated with the presence of the δ -layers changes from a narrow emission band with a cut-off energy near the band-edge to a broad emission band with a cut-off energy about 60 meV above the renormalized GaAs bandgap^[4] (see also [5]). Similarly, for a fixed doping level the absorption threshold is pushed upwards when the superlattice period is made shorter^[6]. These observations are in good agreement with the theoretical calculations, made in the effective mass approximation and using the characteristic sample parameters as input^[7]. Shubnikov-de Haas experiments in tilted fields demonstrate the effect of coupling between adjacent δ -wells upon the shape of the Fermi surface^[8]; the extremal cross-section areas of the Fermi surface and their dependence on the angle between the magnetic field and the SL axis are

*Permanent address: A.F.Ioffe Institute, 26 Polytechnicheskaya, 194021 St. Petersburg, Russia.

also well reproduced by the same theoretical model^[9]. Thus, parameters d , n_S and Δ form the basis for the modelling of the electronic structure of a δ -doped superlattice, and their knowledge is a pre-requisite for the understanding of the optical and electronic properties of a given sample.

The period of the δ -doped superlattice can be established accurately during the growth process; the remaining parameters (the carrier density n_S and the spreading of the donor atoms Δ) are more difficult to control during the growth, and should be established independently. For a sample with an isolated δ -well (or equivalently a SL of period large enough to uncouple the δ -wells), it has been demonstrated that both n_S and Δ can be determined simultaneously from the sample's transverse Shubnikov-de Haas spectrum^[10]. The procedure is based upon the linear dependence between the carrier population in a given subband and a frequency of oscillation in the magnetoresistance of the sample. For a superlattice, however, the energy dispersion for movement across the layers implies that the relation between the population of a given miniband and the corresponding oscillatory magnetoresistance frequency must be calculated self-consistently^[9]. To avoid this, several authors have approximated the density of states for each miniband by either a strictly two-dimensional or a three-dimensional form^[8,11]; the sample parameters obtained in this way, however, are only approximate.

In this paper, we present results obtained on δ -doped InP superlattices obtained by Shubnikov-de Haas and capacitance-voltage (CV) measurements. By comparing the measured frequencies of oscillation in the magnetoresistance to the values predicted by the self-consistent calculations, the best fit values of n_S and Δ are determined. The width of the donor layers, Δ , obtained from the analysis of the Shubnikov-de Haas (SdH) spectra, is in good agreement with the width of the donor layer which is extracted from the capacitance-voltage profiling for the same samples.

II. Numerical procedure

The electronic structure calculations for the δ -doped superlattice were performed in the effective mass approximation by solving self-consistently the Schrödinger and Poisson equations: details of the theoretical model and a description of the sequence of steps taken in the self-consistent procedure are described in Ref. [7]. Throughout this paper atomic units are used, whereby the units of length, energy and mass are $a_B = \frac{\hbar^2}{m^* e^2}$, $\hbar^2/m^* a_B^2$, and m^* , respectively; in this unit system the unit of magnetic field is $B_0 = \frac{\hbar}{a_B^2 e}$. The distribution of ionized donors can be approximated by a Gaussian function^[1]

$$N_D(z) = n_D \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi \Delta^2}} \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{z}{\Delta} \right)^2 \right]$$

where Δ is the FWHM and is related to the diffusion coefficient D according to $\Delta = 4\sqrt{D\tau \ln 2}$, where τ is the diffusion time. As the starting potential for the self-consistent iterations we used the Thomas-Fermi approximation for a single δ -well, as given by Ioriatti¹ [12]:

$$V(z) = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4} \quad (1)$$

where $\alpha = 2/15\pi$ and $z_0 = (\alpha^3 \pi n_S)^{1/5}$.

Figure 1. Calculated Fermi energy for a SL with parameters $d = 2a_B$ as a function of n_S (crosses). Full line is the limiting 3D approximation. Full circles correspond to the 2D Thomas-Fermi approximation, obtained from a numerical solution for the potential given by Eq.(1).

¹The factor $\frac{1}{2}$ arises here because of the system of units used.

Fig. 1 shows the calculated dependence of the Fermi energy on the areal density n_s for a SL of period $d = 2a_B$ and $\Delta = 0.2a_B$ (full circles). Also shown in Fig. 1 is the Fermi energy dependence on n_s for a free electron gas, $E_F^{3D} = \frac{1}{2}(3\pi^2 n_s/d)^{2/3}$ (full line), and the dependence of the Fermi energy on n_s in the two-dimensional Thomas-Fermi approximation (full circles), obtained from a numerical solution to the Schrödinger equation with the confining potential given by Eq.(1). At low values of n_s , the wells are shallow and the coupling between neighboring wells is strong, so that E_F follows the bulk dependence E_F^{3D} . At high concentrations the coupling between adjacent wells decreases, and the dependence of E_F on n_s approaches the same linear dependence as the Thomas-Fermi approximation for an isolated δ -well. The 2D behavior at large n_s illustrates the point that at very high doping levels the δ -wells are uncoupled even for very short period SL's, as previewed from *ab-initio* calculations^[13].

The connection between the output of the numerical calculations and the results of the transverse Shubnikov-de Haas measurements (when the magnetic field is applied parallel to the axis of the superlattice) is based upon the fact that if plotted against inverse field the magnetoresistance oscillations of a δ -doped superlattice display a set of frequencies, Bi ,

$$Bi = \frac{Ai}{2\pi} \quad (2)$$

where $i = 1, 2, \dots$ and Ai is cross-sectional area of the mini-Fermi surface of the i -th electronic miniband^[14]; thus to each filled miniband there corresponds a period in the magnetoresistance oscillations. Parameters n_s , d and Δ of a given sample are taken to be those that give the best simultaneous agreement between all the calculated and measured SdH oscillation frequencies.

For an isolated well, Eq.(2) takes the familiar form $Bi = \pi n_s^i$, where n_s^i is the sheet carrier density in the i -th electronic subband. By adjusting the input parameters n_s and Δ in the theoretical model until the predicted SdH frequencies agreed with the measured ones, Koemraad determined both the sheet carrier density and the width of the donor layer in GaAs with an isolated δ -well^[9].

Fig. 2 shows the calculated dependence of Bi on the sheet carrier density for an isolated δ -well with $\Delta=0.1a_B$ ($\sim 10\text{\AA}$ for GaAs) (solid lines) and $\Delta=1.0a_B$

($\sim 100\text{\AA}$ for GaAs) (dashed lines). When the width of the donor layer is increased, the δ -well becomes broader, consequently the energy difference between the minimum of the subbands decrease, resulting in a transfer of electrons from the subband E_1 to E_2 and E_3 . It is observed that the calculated SdH oscillation frequencies exhibit a substantial sensitivity to the width Δ : for a variation of Δ from $0.1a_B$ to $1.0a_B$, at $n_s = 2.0a_B$ the change in the calculated frequencies B_1 is more than 0.7 at.unit. Considering that the Bi can be detected experimentally with an accuracy of ± 0.2 Teslas^[3], and taking the GaAs effective mass and dielectric constant to be $m^* = 0.0665 m_0$ and $\epsilon = 12.6$, respectively, it can be expected that the SdH analysis can produce an estimate of Δ with an uncertainty of about $\pm 5\text{\AA}$.

Figure 2. Calculated SdH oscillation frequencies Bi for an isolated δ -well. Full lines correspond to $\Delta=0.1a_B$ and dashed lines to $\Delta=1.0a_B$.

Fig. 3 depicts the calculated SdH frequencies Bi as a function of n_s using a fixed value of the donor layer width, $\Delta=0.2a_B$, for superlattice periods of $d = 1.5a_B$ and $d = 2.0a_B$. As the superlattice period is made shorter, it is required a higher value of doping n_s to populate the excited minibands; for this reason, as the period d is decreased, functions $Bi(n_s)$ for the excited minibands intersect the horizontal axis at higher values of n_s . Fig. 2 and Fig. 3 demonstrate that the SdH spectrum is sensitive to all the characteristic param-

ters (n_s , d and Δ) of a δ -doped superlattice, and it can in principle be used to estimate all the characteristic parameters of a given sample. In this paper, however, the period of the superlattice is obtained from CV measurements, and we limit our analysis of the SdH spectra to extract the parameters n_s and Δ only.

Figure 3. Calculated SdH oscillation frequencies B_i for a SL with $d=2.0a_B$ (full curve) and $d=1.5a_B$ (dashed curve). The calculations were done with $\Delta=0.2a_B$.

CV profiles were calculated by resolving self-consistently the Schrödinger and Poisson equations for the superlattice under bias. The capacitance of the system at a given bias is then determined according to $C = dQ/dV$, and the CV profiles were obtained from

$$N_{CV} = 4\pi C^3 \frac{dV}{dC} \quad (3)$$

where V is the external bias and N_{CV} is the CV concentration, which occurs at a depth $z = 1/4\pi C$ from the surface of the sample.

III. Experimental

The δ -doped InP:Si structures were grown by LP-MOVPE in a AIX 200 reactor. The source materials were PH_3 (100%), trimethylindium (TMI) and silane (SiH_4) as dopant. The InP epilayers were grown on (100) Fe-doped InP substrates at 640°C and pressure 20 mbar with a growth rate of about $4\text{\AA}/\text{s}$. The structures consisted of a $0.4\mu\text{m}$ thick undoped InP buffer

layer, the doped structure, and a cap layer of 0.06 – $0.07\mu\text{m}$ thickness. During the growth the δ -doped plane was sinterized after the TMI flow was bypassed and the surface was PH_3 stabilized. The planar doping was accomplished by introducing SiH_4 in the gas phase.

Hall measurements at 4.2K were performed using the van der Pauw technique, and the average Hall mobility was approximately $4000\text{ cm}^2/\text{Vs}$ for all samples. The Shubnikov-de Haas measurements were made using a four-contact geometry; the samples were approximately square, with contacts in the corners. The magnetoresistance oscillations were studied at a fixed temperature of 4.2K in magnetic fields up to 14 Teslas. Measurements were done in the constant current mode, employing currents of 10 – $50\text{ }\mu\text{A}$. Prior to the beginning of measurements the samples were irradiated with a red LED with the purpose of neutralizing the background impurities. CV measurements were performed using a PN4300 profiler. By applying a reverse bias to the Schottky contact on the surface of the sample and measuring the differential capacitance, the distribution of charge within a distance of $\sim 500\text{\AA}$ from the surface can be probed^[1]. To probe distances further from the surface, the sample was etched prior to the CV measurement.

IV. Results and discussion

We studied three δ -doped InP samples listed in Table I. One of these samples (No.124) contained a single δ -layer. The other two samples contained 20 δ -layers; the sheet donor density in sample No.121 was approximately the same as in sample No.124, whereas sample No.120 had a smaller doping level. Fig 4(a) shows the Shubnikov-de Haas spectrum for sample No.124, and (b) its inverse-field Fourier transform. The peaks seen at 9.5, 22.6 and 65.6 Teslas correspond the occupation of subbands E_3 , E_2 and E_1 , respectively. As shown by Skuras et al^[15], the width at half maximum of a Fourier peak can be associated with the quantum mobility of the carriers in the corresponding subband; the decreasing width of the peaks as we go from E_1 to E_2 and E_3 reflect an increasing mobility of the carriers, in agreement with previous observations^[16,3]. This effect is responsible for a smaller uncertainty in the measured

Table I. Frequency of the oscillations in the magnetoresistance of δ -doped InP:Si. The experimental values are an average of 5 measurements at 4.2K. The values of n_s and Δ and their uncertainties were estimated from the measured values of B_i .

Sample	Number of donor layers	period d (Å)	B_1	Measured B_2 (Teslas)	B_3	Calculated B_1	Calculated B_2 (Teslas)	B_3	n_s (10^{12}cm^{-2})	Δ (Å)
124	1	—	65.6 ± 1.0	22.6 ± 0.5	9.5 ± 0.1	65.2	25.4	9.3	4.94 ± 0.05	30 ± 6
120	20	270	19.6 ± 1.1	8.1 ± 0.3	—	19.6	8.1	—	1.14 ± 0.06	53 ± 15
121	20	400	64.4 ± 1.9	23.6 ± 1.2	11.3 ± 0.3	64.4	25.7	11.0	4.89 ± 0.01	39 ± 7

peak position in the Fourier transform which are associated to more excited minibands, as shown in Table I. In the SL, however, the electrons in the excited minibands are delocalized, and they interact simultaneously with several donor layers, resulting that their quantum mobilities are smaller than in the isolated δ -well case^[17], consequently the Fourier peaks are broader and the uncertainty in their positions is larger, as Table I shows.

Figure 4. Shubnikov-de Haas spectrum (a) and its inverse field Fourier transform (b) for sample No.124.

In order to compare the experimental results to the theoretical calculations, the electronic effective mass and the dielectric constant for InP were taken to be equal to $m^* = 0.08m_0$ [18] and $\epsilon = 11.8$ [19] respectively. The values of n_s and Δ for each sample were taken to be equal to those that gave the least square deviation of the calculated to the experimental SdH frequencies, and the uncertainties in the values of n_s and Δ were estimated from the experimental errors in the values of B_i . The values of n_s estimated from the Shubnikov-de Haas measurements are in approximated agreement with the values of these parameters estimated from the conditions of growth. Table I summa-

rizes the results of the experiment and calculations for all samples: a comparison of the measured SdH oscillation frequencies to the calculated ones is given, and the best-fit values of n_s and Δ are shown. The greater uncertainty in the estimated value of Δ for sample No.120 is due to the fact that this sample has a lower doping level, and for this sample only two peaks are seen in the Fourier transform of the Shubnikov-de Haas oscillations.

Figure 5. CV profile for sample No.121: (a) is the result obtained by alternating etching of the sample and taking a CV measurement (b) is a single CV scan which allows to probe the charge distribution around the first donor layer; the dashed line represents the theoretical CV spectrum generated by using the values of n_s and Δ obtained from the Shubnikov-de Haas spectrum.

Fig. 5(a) shows the CV profile for sample 121 obtained by alternating a CV measurement and an etching of the sample repeatedly. From the CV profile the superlattice period is determined to be $400 \pm 15 \text{Å}$. The CV profile shown by the full curve in Fig. 5(b) was obtained by a single CV scan of the sample which was etched prior to the beginning of the measurements. The dashed curve in Fig. 5(b) is the theoretical CV spectrum for sample 121, generated with the sample parameters given in Table I and by using Eq. 3.

The width at half maximum of the CV peak of Fig. 5(b) is 70Å ; the width of the theoretical spectrum, shown in Fig. 5 by the dashed line, reproduces this result, although the height of the theoretical peak is larger

than obtained experimentally. Thus, the characteristic width of the donor layer estimated from the SdH spectrum is in quantitative agreement with the value estimated from the CV spectrum.

V. Conclusions

It was demonstrated that the Shubnikov-de Haas experiment can serve the purpose of determining the characteristic parameters of a δ -doped superlattice – the carrier distribution among the superlattice minibands, the width of the donor layer, and the superlattice period. In this paper we have limited the analysis of the Shubnikov-de Haas spectrum to the estimate of the sheet carrier density, n_s , and the width of the donor layer, Δ , and fixed the period of the superlattice at the value obtained from the CV measurement. The value of Δ obtained from the analysis of the SdH spectrum is in good agreement with the value predicted by the CV technique.

Acknowledgements

We are grateful to Prof. N.F. Oliveira, Jr., for providing us the access to the high magnetic field facilities of the LESBT/DFMT/IFUSP. The authors acknowledge support by FAPESP, Project. No. 94/2155-0 and 94/5645-7, and CNPq, Project No. 306335/88 and 400935/93-7.

References

1. E. F. Schubert, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by A. C. Gossard (Academic Press, New York, 1994), Vol.40, p.1.
2. M. H. Degani, J. Appl. Phys. **70** 4362 (1991).
3. P. M. Koenraad, B. F. A. van Hest, F. A. P. Blom, R. van Dalen, M. Lays, J. A. A. J. Perenboom and J. H. Wolter, Physica B **177**, 485 (1992).
4. A. C. Maciel, M. Tatham, J. F. Ryan, J. M. Worlock, R. R. Nahory, J. P. Harbison and L. T. Florez, Surf. Sci. **228**, 251 (1990).
5. Ke Mao-Long, J. S. Rimmer, B. Hamilton, J. H. Evans, M. Missous, K. E. Singer and P. Zalm, Phys. Rev. B **45**, 14114 (1992).
6. A. B. Henriques and L. C. D. Gonçalves, Surf. Sci. **305**, 343 (1994).

7. A. B. Henriques and L. C. D. Gonçalves, Semicond. Sci. Technol. **8**, 585 (1993).
8. R. A. Droopad, S. D. Parker, E. Skuras, R. A. Stradling, R. L. Williams, R. B. Beall and J. J. Harris, in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II, Transport and Optics*, Proceedings of the International Conference, Würzburg, Germany, 1988, edited by G. Landwehr, Springer Series in Solid State Sciences V.87 (Springer-Verlag, Berlin, 1989), p.199.
9. A. B. Henriques, V. N. Morgoon, P. L. de Souza, V. Bindilatti, N. F. Oliveira, Jr., and S. M. Shibli, Phys. Rev. B **49**, 11248 (1994).
10. A. Zrenner, H. Resinger, F. Koch and K. Ploog, Proceedings of the 17th International Conference on the Physics of Semiconductors, San Francisco, 1984, edited by J. P. Chadi and A. Harrison (Springer, New York, 1984) p.325.
11. A. J. Dewdney, S. Holmes, H. Yu, M. Fahy and R. Murray, Superlattices and Microstructures **14**, 205 (1993).
12. L. Ioriatti, Phys. Rev. B **41**, 8340 (1990).
13. T. M. Schmidt and A. Fazio, Phys. Rev. B **51**, 7898 (1995).
14. A. B. Henriques, Phys. Rev. B **50**, 8658 (1994).
15. E. Skuras, R. Kumar, R. L. Williams, R. A. Stradling, J. E. Dmochowski, E. A. Johnson, A. Mackinnon, J. J. Harris, R. B. Beall, C. Skierbeszewski, J. Singleton, P. J. van der Wel, and P. Wisniewski, Semicond. Sci. Technol. **6**, 535 (1991).
16. S. Yamada and T. Makimoto, Appl. Phys. Lett. **57**, 1022 (1990).
17. A. B. Henriques, V. Bindilatti, N. F. Oliveira Jr., and S. M. Shibli, Proceedings of the 11th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, Boston, 1994 (World Scientific, Singapore, in press).
18. D. Schneider, D. Rürup, A. Plichta, H. Grubert, A. Schlachetzki and K. Hansen, Z. Phys. B **95**, 281 (1994).
19. L. G. Meiners, J. Appl. Phys. **59**, 1611 (1986).

Characterization of δ -doped superlattices by Shubnikov–de Haas measurements

A B Henriques†, L C D Gonçalves†, P L de Souza‡ and B Yavich‡§

† Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05389–970 São Paulo, Brazil

‡ Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica, 22453 Rio de Janeiro, Brazil

Received 4 July 1995, in final form 2 October 1995, accepted for publication 24 October 1995

Abstract. The Shubnikov–de Haas oscillations of InP with a periodical planar doping with Si were studied at 4.2 K in fields of 0–14 T. By confronting the oscillation frequencies detected experimentally with the ones predicted on the basis of the effective-mass approximation the carrier population of the superlattice minibands and the characteristic width of the doped layer were obtained. The width of the doped layer obtained in this way is in good agreement with the value obtained from C–V profiling measurements on the same structures.

1. Introduction

Semiconductors in which the dopant atoms are confined to a single or a few monolayers of the semiconductor lattice are of much technological importance due to their applications in novel semiconductor devices [1]. In an ideal δ -doped superlattice (SL) a monolayer of donor impurities is introduced periodically into the host crystal during the epitaxial growth process. The characteristic parameters of a δ -doped superlattice sample are the density of donor atoms in the doping layers, n_D , and the period of the doping profile, d . In real samples, thermal diffusion of the donor atoms into the host crystal may occur; in this case the distribution of donor atoms along the growth direction can be approximated by a Gaussian function with a full width at half-maximum Δ [1]. The non-zero thickness of the donor layer is reflected in the energy spectrum and miniband filling of the superlattice [2]. In addition, the presence of background ionized impurities also has influence on the electronic structure; however, these impurities can be neutralized by illuminating the sample at low temperatures; after illumination the areal density of free carriers per superlattice period can be taken, as a good approximation, to be equal to the density of donors, i.e. $n_S = n_D$ [3].

The characteristic parameters of a given δ -doped SL sample determine to a great extent its optical and electrical properties. For instance in GaAs, with an areal carrier density fixed at about $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, when the doping period is decreased from 500 to 100 Å the

photoluminescence spectrum associated with the presence of the δ -layers changes from a narrow emission band with a cut-off energy near the band edge to a broad emission band with a cut-off energy about 60 meV above the renormalized GaAs bandgap [4] (see also [5]). Similarly, for a fixed doping level the absorption threshold is pushed upwards when the superlattice period is made shorter [6]. These observations are in good agreement with the theoretical calculations, made with the effective-mass approximation and using the characteristic sample parameters as input [7]. Shubnikov–de Haas experiments in tilted fields demonstrate the effect of coupling between adjacent δ -wells upon the shape of the Fermi surface [8]; the extremal cross-section areas of the Fermi surface and their dependence on the angle between the magnetic field and the SL axis are also well reproduced by the same theoretical model [9]. Thus, parameters d , n_S and Δ form the basis for the modelling of the electronic structure of a δ -doped superlattice, and knowledge of them is a prerequisite for the understanding of the optical and electronic properties of a given sample.

The period of the δ -doped superlattice can be established accurately during the growth process; the remaining parameters (the carrier density n_S and the spreading of the donor atoms Δ) are more difficult to control during the growth, and should be established independently. For a sample with an isolated δ -well (or equivalently a SL of period large enough to uncouple the δ -wells), it has been demonstrated that both n_S and Δ can be determined simultaneously from the sample's transverse Shubnikov–de Haas spectrum [10]. The procedure is based upon the linear dependence of the carrier population

§ Permanent address: A F Ioffe Institute, 26 Polytechnicheskaya, 194021 St Petersburg, Russia

Figure 1. The calculated Fermi energy relative to the minimum of the subband $E1$ as a function of the number of plane waves in the discrete Fourier expansion of the confining potential (crosses) for an isolated neutral δ -well with $n_s = 5a_B^{-2}$, $d = 12a_B$ and $\Delta = 0.1a_B$. Full circles represent the results obtained by the transfer-matrix method.

in a given subband on the frequency of oscillation in the magnetoresistance of the sample. For a superlattice, however, the energy dispersion for movement across the layers implies that the relation between the population of a given miniband and the corresponding oscillatory magnetoresistance frequency must be calculated self-consistently [9]. To avoid this, several authors have approximated the density of states for each miniband with either a strictly two-dimensional form or a three-dimensional form [5, 11]; the sample parameters obtained in this way, however, are only approximate.

In this paper, we present results obtained on δ -doped InP superlattices obtained by Shubnikov-de Haas and capacitance-voltage (C - V) measurements. By comparing the measured frequencies of oscillation in the magnetoresistance to the values predicted by the self-consistent calculations, the best-fit values of n_s and Δ are determined. The width of the donor layers, Δ , obtained from the analysis of the Shubnikov-de Haas (SdH) spectra, is in good agreement with the width of the donor layer which is extracted from the capacitance-voltage profiling for the same samples.

2. Numerical procedure

The electronic structure calculations for the δ -doped superlattice were performed in the effective-mass approximation by solving self-consistently the Schrödinger and Poisson equations; details of the theoretical model and a description of the sequence of steps taken in the self-consistent procedure are described in [7]. Throughout this paper atomic units are used, whereby the units of length, energy and mass are $a_B = \epsilon\hbar^2/m^*e^2$, $\hbar^2/m^*a_B^2$ and m^* , respectively; in this unit system the unit of magnetic field is $B_0 = \hbar/a_B^2c$. The distribution of ionized donors can be approximated by

a Gaussian function [1]

$$N_D(z) = n_D \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi \Delta^2}} \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{z}{\Delta} \right)^2 \right]$$

where Δ is the FWHM and is related to the diffusion coefficient D according to $\Delta = 4\sqrt{D\tau \ln 2}$, where τ is the diffusion time. As the starting potential for the self-consistent iterations we used the Thomas-Fermi approximation for a single δ -well, as given by Ioratti [12]:

$$V(z) = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4} \quad (1)$$

where $\alpha = 2/15\pi$ and $z_0 = (\alpha^3 \pi n_s)^{1/3}$. At each stage of the self-consistent procedure, the Schrödinger equation was resolved by two different methods: (1) by expanding both the confining periodic potential and the envelope electronic wave function in a discrete Fourier series and solving the resultant set of simultaneous algebraic equations (see, for instance, [13]); (2) by use of the transfer-matrix method for a piecewise-constant potential [14]. In either case the periodic potential and the donor distribution function along the growth direction are sampled at N_z equidistant points in each SL period; for method (1) N_z will also be equal to the number of plane waves used in the Fourier expansion of the confining potential. As N_z is increased, the numerical potential and the donor distribution function are progressively better approximated by their sampled values, and the results of the calculation converge. We studied the convergence as a function of N_z for a highly doped SL ($n_s = 5.0a_B^{-2}$) with a large period of $d = 12a_B$ and a sharp Gaussian distribution of donors with $\Delta = 0.1a_B$. For such parameters only the electrons in minibands above the fifth will be coupled to adjacent wells; these electrons account for less than 0.5% of the total, so the wells can be taken as effectively uncoupled. The Fermi energy E_F was chosen as the convergence parameter; this choice was based upon the observation that E_F is very sensitive to any changes in the shape of the potential wells, making it an ideal single parameter for the convergence test. The calculated position of the Fermi energy measured from the minimum of the fundamental subband, $E1$, as a function of the number N_z , is shown in figure 1. Crosses in figure 1 represent the solutions by the Fourier expansion method, whereas the full circles are the results obtained by the transfer-matrix method. Figure 1 shows that the method of solution using the Fourier expansion converges more rapidly than the transfer-matrix method; this can be attributed to the fact that an expansion with N_z plane waves is a better approximation of the confining potential than its representation by a staircase of N_z constants, as is the case when the transfer-matrix method is used.

For the parameters considered in figure 1, an expansion with 128 plane waves gives a Fermi energy with a deviation of less than 0.3% from the value obtained with $N_z = 512$. For either a larger coupling between adjacent wells, a smaller doping level, or a wider distribution of the donor atoms, the confining potential will be smoother

[1] The factor $\frac{1}{2}$ arises here because of the system of units used

Figure 2. The calculated Fermi energy for a SL with parameters $d = 2a_B$ as a function of n_S (crosses). The full line shows the limiting 3D approximation. Full circles correspond to the 2D Thomas-Fermi approximation, obtained from a numerical solution for the potential given by equation (1).

than in the case considered in figure 1, and it will be better approximated by the same number of plane waves, so it is assumed that an order of 128 in the Fourier expansion as used hereafter will be sufficient in all of the cases considered here.

Figure 2 shows the calculated dependence of the Fermi energy on the areal density n_S for a SL of period $d = 2a_B$ and $\Delta = 0.2a_B$ (crosses). Also shown in figure 2 is the Fermi energy dependence on n_S for a free-electron gas, $E_F^{3D} = \frac{1}{2}(3\pi^2 n_S/d)^{2/3}$ (full line), and the dependence of the Fermi energy on n_S in the two-dimensional Thomas-Fermi approximation (full circles), obtained from a numerical solution to the Schrödinger equation with the confining potential given by equation (1). At low values of n_S , the wells are shallow and the coupling between neighbouring wells is strong, so E_F follows the bulk dependence E_F^{3D} . At high concentrations the coupling between adjacent wells decreases, and the dependence of E_F on n_S approaches the same linear dependence as the Thomas-Fermi approximation for an isolated δ -well. The 2D behaviour at large n_S illustrates the point that at very high doping levels the δ -wells are uncoupled even for SLs with very short periods, as 'previewed' from *ab initio* calculations [15].

The connection between the output of the numerical calculations and the results of the transverse Shubnikov-de Haas measurements (when the magnetic field is applied parallel to the axis of the superlattice) is based upon the fact that if plotted against inverse field the magnetoresistance oscillations of a δ -doped superlattice display a set of frequencies, Bi ,

$$Bi = E_F - Ei \quad (2)$$

where $i = 1, 2, \dots$ and Ei is the energy threshold of the i th electronic miniband [16]; thus to each filled miniband there corresponds a period in the magnetoresistance oscillations. Parameters n_S , d and Δ of a given sample are taken to be those that give the best simultaneous agreement between all the calculated and measured SdH oscillation frequencies.

Figure 3. Calculated SdH oscillation frequencies Bi for an isolated δ -well. Full lines correspond to $\Delta = 0.1a_B$ and dashed lines to $\Delta = 1.0a_B$.

For an isolated well, equation (2) takes the familiar form $Bi \approx \pi n_S^i$, where n_S^i is the sheet carrier density in the i th electronic subband. By adjusting the input parameters n_S and Δ in the theoretical model until the predicted SdH frequencies agreed with the measured ones, Koenraad determined both the sheet carrier density and the width of the donor layer in GaAs with an isolated δ -well [3].

Figure 3 shows the calculated dependence of Bi on the sheet carrier density for an isolated δ -well with $\Delta = 0.1a_B$ ($\sim 10 \text{ \AA}$ for GaAs) (solid lines) and $\Delta = 1.0a_B$ ($\sim 100 \text{ \AA}$ for GaAs) (dashed lines). When the width of the donor layer is increased, the δ -well becomes broader; consequently the energy difference between the minima of the subbands decreases, resulting in a transfer of electrons from the subband $E1$ to $E2$ and $E3$. It is observed that the calculated SdH oscillation frequencies exhibit a substantial sensitivity to the width Δ : for a variation of Δ from $0.1a_B$ to $1.0a_B$, at $n_S = 2.0a_B$ the change in the calculated frequencies $B1$ is more than 0.7 au. Considering that the Bi can be detected experimentally with an accuracy of $\pm 0.2 \text{ T}$ [3], and taking the GaAs effective mass and dielectric constant to be $m^* = 0.0665 m_0$ and $\epsilon = 12.6$, respectively, it can be expected that the SdH analysis will produce an estimate of Δ with an uncertainty of about $\pm 5 \text{ \AA}$.

Figure 4 depicts the calculated SdH frequencies Bi as a function of n_S using a fixed value of the donor layer width, $\Delta = 0.2a_B$, for superlattice periods of $d = 1.5a_B$ and $d = 2.0a_B$. As the superlattice period is made shorter, a higher value of doping n_S is required to populate the excited minibands; for this reason, as the period d is decreased, functions $Bi(n_S)$ for the excited minibands intersect the horizontal axis at higher values of n_S . Figure 3 and figure 4 demonstrate that the SdH spectrum is sensitive to all the characteristic parameters (n_S , d and Δ) of a δ -doped superlattice, and it can in principle be used to estimate all

Figure 4. Calculated SdH oscillation frequencies Bi for a SL with $d = 2.0a_B$ (full curve) and $d = 1.5a_B$ (dashed curve). The calculations were done with $\Delta = 0.2a_B$.

of the characteristic parameters of a given sample. In this paper, however, the period of the superlattice is obtained from C - V measurements, and we limit our analysis of the SdH spectra to extracting the parameters n_S and Δ only.

C - V profiles were calculated by resolving self-consistently the Schrödinger and Poisson equations for the superlattice under bias. The capacitance of the system at a given bias is then determined according to $C = dQ/dV$, and the C - V profiles were obtained from

$$N_{CV} = 4\pi C^3 \frac{dV}{dC} \quad (3)$$

where V is the external bias and N_{CV} is the C - V concentration, which occurs at a depth $z = 1/4\pi C$ from the surface of the sample.

3. Experimental details

The δ -doped InP:Si structures were grown by LP-MOVPE in an Aix 200 reactor. The source materials were PH_3 (100%), trimethylindium (TMI) and silane (SiH_4) as dopant. The InP epilayers were grown on (100) Fe-doped InP substrates at 640 °C and pressure 20 mbar with a growth rate of about 4 Å s⁻¹. The structures consisted of a 0.4 μm thick undoped InP buffer layer, the doped structure, and a cap layer of 0.06–0.07 μm thickness. During the growth the δ -doped plane was sintered after the TMI flow was bypassed and the surface was PH_3 stabilized. The planar doping was accomplished by introducing SiH_4 in the gas phase. The concentration of SiH_4 was the same for all runs, and an interval of time of SiH_4 flow of up to 45 seconds was used. Before and after the SiH_4 was introduced, the reaction chamber was idle for 5 s for the purpose of purification.

Hall measurements at 4.2 K were performed using the van der Pauw technique, and the average Hall mobility

Figure 5. The Shubnikov-de Haas spectrum (a) and its inverse-field Fourier transform (b) for sample No 124. (c), (d) The same, but for sample No 120. (e), (f) The same, but for sample No 121.

was approximately 4000 cm² V⁻¹ s⁻¹ for all samples. The Shubnikov-de Haas measurements were made using a four-contact geometry; the samples were approximately square, with contacts at the corners. The magnetoresistance oscillations were studied at a fixed temperature of 4.2 K in magnetic fields up to 14 T. Measurements were done in the constant-current mode, employing currents of 10–50 μA. Prior to the beginning of measurements the samples were irradiated with a red LED with the purpose of neutralizing the background impurities. C - V measurements were performed at room temperature using a PN4300 profiler. By applying a reverse bias to the Schottky contact on the surface of the sample and measuring the differential capacitance, the distribution of charge within a distance of ~500 Å from the surface was probed [11]. To probe distances further from the surface, the sample was etched prior to the C - V measurement.

4. Results and discussion

We studied the three δ -doped InP samples listed in table 1. One of these samples (No 124) contained a single δ -layer. The other two samples contained 20 δ -layers; the sheet donor density in sample No 121 was approximately the same as in sample No 124, whereas sample No 120 had a smaller doping level. Figure 5(a) shows the Shubnikov-de Haas spectrum for sample No 124, and (b) its inverse-field

Table 1. Frequencies of the oscillations in the magnetoresistance of δ -doped InP:Si. The experimental values are in each case averages of five measurements at 4.2 K. The values of n_s and Δ and their uncertainties were estimated from the measured values of B_i .

Sample	Number of donor layers	Period, d (Å)	Measured			Calculated			n_s (10^{12} cm $^{-2}$)	Δ (Å)
			B_1 (T)	B_2 (T)	B_3 (T)	B_1 (T)	B_2 (T)	B_3 (T)		
124	1	—	65.6 ± 1.0	22.6 ± 0.5	9.5 ± 0.1	65.2	25.4	9.3	4.94 ± 0.05	30 ± 6
120	20	270	19.6 ± 1.1	8.1 ± 0.3	—	19.6	8.1	—	1.14 ± 0.06	53 ± 15
121	20	400	64.4 ± 1.9	23.6 ± 1.2	11.3 ± 0.3	64.4	25.7	11.0	4.89 ± 0.01	39 ± 7

Fourier transform. The peaks seen at 9.5, 22.6 and 65.6 T correspond to the occupation of subbands E_3 , E_2 and E_1 , respectively. As shown by Skuras, *et al* [17], the width at half-maximum of a Fourier peak can be associated with the quantum mobility of the carriers in the corresponding subband; the decreasing width of the peaks as we go from E_1 to E_2 and E_3 reflects an increasing mobility of the carriers, in agreement with previous observations [18, 3]. This effect is responsible for a smaller uncertainty in the measured peak positions in the Fourier transform which are associated with more excited minibands, as shown in table 1. In the SL, however, the electrons in the excited minibands are delocalized, and they interact simultaneously with several donor layers, resulting in their quantum mobilities being smaller than in the isolated δ -well case [19]; consequently the Fourier peaks are broader and the uncertainty in their positions is larger, as table 1 shows.

In order to compare the experimental results to the theoretical calculations, the electronic effective mass and the dielectric constant for InP were taken to be equal to $m^* = 0.08m_0$ [20] and $\epsilon = 11.8$ [21] respectively; using the sheet carrier density per superlattice period, n_s , and the spread of the donor layers, Δ , as input parameters, the theoretical frequencies expected to be seen in the Shubnikov-de Haas spectrum, B_i , were calculated numerically. The input parameters (n_s and Δ) in the numerical calculations were varied until the calculated SdH frequencies agreed with the frequencies seen experimentally. The values of n_s and Δ for each sample were taken to be equal to those that gave the least-square deviation between the calculated and the experimental SdH frequencies. The uncertainties in the values of n_s and Δ were estimated from the experimental errors in the experimental values of B_i . Table 1 summarizes the results of the experiment and calculations for all samples: a comparison of the measured SdH oscillation frequencies to the calculated ones is given, and the best-fit values of n_s and Δ are shown. The characteristic width of the doped layers estimated from the analysis of the Shubnikov-de Haas spectrum is fairly consistent for all samples. The slightly higher value of Δ and its greater uncertainty obtained for sample No 120 as compared to samples No 121 and No 124 is probably a consequence of the fact that for this sample only two peaks are seen in the Fourier transform of the Shubnikov-de Haas oscillations (due to a lower doping level), which makes our fitting procedure for extracting n_s and Δ less reliable than for samples No 121 and No 124.

Figure 6. The C - V profile for sample No 121: (a) shows the result obtained by alternating etching of the sample and taking a C - V measurement; (b) shows a single C - V scan which allows us to probe the charge distribution around the first donor layer; the dashed line represents the theoretical C - V spectrum generated by using the values of n_s and Δ obtained from the Shubnikov-de Haas spectrum.

Figure 6(a) shows the C - V profile for sample 121 obtained by alternating a C - V measurement and an etching of the sample repeatedly. From the C - V profile the superlattice period is determined to be 400 ± 15 Å. The C - V profile shown by the full curve in figure 6(b) was obtained from a single C - V scan of the sample which was etched prior to the beginning of the measurements. The dashed curve in figure 6(b) is the theoretical C - V spectrum for sample 121, generated with the sample parameters given in table 1 and by using equation (3). The discrepancy between the experimental and theoretical absolute values of N_{CV} shown in figure 6(b) may have its origin in the fact that the C - V measurements were performed at room temperature, while the Shubnikov-de Haas measurements were taken at 4.2 K, and n_s may show some dependence as a function of temperature. Another possible source for this discrepancy may be connected with the etching procedure needed to obtain the C - V profile: the etching technique introduces an uncertainty in the area of the Schottky contact between the semiconductor and the liquid electrolyte. As a consequence of the uncertainty in the area of the Schottky contact, an uncertainty in the experimental value of N_{CV} is introduced [22]. Nevertheless, the width at half-maximum of the C - V spectrum should not be dependent on these error sources, and it can provide an independent estimate of the spread of the donors atoms which can be used to evaluate the accuracy of the estimate of Δ based on the analysis of the Shubnikov-de Haas spectrum of the sample. The

width at half-maximum of the $C-V$ peak of figure 6(b) is 70 Å; the width of the theoretical spectrum, shown in figure 6 by the dashed line, reproduces this result. Thus, the characteristic width of the donor layer estimated from the SDH spectrum is in excellent agreement with the width estimated from the $C-V$ spectrum.

5. Conclusions

It was demonstrated that the Shubnikov-de Haas experiment can serve the purpose of determining the characteristic parameters of a δ -doped superlattice—the carrier distribution among the superlattice minibands, the width of the donor layer, and the superlattice period. In this paper we have limited the analysis of the Shubnikov-de Haas spectrum to an estimation of the sheet carrier density, n_s , and the width of the donor layer, Δ , and fixed the period of the superlattice at the value obtained from the $C-V$ measurement. The value of Δ obtained from the analysis of the SDH spectrum is in good agreement with the value predicted by the $C-V$ technique.

Acknowledgments

The authors acknowledge support from FAPESP, Project Nos 94/2155-9 and 94/5645-7, and CNPq, Project Nos 306335/88 and 400935/93-7.

References

- [1] Schubert E F 1994 *Semiconductors and Semimetals* vol 40, ed A C Gossard (New York: Academic) p 1
- [2] Ikegami M H 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 4362
- [3] Koenraad P M, van Hest B F A, Blom F A P, van Dalen R, Leys M, Perenboom J A A J and Wolter J H 1992 *Physica B* **177** 485
- [4] Maciel A C, Tatham M, Ryan J F, Worlock J M, Nahory R R, Harrison J P and Morez L T 1990 *Surf. Sci.* **228** 251
- [5] Ke Mao-Lang, Rimmer J S, Hamilton B, Evans J H, Missous M, Singer K E and Zalm P 1992 *Phys. Rev. B* **45** 14114
- [6] Henriques A B and Gonçalves L C D 1994 *Surf. Sci.* **305** 343
- [7] Henriques A B and Gonçalves L C D 1993 *Semicond. Sci. Technol.* **8** 585
- [8] Droopad R A, Parker S D, Skuras E, Stradling R A, Williams R L, Beall R B and Harris J J 1989 *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II, Transport and Optics; Proc. Int. Conf. (Würzburg, Germany, 1988) (Springer Series in Solid State Sciences 87) ed G Landwehr (Berlin: Springer) p 199*
- [9] Henriques A B, Morgoun V N, de Souza P L, Bindilatti V, Oliveira N F Jr and Shibli S M 1994 *Phys. Rev. B* **49** 11248
- [10] Zrenner A, Resinger H, Koch F and Plong K 1984 *Proc. 17th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors (San Francisco, CA, 1984) ed J P Chadi and A Harrison (New York: Springer) p 325*
- [11] Dewdney A J, Holmes S, Yu H, Fahy M and Murray R 1993 *Superlatt. Microstruct.* **14** 205
- [12] Iuriatti L 1990 *Phys. Rev. B* **41** 8340
- [13] Rehoredo F A and Proetto C 1992 *Solid State Commun.* **81** 163
- [14] Chico L, Garcia-Moliner F and Velasco V R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 11427
- [15] Schmidt T M and Fazzio A 1995 *Phys. Rev. B* **51** 7898
- [16] Henriques A B 1994 *Phys. Rev. B* **50** 8658
- [17] Skuras E et al 1991 *Semicond. Sci. Technol.* **6** 535
- [18] Yamada S and Makimoto T 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 1022
- [19] Henriques A B, Bindilatti V, Oliveira N F Jr and Shibli S M 1996 *Proc. 11th Int. Conf. on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (Boston, MA, 1994) (Singapore: World Scientific) at press*
- [20] Schneider D, Rönig D, Plichta A, Grubert H, Schlachetzki A and Hansen K 1994 *Z. Phys. B* **95** 281
- [21] Meiners L G 1986 *J. Appl. Phys.* **59** 1611
- [22] Schneider D K 1990 *Semiconductor Material and Device Characterization* (New York: Wiley) p 43

Trabalho apresentado na 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors, Berlin, Julho de 1996; Aceito para publicação em livro da Editora "World Scientific", Singapore

MULTISUBBAND SCATTERING IN PERIODICALLY DELTA-DOPED InP

A.B.HENRIQUES, L.C.D.GONÇALVES, V.BINDILATTI, N.F.OLIVEIRA, JR.

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo
Caixa Postal 66318, 05389-970 São Paulo, Brazil
E-mail: ahenriques@if.usp.br*

and

P.L.SOUZA, B.YAVICH*

*Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica
Rua Marquês de São Vicente 225
22453-900 Rio de Janeiro, Brazil*

ABSTRACT

The Shubnikov-de Haas (SdH) oscillations of InP with a periodical planar doping with Si were studied below 30 mK and in fields of 0-35 T produced by a hybrid magnet. The low temperatures and high fields employed allowed to isolate well defined magneto-resistance oscillatory components. The areal density of free carriers extracted from the SdH curves was obtained to be $4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ for both samples. The distance between doping planes and the width at half-maximum of the doping layers were obtained from capacitance-voltage profile measurements. Experimental results show that the quantum mobilities decrease when the doping period is made shorter. This is in qualitative agreement with the theoretical estimates made using a model based on the Coulomb interaction of free carriers with ionized donors, whereby the screening of the impurity centers is treated in the random phase approximation (RPA).

Single layer delta-doped semiconductors are obtained by doping one crystal plane of the host crystal lattice with shallow donor atoms. In periodically delta-doped samples, equally spaced planes of the host material are doped with donors; such samples present an enhanced conductivity compared to the single delta-doped ones, which is advantageous for device applications¹. Understanding the way in which sample parameters influence the carrier mobility in these systems is of fundamental importance. In this work we report a study of the carrier mobility in periodically Si delta-doped InP by SdH measurements.

The samples were grown by LP-MOVPE, by which means Si delta-doped InP with a sharp doping profile can be obtained². In order to study the carrier mobility as a function of the distance between dopant sheets, two samples were selected with same

*Also at: A.F.Ioffe Institute, 26 Polytechnicheskaya, 194021 St.Petersburg, Russia

density of $4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ free carriers per doped layer. Sample 124 had a single, whereas sample 121 had 20 doped layers. To determine the width of the doped layer and the doping period for the periodically doped sample, the capacitance-voltage (CV) profile for both samples was measured. The donor atoms were found to be distributed within a layer of width of 35 Å and the doping period of sample 121 was obtained to be 400 Å. The magnetoresistance measurements were made with the samples mounted inside the mixing chamber of a plastic dilution refrigerator located within a 35-T hybrid magnet³, using a 4-wire automatic AC bridge and employing excitation currents under 1 μA.

In periodically delta-doped semiconductors each miniband manifests itself in the SdH spectrum with a separate oscillatory component, whose frequency is determined by the 'belly' extremal cross section of the mini-Fermi surface⁴. The dependence of the amplitude of the magnetoresistance oscillations on the intensity of the magnetic field and temperature is given by

$$\frac{\Delta R(B, T)}{R_0} = \frac{X}{\sinh X} \exp(-\pi \Gamma / \hbar \omega) = \frac{X}{\sinh X} \exp(-\pi / \mu_Q B)$$

where $X = 2\pi^2 k_B T / \hbar \omega$, Γ is the full width at half maximum of the energy levels, and $\mu_Q = \frac{e}{m^*} \frac{\hbar}{v_F}$ is the quantum mobility. At temperatures below 30 mK and for fields of intensity higher than 1.5 T, i.e. the conditions under which oscillations in the magnetoresistance were observed, the thermal broadening factor, $X / \sinh X$, differs from unity by less than 0.01%, hence the quantum mobility can be determined from the slope of a plot of $\ln(\Delta R)$ versus $1/B$. Each oscillatory component was isolated from the rest of the magnetoresistance spectrum by bandpass filtering in the Fourier domain, and the quantum mobility was obtained by fitting the dependence of $\ln \Delta R$ on $1/B$ with a straight line.

Figure 1 shows the results of the SdH measurements for sample 124. Results of the experiments are summarized in Table 1. Table 1 shows that the mobility of the electrons in an excited miniband decreases when the doped layers are brought closer together; moreover, the reduction in mobility is greater for a more energetic miniband. This effect is not unexpected, given that a more energetic miniband is described by a more extended electronic charge. As the distance between the doped layers is made shorter, the carriers in the excited subbands will begin to interact with charged impurities in the neighboring doped layers, which means an enhancement of the Coulomb scattering process, and hence a lower quantum mobility.

In order to describe quantitatively the evolution of carrier scattering with the doping period, the quantum mobility in the individual minibands was calculated for samples 124 and 121 in the frame of the RPA approximation, as described elsewhere⁵. In this model, the quantum mobility of an electronic subband is given by $\mu_Q = e\tau/m^*$, where τ is the quantum lifetime of the electronic state at the Fermi energy, which is calculated by using the Fermi golden rule. Calculations were made using a structure with the parameters given in Table 1; for the periodically doped sample, the number of

doped layers was taken to be 4 in order keep the computational time within reasonable limits. The theoretical quantum mobility of a miniband was taken to be equal to the mobility of the lowest energy subband from the set of subbands which originates the continuous miniband in the limit of an infinite number of doping periods.

Figure 1: (a) SdH spectrum for sample 124; (b) Fourier transform of the SdH spectrum plotted against inverse magnetic field; (c)-(e) Oscillations due to individual minibands; (f) Plot of $\log_{10} \Delta R$ against B^{-1} for the oscillations shown in (c)-(e).

Following the notation of Ref.5, the impurity form factor was taken to be

$$F_d(q, z, z') = \sum_{i=1}^4 \int_{-\infty}^{+\infty} g(z_1 - z_i) e^{-q|z - z_1|} e^{-q|z' - z_1|} dz_1$$

where $g(z)$ is a normalized Gaussian function of full width at half maximum of 35 Å, which describes the donor distribution in each doped layer. In every other aspect

Table 1: Carrier concentration determined from the analysis of the SdH (n_{SdH}): μ_Q^{SdH} was determined from the individual oscillatory components in the SdH spectrum: μ_Q^{theory} is the theoretical estimate of the quantum mobility.

Sample	Subband	Period (Å)	n_{SdH} (cm ⁻²)	μ_Q^{SdH} (cm ² /Vs)	μ_Q^{theory} (cm ² /Vs)
124		∞	4.9×10^{12}		
	E1		3.2×10^{12}	385	454
	E2		1.3×10^{12}	1640	1540
	E3		0.4×10^{12}	2820	4020
121		400	4.9×10^{12}		
	E1		3.2×10^{12}	478	454
	E2		1.2×10^{12}	1050	1490
	E3		0.5×10^{12}	1550	2950

the theoretical quantum mobilities were obtained by following the steps described previously⁵; results are shown in Table 1. Results of the theory show that the effect of doped layer proximity upon the miniband's quantum mobility increases with the energy of the miniband, in qualitative agreement with the experimental results.

1. Acknowledgements

Calculations were performed using the computation facilities of the Laboratório Central de Computação Avançada do Centro de Computação Eletrônica da Universidade de São Paulo (LCCA-CCE-USP). This work was supported by CAPES, Grant No. AEX0654/96-5, CNPq, Grants No.306335/88 and 400935/93-7, and FAPESP, Grant No. 94/2155-9 and 94/5645-7.

2. References

1. E.F.Schubert, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by A.C.Gossard (Academic Press, New York, 1994), Vol.40, p.1
2. B.Yavich, P.L. de Souza, M.Pamplona Pires, W.M.Mendes, A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves. Proceedings of the 1996 International Conference on MOVPE, Cardiff, U.K. (unpublished)
3. N.F.Oliveira Jr, V. Bindilatti, E.ter Haar, R.V.Martin and E.McNiff. *Czechoslovak J. of Phys.* 46. 2787 (1996)
4. A.B.Henriques, *Phys. Rev. B* 50, 8658 (1994)
5. A.B.Henriques. *Phys. Rev. B* 53. 16365 (1996)

Trabalho apresentado na 12th International Conference on Applications of High Magnetic Fields, Würzburg, Julho de 1996; Aceito para publicação em livro da Editora "World Scientific", Singapore

PHOTOLUMINESCENCE OF PERIODICALLY DELTA-DOPED InP IN HIGH MAGNETIC FIELDS

A.B. HENRIQUES, L.C.D. GONÇALVES, V. BINDILATTI, N.F. OLIVEIRA, JR.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo
Caixa Postal 66318, 05389-970 São Paulo, Brazil

P.L. SOUZA, B. YAVICH
Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica
22453 Rio de Janeiro, Brazil

The photoluminescence (PL) of InP with a periodical doping with Si was studied in magnetic fields of intensity 0–15 Teslas. The set of samples selected for the experiments had a doping period varying in the range 100–300 Å and a fixed sheet carrier density per doping period of approximately $4.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. A very well defined Landau level fan diagram is obtained by measuring the PL intensity at a fixed wavelength as a function of applied magnetic field. The samples were characterized by C-V profiling, Hall, and Shubnikov-de Haas (SdH) measurements. On the basis of this characterization the theoretical Landau fan level diagram was calculated, which agrees with the experimental one with no adjustable parameters. The oscillator strength of the photoexcited holes with the individual minibands is discussed.

In n-type periodically delta-doped semiconductors equally spaced sheets of the host crystal are doped with shallow donors. In such systems the carriers released from the donor atoms are confined by a self-consistent periodic potential which gives rise to a miniband structure. The existence of a miniband structure has been demonstrated by PL^{1,2} and by SdH measurements^{3,4,5}. From the theoretical point of view it is predicted that under a magnetic field applied perpendicular to the dopant sheets each miniband will develop a single series of weakly defined Landau levels⁶. It should be possible to detect the formation of the Landau levels optically, however, optical experiments in high magnetic fields on periodically doped semiconductors have not been reported, which is probably a consequence of the strong electron-impurity interaction in these systems^{7,8,9,10}, which leads to a broad (unresolved) Landau structure.

The delta-doped InP structures were grown by LP-MOVPE at the Centro de Estudos em Telecomunicações of the Pontifícia Universidade Católica. The very high quality of the samples is demonstrated by their Hall and CV spectra,

Table 1: Data on the samples studied. Hall data was taken at room temperature. The sheet carrier density per period, n_{SdH} , was inferred from the Shubnikov-de Haas spectrum. Using the value of n_{SdH} , the position of the Fermi energy relative to the miniband E2, $EF_2=EF-E2$, is estimated from a self-consistent solution of Poisson and Schrodinger equations for the structure¹³.

Sample	Period (Å)	$n_{Hall}(cm^{-2})$	$n_{SdH}(cm^{-2})$	EF	EF-E2
199	246	4.1×10^{12}	4.3×10^{12}	1.436	0.0373
200	176	4.2×10^{12}	4.2×10^{12}	1.445	0.0435

which showed that the donor atoms are spread over not more than two monolayers of the host crystal¹¹. The doping periodicity was also extracted from CV measurements; Table 1 summarizes the results. PL was detected using an unfocused low power laser beam; the bandpass of the spectrometer was fixed at < 1 meV. Light was conveyed to the sample, and collected from the sample by using an optical fiber bundle. SdH measurements were made in the constant current mode, using the van der Pauw method, and the Joule heat dissipated on the sample was less than 10-20pW.

Figure 1 shows the near band-edge PL as a function of the magnetic field intensity for sample 200 at 4.2 K. The weak structure seen is due to the development of Landau levels in the E2 miniband. This is demonstrated by the concomitance of the oscillations in the PL intensity at a fixed photon energy as a function of applied magnetic field and the SdH oscillations, as Figure 2 shows. The SdH oscillations are dominated by the carriers occupying states in the E2 miniband, which have a higher mobility than carriers from the fundamental E1 miniband due to a smaller overlap of the E2 charge density with the impurity layers¹⁰. The Fourier transform of the SdH oscillations gives the fundamental field $BF(E2)=32.3$ T; using this value, and also the periodicity and donor layer width extracted from the CV profile, the electronic structure of the sample can be modeled¹², and the results of the theory are given in Table 1. In Figure 2 the photon energy was fixed at $h\nu = 1.445$ eV, which was chosen so as to have the oscillations in the PL intensity in phase with the SdH oscillations, which determines the position of the Fermi energy relative to the photoexcited holes to be 1.445 eV. Using the value of $EF-E2$ given in Table 1, the energy position of the electronic miniband relative to the photoexcited holes is obtained to be 1.4015. The Landau level diagram for the E2 miniband can then be drawn, as shown in Figure 3. In order to check this result, the position of the Landau levels as a function of the magnetic field intensity should be measured optically. To determine the field dependence of the Landau levels, the PL intensity was

measured as a function of the field at a fixed photon energy; this is shown in Figure 4. The peaks shown obtained from Figure 4 are shown as solid circles in Figure 3, giving an excellent agreement with the theoretical lines.

Assuming that the holes have only a weak dispersion and that the electron-hole oscillator strength is energy independent, under weak excitation the zero-field PL lineshape will be given by

$$I(h\nu) = D(h\nu)f(h\nu, T) \quad (1)$$

where $D(E)$ is the density of states (DOS) of the minibands and $f(E, T)$ is the Fermi-Dirac distribution. The DOS function was calculated using the parameters given above, and the results are shown in Figure 5. At lower energies, the DOS function overshoots the experimental curve, indicating that the overlap of the E1 miniband wave function with holes is weak.

Acknowledgments

This work was supported by CAPES, Grant No. AEX0654/96-5, CNPq, Grants No.306335/88 and 400935/93-7, and FAPESP, Grant No. 94/2155-9 and 94/5645-7.

References

1. A.C.Maciel, M.Tatham, J.F.Ryan, J.M.Worlock, R.R.Nahory, J.P.Harison and L.T.Florez *Surf. Sci.* **228**, 251 (1990)
2. Ke Mao-Long, J.S.Rimner, B.Hamilton, J.H.Evans, M.Missous, K.E.Singer and P.Zalm. *Phys. Rev. B* **45**, 14114 (1992)
3. F.Koch, A.Zrenner and M.Zachau, in *Two-dimensional systems: physics and new devices*, edited by G.Bauer, F.Kuchar and H.Heinreich (Springer, Berlin, 1986), p.173.
4. A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves, *Surf. Sci.* **305**, 343 (1994)
5. A.B.Henriques, V.N.Morgoon, P.L.de Souza, V.Bindilatti, N.F.Oliveira, Jr., and S.M.Shibli, *Phys. Rev. B* **49**, 11248 (1994)
6. A.B.Henriques, *Phys. Rev. B* **50**, 8658 (1994)
7. S.Yamada and T.Makimoto *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1022 (1990)
8. P.M.Koenraad, B.F.A. van Hest, F.A.P.Blom, R.van Dalen, M.Leys, J.A.A.J.Perenboom and J.H.Wolter, *Physica B* **177**, 485 (1992)
9. A.B.Henriques, V.Bindilatti & N.F. Oliveira Jr., in *High Magnetic Fields in the Physics of Semiconductors*, edited by D.Heiman, (World Scientific, Singapore, 1995), p.604
10. A.B.Henriques, *Phys. Rev. B* . at press (1996)

Figure 1

Figure 2

Figure 4

Figure 5

Figure 3

11. B.Yavich, P.L. de Souza, M.Pamplona Pires, W.M.Mendes, A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves, Proceedings of the 1996 International Conference on MOVPE, Cardiff, U.K. (unpublished)
12. A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* 11, 190 (1996)
13. A.B.Henriques, L.C.D.Gonçalves, P.L. de Souza and B.Yavich, *Semicond. Sci. Technol.* 8, 585 (1993)

Electronic properties of gated δ -doped semiconductors

L C D Gonçalves and A B Henriques

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318,
05389-970 São Paulo, Brazil

Received 2 September 1996, in final form 1 November 1996, accepted for
publication 15 November 1996

Abstract. The quantum and transport subband mobilities as a function of applied bias were calculated for a gated δ -doped semiconductor. The electronic spectra (envelope wavefunctions, subband energies and Fermi energy) for the structure under bias used as input in the calculations were obtained by either solving self-consistently Schrödinger and Poisson equations or by solving the Schrödinger equation with a confining potential determined by the Thomas–Fermi semiclassical approximation. In the first case the screening of the electron-ionized impurity interaction was treated in the random phase approximation, whereas in the latter case the two-dimensional Thomas–Fermi model of screening was used. Results show that although the semiclassical approach offers the advantage of greater simplicity, it describes reliably the carrier mobility in the fundamental subband only. The dependence of the mobility of carriers in individual subbands on applied bias correlates with the evolution with bias of the overlap between subband wavefunctions and the doped-layer region.

1. Introduction

The δ -doping technique was originally devised [1] as a means to supply free carriers for epitaxial semiconductor structures. Since then, much attention has been paid to δ -doped systems due to their technological applications and interesting physical properties [2,3]. In a δ -doped semiconductor shallow donors are localized in a few monolayers of a host crystal (for instance GaAs, InP, InSb). The electrons released from the donor atoms are confined by a V-shaped self-consistent potential well which splits the conduction band into a set of electronic subbands which are described by wavefunctions whose localization around the doped layer decreases with the subband index. Since the electronic mobility in a δ -doped semiconductor is determined by the Coulomb interaction of carriers with ionized donors situated in the doped layer, the decreasing spatial localization leads to a mobility which increases with the subband index, as has been demonstrated both experimentally [4] and theoretically [5]. Much effort has been devoted to investigating the mechanisms which limit the carrier mobility in δ -doped semiconductors [5–10], the understanding of which is of key importance in finding ways of optimizing the transport properties of these systems [11].

Theoretical calculations of the transport and quantum mobilities of carriers in individual subbands of a δ -doped semiconductor have already been performed using various levels of approximation. These calculations require as input the electronic spectrum (envelope wavefunctions for

each subband, subband energies and the Fermi energy) and the doping profile. The carrier mobility is obtained by using perturbation theory with the screened Coulomb interaction between carriers and ionized donors taken to be the scattering mechanism. The authors of reference [6] used the semi-classical Thomas–Fermi (TF) theory to obtain both the electronic spectrum and the screened Coulomb potential; in this model, the screening charge and the doped layer are taken to be of zero thickness, i.e. the two-dimensional (2D) limit is assumed. Recently, more realistic calculations have been performed: the electronic structure was obtained by solving self-consistently Schrödinger and Poisson equations, with inclusion of the exchange and correlation correction in the framework of the local density approximation, and the screening of the electron-ionized impurity interaction was treated in the random phase approximation [5,7–9]. This approach allowed us to incorporate into the theory the width and profile of the doping layer and the non-zero thickness of the screening charge, and also the effect of scattering by ionized background impurities. A comparison between experiment and theory showed that the quantum treatment can successfully predict the carrier mobility in individual subbands [7]. In contrast, the semiclassical treatment, whereby the screening charge is strictly 2D, is not anticipated to be quantitatively suitable, given that the non-zero thickness of the screening charge is an important ingredient in the screening theory of quasi-2D systems (see, for instance, the pronounced effect of the finite thickness of the screening charge upon the binding energy

of excitons in modulation-doped quantum wells [12]). In principle, it is possible to incorporate the non-zero thickness of the screening charge into the semiclassical theory [12]; however, the screened potential becomes much more complicated, thus decimating the main virtue of the semiclassical approach, i.e. its simplicity and semi-analytical formulation†.

For a gated δ -doped structure, the carrier mobility in the individual electronic subbands so far has been calculated only within the TF approach [10]. The interest in the transport properties of the gated structure comes from its technological applications, for instance in the δ -FET transistor [13]. The gated δ -doped structure is also a convenient system to study the effects of the surface proximity upon the properties of the confined electron gas [14], since by applying a bias to the gated system the region near the surface can be depleted of carriers. It seems appropriate to extend the full quantum treatment to gated δ -doped structures, which is the purpose of this investigation. We calculated the mobility of carriers in individual subbands both in the framework of the TF model for the confining potential, along with a 2D TF screening charge (which will be referred to hereafter as the TF-2D approximation), and in the framework of the quantum treatment. The reliability of the full quantum treatment is assumed based on its success in describing the unbiased δ -doped semiconductor. Our results show that although the TF-2D model presents the advantage of greater simplicity and requires a smaller computational effort, it does describe successfully the mobility of carriers occupying states belonging to the fundamental subband only.

2. Theory

Our system will be modelled assuming that the positively charged donors, described by an areal density N_d , are uniformly distributed in a single monolayer of the host crystal, located in the plane $z = 0$. The assumption of an ultimately thin doped layer is motivated by the ability of epitaxial growth techniques to obtain doped layers with a thickness of one or two monolayers [15, 16], and it simplifies the formalism and computational requirements. A sufficiently low doping density ($N_d < 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) will be considered, so that the donor atoms can be taken to be uncorrelated. The presence of ionized background impurities in the structure is ignored, in which case the electrical neutrality of the semiconductor is guaranteed by taking $n_s = N_d$, where n_s is the overall sheet density of confined electrons in the δ -well. All results are presented in effective atomic units, hence the units of length, mass and energy are the effective Bohr radius $a_B = \epsilon \hbar^2 / m^* \kappa e^2$, the effective mass m^* and the effective Hartree potential $\hbar^2 / m^* a_B^2$ respectively. The calculated

mobilities are in units of $ea_B^2/\hbar$ (for GaAs approximately $1500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$). All calculations were made assuming a sample temperature of $T = 0 \text{ K}$.

In atomic units the quantum mobility of carriers in the i th electronic subband is equal to the single-particle lifetime at the Fermi energy, $\tau_Q(i)$, which can be calculated by using the Fermi Golden Rule. The result is given by [9]

$$\frac{1}{\tau_Q(i)} = \frac{S}{\pi} \sum_{i'} \int_0^\pi |V_{ii'}^{TOT}(q_{ii'})|^2 d\varphi \quad (1)$$

where S is the area of the sample.

$$q_{ii'} = (k_i^2 + k_{i'}^2 - 2k_i k_{i'} \cos \varphi)^{1/2}$$

$k_i = \sqrt{2(E_F - E_i)}$ is the Fermi momentum for the i th subband, E_F is the Fermi energy, E_i is the energy threshold of the i th subband, and

$$V_{ii'}^{TOT}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_i^*(z) \chi_{i'}(z) V^{TOT}(q, z) dz$$

where $V^{TOT}(q, z) = \sum_q V^{TOT}(\rho, z) e^{-iq \cdot \rho}$ is the 2D Fourier transform of the screened electrostatic potential of the ionized impurities. In equation (1) the summation extends over filled subbands only, and the overline represents the statistical average over all possible impurity configurations.

The subband energy threshold values, E_n , and the corresponding single-particle wavefunctions $\chi_n(z)$ are solutions of the Schrödinger equation

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + V_{conf}(z) \right) \chi_n(z) = E_n \chi_n(z) \quad (2)$$

where $V_{conf}(z)$ is the δ -well potential profile.

The transport mobility for carriers in the i th subband, $\tau_T(i)$, can be obtained from the Boltzmann equation in the relaxation time approximation, which leads to a system of coupled linear equations [17]

$$\sum_{i'} \mathcal{K}_{ii'} \tau_T(i') = \frac{k_i^2}{2} \quad (3)$$

with

$$\mathcal{K}_{ii'} = \delta_{ii'} \sum_j \mathcal{K}_{ij}^{(1)} - \mathcal{K}_{ii'}^{(2)} \quad (4)$$

where

$$\mathcal{K}_{ii'}^{(1)} = \frac{S}{2\pi} k_i^2 \int_0^\pi |V_{ii'}^{TOT}(q_{ii'})|^2 d\varphi \quad (5)$$

and

$$\mathcal{K}_{ii'}^{(2)} = \frac{S}{2\pi} k_i k_{i'} \int_0^\pi |V_{ii'}^{TOT}(q_{ii'})|^2 \cos \varphi d\varphi. \quad (6)$$

Equations (3)–(6) were obtained assuming that each subband is described by an energy-dependent momentum relaxation time $\tau_i(E)$, and $\tau_T(i)$ represents the value of $\tau_i(E)$ at $E = E_F$.

In order to make a quantitative calculation of carrier mobility using equations (1) and (3)–(6), a model for the confining potential, $V_{conf}(z)$, as well as for the screened

† Another shortcoming which will remain, even if the non-zero thickness of the screening charge were taken into account, is that the semiclassical screening response of a quasi-2D system is density independent. This, however, should not be a concern in ungated δ -doped systems, in which the density of confined carriers is high ($n_s > a_B^{-2}$). (See appendix of Chapter VI in [22] for a full discussion.)

potential of the ionized impurities, $V^{TOT}(q, z)$, is needed. In the following sections, the carrier mobility is obtained first from a full quantum treatment, whereby the confining potential is obtained by solving Schrödinger and Poisson equations self-consistently and the screening charge is modelled in the random phase approximation (RPA), and second in the TF-2D approximation.

2.1. Subband mobilities in the RPA

In this case the confining potential is taken to be given by

$$V_{conf}(z) = V_H(z) + V_{xc}(z)$$

where $V_H(z)$ is the Hartree self-consistent potential and $V_{xc}(z)$ is the exchange-correlation correction to the confining potential, which we used in the form parametrized by Hedin and Lundqvist [18]. The Hartree potential is obtained by solving self-consistently equation (2) in conjunction with the Poisson equation

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -4\pi n(z) \quad (7)$$

where $n(z) = \frac{1}{\pi} \sum_i |E_i| \chi_i(z)|^2$ is the density of carriers confined in the δ -well.

For the biased structure, a fraction s of the total electronic sheet charge density, n_S , will be transferred to the gate placed at $z = -d$. In this case equation (7) will be subjected to the boundary conditions

$$\left. \frac{dV_{conf}(z)}{dz} \right|_{z=-d} = -4\pi s n_S \quad (8)$$

and

$$\lim_{z \rightarrow 0} \left(\frac{dV_{conf}(z)}{dz} - \frac{dV_{conf}(-|z|)}{dz} \right) = 4\pi n_S. \quad (9)$$

Although the width and profile of the distribution of donor atoms in the doped layer can be incorporated into the model [9], in the present study we restrict ourselves to investigating the limit of a very narrow layer. In this case the statistical average of the RPA screened scattering potential will be given by

$$\overline{|V_{ir}^{TOT}(q)|^2} = \frac{n_S}{S} \left(\frac{2\pi}{q} \right)^2 \times \left| \sum_{mm'} \epsilon_{ii'mm'}^{-1}(q) \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_m(z) \chi_{m'}^*(z) e^{-q|z|} dz \right|^2 \quad (10)$$

where $\epsilon_{ii'mm'}^{-1}(q)$ is the dielectric matrix, which is given by [17]

$$\epsilon_{ii'mm'}(q) = \delta_{im} \delta_{i'm'} + A_{mm'}(q) T_{i'mm'}(q). \quad (11)$$

In the last equation $A_{mm'}(q)$ is the independent response particle density matrix and $T_{i'mm'}(q)$ is the Coulomb energy form factor. The Coulomb energy form factor is given by

$$T_{i'mm'}(q) = \frac{2\pi}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_i(z) \chi_{i'}^*(z) \chi_m^*(z') \chi_{m'}(z') \times e^{-q|z-z'|} dz dz'. \quad (12)$$

If we neglect the small contributions to the dielectric matrix which arise from subbands lying above the Fermi level, $A_{mm'}(q)$ will be given by [9]

$$A_{mm'}(q) = \frac{1}{\pi} - \frac{1}{\pi} \Theta(q - (k_m + k_{m'})) \times \sqrt{\left[1 - \left(\frac{k_m - k_{m'}}{q} \right)^2 \right] \left[1 - \left(\frac{k_m + k_{m'}}{q} \right)^2 \right]}$$

where $\Theta(z)$ is the Heaviside step function.

The carrier mobilities were calculated numerically by using equation (10) in conjunction with equations (1) and (3)–(6).

Note that in the RPA approximation the lineshape and width of the screening charge are reflected upon the screened potential through the dielectric matrix defined by equation (11), which depends on the electronic wavefunctions through the Coulomb energy form factor of equation (12).

2.2. Subband mobilities in the TF-2D approximation

The δ -well profiles can be determined using the well known TF semiclassical approximation. Setting the origin of the energy scale at the Fermi level, E_F , the TF differential equation for the confining potential will be given by [19, 20]

$$\frac{d^2 V_{conf}(z)}{dz^2} = -\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} |V_{conf}(z)|^{3/2} \quad (13)$$

where z is the coordinate perpendicular to the doping plane; for a biased structure equation (13) will be subjected to the same boundary conditions (8) and (9) as before.

For $z > 0$, the solution of the differential equation is the TF potential [10, 20]

$$V_{conf}(z) = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4} \quad (14)$$

with $\alpha = 2/15\pi$ and

$$z_0 = \left(\frac{\alpha^3}{\pi n_S} \right)^{1/3} (1 - s^2)^{-1/5}.$$

The depth of the potential well, V_0 , is given by

$$V_0 = \overline{V}_0 (1 - s^2)^{4/5}$$

where $\overline{V}_0$ is the depth for the unbiased structure (e.g. $s = 0$)

$$\overline{V}_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi^2 n_S^2}{\alpha} \right)^{2/5}.$$

For $z < 0$, the potential is determined numerically from the differential equation

$$\frac{dV_{conf}(z)}{dz} = -\sqrt{16\sqrt{2}\alpha |V_{conf}(z)|^{3/2} \Theta[-V_{conf}(z)] + (4\pi s n_S)^2}.$$

In the TF-2D approximation the screened potential of a positively charged impurity situated at $(\rho_i, 0)$ can be

calculated for a screening charge located at $z = 0$, and the result is [12, 21, 22]

$$V^{TOT}(q, z, \rho_s) = \frac{e^{-q|z|}}{S} \frac{2\pi}{q + q_s} e^{-q|z|}$$

where $q_s = 2$ is the TF screening wavevector, which characterizes a density-independent screening response of a 2D electronic charge.

In order to calculate the subband mobilities by using equation (1) and equations (3)–(6) it is necessary to define the subband wavefunctions $\chi_i(z)$ and energies E_i . These were obtained by solving numerically equation (2) with the confining potential taken to be equal to the TF approximation (14). Using the wavefunctions obtained in this way the statistical average of the screened electrostatic potential over the distribution of positively charged donors can be calculated to obtain

$$|V_{ii'}^{TOT}(q)|^2 = \frac{n_s}{S} \left(\frac{2\pi}{q + q_s} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_i^*(z) \chi_{i'}(z) e^{-q|z|} dz \right|^2. \quad (15)$$

Substituting equation (15) into equation (3), one obtains for $i \neq i'$

$$K_{ii'} = -2\pi n_s \times \int_{|k_i - k_{i'}|}^{k_i + k_{i'}} \frac{(k_i^2 + k_{i'}^2 - q^2) |Q_{ii'}(q)|^2}{(q + q_s)^2 \left[4k_i^2 - \left(q + \frac{k_i^2 - k_{i'}^2}{q} \right)^2 \right]^{1/2}} dq \quad (16)$$

and the diagonal elements

$$K_{ii} = 2\pi n_s \int_0^{2k_i} \frac{q^2 |Q_{ii}(q)|^2}{(q + q_s)^2 (4k_i^2 - q^2)^{1/2}} dq + 4\pi n_s k_i^2 \sum_{i' \neq i} \int_{|k_i - k_{i'}|}^{k_i + k_{i'}} \frac{(q + q_s)^{-2} |Q_{ii'}(q)|^2}{\left[4k_i^2 - \left(q + \frac{k_i^2 - k_{i'}^2}{q} \right)^2 \right]^{1/2}} dq \quad (17)$$

where

$$Q_{ij}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_i^*(z) \chi_j(z) e^{-q|z|} dz.$$

Equations (16) and (17) are in the form obtained by Mezrin and Shik [6], and represent a convenient form to calculate numerically the transport and quantum mobilities of a subband by using relations (1) and (3) of the previous section.

In the TF-2D approximation the non-zero width of the screening charge is not taken into account, in opposition to the RPA approach. This difference can be appreciated from an examination of equation (15), which leads to a diagonal dielectric matrix

$$\epsilon_{ii'mm'}^{TF}(q) = \left(1 + \frac{2\pi}{q} \frac{dn_s}{dE_F} \right) \delta_{im} \delta_{i'm'}. \quad (18)$$

Equation (18) is independent of the shape of the screening charge, in contrast to the RPA dielectric matrix given by equation (11). It is well known that the limit $q \rightarrow 0$ of the RPA for a quantum confined system will lead to the TF approximation for a strictly 2D system. Equation (18) can

be obtained by taking the limit $q \rightarrow 0$ of the RPA equations which lead to equation (11) (but *not* of equation (11) directly) and assuming $n_s = E_F/\pi$, which is valid for a strictly 2D system.

3. Results and discussion

The quantum and transport mobilities in individual subbands as a function of applied bias were calculated in both the RPA and TF-2D approximation for a δ -doped semiconductor with donor concentrations $n_s = 2, 5$ and $10 a_B^{-2}$. We choose to represent the effect of bias through the fraction, x , of the total number of electrons in the structure, n_s , which is transferred to the surface of the sample when a potential difference is applied between the gate and the substrate. Results for the quantum and transport mobilities as a function of x are shown in figure 1.

First the results for zero bias will be discussed. The most remarkable difference between the results of the RPA and TF-2D approaches is that the RPA subband mobilities increase with the subband index, while in the TF-2D calculation the subband mobilities are quantitatively similar. However, the mobility for carriers in the fundamental subband, E_1 , is approximately the same in both calculations. The output of the quantum treatment for zero bias is in quantitative agreement with the experimental results of Koenraad *et al* [23]. The authors of [23] obtain quantum mobilities in the i th electronic subband, $\mu_Q(E_i)$, which are related as $\mu_Q(E_2) \sim 4\mu_Q(E_1)$ for $n_s \sim 2$ and $\mu_Q(E_2) \sim 3\mu_Q(E_1)$ for $n_s \sim 5$. These results are well reproduced by our RPA calculations, thus favouring the validity of the RPA approximation.

The calculations rely on two input quantities: the electronic spectrum and the screened electrostatic potential of the sheet of ionized impurities. We find that, for a donor layer of zero thickness as considered in this work, the electronic spectrum obtained by solving the Schrödinger equation (2) using the TF confining potential (14) is very nearly the same as the result obtained by solving simultaneously the Schrödinger and Poisson equations; this finding is in agreement with the conclusion of [20], where it is shown that at zero bias the TF confining potential of equation (14) yields results that are equivalent to those of the more elaborate self-consistent Schrödinger–Poisson theory.

Thus the differences between the subband mobilities obtained by the RPA and TF-2D calculations cannot be explained by the differences in the electronic spectra and must be traced to the differences in the model for the screened electrostatic potential used in each case. In the RPA model, the non-zero thickness of the screening charge is taken into account. This implies that the intensity of the electric field of the charged impurity sheet will weaken rapidly as we move away from $z = 0$. Therefore electrons occupying states in more energetic subbands, described by wavefunctions delocalized to a greater extent, will be scattered less efficiently, and will display a higher mobility. In contrast, in the TF-2D model the screening charge is assumed to be of zero thickness, hence the electric field of the charged impurity sheet changes with z much

Figure 1. Calculated quantum and transport mobilities for $n_\delta = 2$ ((a) and (b)); $n_\delta = 5$ ((c) and (d)); and $n_\delta = 10$ ((e) and (f)) as a function of the fraction s of the total number of carriers in the structure transferred to the gate. Full curves correspond to the RPA result, whereas dashed curves represent the result of the TF-2D approximation. Labels indicate the subband index corresponding to each curve.

more slowly than in the RPA model, and electrons in all subbands are scattered with nearly equal efficiency and display similar mobilities. In other words, the mean distance between the electronic charge and the charged impurity sheet is shown to be a crucial ingredient in the RPA model, but not in the TF-2D approach. In fact, the TF-2D theory predicts that sometimes the mobility decreases with the subband index, which is a consequence of a decreasing Fermi wavevector, which favours a higher scattering probability rate.

When an external bias is applied, electronic charge is transferred from the δ -well to the surface of the sample. The outermost subband is depleted of carriers, until above $s \sim 0.95$ only the fundamental subband remains populated. Whenever a subband is depopulated of carriers,

the mobilities in the subbands which remain populated experience a jump, which is a consequence of the sudden change in the density of states at the Fermi energy; such jumps will be attenuated at finite temperatures, when the energy range of conducting electrons is broadened.

With increasing bias the total density of electrons confined in the well, $(1-s)n_\delta$, decreases, which in the RPA model implies that the screening capability of electrons confined in the δ -well decreases, hence the electrostatic potential of the charged impurities becomes more intense, which means an increased scattering efficiency and a lower carrier mobility. This behaviour (i.e. a decreasing mobility with bias) is seen in both transport and quantum subband RPA mobilities in the range of small bias. However, at larger values of the bias the RPA mobilities in excited subbands increase. When bias is applied, the high-energy subbands are tilted, due to the fact that the electronic charge is repelled by the negative charge on the surface of the sample. This is illustrated in figure 2, which shows the δ -well with $n_\delta = 2.0$ and subband wavefunctions for zero bias and for $s = 0.25$. At zero bias, the expectation values are $\langle z \rangle = 0$ for all subbands. At $s = 0.25$, the expectation value for the strongly bound electrons in the E_1 subband experiences a small shift to $\langle z \rangle_{E_1} = 0.05$; for the E_2 and E_3 subbands, a large shift to $\langle z \rangle_{E_2} = 0.56$ and $\langle z \rangle_{E_3} = 1.82$, respectively, is obtained. Thus, with increasing bias electrons occupying states in energetic subbands will move further away from the impurity sheet. In the RPA model such a spatial separation of electrons and impurities implies that the mobility in excited subbands will increase with bias.

In [9] it was found that the electronic mobility in a subband E_i correlates with the overlap of the corresponding single-particle density, $|\chi_{E_i}(z)|^2$, with a distribution function which determines the doped-layer profile. For a donor layer of zero thickness as used in this work, such an overlap will be given simply by $|\chi_{E_i}(0)|^2$. Figure 3 shows the calculated overlaps as a function of bias for a δ -well with $n_\delta = 2.0$. A comparison of figure 3 and figure 1 shows that there is a clear correlation between the overlap $|\chi_{E_i}(0)|^2$ evolution with bias and the RPA mobility in subband E_i , i.e. when the overlap increases, the mobility decreases, and vice versa. Such a correlation proves the point that the RPA mobilities are sensitive to the mean distance between the electronic charge and the doping layer.

In contrast, as figure 1 shows, in the TF-2D model the subband mobilities always decrease with applied bias; in this case, however, the screening length is density independent, thus the decrease in mobility cannot be attributed to a change in screening efficiency. As mentioned above, the TF-2D mobilities are also insensitive to the localization of the wavefunction, and therefore the tilting of the δ -well has little effect upon the absolute values of the subband mobilities. The decrease in the subband mobilities with bias obtained by the TF-2D model is dominated by the decrease in the Fermi wavevector as the δ -well is depleted, which leads to a higher scattering probability rate and hence lower mobilities.

An additional result of the theoretical calculations is the average drift mobility, μ_{Av} , for transport parallel to the doped layer. The average drift mobility is given by

Figure 2. The confining δ -well obtained from the TF-2D approximation (full curve) for $s = 0$ (a) and $s = 0.25$ (b). The origin of the energy scale was chosen at the Fermi energy. Broken curves represent the electronic charge corresponding to the subband indicated by a label.

Figure 3. The calculated overlap $|\chi_i(0)|^2$ as a function of bias for $n_s = 2$. Labels indicate the subband index corresponding to each curve. The factor by which the calculated overlap is multiplied is indicated.

the average of the transport subband mobility weighted by the density of carriers in the corresponding subband, $\mu_{Av} = \sum_i \mu_T(i) E_i / \sum_i E_i$. Results of the calculation are shown in figure 4 as a function of applied bias; the full curve corresponds to the RPA with $n_s = 5.0$ (for $n_s = 2.0$ and $n_s = 10.0$ the RPA model yields a similar result to that obtained for $n_s = 5.0$, and the average drift mobility curves are not shown to avoid overloading the figure); the average drift mobilities obtained by the TF-2D model are shown for $n_s = 2.0, 3.0$ and 5.0 by the broken curves. It is interesting to observe that the dependence of average drift mobility on bias is approximately the same in both models.

Figure 4. Calculated average drift mobilities in the RPA model (full curve) and the TF-2D model (broken curves) as a function of applied bias. The total density of carriers in the structure is indicated for each curve.

Since most of the electronic charge in the well occupies states belonging to the fundamental miniband, the average drift mobility will be dominated by the $E1$ mobility, which is similar in the RPA and TF-2D models. This fact was observed in [6] whereby the authors show that the average drift mobility obtained within the TF-2D model compares favourably with the experimental values for an ungated δ -doped structure.

4. Conclusion

The quantum and transport mobilities in individual subbands of a δ -doped semiconductor were calculated in the RPA and the TF-2D approximation as a function of external bias. Results of the TF-2D and RPA theories agree for the fundamental subband only, which is explained by the short binding length for carriers in the fundamental subband. For excited subbands, the mobilities increase with the subband index in the RPA approximation, whereas they remain nearly unchanged in the TF-2D model. This difference is due to the fact that in the RPA approximation the subband mobility is very sensitive to the average distance between the electronic charge and the scattering centres, which is not the case in the TF-2D model. Because the average drift mobility for transport parallel to the doped layer is dominated by carriers in the fundamental subband, the average drift mobility in the TF-2D model agrees reasonably well with the RPA average drift mobility. The output of the RPA calculation, which is assumed to be reliable due to the success of RPA theory in describing unbiased δ -doped structures, shows that mobility dependence on bias correlates with the amount of overlap between wavefunctions and the region where donor atoms are situated.

Acknowledgments

Calculations were performed using the facilities of the Laboratório Central de Computação Avançada do Centro de Computação Eletrônica da Universidade de São Paulo (LCCA-CCE-USP). The authors acknowledge support by FAPESP, Grant 94/2155-9 and Grant 94/5645, CNPq, Grant 306335/88 and CAPES.

References

- [1] Wood C F C, Metze G, Berry J and Eastman L F 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 383
- [2] Schubert E F 1993 *Doping in III-V Semiconductors* (Cambridge: Cambridge University Press) p 433
- [3] Schubert E F 1994 *Semicond. Semimetals* **40** 1
- [4] Yamada S and Makimoto T 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 1022
- [5] González L R, Krupski J and Szewacka T 1994 *Phys. Rev. B* **49** 11111
- [6] Mezrin O and Shik A 1991 *Superlatt. Microstruct.* **10** 107
- [7] Hai G-Q, Studart N and Peeters F M 1995 *Phys. Rev. B* **52** 8363
- [8] Hai G-Q and Studart N 1995 *Phys. Rev. B* **52** R2245
- [9] Henriques A B 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16365
- [10] Mezrin O A, Shik A V and Mezrin V O 1992 *Semicond. Sci. Technol.* **7** 664
- [11] Johnson M B, Koenraad P M, van der Vleuten W C and Salemink H W M 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1606
- [12] Henriques A B 1991 *Phys. Rev. B* **44** 3340
- [13] Ploog K 1987 *J. Crystal Growth* **81** 304
- [14] De Keyser A, Bogaerts R and Borghs G 1996 *Solid-State Electron.* **40** 395
- [15] Wang C-J, Wu J-W, Chan S-H, Chang C-T, Sze S M and Feng M-S 1995 *Japan. J. Appl. Phys.* **34** 1107
- [16] Yavich B, Souza P L, Pires M P, Mendes W M, Henriques A B and Gonçalves L C D 1996 *J. Crystal Growth*
- [17] Siggia E D and Kwok P C 1970 *Phys. Rev. B* **2** 1024
- [18] Hedin L and Lundqvist B 1971 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4** 2064
- [19] Keys R W 1976 *Comment. Solid State Phys.* **7** 53
- [20] Ioriatti L 1990 *Phys. Rev. B* **41** 8340
- [21] Ando T, Fowler A and Stern F 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 437
- [22] Bastard G 1988 *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Ulis: Les Éditions de Physique)
- [23] Koenraad P M, van de Stadt A F W, Shi J M, Hai G Q, Studart N, Vansant P, Peeters F M, Devreese J T, Pierenboom J A A J and Wolter J H 1995 *Physica B* **211** 426

Single and periodically Si δ -doped InP grown by LP-MOVPE

B Yavich†‡, P L Souza†§, M Pamplona-Pires†, A B Henriques‡
and L C D Gonçalves‡

† Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rua Marquês de São Vicente 225, Gávea, Rio de Janeiro, RJ 22453-900, Brazil

‡ Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, São Paulo, SP 05389-970, Brazil

Received 10 December 1996, accepted for publication 10 January 1997

Abstract. Single and periodically Si δ -doped InP layers were grown by LP-MOVPE at 640 °C. A full width at half maximum of 32 Å was obtained for the net charge concentration profile for a sample with a peak net charge concentration of $1.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Numerical simulations showed that the impurities are localized over less than three InP monolayers. No dopant diffusion or segregation was observed. The periodic structures, grown with barriers varying from 100 to 300 Å, all had nearly the same carrier sheet concentration per dopant layer and impurity localization characteristics.

Since it was proposed by Wood *et al* in 1980 [1], the δ -doping technique which would ideally confine the dopants to a single layer has contributed much both to the understanding of fundamental properties of 2D systems [2, 3] and to the development of high-performance devices [2-5].

Most of the work in this field has been done on the GaAs and AlGaAs systems [3]. Net charge distributions with a full width at half maximum (FWHM) around 40 Å for Si δ -doped GaAs layers have been measured by *C-V* profiling. Such a charge distribution implies a dopant localization over 10 Å or less, essentially reaching the ideal goal. Similar results have been obtained for AlGaAs.

Almost a decade after the first work on GaAs, Di Forte-Poisson *et al* [6] reported the observation by *C-V* profiling of Si δ -doped InP layers with a FWHM of 32 Å. Si δ -doped InGaAs layers with very high carrier sheet concentration have been grown by MBE [7]. Recently, Wang *et al* [8] obtained extremely thin Si δ -doped layers in GaInP for HEMTs and npn HBTs.

Periodically δ -doped layers, several δ -doped layers separated by the same distance, have raised much interest due to their great potential for unique device applications. Transport properties of δ -doped Si superlattices have been extensively studied in GaAs and AlGaAs [3, 9-12]. Such structures are very attractive in the quest for high conductivity [13]. For applications and integration of devices operating at 1.55 μm , knowledge of the properties

of δ -doped superlattices in InP-based materials is of paramount importance.

In this communication, results of a systematic electrical characterization of single and different periodically InP δ -doped structures are presented and discussed for the first time. The samples with a single doping plane were grown with varying doping levels for studying the impurity localization. The periodically δ -doped structures have been designed to have the same carrier sheet concentration per doping plane. The possibility of growth of top quality samples by low pressure metalorganic vapour phase epitaxy (LP-MOVPE) is demonstrated by the excellent accord between the experimental data and numerical simulation.

The δ -doped InP structures were grown at 640 °C by LP-MOVPE in an AIX 200 reactor at 20 mbar. The source materials were PH_3 (100%), TMI and 1% of SiH_4 diluted in H_2 . The total flow rate, the TMI mole fraction and the V/III ratio used were 7 l min^{-1} , 2.5×10^{-6} and 360 respectively. The growth rate was 4.5 Å s^{-1} . The SiH_4 flux chosen was the one that produced the maximum doping level for a bulk sample (sample 204) but without reaching the saturation regime, since no signs of compensation could be detected. On (100) Fe-doped InP substrates, first a 0.3 μm thick undoped buffer layer was grown, followed by either a single or periodic δ -layers and finally a 550 Å cap layer was deposited. The periodic structures are composed of 5 or 10 periods with barrier thicknesses varying from 100 to 300 Å. The dopant plane for the single δ -doped samples was deposited during a 5 to 40 s growth interruption. Doping times longer than 30 s caused no increase in the doping concentration, while the mobility dropped. The optimized doping time, 25 s, was achieved for sample 187

† Also with the A.F. Ioffe Physico-Technical Institute, St Petersburg, Russia.

§ Author to whom correspondence should be addressed (e-mail plusloza@cetuc.puc-rio.br).

Table 1. Electrical characteristics of the δ -doped structures. Experimental data for the investigated samples. The first column shows the sample number, followed by the number of periods; the third, fourth and fifth columns show the period (d), the peak net charge concentration (N_{2D}) and the full width at half maximum of the net charge concentration profile (FWHM), all obtained from C - V measurements. The last column shows the carrier sheet concentration (N_{2D}) determined by Hall effect measurements.

Sample no	Number of periods	d (C-V) (Å)	N_{2D} (C-V) (10^{18} cm $^{-2}$)	FWHM (C-V) (Å)	N_{2D} (Hall) (10^{12} cm $^{-2}$)
204	Bulk	Bulk	9.0		6.0×10^{18} (cm $^{-3}$)
187	Single	Single	10.0	35	8.4
164	Single	Single	8.0	41	4.4
162	Single	Single	5.3	47	4.2
166	Single	Single	2.0	60	2.0
189	Single	Single	2.5	76	1.1
194	5	92	18.0	32	23.0
196	5	129	15.0		21.5
197	5	222	13.0		22.0
198	5	278	12.0	35	21.0
206	10	107	12.0		49.6
207	10	140	7.6		52.0
200	10	176	9.0		45.2
199	10	246	9.0		41.5

(see table 1). Therefore, this was the doping time chosen for the periodic samples. Much longer doping times are required when doping saturation is desired [14]. The silane flux was always triggered 2 s after growth interruption and halted 2 s before the growth was resumed. Two-seconds pre- and post-doping steps minimize the dopant memory effect and produce abrupt interfaces at the same time.

C - V measurements were performed using the electrochemical profiler PN4300 where a Schottky contact is formed between the semiconductor and the electrolyte (HCL, 0.5 mol). In the case of the periodic structures the C - V profiles were obtained by alternating a measurement and an etch in order to detect the deeper layers in the sample. Hall effect data were taken at room temperature using HL 5500 equipment.

Table 1 shows the results for the single δ -doped samples (162, 164, 166, 187 and 189), for the periodic structures (samples 194, 196–198 have five periods while samples 199, 200, 206 and 207 have ten periods) and for a reference bulk sample (204). N_{2D} is the net charge concentration, FWHM is the full width at half maximum of the net charge distribution, both obtained with C - V . Also, for the periodic samples, the period d was measured by the C - V profiling technique. The carrier sheet concentration, N_{2D} , obtained by Hall effect measurements, is in table 1, as well. Mobilities up to 2000 cm 2 V $^{-1}$ s $^{-1}$ at room temperature were measured.

The insert of figure 1 shows a C - V profile (scattered points) for a single δ -doped layer (sample 187) with a net charge concentration of 10×10^{18} cm $^{-3}$ and a FWHM of 35 Å. Also shown on the same figure is the theoretical C - V profile (full curve). In order to obtain a C - V depletion profile, a reverse bias is applied to the Schottky barrier on the surface of the semiconductor, and the differential capacitance is measured by adding a small alternating voltage to the reverse bias. The C - V profile is then obtained by plotting the C - V concentration against the C - V depth. The FWHM of the experimental C - V curve is determined by the planar density of Si atoms and the

width of the δ -layer. When the density of impurity atoms is known, the width of the Si distribution can be estimated by calculating self-consistently the theoretical C - V profile with the width of the δ -layer as a variable input parameter. The true width of the δ -layer is taken to be the theoretical value which gives the C - V profile in best agreement with the experimental one.

The C - V technique has already been successfully applied to δ -doped GaAs semiconductor structures, as described in [3] and [15]. Schubert *et al* [15] have already demonstrated that the C - V spectrum of a δ -doped layer shows a peak with a FWHM which depends sensitively on the spatial localization of the dopant impurities. It is also possible to determine the spread of the dopants in a δ -doped structure with an accuracy within the length scale of the lattice constant of the host crystal [16].

In the simulation reported here, the Poisson and Schrödinger equations were solved self-consistently within the Hartree approximation for the gated δ -doped structure [17]. The impurities were assumed to be distributed as a Gaussian function. The differential capacitance was calculated assuming that transfer of electrons from the δ -well to the Schottky barrier is the sole contributing mechanism. Other contributions are exceedingly small and are neglected [3]. The inclusion of background acceptors with a density up to 2×10^{14} cm $^{-3}$ had no noticeable effect on the calculated C - V profile. The dopant concentration used was taken from the results of Hall measurements, shown in table 1. One clearly sees the excellent accord between experimental and simulated data which was obtained for a dopant distribution over 10% of the Bohr radius, namely 7.8 Å. This result excludes diffusion of Si impurities over more than two lattice constants, as Schubert *et al* [15] have already shown to be the case for MBE-grown GaAs at temperatures $\leq 550^\circ$ C. The lineshapes are reproduced with great precision.

The simulation for the C - V profiles as a function of N_{2D} , assuming a dopant localization over both 10% and 70% of the Bohr radius (7.8 Å and 54.6 Å), were

Figure 1. Full width at half maximum (FWHM) of the C-V plots as a function of the carrier sheet concentration. The squares represent the experimental points for the single δ -doped layers while the diamonds correspond to the periodical structures. The lower and upper full curves are the result of a numerical simulation assuming an impurity spread (Δ) over 10% and 70% of the Bohr radius respectively. The insert shows the net charge concentration as a function of depth for the single δ -doped InP sample 187. The squares are the experimental points obtained from a C-V depletion profile while the full curve is a simulation assuming an impurity distribution (Δ) over 10% of the Bohr radius (a_B). Included in the figure is the carrier sheet concentration obtained from Hall measurements.

performed. The curves obtained for the FWHM of the C-V profiles as a function of N_{2D} are depicted by the full curves in figure 1. The experimental points are included in the figure, where the squares represent the single δ -doped samples while the diamonds represent periodic structures. Note that all the periodic samples have the same carrier sheet concentration per doped layer. The data points lie either on the simulated lower curve (impurities localized over 7.8 Å) or below it, meaning that the Si dopants are located at most over 8 Å. This implies that the dopants are confined to fewer than three monolayers of InP, showing that essentially no diffusion of Si or surface segregation takes place even at the growth temperature of 640°C. This is equivalent to the best results recently published for GaInP [8], for example. A simulation of the profile reported by those authors revealed approximately the same spatial localization for the dopants. This is in accordance to what has been previously observed by Schubert *et al* [3, 15] at lower temperatures for MBE grown GaAs and by Di Forte-Poisson *et al* [6] for MOVPE-grown InP at 600°C and in contrast to the diffusion observed by Zrenner *et al* [18].

In figure 2 one can observe a C-V profile for two periodically δ -doped structures with five and ten periods separated by 92 Å and 176 Å respectively. The first doping plane is not resolved in these C-V profiles. The net charge concentration, N_{3D} , is essentially the same as for the single layer. This profile is obtained by alternating

an etching step of 10 Å with a measurement. The etching procedure, however, introduces a broadening of the doping peaks. Therefore, in order to more precisely measure the FWHM, another piece of the same sample was used to make a depletion profile of the first doping peak without etching. The same FWHM obtained for the single δ -doped layers has been reproduced for the periodic structures, as shown in table 1 and plotted in figure 1. A small decrease in the peak net charge concentration is observed as the dopant layer is located deeper in the sample. This effect is a consequence of the etching technique. As one etches the sample down, a hole will be produced and the electrolyte that makes the Schottky barrier with the semiconductor will be in contact with the bottom of the hole and with the walls of the hole, as well. This effect will be responsible for the observed damping in the net charge concentration. Also, in table 1, one notices that for each set of periodic structures, N_{3D} decreases slightly as the barrier thickness increases. As the barrier gets larger the value of N_{3D} approaches the value of N_{2D} for the single δ -layer. This effect is most likely due to a contribution to the charge distribution from the neighbouring δ -layers, this contribution being more significant the closer the neighbouring δ -layers are. One should keep in mind that the wavefunction extension of the Si δ -layers in InP is around 80 Å. Sample 207 is an exception, possibly due to a bake-out of the reactor which was done prior to its growth. The bake-out influences the

Figure 2. Net charge concentration as a function of depth for two periodically δ -doped samples, namely 194 (plot (a)) and 200 (plot (b)) with five periods separated by 92 Å and with ten periods separated by 176 Å respectively. The profiles were obtained from a C-V etching profile. Included in plot (a) is the C-V depletion profile of the first doping plane, represented by triangles.

background impurity concentration.

In conclusion, excellent quality Si δ -layers of 8 Å width were grown by LP-MOVPE, showing that no diffusion takes place even at the relative high growth temperature of 640°C. The FWHM of N_{DP} decreases with increasing doping as expected for this 2D system, clearly indicating the increasing confinement of carriers. Periodic structures with five and ten periods were obtained with the same optimal impurity localization as the single δ -layers.

References

- [1] Wood C E C, Metze G, Berry J and Eastman L F 1980 *J. Appl. Phys.* 51 383
- [2] Ploog K, Hauser M and Fisher A 1988 *Appl. Phys. A* 45 233
- [3] For a complete review Schubert E F 1994 *Semiconductors and Semimetals* vol 40, ed A C Gossard (New York: Academic) p 1
- [4] Jeong Y, Jeong D, Hong W, Caneau C, Bhat R and Hayes J R 1992 *Japan. J. Appl. Phys.* 31 L66
- [5] Ballegger D G, Nummila K, Adesida I, Caneau C and Bhat R 1993 *Electron. Lett.* 29 1375
- [6] Di Forte-Poisson M A, Brylinski C and Blondeau E 1989 *J. Appl. Phys.* 66 867
- [7] Passenberg W, Bach H G and Böttcher J 1991 *J. Electron. Mater.* 20 989
- [8] Wang C, Wu J, Chan S, Chang C, Sze S M and Feng M 1995 *Japan. J. Appl. Phys.* 34 L1107
- [9] Ihn Th, Friedland K J, Hey R and Koch F 1995 *Phys. Rev. B* 52 2789
- [10] Henriques A B and Gonçalves L C D 1994 *Surf. Sci.* 305 343
- [11] Henriques A B and Gonçalves L C D 1993 *Semicond. Sci. Technol.* 8 585
- [12] Hai G-Q, Studart N and Peeters F 1995 *Phys. Rev. B* 52 8363
- [13] Fu Y and Willander M 1995 *J. Appl. Phys.* 78 3504
- [14] Ishikawa H, Miwa S, Maruyama T and Kamada M 1991 *Appl. Phys. Lett.* 58 851
- [15] Schubert E F, Stark J B, Ullrich B and Cunningham J E 1988 *Appl. Phys. Lett.* 52 1508
- [16] Ullrich B, Schubert E F, Stark J B and Cunningham J E 1988 *Appl. Phys. A* 47 123
- [17] Gonçalves L C D and Henriques A B 1997 *Semicond. Sci. Technol.* 12 203
- [18] Zrenner A, Koch F and Ploog K 1987 *Proc. 7th Int. Conf. on the Electronic Properties of 2D Systems (Santa Fé)* p 341

Electronic and optical properties of periodically Si δ -doped InP grown by low pressure metalorganic vapor phase epitaxy

P. L. Souza,^{a)} B. Yavich,^{b)} and M. Pamplona-Pires

Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rua Marquês de São Vicente 225, Gávea, Rio de Janeiro, RJ 22453-900, Brasil

A. B. Henriques and L. C. D. Gonçalves

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, São Paulo, SP 05389-970, Brasil

(Received 18 November 1997; accepted for publication 22 April 1997)

A series of periodically Si δ -doped InP samples with 5 and 10 periods varying from 92 to 278 Å has been investigated in terms of the transport and optical properties. A reduction in mobility with decreasing period was observed due to the increasing overlap of the electronic wavefunction with the various Si planes. A broad band emission was detected for the periodic structures at energies higher than the InP band gap. The cutoff energy for this band decreases with the period and this behavior can be described by a $d^{-2/3}$ decay. The results are discussed and compared with the ones for GaAs available in the literature. © 1997 American Institute of Physics. [S0021-8979(97)03515-9]

I. INTRODUCTION

In 1980 Wood *et al.*¹ proposed growth interruption during the doping procedure of semiconductors in order to achieve the planar dopant localization over only a few angstroms. Since then this technique attracted the attention of many researchers and the confinement of dopants to essentially a single layer contributed much both to the understanding of fundamental properties of two-dimensional systems,^{2,3} as well as to the development of high performance devices.⁴⁻⁶ Dopant localization over 10 Å or less has already been obtained for a single Si doping plane in GaAs,⁷ AlGaAs,⁸ InP,^{6,7} InGaAs,⁹ and GaInP^{9,10} layers. Since this impurity distribution can be described by a Dirac's δ function, such a structure is referred to as δ -doped. Delta-doped samples were grown by molecular beam epitaxy at temperatures equal or below 550 °C to avoid diffusion of impurities. Nevertheless, equally sharp distributions have been obtained also by metalorganic vapor phase epitaxy (MOVPE), where the growth temperature can be considerably higher, 600–750 °C. This result was very encouraging since with MOVPE it is possible to grow compounds with both As and P.

The success achieved with the single δ -doped layers prompted researchers to grow δ -doped superlattices, i.e., several δ -doped layers separated by the same distance. Such systems have two unique properties if the period is smaller than 300 Å. First, contrary to the single delta layer, it is possible to observe luminescence due to the periodic potential introduced in such structures. Single delta doping layers create a V-shaped potential which confines the electrons but repels the holes. In case of a periodically δ -doped structure minibands may be formed so that holes and electrons are allowed to have spatially overlapping wavefunctions and optical transitions may occur. In addition, the combination of

several doped planes can lead to structures of extremely high conductivity which are particularly interesting for high speed devices.

Transport and optical properties of δ -doped Si superlattices have been extensively studied in GaAs and AlGaAs.¹¹⁻¹⁷ However, only very few results in δ -doped superlattices in InP based materials have been published.^{7,18,19} Since such materials are the ones mostly used for integration and for devices operating at 1.55 μm , it is imperative that data on the optical and transport properties of δ -doped superlattices in these materials become available.

In this article the results of a systematic investigation of the mobility and photoluminescence (PL) characteristics of a series of Si δ -doped InP superlattices as a function of the superlattice period is reported.

II. EXPERIMENTAL DETAILS

The δ -doped InP structures were grown at 640 °C by low pressure metalorganic vapor phase epitaxy in an AIX 200 reactor at 20 mbar with a growth rate of 4.5 Å/s. The source materials were PH₃ (100%), TMIn, and 1% of SiH₄ diluted in H₂. On (100) Fe-doped InP substrates, first a 0.3 μm thick undoped buffer layer was grown, followed by either a single or periodical δ -layers, and finally a 550 Å cap layer was deposited. The periodical structures are composed of 5 or 10 periods with barriers' thickness varying from 100 to 300 Å. The dopant layers were deposited during a 25 s growth interruption. The silane flux was always triggered 2 s after growth interruption and halted 2 s before the growth was resumed. The periodically δ -doped structures have been designed to have the same sheet carrier concentration per doping plane. A scheme of the samples used is shown in Fig. 1.

C–V measurements were performed using the electrochemical profiler PN4300 where a Schottky contact is formed between the semiconductor and the electrolyte (HCL-0.5 mol). In the case of the periodic structures the

^{a)}Electronic mail: plusioza@ceiuc.puc-rio.br

^{b)}Also with the A. F. Ioffe Physico-Technical Institute, Saint Petersburg, Russia.

FIG. 1. Scheme of the δ -doping superlattice samples.

C-V profiles were obtained by alternating a measurement and an etch in order to detect the deeper layers in the sample. Hall effect data were taken at room temperature using a HL 5500 equipment. Secondary ion mass spectroscopy (SIMS) measurements were performed in a Cameca IMS4F for determining the depth profile of the atomic distribution. Oxygen with energy of 3 KeV and current 0.4 μ A was used as primary ion. The scanned area was $500 \times 500 \mu\text{m}^2$ and the analytical ions were collected from the central area of diameter equal to 10 μm . Quantification of the compositional profiles was done referring to implanted standards.

The PL measurements were performed using the 514 nm line of an Ar⁺ laser for excitation. The signal was dispersed by a 250 nm monochromator and detected by a Ge nitrogen cooled photodetector. The excitation power density varied from 0.2 to 20 W/cm². The PL spectra were taken at 12 K.

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Electronic Transport

Figure 2 shows the depth profile of both the net charge concentration and Si atomic concentration for sample 200, which contains 10 periods, measured by C-V (represented by dots) and SIMS (represented by the solid line), respectively. One clearly sees an excellent agreement between the

FIG. 2. Depth profile for sample 200 of the net charge concentration measured by C-V (scattered plot) and the Si atomic concentration measured by SIMS (solid line plot).

two techniques, in terms of the period of the superlattice. As for the impurity concentration, at first sight, the integrated impurity concentration measured by SIMS seems much lower than the integrated charge density determined by C-V. However, the observed width of the different peaks in the C-V profile in Fig. 2 is not the real width of the Si atomic distribution as published elsewhere.⁷ The C-V profile is obtained by alternating an etching step of 10 Å with a measurement. The etching procedure, however, introduces a broadening of the doping peaks. Therefore, in order to more precisely measure the full width at half-maximum (FWHM), another piece of the same sample was used to make a depletion profile of the first doping peak without etching. The FWHMs thus obtained are included in Table I. The net charge distributions observed in our samples correspond to an atomic distribution of around 8 Å,⁷ as determined by solving self-consistently the Poisson and Schrödinger equations within the Hartree approximation for the gated δ -doped structure.^{3,14} Excellent agreement between the simulated and measured C-V profiles was obtained when a dopant local-

TABLE I. Experimental data for the investigated samples. First column shows the sample number, followed by the number of periods; third, fourth, and fifth columns show the period (d), the peak net charge concentration (N_D^{peak}), and the FWHM of the net charge concentration profile, all obtained from C-V measurements. The last two columns show the carrier sheet concentration (N_D^{2D}) and the mobility (μ), both determined by Hall effect measurements.

Sample No.	Number of periods	d C-V (Å)	N_D^{peak} C-V (10^{18} cm^{-3})	FWHM C-V (Å)	N_D^{2D} Hall (10^{12} cm^{-2})	μ ($\text{cm}^2/\text{V s}$)
204	Bulk	Bulk	9.0		$6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$	1300
187	Single	Single	10.0	35	8.4	1850
164	Single	Single	8.0	41	4.4	1630
194	5	92	18.0	32	23.0	1430
198	5	129	15.0		21.5	1580
197	5	222	13.0		22.0	1710
196	5	278	12.0	35	21.0	1860
206	10	106	12.0		49.6	1490
207	10	133	7.6		52.0	1520
200	10	176	9.0		45.2	1780
199	10	246	9.0		41.5	2000

FIG. 3. Mobility as a function of the aspect ratio for the periodic structures (■), for the bulk sample 204 (◆), and for the single δ -layer sample 187 (●). The solid line is the best fit for the periodic structures. The aspect ratio is defined as $1/d\sqrt{N^{2D}}$.

ization over 10% of the Bohr radius was assumed.⁷ The atomic localization over less than three monolayers indicates that Si diffusion can be neglected. Nevertheless, the SIMS curves reveal a much broader atomic profile. The large width of the impurity peaks detected by SIMS are due to the resolution limit of the apparatus used which is of the order of 30 Å. The calculated area for the first peak in the SIMS profile is $4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ while for the C-V profile it is $3.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. The difference in the real atomic concentration detected by SIMS and C-V is well within the experimental error of both techniques. The profiles also demonstrate the excellent uniformity achieved in the InP barriers' width or the period of the superlattices. The slight discrepancy of 5 Å between the period measured by both C-V (176 Å) and SIMS (181 Å) is within the resolution of the techniques. The first grown doping plane is not resolved in the C-V profile. The line shape is not the same in the two profiles of Fig. 2, as expected, since the two techniques reveal different parameters, i.e., charge and atom distributions.

Table I shows the data extracted from the C-V profiles and from the Hall effect measurements for samples 204 (a bulk reference sample), 164, 187 (samples with a single dopant plane), 194, 196, 197, 198 (superlattices with 5 periods), 199, 200, 206, and 207 (superlattices with 10 periods). In Table I, d , N^{3D} C-V and FWHM are the period, the net charge concentration, and the full width at half-maximum of the net charge distribution, all determined from the C-V profiles. N^{2D} and μ are the net sheet carrier concentration and the mobility both measured by Hall effect experiments.

As mentioned before, one of the highlights of the δ -doping superlattices for applications is the higher mobility for high doping levels which can be achieved compared to bulk structures. One way of examining this characteristic is by plotting the mobility of the periodic structures as a function of the so-called aspect ratio. The aspect ratio is defined as the mean distance between the Si atoms in the plane divided by the period or $1/d\sqrt{N^{2D}}$. This data is plotted in Fig. 3, where the squares represent the experimental points and the straight solid line is the best fit. The diamond represents a single delta layer, sample 187 (aspect ratio is zero since the

period is infinity) and the black dot represents the bulk layer sample 204 (aspect ratio is one since the distance between the dopant atoms in the plane is the same in any of the three directions). As the period increases the mobility increases, approaching, in the limit of $d \rightarrow \infty$, the mobility of a single δ layer. If one extrapolates the best fit to the equivalent three-dimensional system, meaning aspect ratio equals zero, this would imply in a sample with a net charge concentration of $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ and mobility of only $440 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. The value of this bulk mobility cannot be directly measured since $N^{3D} = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ is above the solubility limit of Si in InP. This result indirectly attests that with δ -doped structures one can achieve much higher mobilities than with bulk materials for the same sheet carrier concentration.

The wave function extension of the Si δ layers in InP is around 80 Å. As the period gets smaller the increasing overlap of the electronic wave function with the doped planes produces a more efficient scattering leading to a decline in mobility. The drop in the mobility for the periodic structures agrees with results recently published for Si δ -doped GaAs. Henriques *et al.*¹⁹ have shown that the quantum mobility decreases for the periodic δ -doped structures, this effect being more drastic for the higher energy minibands. It should be noted that a reduction of the quantum mobility implies a lower transport mobility, as well. In view of this effect when designing high speed devices, one should consider the compromise between using a periodic structure, instead of a single δ -doped layer, in order to increase the conductivity and the consequent decrease in mobility. In case a periodic structure is desired, then the period should be carefully chosen.

Comparing the mobility for the two samples with a single δ -doping layer, it should be mentioned that sample 164 was grown with a different phosphine source which has a higher background impurity level. The presence of impurities unintentionally introduced during growth, indicated also by PL measurements, should be the reason for the lower mobility presented by sample 164 compared to sample 187. The data on sample 164 are shown in Table I because it has essentially the same sheet carrier density as each doping plane in the superlattice structures. In the next session, when the PL results will be presented, the spectrum of sample 164 will be compared with those of the doping superlattices.

B. Optical Properties

The photoluminescence spectra at 12 K of the single δ -doped sample 164 and of the periodic structures are shown in Fig. 4. The single δ -doped spectrum, as expected, is similar to the spectrum of good quality undoped InP. The PL FWHM of the near band edge emission at 1.417 eV for sample 187 is around 7 meV and for sample 164 is larger, probably due to the incorporation of undesirable impurities as mentioned in the previous paragraph. The undoped InP layers grown under similar conditions present a PL FWHM of 3 meV at the same temperature and excitation power density. The near band edge peak for the samples investigated involves more than two excitonic emissions as it was shown by a fitting procedure using three and four gaussians, indicating the presence of different bound excitons. No sign of

FIG. 4. PL spectra at 12 K for samples with different periods. The period and sample numbers are included in the figure. The arrows show the cutoff energy for the different samples. The cutoff energy was chosen as the energy for which the PL intensity of the broad band drops to half of its maximum value.

the delta layer potential well is observed for the single δ -doped samples since the well confines the electrons but repels the holes. Hence, there is no overlap between the holes and the confined electrons. Two other emissions, one at lower and one at higher energy with respect to the near band edge peak, are observed in the spectra of the periodic structures. The low energy one, located around 1.39 eV at 0.2 W/cm², is attributed to a donor-acceptor transition since it shifts to higher energies with increasing excitation power density. This type of behavior with the excitation power density can also be observed in doping superlattices of the $n-i-p-i$ type when the period of the superlattice is of the order of 600 Å as reported by Schubert *et al.*³ However, for short periods (100 to 250 Å), as reported here, one would expect no changes in the emission energy for an increase in the excitation power density. In addition, higher excitation power densities favor the near band edge emission indicating that this impurity band saturates. This emission is not related to the presence of the doping superlattice.

The striking feature in these spectra is the presence of the high energy PL broad band emission which shows a different cutoff energy for the different samples and whose intensity relative to the near band edge peak declines as the period is reduced. This high energy PL emission is attributed to the transition between electrons at the Fermi energy and confined holes in the doping superlattice region. The high energy cutoff, $h\nu_{\text{cutoff}}$, represented by an arrow in Fig. 4 is given by:

$$h\nu_{\text{cutoff}} = E_g(\text{InP}) - V + E_e + E_h, \quad (1)$$

where V is the effective V -shaped potential, E_e is the electron Fermi energy measured from the bottom of the V potential, and E_h is the confinement energy for the holes measured from the top of the V potential.^{13,16,17} A band diagram is shown schematically in Fig. 5 to help one in understanding this discussion more easily. Both E_e and E_h should increase with decreasing period, consequently increasing $h\nu_{\text{cutoff}}$, as it is observed in this investigation. For the spectra shown in

FIG. 5. Band diagram for the periodic structures.

Fig. 4, $h\nu_{\text{cutoff}}$ is between 20 and 57 meV above the near band edge emission. Similar results have been reported for GaAs.¹⁶

The cutoff energies from Fig. 4 are plotted as a function of the period in Fig. 6 and are represented by squares. The behavior of $h\nu_{\text{cutoff}}$ as a function of the period of the superlattice should follow a $d^{-2/3}$ dependence in the case of short periods as it will be shown below. In this case, the system can be considered three-dimensional and $h\nu_{\text{cutoff}}$ or the transition cutoff energy is then given by the position of the Fermi energy for the system, which can be written as:

$$h\nu_{\text{cutoff}} - A = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}, \quad (2)$$

where A is the energy offset, k_F is the Fermi wave vector, and m^* is the effective mass. On the other hand, N^{3D} equals the total occupied volume in k -space, $(4\pi k_F^3/3)$, divided by the volume of each occupied state, $(2/(2\pi)^3)$. Thus,

$$N^{3D} = \frac{4\pi k_F^3}{3} \frac{2}{(2\pi)^3}. \quad (3)$$

Replacing N^{3D} by N^{2D}/d in Eq. (3), then solving it for k_F , and finally substituting it in Eq. (2), one obtains:

FIG. 6. Plot of the cutoff energy $h\nu_{\text{cutoff}}$ as a function of the period. The experimental data reported here are represented by (■) and the data from Ref. 18 are represented by (○). The solid and dashed lines represent the best fit with a $d^{-2/3}$ decay and the theoretical curve, respectively.

$$\hbar\nu_{\text{cutoff}} - A = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{3\pi^2 N^{2D}}{d} \right)^{2/3} \quad (4)$$

It should be pointed out that the approximation $N^{3D} = N^{2D}/d$ is only valid for d smaller or equal to the Bohr radius,¹³ which in this case is 78 Å. Only under this condition can the system be considered three-dimensional and the Fermi surface is indeed approximately spherical. In fact, it is shown in Ref. 12 that the electron gas is effectively isotropic as it is in bulk material when the period is of the order of 100 Å. The reduction in the period of the superlattice is equivalent to an increase in the number of electrons in a three-dimensional system, i.e., it implies a raise of the Fermi energy and consequently an increase of the cutoff energy. Simulations of the PL spectra for GaAs δ -doped samples showing an energy cutoff above the energy band gap of the host material which increases with the decrease in the period have been already reported.¹³

In Eq. (4) all the parameters, except for the period, are constant for the superlattices investigated, therefore, $\hbar\nu_{\text{cutoff}} \propto d^{-2/3}$. This dependence is depicted by the solid curve in Fig. 6, where the constant A and the coefficient of $d^{-2/3}$ were best fit. The experimental data can clearly be fit to a $d^{-2/3}$ behavior even for periods larger than 80 Å. On the other hand, the fitting parameters cannot be totally accounted for in this simple approximation. The energy offset, A , obtained, i.e., the energy in the limit of $d \rightarrow \infty$, was 1.40 eV or 15 meV below the expected InP band gap at 12 K, possibly due to band gap renormalization effects.²⁰ The coefficient of $d^{-2/3}$ obtained in the fitting procedure is 50% higher than the calculated value in Eq. (4). Such slight discrepancy is positively surprising if one considers that the substitution of N^{3D} by N^{2D}/d in Eq. (4) is only valid for $d \leq 80$ Å. The theoretical curve where A is substituted by the InP band gap and the coefficient of $d^{-2/3}$ is calculated using N^{2D} measured by Hall effect is represented in Fig. 6 by the dashed line. The close agreement between the experimental values and the simple predicted $d^{-2/3}$ trend indicates that for many purposes and applications such an approximation can be accurate enough. A more complete and precise modeling of the problem, including effects such as band gap renormalization, for example, is beyond the scope of this paper.

Also included in Fig. 6 and represented by diamonds are the values of the cutoff energy as determined from a combination of Shubnikov-de-Haas measurements and photon energy emission as a function of applied magnetic field. This technique together with some preliminary results have been published elsewhere.¹⁸ One clearly observes that the trends determined in this investigation and by the method of Ref. 18 coincide. The energy at which the intensity of the high energy broad band drops to half of its maximum value was used as the criteria to determine $\hbar\nu_{\text{cutoff}}$ from the PL spectra. Some uncertainty may be introduced by this choice of criteria. Also, in the technique described in Ref. 18, the PL emission intensity as a function of magnetic field is measured for discrete values of emission energy. The energy steps are around 2 meV, which should introduce an error in the evaluation of the transition energy.

Another important feature which can be noted in the

spectra of Fig. 4 is that the high energy band becomes less intense relative to the near band edge emission as the period of the superlattice diminishes. Structures with very large period, $d \rightarrow \infty$, present practically no overlap between the electron and the hole wavefunctions. As the period is made shorter, but still maintaining some degree of a two-dimensional character, the localized electron and hole wave functions will gradually overlap increasing the optical transition cross section. On the other hand, if the period is further reduced, the system moves from a two-dimensional to a three-dimensional situation, where minibands are formed and the wave functions are spread out. Consequently, the relative intensity of the high energy broad band would first increase reaching a maximum for a critical period, and then, would drop as the period is continuously reduced. According to this, the samples investigated here would belong to the range where the system has already gone through a maximum for the high energy PL emission relative intensity and it is gradually losing its two-dimensional character as the period is made shorter. This behavior is consistent with the assumption used in the previous discussion, namely, that the electron gas is isotropic and that the δ -doping superlattice systems investigated have a predominantly three-dimensional character. The maximum in the relative intensity of the broad band emission should occur for a critical period, $d_c \leq 278$ Å. This transition from two-dimensional to three-dimensional behavior has already been observed for GaAs.^{12,13} A similar variation of the broad band emission intensity with the period has been predicted in GaAs,¹³ however, in that case, d_c was found to be between 50 and 100 Å. Further investigation is required for a better quantitative understanding of this phenomenon.

IV. CONCLUSION

A systematic investigation of mobility and photoluminescence characteristics of Si δ -doped InP superlattices has been carried out as a function of the period. Samples with 5 and 10 periods have been grown with great uniformity as demonstrated by both C-V and SIMS measurements. A reduction in the mobility with decreasing period of the superlattices for the same sheet carrier concentration per doping plane has been observed. This effect is qualitatively explained by the overlap of the electronic wavefunction with the neighboring doping planes.

The photoluminescence spectra for the superlattices investigated presented a high energy broad band whose cutoff energy varies, in a simple approximation, with the period of the superlattice as $d^{-2/3}$. This behavior can be understood as the dependence of the Fermi level position on the barrier width for the different samples. The increase in the intensity of this broad band with increasing period can be qualitatively explained by a two-dimensional to three-dimensional transition.

KNOWLEDGMENTS

Dr. B. Ber from the A. F. Ioffe Institute, Saint Petersburg, Russia has kindly performed the SIMS measurements. This work has been financially supported by FINEP, PES, CNPq, FAPERJ, and FAPESP.

E. C. Wood, G. Metzger, J. Berry, and L. F. Eastman, *J. Appl. Phys.* **51**, 13 (1980).

Piogg, M. Hauser, and A. Fisher, *Appl. Phys. A* **45**, 233 (1988).

For a complete review, see E. F. Schubert, *Semiconductors and Semimetals*, edited by A. C. Gossard (Academic, New York, 1994), Vol. 40.

Jeong, D. Jeong, W. Hong, C. Caneau, R. Bhat, and J. R. Hayes, *Jpn. Appl. Phys.* **31**, L66 (1992).

G. Ballegger, K. Nummela, I. Aderida, C. Caneau, and R. Bhat, *Electron. Lett.* **29**, 1375 (1993).

A. Di Forte-Poisson, C. Brylinski, and E. Blondeau, *J. Appl. Phys.* **66**, 7 (1989).

Yavich, P. L. Souza, M. Pamplona Pires, A. B. Henriques, and L. C. Gonçalves, Presented at the VIII International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy, Cardiff, UK, June 1996; B. Yavich, P. L. Souza, M. Pamplona Pires, A. B. Henriques, and L. C. Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 481 (1997).

Passenberg, H. G. Bach, and J. Büncher, *J. Electron. Mater.* **20**, 989 (1991).

⁹C. Wang, J. Wu, S. Chan, C. Chang, S. M. Sze, and M. Feng, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L1107 (1995).

¹⁰C. Wang, M. Feng, S. Chan, C. Chang, J. Wu, and S. Sze, *J. Appl. Phys.* **79**, 8054 (1996).

¹¹Th. Ihm, K. J. Friedland, R. Hey, and F. Koch, *Phys. Rev. B* **52**, 2789 (1995).

¹²A. B. Henriques and L. C. D. Gonçalves, *Surf. Sci.* **305**, 343 (1994).

¹³A. B. Henriques and L. C. D. Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 585 (1993).

¹⁴A. B. Henriques, L. C. D. Gonçalves, P. L. Souza, and B. Yavich, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 190 (1996).

¹⁵G.-Q. Hai, N. Studart, and F. Peeters, *Phys. Rev. B* **52**, 8363 (1995).

¹⁶A. C. Maciel, M. Tatham, J. F. Ryan, J. M. Worlock, R. E. Nahory, J. P. Harrison, and L. T. Flores, *Surf. Sci.* **228**, 251 (1990).

¹⁷K. Mac-Leung, J. S. Rimmer, B. Hamilton, J. H. Evans, M. Missous, K. E. Singer, and F. Zalm, *Phys. Rev. B* **45**, 14 114 (1992).

¹⁸A. B. Henriques, L. C. D. Gonçalves, V. Bindilati, N. F. Oliveira, Jr., P. L. Souza, and B. Yavich, Proceedings of the 12th International Conference on the Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, Würzburg, Germany, 1996 (unpublished).

¹⁹A. B. Henriques, L. C. D. Gonçalves, V. Bindilati, N. F. Oliveira, Jr., P. L. Souza, and B. Yavich, Proceedings of the 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors, Berlin, Germany, 1996, edited by Scheffter and Zimmerman (World Scientific, Singapore, 1996), p. 2363.

²⁰S. Das Sarma, R. Jalabert, and S.-R. Eric Yang, *Phys. Rev. B* **41**, 8288 (1990).

Magnetic Quantum Effects in Degenerate Superlattices

A.B.Henriques^{1*}, L.C.D.Gonçalves¹, P.L.Souza², and B.Yavich²

1: Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Caixa Postal 66318, 05315-970, São Paulo, Brazil

2: Centro de Estudos em Telecomunicações, PUC/RJ

Rua Marques de São Vicente, 225

22453-900 Rio de Janeiro, Brazil

Received February 2, 1997

The density of states for an effective mass electron gas confined by a superlattice potential in the presence of a quantizing magnetic field applied parallel to the growth axis was modelled using a tight-binding approximation for the superlattice dispersion. The magneto-oscillatory behavior of the density of states at the Fermi energy is analyzed. The broadening of the energy levels due to ionized impurity scattering was calculated using the RPA for the screened Coulomb interaction in periodically δ -doped samples, and results support the conclusion that in such systems only the belly cross sectional areas of the mini-Fermi surface will contribute to magneto-resistance oscillations. The theory is used to interpret experimental results and allows to deduce important sample parameters from the Shubnikov-de Haas experiment.

I. Introduction

Semiconductor superlattices can be doped with impurities so as to obtain a degenerate system. For such superlattices it is important to assess the carrier density and mobility, which are crucial parameters in respect to the optical and transport properties of a given sample. Because of the fact that often more than one miniband is populated with carriers, the conductivity takes place in several minibands, which differ largely in mobility, and the interpretation of the classical Hall experiment becomes unreliable. An alternative procedure to characterize the samples is to study their Shubnikov-de Haas (SdH) effect. At low temperatures, degenerate semiconductor superlattices exhibit an oscillatory magnetoresistance, which encodes such fundamental information as the carrier distribution among the superlattice minibands and the broadening of the electronic energy levels which arises as a consequence of carrier scattering. For a degenerate system, in a collision-free picture, the magnetoresistance oscillations are periodic if plotted in $1/B$ (B is the intensity of the external

magnetic field), and each frequency of oscillation, B_i , is associated with an extremal cross sectional area of the Fermi surface, A_i , according to^[1]

$$B_i = \frac{\hbar}{2\pi e} A_i$$

Figure 1(a) shows schematically the mini-Fermi surface for a superlattice with two occupied minibands, $E1$ and $E2$. The arrows show the extremal cyclotron orbits at the Fermi surface for a magnetic field applied along the growth axis, k . The fundamental miniband, $E1$, contains two extremal cross sections, a *belly* and a *neck*, and miniband $E2$ is described by a single extremal cross section. In this case the Fourier spectrum of the inverse field magnetoresistance should be described by three amplitude peaks, two peaks associated with miniband $E1$ and a single lower frequency peak associated with miniband $E2$, as shown schematically in Fig. 1(b). The miniband structure shown in Fig. 1(a) can be attained, for instance, with a superlattice of composition $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{InSb}$ [2]. For a sample with a Hall mobility of $27,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, the Fourier spectrum of the SdH

*Contact Author: E-mail: ahenriques@if.usp.br

oscillations displays three well resolved peaks: two associated with the miniband $E1$ and one associated with $E2$. The same mini-Fermi surface topology of Fig.1(a) can be achieved with semiconductors (GaAs^[3] or InP^[4]) doped periodically with sheets of Si; in this case, however, only two peaks are seen in the magnetoresistance. The δ -doped systems are described by a much lower Hall mobility of about 4,000 cm²/Vs due to the efficient scattering of carriers by ionized impurities. It is well known that in a lower mobility system the SdH oscillations will be associated with broader bands in the Fourier spectrum^[5]. Therefore the obvious interpretation is that in the periodically δ -doped system, in opposition to the higher mobility InAs_{1-x}Sb_x/InSb system, as a consequence of the lower mobility, the belly and neck peaks cannot be resolved separately, but instead give rise to a single oscillatory magnetoresistance component. Nevertheless, in order to interpret quantitatively the Shubnikov-de Haas spectrum, it is required to gain a formal understanding of the effects of broadening of the electronic energy levels upon the magnetoresistance oscillations.

Figure 1. (a) mini-Fermi surface for a degenerate superlattice with two populated minibands; arrows show the extremal cyclotron orbits in k -space for a magnetic field applied parallel to k ; (b) Schematic representation of the Fourier spectrum, in the collision-free picture, of the magnetoresistance oscillations associated with a mini-Fermi surface structure as in (a).

II. Tight-binding model for the Shubnikov-de Haas oscillations

We will consider the isolated magnetoresistance contribution from an electronic miniband, described by a dispersion law according to the tight-binding approximation (we use effective atomic units, whereby the unit of mass, distance and energy are m^* , $a_B = \epsilon \hbar^2 / m^* \kappa e^2$ and $H = \hbar^2 / m^* a_B^2$, respectively)

$$E(k_{\perp}, k) = \frac{1}{2} k_{\perp}^2 + \frac{\Delta}{2} (1 - \cos kd) - \epsilon \frac{\Delta}{2} (1 - \cos 2kd)$$

where $k_{\perp}$ and k are the wave vector components perpendicular and parallel to the growth axis, respectively, Δ is the width of the miniband, d is the period of the superlattice, and ϵ is a small dimensionless constant which is a measure of the amount of second-neighbor interaction in the tight-binding dispersion law. It readily follows from Eq.(1) that filled minibands, for which the Fermi energy ϕ_0 is greater than the miniband width Δ , will be described by a Fermi surface of the shape of the corrugated cylinder as is the Fermi surface section associated with $E1$ shown in Figure 1(a).

Under an applied magnetic field parallel to the axis of the superlattice, the in-plane motion will be quantized into Landau levels, giving rise to an energy spectrum

$$E_N(k) = \lambda_N + \frac{\Delta}{2} (1 - \cos kd) - \epsilon \frac{\Delta}{2} (1 - \cos 2kd)$$

where $\lambda_N = B(N+1/2)$, $N = 0, 1, \dots$, is the energy of the Landau levels, and the effects of spin-splitting have been neglected. The density of states can be calculated to give (considering $\epsilon = 0$ for simplicity)

$$D(E, B) = \frac{B}{\pi^2} \sum_N \frac{\Theta(E - \lambda_N) \Theta(\lambda_N + \Delta - E)}{\sqrt{(E - \lambda_N)(\lambda_N + \Delta - E)}} \quad (1)$$

where

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

is the Heaviside step function. Eq. (1) shows that in the collision-free limit each Landau level contributes to the density of states with two singularities at the

energies λ_N and $\lambda_N + \Delta$. In real systems, the Landau levels will be broadened due to potential fluctuations, scattering by impurities, phonons and other scattering mechanisms^[6]. A full calculation of the density of states in the presence of scatterers should take into account the physical nature of the broadening mechanisms, and the absolute value of the level width can be a complicated function of energy (see, for instance, Ref.[7]). However, as far as the interpretation of magneto-oscillatory phenomena is concerned, the main aspect of the broadening of the energy levels is that two energy levels can be distinguished only if their energy separation is greater than their level broadening, and this should not be fundamentally dependent of the exact lineshape of the broadening function. A simple way to see heuristically the effect of the broadening on the density of states is to assume energy levels described by Lorentzian functions. The oscillatory magnetoresistance contribution from the miniband can then be calculated through ^[8]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim \frac{X}{\sinh X} \frac{D(\phi, B)}{D_0(\phi_0)} \quad (2)$$

where ϕ is the position of the Fermi level under an applied magnetic field, and $X = 2\pi^2 T/B$, T is the temperature in units of $\hbar^2/k_B m^* a_B^2$. By a standard procedure^[9], we substitute (1) in (2), make use of the Poisson summation formula^[10]. To take into account the broadening of the energy levels, the expression obtained is convoluted with a Lorentzian function of semi-width at half-maximum γ , and the final result is ^[11]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim -\frac{X}{\sinh X} e^{-\alpha u} \{ 2J_0(\beta u) \cos \omega u + 8\epsilon \Im m [e^{-i\beta u} \Phi(1/2, 2, 2i\beta u)] \sin \omega u \}, \quad (3)$$

where $u = 1/B$, $\alpha = \pi/\mu_Q$, $\mu_Q = 1/2\gamma$ is the quantum mobility, $\beta = \pi\Delta$, and $\omega = 2\pi(\phi - \Delta)$, $\Phi(\alpha, \beta, z)$ is the degenerate hypergeometric function.

A Fourier analysis of Eq.(3)^[11] shows that in order for the belly and neck frequencies associated with a filled electronic miniband to be resolved as separate peaks, the broadening of the energy levels must be smaller than the width of the miniband, i.e. $\gamma < \Delta$; otherwise, a single magneto-oscillatory component will be detected. In the latter case, the exact frequency of magnetoresistance oscillations will depend on the

amount of second neighbor interaction, ϵ , within the tight-binding model used for the dispersion law.

It should be pointed out that the existence of two magneto-oscillatory components, the belly and neck, can be traced back to the two Van Hove singularities associated with a given miniband, the M_0 singularity at the miniband threshold and the M_1 singularity at the miniband top, respectively ^[12]. Thus, under large broadening conditions, $\gamma > \Delta$, the M_0 and M_1 singularities will not be manifested separately in the density of states, hence a single magnetoresistance oscillatory component will be manifested in the Shubnikov-de Haas experiment. Another way of weakening the oscillatory component associated with the neck orbit is to reduce the energy minigap which separates the top of the miniband from the threshold of the miniband of higher energy. If such a minigap, which we will denote by G , is smaller than γ , then the Van Hove singularity M_1 will be effectively removed, and the magneto-oscillatory component associated with the neck orbit will not manifest itself experimentally.

Figure 2. Energy width (Δ) for miniband $E1$ (full circles), energy minigap between minibands $E1$ and $E2$ at $k_{\perp} = 0$ (empty circles), and estimated value of the level width in a GaAs/GaAs:Si superlattice with an electron concentration of $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ per superlattice period.

The conclusion to which we arrive is that the belly and neck orbits will be detected experimentally only if the broadening of the energy levels is sufficiently small, i.e. $\gamma < \Delta$ and $\gamma < G$. Consider the fundamental miniband $E1$ in a periodically delta-doped system, whose

characteristic level width is $\gamma \sim 15$ meV in GaAs for a density of impurities of $2.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ per superlattice period [13–15]. If we were to detect the belly and neck orbits separately, the doping period of the system would have to be reduced so as to couple adjacent wells to an extent which would make the E1 miniband energy width, Δ , larger than 15 meV. However, self-consistent calculations of the miniband structure [16] show that along with the increase of Δ there is a decrease of the minigap, G , and if $\gamma \sim 15$ meV then the condition $\gamma < \Delta$ and $\gamma < G$ is only weakly satisfied in a narrow range of doping periods $100\text{\AA} < d < 150\text{\AA}$, see Fig.2. This makes the perspective of observing the magneto-oscillatory components associated with the belly and neck extremal orbits as separate oscillations in periodically δ -doped systems unlikely. In contrast, in compositional superlattices such as the system $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{InSb}$, the thickness of the layers can be chosen so as to increase Δ while maintaining G constant, which justifies the experimental observation of the belly and neck cross sections as separate magneto-oscillatory components in this case.

III. Miniband quantum mobilities in the RPA

The model developed for the lineshape of the magnetoresistance oscillations as a function of magnetic field intensity applied perpendicular to the confining layers, developed in the previous section, relies on the assumption that all of the Fermi energy electronic states of a given miniband are described by a broadening function of a fixed semi-width at half-maximum γ . This assumption is useful to give an approximate description of the magneto-oscillatory phenomena in degenerate superlattices, however, in reality the scattering probability of electrons from a given quantum state will depend on the wave function of the initial electronic state. From the theoretical standpoint, calculations of the widths of energy levels in samples with a single δ -doped layer has been calculated using either the Thomas-Fermi model [17–19] or the random phase approximation (RPA) [19–23] to describe the screened interaction between confined carriers and ionized impurities. The theoretical calculations made in the frame of the RPA show good quantitative agreement with experimental estimates [20,24], while the agreement is poorer

when a 2-dimensional Thomas-Fermi model of screening is used (see discussion in Ref.[23]). More recently, a calculation of the electronic mobilities in periodically delta-doped samples has been attempted [25]. For the periodically delta-doped semiconductor, the theoretical quantum mobility calculation is based on the same input quantities as the mobility theory for semiconductors with a single δ -doped layer, i.e., electronic energy spectrum and wave functions, and a model for the screened electrostatic potential of ionized impurities. The basic novelty is the electronic wave functions, which for a periodically δ -doped system describe Bloch states, whereas for a semiconductors with a single δ -layer the wave functions describe states which are spatially localized around the doped layer. Our calculations were made using the RPA model for the screened Coulomb interaction between carriers and ionized donors; this choice was motivated by the success of the RPA theory in describing the carrier mobility in δ -doped materials with a single δ -doped layer.

When electrons are confined by a potential which is periodic along one axis (the growth direction z), as occurs in a semiconductor with a periodical delta-doping, the electronic states are quantized into superlattice minibands of energies $E(n, k_{\perp}, k)$,

$$E(n, k_{\perp}, k) = E_n(k) + \frac{1}{2} k_{\perp}^2$$

where $k_{\perp}$ and k are the wave vector components perpendicular and parallel to the growth axis, respectively, and $E_n(k, z)$ is the miniband dispersion. In order of increasing energy, we will denote the succession of minibands as $E1, E2, E3, \dots$. The electronic states corresponding to the energies $E_n(k, z)$ are described by the wave functions

$$\Psi_n(\vec{k}_{\perp}, k, \vec{r}, z) = \frac{e^{i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{S}} \chi_n(k, z) \quad (4)$$

where S is the area of the sample, $\chi_n(k, z) = u_n(k, z)e^{ikz}$, and $u_n(k, z)$ are Bloch functions normalized to the length of the superlattice. Functions $\chi_n(k, z)$ are the solutions of the Schrödinger equation

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} \chi_n(z) + \{V_H(z) + V_{xc}(z)\} \chi_n(k, z) \\ = E_n(k) \chi_n(k, z) \end{aligned} \quad (5)$$

where $V_{xc}(z)$ is local density approximation for the exchange-correlation correction to the confining potential, which was taken to be equal to the form due to

Hedin and Lundqvist [28],

$$V_{sc}(x) = \frac{1}{\pi\alpha r_s} [1 + 0.7734 x \ln(1 + x^{-1})],$$

$\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$, $r_s = [\frac{4}{3}\pi n(z)]^{-1/3}$, $x = r_s/21$, and $V_H(z)$ is the self-consistent Hartree potential, which is obtained from a numerical solution of the Poisson equation

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = 4\pi [n_d(z) - n(z)] \quad (6)$$

where $n_d(z)$ is the density of ionized donors, $n(z) = \frac{1}{\pi} \sum_{nk} |u_n(k, z)|^2 \phi_{nk} \Theta(\phi_{nk})$ is the density of free carriers, $\phi_{nk} = \phi - E_n(k)$, ϕ denotes the Fermi energy, and $\Theta(x)$ is the Heaviside step function.

The scattering rate of electrons from a given quantum state for $T = 0K$ can be obtained from the Fermi golden rule, taking the Coulomb interaction between electrons and ionized impurities to be the scattering mechanism. By using the wave functions given by Eq.(4), and considering the scattering processes of carriers at the Fermi surface, one obtains for the quantum lifetime of the state k of the n th electronic miniband (in atomic units, the quantum lifetime equals the quantum mobility μ_Q):

$$\mu_Q^{-1}(n, k) = \frac{S}{\pi} \sum_{n', k'} \int_0^\pi \overline{|V_{nk, n'k'}^{TOT}(q_{nk, n'k'})|^2} d\varphi \quad (7)$$

where the summation extends over the quantum states (n', k') which lie below the Fermi level (i.e. $\phi_{n'k'} > 0$),

$$q_{nk, n'k'} = 2^{1/2} [\phi_{nk} + \phi_{n'k'} - 2\sqrt{\phi_{nk}\phi_{n'k'}} \cos \varphi]^{1/2},$$

the integration variable φ is the angle of scattering formed between vectors $\vec{k}_\perp$ and $\vec{k}'_\perp$, and

$$\overline{|V_{nk, n'k'}^{TOT}(q)|^2} = \left(\frac{2\pi}{q}\right)^2 \frac{N_d}{S} \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \left| \sum_{m|m' \neq i} \epsilon_{nk, n'k', m|m'}^{-1}(q) \right. \\ \left. \times \int_0^L \chi_m(l, z) \chi_{m'}^*(l', z) e^{-q|l-l'|} dz \right|^2$$

represents the statistical average of the matrix elements of the two-dimensional Fourier transform of the scattering potential. In the latter equation the summation extends over all the electronic energy levels, N_d is the areal density of single charged donor atoms in each doping period, distributed along the z -direction in a plane of zero thickness, d is the superlattice period, $L = Nd$

is the Born-von Karman period, and $\epsilon_{nk, n'k', m|m'}(q)$ is the dielectric matrix which is given by

$$\epsilon_{nk, n'k', m|m'}(q) = \delta_{nm} \delta_{kk'} \delta_{n'n'} \delta_{m'm'} \\ + A_{m|m'}(q) T_{nk, n'k', m|m'}(q),$$

with $A_{m|m'}(q)$ being the independent response particle density matrix, given in the Appendix of Ref.[27], and $T_{nk, n'k', m|m'}(q)$ is the Coulomb energy form factor

$$T_{nk, n'k', m|m'}(q) = \frac{2\pi}{q} \int_0^L \chi_n(k, z) \chi_{n'}^*(k', z) \\ \times \chi_m^*(l, z') \chi_{m'}(l', z') e^{-q|l-l'|} dz dz'.$$

Results of the theoretical calculations reveal^[26] that the width of the energy levels corresponding to the neck orbit state (at the extreme of the mini-Brillouin zone, $k = \pi/d$, for miniband $E1$) is always greater than the energy width of the levels associated with the belly orbit state of the same miniband (at the center of the Brillouin zone, $k = 0$, for miniband $E1$). The higher efficiency of the scattering by ionized impurities of electrons in the neck orbit state is a consequence of to their greater proximity to the sheets containing the ionized impurity atoms than electrons in the belly orbit state. In the present context this result implies that the impact of energy level broadening will be greater upon the M_1 singularity, rather than the M_0 one. This provides new support to our earlier conclusion (see previous section) that the neck extremal orbit should not manifest itself experimentally, therefore the single oscillatory component observed in association with each superlattice miniband in periodically δ -doped systems should be associated with the cross sectional area embraced by the belly orbit.

IV. Experimental

The δ -doped structures were grown at 640°C by LP-MOVPE in an AIX 200 reactor at 20 mbar with a growth rate of 4.5 Å/sec. The source materials were PH₃ (100%), TMI_n and 1% SiH₄ diluted in H₂. On (100) Fe-doped InP substrates, first a 0.3 μm thick undoped buffer was grown, followed by a periodically δ -doped InP layer, and finally a 500 Å cap layer was deposited. The periodical structures are composed of either 5 or 10 periods, with a spacing varying from 90 to 300 Å. The dopant layers were deposited during a

25 sec growth interruption. The silane flux was triggered two seconds after growth interruption and halted two seconds before the growth was resumed.

In order to determine the width of the doped layer and the doping period, the capacitance-voltage profile (C-V) was measured for each sample, using an electrochemical profiler PN4300. The Shubnikov-de Haas experiment was carried out in a superconducting magnet. The sample was placed in liquid He at 4.2K. The magnetoresistance measurements were made in constant current mode, employing currents of $\sim 10\mu\text{A}$, and using a four-contact geometry; the samples were approximately square, with contacts in the corners. The magnetoresistance oscillations were measured in magnetic fields of intensity up to 14 T.

V. Results

The overall sheet carrier concentration, n_s , for each sample was extracted from an analysis of its Shubnikov-de Haas spectrum. Figure 3 (a) shows the magnetoresistance spectrum for sample No. 196, and Figure 3 (b) shows the Fourier transform of the SdH oscillations plotted against inverse field. Prior to taking the Fourier transform, and with the motive of reducing the unwanted background of monotonous magnetoresistance, the magnetoresistance curves were differentiated. Each of the peaks seen in Fig.3 (b) corresponds to a belly orbit of one of the populated minibands; the peak positions determine the belly extremal cross sectional areas of the mini-Fermi surface in units of $\hbar/2\pi e$.

To determine n_s it was necessary to solve self-consistently Schrödinger and Poisson equations (Eq.(5) and Eq.(6)) for each sample. In the calculation, the doping period was fixed at the value determined by the C-V measurement, and the Si atoms were taken to be distributed according to a Gaussian function with a full width at half maximum of $8\text{\AA}$ as deduced from the C-V spectrum^[29]. The only additional parameter in this calculation, the carrier concentration n_s , was varied until all theoretical frequencies of magnetoresistance oscillation, i.e. those corresponding to the belly cross-sections of the mini-Fermi surface, approximated simultaneously all of the frequencies of oscillation seen in the experimental Shubnikov-de Haas spectrum. (It should be pointed out that such a procedure will incorporate into the final result of n_s those carriers in the

outer minibands with a low density population, which are beyond the sensitivity of the Shubnikov-de Haas spectrum). The procedure used to determine n_s is described in more detail in Ref.[4]. Results of the analysis of the C-V spectra and of the Shubnikov-de Haas oscillations are summarized in Table 1.

Figure 3. (a) Shubnikov-de Haas spectrum of sample 196; (b) Fourier transform of the Shubnikov-de Haas spectrum plotted in $1/B$ for sample 196. The frequencies of oscillation associated with the belly orbits are indicated. Dashed curves show the bandpass filtered Fourier spectrum associated with individual minibands.

The very good agreement seen between theory and experiment in Table 1 is an indication that the assumption that only belly extremal cross sections of the mini-Fermi surface can be detected experimentally in periodically δ -doped systems is correct. Moreover, the same assumption leads to excellent agreement between the

experimental and theoretical periods of the magneto-oscillatory components for a magnetic field applied at

tilted angles respective to the axis of the superlattice [30,3].

Table 1: Parameters of the samples studied. The doping period d was obtained from the C-V spectrum of the sample. B_{E1}^{SdH} and B_{E1}^{Th} symbolize the experimental and theoretical frequencies of oscillation associated with the belly orbit in k -space. The overall carrier concentration n_s shown gives the best agreement of theory with experiment.

Sample	No. of periods	d (Å)	SdH Experiment (T)			Calculated (T)			n_s (cm ⁻²)
			B_{E1}^{SdH}	B_{E2}^{SdH}	B_{E3}^{SdH}	B_{E1}^{Th}	B_{E2}^{Th}	B_{E3}^{Th}	
194	5	92.0	85.5	43.1	—	86.3	42.3	—	4.27×10^{12}
206	10	107	89.7	47.9	—	90.3	48.7	—	5.08×10^{12}
198	5	128	74.9	38.6	—	75.4	40.2	—	4.50×10^{12}
207	10	133	80.7	46.0	—	79.2	46.2	—	5.08×10^{12}
200	10	176	62.2	32.2	—	63.8	32.4	9.1	4.27×10^{12}
197	5	225	73.7	33.8	—	73.7	34.9	17.0	5.38×10^{12}
199	10	245	73.1	25.9	11.1	75.6	27.2	11.2	5.26×10^{12}
196	5	278	65.4	28.1	15.0	68.2	28.4	15.9	4.98×10^{12}
164	single	—	69.6	24.0	6.8	70.8	24.5	6.7	5.07×10^{12}

The quantum mobility associated with each of the populated minibands was obtained from a fit with theory of the minibands' contribution to the magnetoresistance, isolated from the rest of the Shubnikov-de Haas spectrum by Fourier filtering techniques as described in Ref. [25]. The individual oscillations were fitted using equation (3) when the miniband energy width was narrow ($\Delta_n < \phi_n$). Parameters Δ_n , ϕ_n and ϵ_n used in the fitting equation were fixed at the values deduced from the self-consistent calculations, and the temperature was set to 4.2 K as used in our experiments. The only remaining parameter, $\mu_Q(n)$, was adjusted for best agreement with the experiment. To illustrate the fitting procedure, the individual oscillations and the fitted curves for sample 196 are shown in Fig.4; a fit with theory in this case yielded $\mu_Q(E1) = 410 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_Q(E2) = 1320 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, and $\mu_Q(E3) = 3650 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. All other samples underwent the same treatment, and the quantum mobility values deduced are plotted against doping period in Fig.5.

Experimental results showed that at a fixed doping period the quantum mobility increases with the index of the miniband. The experimental quantum mobilities associated with individual minibands are shown by dots in Fig.5 as a function of the doping period d . At large values of d adjacent wells become uncoupled; the quantum miniband mobilities obtained for sample 164,

which contains a single δ -layer, is plotted in Fig.5 at $d = 800 \text{ Å}$.

Figure 4. Magnetoresistance oscillations associated with individual minibands for sample 196. Dots represent the oscillations obtained experimentally and the full curves correspond to the theory. (a) Isolated oscillations due to miniband E1 and theoretical result by use of Eq.(3); (b) and (c) Same for minibands E2 and E3, respectively.

Figure 5. Quantum mobility as a function of the doping period. Circles, crosses and squares represent the experimental results corresponding to minibands E1, E2 and E3, respectively; dashed and full lines depict the theoretical results for $n_s = 4.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and $n_s = 5.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, respectively.

When the period is made shorter, the mobility in miniband E1 remains nearly unchanged. The experimental quantum mobility in miniband E2 does not show a smooth dependence on the doping period, which is attributed to the fluctuation in carrier density in the samples (see Table 1) and to the limited accuracy of the experimental values of mobility. Nevertheless, the experimental data plotted in Fig.5 shows clearly that in the region $d < 200 \text{ Å}$ the E2 quantum mobility decreases when the doping period is made shorter. Finally, the quantum mobility of carriers in miniband E3 could only be measured for periods greater than 230 Å , in which range the measured mobility attains a value of approximately $3500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

VI. Conclusion

A theoretical model for the lineshape of the Shubnikov-de Haas spectrum in degenerate semiconductor superlattices was presented, which allows for a quantitative estimation of the implications of the relative absolute values of the broadening of the energy levels, miniband width, and energy minigaps. The Shubnikov-de Haas oscillations were measured for periodically δ -doped InP as a function of the doping period in samples with a density of carriers around $\sim 4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ per doped layer and doping period

in the range $90\text{--}300 \text{ Å}$. Each miniband manifests itself in the SdH spectrum through a single oscillatory component, which can be associated to the belly extremal orbit of its mini-Fermi surface. The quantum oscillations associated with individual minibands were isolated from the underlying magnetoresistance spectrum by Fourier techniques. From the individual oscillatory components, the quantum mobility for each miniband was estimated.

A theory for the quantum mobility in periodically δ -doped semiconductors was developed, which yields a fair agreement with the experimental results. The theoretical model predicts that the mobilities will increase with the miniband index, and the mobilities decrease when the doping period is made shorter. The onset of the decreasing behavior occurs at $d \sim 200 \text{ Å}$ for miniband E2 and below $d \sim 50 \text{ Å}$ for miniband E1.

VII. Acknowledgements

Calculations were performed using the facilities of the Laboratório de Computação Científica Avançada da Universidade de São Paulo (LCCA-USP). A.B.H. acknowledges support by FAPESP, Grant No. 94/5645-7, and CNPq, Grant No. 306335/88.

References

1. C.Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York (1963).
2. Tan Le, A.G.Norman, W.T.Yuen, L.Hart, I.T.Ferguson, J.J.Harris, C.C.Phillips, and R.A.Stradling, *Surf. Sci.* **305**, 337 (1994).
3. A.B.Henriques, V.N.Morgoon, P.L.Souza, V.Bindilatti, N.F.Oliveira Jr. and S.M.Shibli, *Phys. Rev. B* **49**, 11248 (1994).
4. A.B.Henriques, L.C.D.Gonçalves, P.L.Souza and B.Yavich, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 190 (1996).
5. E.Skuras, R.Kumar, R.L.Williams, R.A.Stradling, J.E.Dmochowski, E.A.Johnson, A.Mackinnon, J.J.Harris, R.B.Beall, C.Skirbeszewski, J.Singleton, P.J. van der Wel and P.Wisniewski, *Semicond. Sci. Technol.* **6**, 535 (1991).
6. E.Gornik, *NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics* **57**, Plenum, New York (1987), p.365.

7. T.Ando, A.B.Fowler, and F.Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 434 (1982).
8. P.T.Coleridge, R.Stoner, and R.Fletcher, *Phys. Rev. B* **39**, 1120 (1989).
9. L.M.Roth and P.N.Argyres, *Semicond. Semimetals* **1**, 159 (1966).
10. R.Courant and D.Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, vol. I, Interscience, New York (1953), p.76
11. A.B.Henriques, *Phys. Rev. B* **50**, 8658 (1994)
12. G.Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique, Les Ulis (1988).
13. A.B.Henriques, V.Bindilatti, and N.F.Oliveira, Jr., *High Magnetic Fields in the Physics of Semiconductors*, World Scientific, Singapore (1995), p.604.
14. S.Yamada and T.Makimoto, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1022 (1990).
15. P.M.Koenraad, B.F.A. van Hest, F.A.P.Blom, R. van Dalen, M.Leys, J.A.A.J.Perenboom and J.H.Wolter, *Physica B* **177**, 485 (1992).
16. A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 585 (1993).
17. O.Mezrin and A.Shik, *Superlattices Microstruct.* **10**, 107 (1991).
18. O.A.Mezrin, A.V.Shik, and V.O.Mezrin, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 664 (1992).
19. L.R.González, J.Krupski, and T.Szwacka, *Phys. Rev. B* **49**, 11111 (1994).
20. G.Q.Hai, N.Studart and F.M.Peeters, *Phys. Rev. B* **52**, 8363 (1994).
21. G.Q.Hai and N.Studart, *Phys. Rev. B* **52**, R2245 (1994).
22. A.B.Henriques, *Phys. Rev. B* **53**, 16365 (1996).
23. L.C.D.Gonçalves and A.B.Henriques, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 203 (1997).
24. P.M. Koenraad, A.F.W. van de Stadt, J.M. Shi, G.Q. Hai, N.Studart, P. Vansant, F.M. Peeters, J.T. Devreese, J.A.A.J.Perenboom and J.H.Wolter, *Physica B* **211**, 426 (1995).
25. A.B.Henriques, L.C.D.Gonçalves, N.F.Oliveira, Jr., P.L.Souza and B.Yavich, *Physical Review B* (1997) (at press).
26. L.Hedin and B.Lundqvist, *J.Phys. C: Solid State Physics* **4**, 2064 (1971).
27. R.Fletcher, E.Zaremba, M.D'Iorio, C.T.Foxon and J.J.Harris, *Phys. Rev. B* **41**, 10649 (1990).
28. A.B.Henriques (unpublished).
29. B.Yavich, P.L.Souza, M.Pamplona-Pires, A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 481-484 (1997).
30. A.B.Henriques and L.C.D.Gonçalves, *Surf. Sci.* **305**, 343 (1994).

Capacitance-Voltage Profiling of Periodically δ -doped Semiconductors

A.B. Henriques^{1*}, L.C.D. Gonçalves¹, P.L. Souza², and B. Yavich²

¹*Instituto de Física, Universidade de São Paulo*

Caixa Postal 66318, 05315-970, São Paulo, Brazil

²*Centro de Estudos em Telecomunicações, PUC/RJ*

Rua Marques de São Vicente, 225

22453-900 Rio de Janeiro, Brazil

Received February 2, 1997

The capacitance-voltage (C-V) profiles of periodically Si- δ -doped InP samples were measured, which are described by a succession of equally spaced peaks, with a spacing which is nearly equal to the intended doping period. The theoretical C-V spectra for periodically Si- δ -doped semiconductors were calculated for various values of δ -doping density, doping period, density of background impurities and temperature. Analysis of the data indicates that the spacing between the peaks seen in the experimental C-V spectrum is a reliable measure of the true doping period of the sample. The practical limitations of the C-V technique when applied to periodically δ -doped semiconductors are discussed.

1. Introduction

The capacitance-voltage (C-V) profiling technique was originally developed to determine the spatial distribution of impurities in semiconductor heterojunctions and is described in standard textbooks (see, for example, Ref.[1]). The C-V technique can also be applied to semiconductor systems with quantum-confined carriers [2,3], such as Si- δ -doped semiconductors, in which case it is demonstrated that an analysis of the C-V spectrum can be used to determine the localization of the Si impurities with an accuracy within the length scale of the lattice constant of the host crystal [4]. In order to obtain a C-V spectrum a reverse bias is applied to the Schottky contact made on the surface of the semiconductor, and the differential capacitance, C , is measured by adding a small alternating voltage to the reverse bias. Using effective atomic units, whereby the units of length, energy and mass are the effective Bohr radius, $a_B = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2$, the effective Hartree, $\hbar^2 / m^* a_B^2$, and the effective mass, m^* , respectively, the C-V spectrum

is defined as the plot of the C-V concentration,

$$N_{CV} = 4\pi C^3 \frac{dV}{dC}, \quad (1a)$$

against the C-V depth,

$$z_{CV} = 1/4\pi C, \quad (1b)$$

and for δ -doped semiconductors it is described by a bell-shaped curve. The physical processes that determine the shape of the C-V spectrum can be understood from a brief discussion. When a reverse bias is applied, electronic charge is transferred from the confining well to the Schottky contact. If we take the intensity of the electric field which exists between the Schottky contact and the δ -layer to be of an approximately constant value, it follows from elementary electrostatics that $z_{CV} \sim L + \bar{z}$, where L is the distance between the surface and the δ -layer and $\bar{z}$ represents the position expectation value of the electronic charge. Therefore the functional dependence of N_{CV} on z_{CV} can be approximated by $N_{CV} \sim dV/sz_{CV}$, and the shape of the C-V spectrum will be determined by the dependence of $d\bar{z}/dV$ on the bias V . At small values of V ,

*Contact Author: E-mail: ahenriques@if.usp.br

$\bar{z}$ increases rapidly due to the contributions from high energy subbands, which are described by a large binding length, and are very sensitive to the intensity of the external electric field. At intermediate values of V , only subbands which are strongly bound to the δ -layer remain populated, and the dependence of $\bar{z}$ on V becomes weaker. Finally, at still larger values of V the binding strength of the confining potential vanishes, meaning that $\bar{z}$ will again increase rapidly with V . Such a step-like dependence of $\bar{z}$ on V leads to a bell-shaped C-V spectrum. The width at half maximum of the C-V spectrum will be proportional to the width of the voltage step, ΔV , in which the intermediate bias regime is fulfilled. For broad δ -layers, ΔV is larger than for narrow ones, given that for a broad δ -layer the confining δ -well is wider, hence there are more electrons occupying high energy subbands, meaning that a larger bias will be required to achieve the intermediate regime than for narrow δ -layers.

It follows that the width of the C-V spectrum of a δ -doped semiconductor reflects the localization of the impurities in the δ -layer. If the density of impurity atoms is known, the width of the δ -layer can be estimated by calculating self-consistently the theoretical C-V spectrum [4]. In such a calculation, the width of the δ -layer is a variable input parameter; the true width of the δ -layer is taken to be equal to the parameter value which leads to a theoretical C-V spectrum in best agreement with the experimental one [5,6].

In this work we extend the C-V spectrum analysis to periodically δ -doped semiconductors. The C-V spectrum was measured for periodically Si δ -doped InP, and oscillations are seen whose period are very nearly equal to the intended doping period. Theoretical C-V spectra for various doping densities and doping periods were calculated, showing that the period of the oscillations are an accurate measure of the doping periodicity. The effects of temperature and presence of background impurities upon the theoretical C-V spectrum were also studied.

II. Experimental

The δ -doped InP structures were grown at 640°C by LP-MOVPE in an AIX reactor at 20 mbar with a growth rate of 4.5 Å/sec. The source materials were

PH₃ (100%), TMIn and 1% of SiH₄ diluted in H₂. The total flow rate, the TMIn mole fraction and the V/III flow ratio used were 7 l/min, 2.5×10^{-6} and 360, respectively. On (100) Fe-doped InP substrates, first a 0.3 μm thick undoped buffer layer was grown, followed by a periodical deposition of δ -layers, and finally a 550 Å cap layer was deposited. The periodical structures were composed of 5 periods with a nominal barrier thickness of 280, 250 and 100 Å. C-V spectra were measured at room temperature using an electrochemical profiler PN4300 where a Schottky contact is formed between the electrolyte (HCl-0.5 mol). The density of Si impurities in each δ -layer was approximately equal to $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ in all samples, as estimated from Shubnikov-de Haas measurements [7].

III. Results

Fig. 1 shows the experimental C-V spectra for the three samples studied. The C-V spectra are described by a set of peaks with a constant spacing which is approximately equal to the nominal spacing between the δ -layers. Note also that when the spacing between the δ -layers is made shorter, the peaks seen in the C-V spectrum are less well resolved.

Figure 1. Experimental C-V spectra of the periodically δ -doped samples with a nominal barrier of 280 Å (full line), 250 Å (dotted line) and 100 Å (dashed line).

To interpret the experimental C-V spectra, theoretical C-V spectra were generated by solving self-consistently Schrödinger and Poisson equations for the δ -doped structure under bias (for a full description

of the self-consistent procedure see Ref.[8]). We considered a structure with 5 equally spaced doping layers, and 25 electronic subbands were included in the calculations. The impurities were assumed to be distributed according to a Gaussian function; the width of the doped layer was fixed at the value of $0.2 a_B$ (approximately $15 \text{ \AA}$ for InP). The input parameters in the calculations were the doping period d , the areal density of impurity atoms in each doping layer, N_d , the volume density of background acceptor impurities, N_a , and the temperature of the structure. The differential capacitance was calculated by using equations (1a,1b).

Figure 2. (a) Dependence of the self-consistent confining potential of a periodically δ -doped semiconductor on the bias applied; the lowest curve corresponds to zero-bias and the uppermost curve corresponds to maximum reverse bias. The parameters were fixed at $N_d = 8.0a_B^{-2}$, $d = 5a_B$ and $T=300\text{K}$. The Schottky contact is located at $z = 0$; (b) Same dependence for the electronic charge density confined in the structure.

Fig. 2 shows the confining potential and electronic charge distribution, obtained from the self-consistent solution of Schrodinger and Poisson equations as a function of applied bias for a periodically δ -doped structure

with parameters $N_d = 8.0a_B^{-2}$ ($1.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ for InP), $d = 5a_B$ ($390 \text{ \AA}$ for InP) and $T=300 \text{ K}$. Fig. 2(a) and 2(b) show that, when the applied bias increases from zero, the semiconductor structure is progressively depleted. Notice, however, that the applied bias depletes first the δ -well nearest to the surface; the next well starts to be depleted only when the first well has been completely depleted of carriers. This suggests that it will be possible to approximate the C-V spectrum of a periodically δ -doped semiconductor by the superposition of C-V curves associated with independent single δ -doped structures, with δ -layers located at distances $L, L+d, L+2d, \dots$ below the surface of the sample.

Figure 3. Calculated C-V spectrum of a periodically δ -doped sample with parameters $d = a_B$ and $N_d = 2.5a_B^{-2}$ at 300K (full curve). The dashed curve represents the linear combination of theoretical C-V curves, associated with single δ -doped samples with the same parameters, but with the δ -layer located at distances $L, L+d, \dots$ below the surface.

In order to test whether this assertion is valid for periodic structures with a strong coupling between adjacent wells [9], the C-V spectrum of a structure with a shorter period and lower doping density, $d = a_B$ and $N_d = 2.5a_B^{-2}$, was calculated and it is shown in Fig. 3. Also shown in Fig.3 by the dashed line is the C-V spectrum obtained from the superposition of C-V curves associated with a single δ -layer located at $L, L+d, \dots$. The similarity between the full and dashed curves in Fig. 3 is striking. This leads to conclude that the doping period inferred from the C-V spectrum will be equal, within a very good approximation, to the doping period of the structure, even in the limit of short-period

periodically δ -doped semiconductors. If the spacing between impurity layers is larger than the full width at half-maximum (FWHM) of the C-V peak associated with each single δ -layer, then the C-V spectrum of the periodic structure will be described by a succession of peaks, the spacing between which is an accurate measure of the doping period d . In opposition, if d is less than FWHM, individual peaks will not be resolved.

To study the effect of temperature upon the C-V spectrum, it was calculated for a structure with a very short doping period, $d = 0.5a_B$, for $T=10$ K and $T=300$ K. Results are shown in Fig.4. It can be seen that the spectrum calculated for $T=10$ K presents distinct oscillations, whereas the oscillations are smeared out for $T=300$ K. The explanation for a lower resolution at a higher temperature lies on the fact that when the temperature is increased, higher energy subbands become populated with electrons, which, by the reasoning exposed in section I leads to broader C-V peaks.

Figure 4. Calculated C-V spectrum of a periodically δ -doped sample with parameters $d = 0.5a_B$, $N_d = 2.5a_B^{-3}$ at 10 K (full curve) and 300 K (dashed curve).

Finally, we considered the effects upon the shape of the C-V spectrum which arise from the presence of background ionized acceptor impurities, uniformly distributed in the δ -doped semiconductor structure with a density N_a . The C-V spectrum was calculated for a structure with $N_d = 8a_B^{-3}$ for $N_a = 0$ and $N_a = 10^{-4}a_B^{-3}$ ($2.1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ for InP). The spectrum calculated for the structure at 300 K was almost identical for both background impurity concentrations, whereas

it was slightly sharper if the temperature of the structure was assumed to be 10 K.

IV. Conclusion

It was shown that the C-V technique can be used reliably to determine the distance between impurity layers in periodically δ -doped semiconductors. The C-V spectrum of the periodical system can be described, to a very good approximation, as a linear combination of C-V curves associated with a sequence of independent single δ -doped samples in which the depth of the doped layer is increased by the distance between the impurity sheets. The C-V technique can be useful to determine the doping period only as long as the doping period is larger than the FWHM of the C-V spectrum associated with an individual impurity layer. Thermal effects were studied and show that the C-V peaks become broader when temperature is increased. The presence of background impurities has only a minor effect on the shape of the C-V spectrum, and should have a practical meaning only at low temperatures.

References

1. S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley, New York (1980).
2. P. Blood, *Semicond. Sci. Technol.* 1, 7 (1986).
3. H. Kroemer, Wu-Yi Chien, J.S. Harris and D.D. Edwall, *Appl. Phys. Lett.* 36, 295 (1980).
4. B. Ulrich, E.F. Schubert, J.B. Stark, and J.E. Cunningham, *Appl. Phys. A* 47, 123 (1988).
5. E.F. Schubert, *Semicond. Semimetals* 40, 1 (1994).
6. B. Yavich, P.L. Souza, M. Pamplona-Pires, A.B. Henriques and L.C.D. Gonçalves, *Semicond. Sci. and Technol.*, Letter to the Editor, (at press).
7. A. B. Henriques, L.C.D. Gonçalves, N.F. Oliveira, Jr., P.L. Souza and B. Yavich, *Physical Review B* (at press).
8. L.C.D. Gonçalves and A.B. Henriques, *Semicond. Sci. Technol.* (at press).
9. A.B. Henriques and L.C.D. Gonçalves, *Surf. Sci.* 305, 343 (1994).

Characterization of periodically δ -doped semiconductors by capacitance-voltage profiling

L C D Gonçalves†, A B Henriques†, P L Souza‡ and B Yavich‡

† Instituto de Física Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, Brazil

‡ Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica, Rua Marques de São Vicente, 225 22453-900 Rio de Janeiro, Brazil

Received 20 May 1997, in final form 25 July 1997, accepted for publication 5 August 1997

Abstract. The capacitance-voltage (C - V) profiles of periodically Si- δ -doped InP samples were measured, and these are described by a succession of equally spaced peaks, with a spatial periodicity which closely matches the intended doping period. Theoretical C - V spectra for periodically Si- δ -doped semiconductors were calculated. Analysis of the data indicates that the spacing between the peaks seen in the experimental C - V spectrum is a reliable measure of the true doping period of the sample. The C - V spectrum of the periodically δ -doped semiconductor is well approximated by a linear combination of C - V curves for isolated δ -doped layers located at successive positions of analogous layers in the periodically δ -doped sample. The practical limitations of the C - V technique when applied to periodically δ -doped semiconductors are discussed.

1. Introduction

The capacitance-voltage (C - V) profiling technique was originally developed to determine the spatial distribution of impurities in semiconductor heterojunctions and is described in standard textbooks (see, for example, [1]). The C - V technique can also be applied to semiconductor systems with quantum-confined carriers [2,3] such as δ -doped semiconductors, in which case it is demonstrated that an analysis of the C - V spectrum can be used to determine the localization of the impurities in the δ layer with an accuracy within the length scale of the lattice constant of the host crystal [4]. In order to obtain a C - V spectrum a reverse bias is applied to the Schottky contact made on the surface of the semiconductor, and the differential capacitance, C , is measured by adding a small alternating voltage to the reverse bias. Using effective atomic units, whereby the units of length, energy and mass are the effective Bohr radius, $a_B = e\hbar^2/m^*e^2$, the effective Hartree approximation, $\hbar^2/m^*a_B^2$ and the effective mass, m^* , respectively, the C - V spectrum is defined as the plot of the C - V concentration

$$N_{CV} = 4\pi C^3 \frac{dV}{dC} \quad (1a)$$

against the C - V depth

$$z_{CV} = 1/4\pi C \quad (1b)$$

and for δ -doped semiconductors it is described by a bell-shaped curve. The physical processes that determine the shape of the C - V spectrum can be understood from a brief discussion. When a reverse bias is applied, electronic charge is transferred from the confining well to the Schottky contact. If we take the intensity of the electric field which exists between the Schottky contact and the δ layer to be of an approximately constant value, it follows from elementary electrostatics that $z_{CV} \sim L + \bar{z}$, where L is the distance between the surface and the δ layer and $\bar{z}$ represents the position expectation value of the electronic charge, measured from the centre of the δ layer. Therefore the shape of the C - V spectrum will be determined by the dependence of $d\bar{z}/dV$ on the bias V . At small values of V , $\bar{z}$ increases rapidly due to the contributions from high-energy subbands, which are described by a large binding length and are very sensitive to the intensity of the external electric field. At intermediate values of V , only subbands which are strongly bound to the δ layer remain populated, and the dependence of $\bar{z}$ on V becomes weaker. Finally, at still larger values of V the binding strength of the confining potential vanishes, meaning that $\bar{z}$ will again increase rapidly with V . Such a step-like dependence of $\bar{z}$ on V leads to a bell-shaped C - V spectrum. Since changes in $\bar{z}$ are much smaller than L , the position of the C - V peak will approximate the distance from the surface to the δ -doped plane. As shown by Schubert, the width of the C - V peak measures the spatial extent, Δz_{E1} , of the single-particle wavefunction of the ground state. Since Δz_{E1}

depends on the width of the δ layer. It follows that the width of the C - V spectrum of a δ -doped semiconductor reflects the localization of the impurities in the δ layer. If the areal density of impurity atoms is known, the width of the δ layer can be estimated by calculating self-consistently the theoretical C - V spectrum [4]. In such a calculation, the width of the δ layer is a variable input parameter; the true width of the δ layer is taken to be equal to the parameter value which leads to a theoretical C - V spectrum in best agreement with the experimental one [5, 6].

In this work we extend the C - V spectrum analysis to periodically δ -doped semiconductors. The C - V spectrum was measured for periodically Si- δ -doped InP, and oscillations are seen. Theoretical C - V spectra were calculated, demonstrating that the periods of the oscillations seen experimentally are an accurate measure of the doping periodicity. We also study the range of sample parameters (doping level and period) in which the C - V technique is useful to measure the doping period d .

2. Experimental details

The δ -doped InP structures were grown at 640 °C by metal-oxide vapour phase epitaxy (LP-MOVPE) in an AIX reactor at 20 mbar with a growth rate of 4.5 Å s^{-1} . The source materials were PH_3 (100%), TMIIn and 1% of SiH_4 diluted in H_2 . The total flow rate, the TMIIn mole fraction and the V/III flow ratio used were 7 l min^{-1} , 2.5×10^{-6} and 360 respectively. On (100) Fe-doped InP substrates, first a $0.3 \text{ }\mu\text{m}$ thick undoped buffer layer was grown, followed by a periodical deposition of δ layers, and finally a 550 Å cap layer was deposited. The periodical structures were composed of five equally spaced δ layers with a nominal barrier thickness of 280, 250 and 100 Å . C - V spectra were measured at room temperature using an electrochemical profiler PN4300 where a Schottky contact is formed between the semiconductor and the electrolyte (HCl -0.5 mol). The density of Si impurities in each δ layer was approximately equal to $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ in all samples, as estimated from Shubnikov-de Haas measurements [7].

3. Results

Figure 1 shows the experimental C - V spectra for the three samples studied. The C - V spectra are described by a set of peaks with a constant spacing which is approximately equal to the nominal spacing between the δ layers. Note also that when the spacing between the δ layers is made shorter, the peaks seen in the C - V spectrum are less well resolved.

To interpret the experimental C - V spectra, theoretical C - V spectra were generated by solving self-consistently Schrödinger and Poisson equations for the δ -doped structure under bias (for a full description of the self-consistent procedure see [8]). We considered a structure with five equally spaced doping layers, and 25 electronic subbands were included in the calculations. The impurities were assumed to be distributed according to a Gaussian function; the width of the doped layer was fixed at a value of $0.2a_B$ (approximately 15 Å for InP). The input parameters in

Figure 1. Experimental C - V spectra of the periodically δ -doped samples with a nominal barrier of 280 Å (full curve), 250 Å (dotted curve) and 100 Å (dashed curve). The carrier density is approximately equal to $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, in each doping period, for all samples.

the calculations were the doping period, d , and the areal density of impurity atoms in each doping layer, N_d . We also studied the effects of background acceptor impurities of volume densities in the range $N_a < 10^{-4} a_B^{-3}$ ($N_a < 2.1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ for InP). However, C - V spectra showed almost no dependence on the density of background acceptors, and the calculations shown here were made for $N_a = 0$, thus electrical neutrality of the structure requires $n_s = N_d$, where n_s is the areal density of confined electrons. The C - V profiles were calculated by using equations (1a) and (1b).

Figure 2 shows the confining potential and electronic charge distribution obtained from the self-consistent solutions of Schrödinger and Poisson equations as a function of applied bias for a periodically δ -doped structure with parameters $N_d = 2.5 a_B^{-2}$ ($4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ for InP), $d = a_B$ (79 Å for InP) and $T = 300 \text{ K}$. Figures 2(a) and 2(b) show that, when the applied bias increases from zero, the semiconductor structure is progressively depleted. Notice, however, that as bias is increased first the δ well nearest to the surface becomes depleted; the next well starts to be depleted only when the previous one has been emptied. This indicates that the C - V spectrum of a periodically δ -doped semiconductor can be approximated by the superposition of C - V curves associated with independent single δ -doped structures, with δ layers located at distances $L, L + d, L + 2d, \dots$ below the surface of the sample; thus the spacing between the C - V peaks will be equal to the distance between adjacent δ layers. As figure 2(c) shows, the superposition of displaced C - V curves associated with single δ layers approximates very well the C - V spectrum for the periodically δ -doped structure.

However, it will only be possible to resolve separate C - V peaks if their spacing is larger than the full width at half maximum (FWHM) of the C - V peak associated with an individual δ layer. Assuming the spacing between C - V

Figure 2. (a) Dependence of the self-consistent confining potential of a periodically δ -doped semiconductor on the bias applied; the lowest curve corresponds to zero-bias and the uppermost curve corresponds to maximum reverse bias. The parameters were fixed at $N_d = 2.5a_B^{-3}$, $d = a_B$ and $T = 300$ K. The Schottky contact is located at $z = 0$; (b) the same dependence for the electronic charge density confined in the structure; (c) the calculated C-V spectrum for the same structure (solid curve). The dashed curve represents the sum of theoretical C-V curves associated with single δ -doped samples with the same parameters, but with the δ layer located at distances L , $L + d$, $L + 2d$, ... below the surface.

peaks to be equal to the doping period d and the FWHM of an individual C-V peak equal to the spatial localization of electrons in the ground-state subband, Δz_{E1} [5], to observe oscillations in the C-V spectrum the following condition must be satisfied

$$d > \Delta z_{E1}.$$

Notice also that in this range of doping periods, the coupling between electrons located in adjacent wells and belonging

to the ground-state miniband is weak. In this case the charge depletion of the structure under bias is a sequential process (i.e. a given well begins to be depleted only when all wells before it have been depleted), which by the arguments given above guarantees that the distance between C-V peaks is a good measure of the doping period of the periodically δ -doped semiconductor.

The spatial extent of the ground-state wavefunction, Δz_{E1} , depends upon two main sample parameters: the sheet density of electrons in each well, n_s , and the width of the distribution of donor atoms in the δ layer, Δ . For an ideal δ layer of zero thickness ($\Delta = 0$), the extent Δz_{E1} can be estimated by use of the Bohr-Sommerfeld quantization rule (in effective atomic units)

$$\int p(z) dz = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

The energy of a bound state, E_n , can be obtained by substituting $p(z) = \sqrt{2(E_n - V(z))}$, where $V(z)$ is the known equation for the confining potential. The spatial extent of the n th state is equal to the distance between the classical turning points and the n th state, which are determined by the condition $V(z) = E_n$. In the proximity of the δ sheet the confining potential can be approximated by $V(z) \sim 2\pi n_s |z|$; in this approximation the spatial extent of the ground state ($n = 0$, which we denote by the label E1) is found to be

$$\Delta z_{E1} = \left(\frac{3\pi^{1/2}}{2^{5/2}} \right)^{2/3} n_s^{-1/3}.$$

Therefore for sharp δ layers the condition for the C-V spectrum to display an oscillatory structure, whose period is equal to the spacing between the δ layers, will be

$$d > \left(\frac{3\pi^{1/2}}{2^{5/2}} \right)^{2/3} n_s^{-1/3}.$$

In summary, it was shown that the C-V spectrum of the periodically δ -doped semiconductor can be described, to a very good approximation, as a linear combination of C-V curves associated with a sequence of independent single δ -doped samples in which the depth of the doped layer is increased by the distance between the impurity sheets. For the three Si δ -doped InP structures considered, and with a given doping strength of $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, the doping periods obtained from the C-V spectra were found to be 92, 225 and 280 Å, which are in close agreement with the intended doping periods of 100, 250 and 280 Å respectively.

The C-V technique can be useful to determine the doping period only as long as the doping period is larger than the FWHM of the C-V spectrum associated with an individual impurity layer. The technique should apply to a structure with an arbitrary number of periods and doping strength; electric breakdown can be avoided if C-V measurements are made in the etching mode. Notice, however, that the etching procedure introduces a broadening of the C-V peaks (see [6] for details), as a consequence of which the experimental C-V spectrum will display only a finite number of oscillations associated with the δ layers nearest to the surface of the sample.

Acknowledgments

This work was supported by Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, Grant No CNPq 306335/88.

References

- [1] Sze S M 1980 *Physics of Semiconductor Devices* (New York: Wiley)
- [2] Blood P 1986 *Semicond. Sci. Technol.* **1** 7
- [3] Kroemer H, Chien Wu-Yi, Hamis J S and Edwall D D 1980 *Appl. Phys. Lett.* **36** 295
- [4] Ulrich B, Schubert E F, Stark J B and Cunningham J E 1988 *Appl. Phys. A* **47** 123
- [5] Schubert E F 1994 Delta-doping of semiconductors: electronic, optical and structural properties of materials and devices *Epitaxial Microstructures* ed A C Gossard (New York: Academic) p 1
Schubert E F 1994 *Semicond. Semimetals* **40** 1
- [6] Yavich B, Souza P L, Pamplona-Pires M, Henriques A B and Gonçalves L C D 1997 *Semicond. Sci. Technol.* **12** 481
- [7] Henriques A B, Gonçalves L C D, Oliveira N F Jr, Souza P L and Yavich B 1997 *Phys. Rev. B* **55** 13 072
- [8] Gonçalves L C D and Henriques A B 1997 *Semicond. Sci. Technol.* **12** 203

Ionized impurity scattering in periodically δ -doped InP

A. B. Henriques, L. C. D. Gonçalves, and N. F. Oliveira, Jr.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, Brazil

P. L. Souza and B. Yavich

Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica,

Rua Marques de São Vicente 225, 22453-900 Rio de Janeiro, Brazil

(Received 5 November 1996)

The quantum mobility in the individual minibands of InP with periodic Si δ doping was estimated from the Shubnikov-de Haas spectra of the samples, measured at 4.2 K in fields of 0–14 T. The set of samples studied had a sheet density of Si atoms of about $4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ in each doped layer, and a doping period in the range 90–300 Å. A theoretical model for the quantum mobility in individual minibands was developed, and theoretical estimates of the quantum mobility are in reasonable agreement with the experimental values. It is observed that at a fixed doping period the quantum mobilities increase with the index of the miniband, and the quantum mobility in an individual miniband decreases when the doping period is made shorter. The dependence of the quantum mobility on the miniband index and doping periodicity correlates with the dependence of the mean distance between electrons and the doped layer on the same quantities. These results demonstrate that in δ -doped semiconductors the binding length of the quantum-confined electronic charge is a very important parameter, determining the carrier mobility which can be attained in these systems. [S0163-1829(97)01119-3]

I. INTRODUCTION

Semiconductors in which the atoms of the dopants are concentrated around a single plane of the host crystal lattice have important technological applications and display interesting physical properties.^{1,2} Using epitaxial growth techniques such as metal-organic vapor phase epitaxy (MOVPE) and molecular-beam epitaxy, planar doping (or δ doping) with silicon has been accomplished for various III-V semiconductors, for instance, GaAs, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, InSb, and InP. In semiconductors doped periodically with sheets of Si, the carriers released from the shallow donor Si atoms are confined by a periodical space charge potential, which splits the continuous conduction band of the host semiconductor into a set of electronic minibands. The conductivity parallel to the doped layer is dominated by carriers confined in such minibands; these carriers interact strongly with the charged donor atoms located in the doped regions, and this interaction consists the mechanism which limits the carrier mobility in δ -doped systems.^{3–5}

From the theoretical standpoint, calculations of the electronic mobility in samples with a single δ layer have been made using either the Thomas-Fermi model^{6–8} or the random-phase approximation (RPA) (Refs. 8–12) to describe the screened interaction between confined carriers and ionized impurities. The theoretical calculations made in the frame of the RPA show good quantitative agreement with experimental estimates,^{9,11} while the agreement is poorer when a two-dimensional Thomas-Fermi model of screening is used (see Ref. 13 by some of the authors). However, to the best of our knowledge a calculation of the electronic mobilities in periodically δ -doped samples has not yet been attempted, and this is the purpose of the present study. For the periodically δ -doped semiconductor, the theoretical quantum mobility calculation is based on the same input quantities as

the mobility theory for semiconductors with a single δ -doped layer, i.e., electronic energy spectrum and wave functions, and a model for the screened electrostatic potential of ionized impurities. The basic novelty is in the form electronic wave functions, which for a periodically δ -doped system are described by Bloch states, whereas for a semiconductor with a single δ layer the wave functions describe states which are spatially localized around the doped layer. Our calculations were made using the RPA model for the screened Coulomb interaction between carriers and ionized donors; this choice was motivated by the success of the RPA theory in describing the carrier mobility in δ -doped materials with a single δ -doped layer.

II. THEORY OF MINIBAND QUANTUM MOBILITIES IN THE RPA APPROXIMATION

In this section effective atomic units are used, whereby the units of mass, length, and energy are the effective mass m^* , the effective Bohr radius $a_B = \epsilon \hbar^2 / m^* \kappa e^2$, and the effective Hartree $H = \hbar^2 / m^* a_B^2$, respectively. For InP, we assume $m^* = 0.08 m_0$ (Ref. 14) and $\epsilon = 11.8$,¹⁵ which gives $a_B = 78 \text{ Å}$ and $H = 15.7 \text{ meV}$.

When electrons are confined by a potential which is periodic along one axis (the growth direction z), as occurs in a semiconductor with a periodical δ doping, the electronic states are quantized into superlattice minibands of energies $E(n, k_\perp, k)$,

$$E(n, k_\perp, k) = E_n(k) + \frac{1}{2} k_\perp^2,$$

where $k_\perp$ and k are the wave-vector components perpendicular and parallel to the growth axis, respectively, and $E_n(k, z)$ is the miniband dispersion. In order of increasing energy, we will denote the succession of minibands as $E1$,

$E_2, E_3, \dots$. The electronic states corresponding to the energies $E_n(k, z)$ are described by the wave functions

$$\Psi_n(\vec{k}_\perp, k, \vec{p}, z) = \frac{e^{i\vec{k}_\perp \cdot \vec{p}}}{\sqrt{S}} \chi_n(k, z), \quad (1)$$

where S is the area of the sample, $\chi_n(k, z) = u_n(k, z)e^{ikz}$, and $u_n(k, z)$ are Bloch functions normalized to the length of the superlattice. Functions $\chi_n(k, z)$ are the solutions of the Schrödinger equation

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} \chi_n(z) + [V_H(z) + V_{xc}(z)] \chi_n(k, z) = E_n(k) \chi_n(k, z) \quad (2)$$

where $V_{xc}(z)$ is local density approximation for the exchange-correlation correction to the confining potential, which was taken to be equal to the form due to Hedin and Lundqvist,¹⁶

$$V_{xc}(z) = \frac{1}{\pi \alpha r_s} [1 + 0.7734x \ln(1+x^{-1})],$$

$\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$, $r_s = [4/3\pi n(z)]^{-1/3}$, $x = r_s/21$, and $V_H(z)$ is the self-consistent Hartree potential, which is obtained from a numerical solution of the Poisson equation

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = 4\pi [n_d(z) - n(z)], \quad (3)$$

where $n_d(z)$ is the density of ionized donors, $n(z) = (1/\pi) \sum_{nk} |\mu_n(k, z)|^2 \phi_{nk} \Theta(\phi_{nk})$ is the density of free carriers, $\phi_{nk} = \phi - E_n(k)$, ϕ denotes the Fermi energy, and

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

is the Heaviside step function.

The scattering rate of electrons from a given quantum state for $T = 0$ K can be obtained from the Fermi golden rule, taking the Coulomb interaction between electrons and ionized impurities to be the scattering mechanism. By using the wave functions given by Eq. (1), and considering the scattering processes of carriers at the Fermi surface, for the quantum lifetime of the state k of the n th electronic miniband (in atomic units, the quantum lifetime equals the quantum mobility μ_Q), one obtains

$$\mu_Q^{-1}(n, k) = \frac{S}{\pi} \sum_{n', k'} \int_0^\pi V_{nk, n'k'}^{\text{TOT}}(q_{nk, n'k'})^2 d\varphi, \quad (4)$$

where the summation extends over the quantum states (n', k') which lie below the Fermi level (i.e., $\phi_{n'k'} > 0$),

$$q_{nk, n'k'} = 2^{1/2} [\phi_{nk} + \phi_{n'k'} - 2\sqrt{\phi_{nk}\phi_{n'k'}} \cos\varphi]^{1/2},$$

the integration variable φ is the angle of scattering formed between vectors $\vec{k}_\perp$ and $\vec{k}'_\perp$, and

$$\begin{aligned} |V_{nk, n'k'}^{\text{TOT}}(q)|^2 = & \left(\frac{2\pi}{q} \right)^2 \frac{N_d}{S} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \left| \sum_{m, m'} \epsilon_{nk, n'k', m, m'}^{-1}(q) \right. \\ & \times \left. \int_0^{Nd} \chi_m(l, z) \chi_{m'}^*(l', z) e^{-q|l-l'|} dz \right|^2 \end{aligned}$$

represents the statistical average of the matrix elements of the two-dimensional Fourier transform of the scattering potential. In the latter equation the summation extends over all the electronic energy levels, N_d is the areal density of single charged donor atoms in each doping period, distributed along the z direction in a plane of zero thickness; d is the superlattice period; Nd is the Born-von Karman period; and $\epsilon_{nk, n'k', m, m'}^{-1}(q)$ is the dielectric matrix which is given by

$$\begin{aligned} \epsilon_{nk, n'k', m, m'}^{-1}(q) = & \delta_{nm} \delta_{kl} \delta_{n'n} \delta_{k'k} \\ & + A_{m, m'}(q) T_{nk, n'k', m, m'}(q), \end{aligned}$$

with $A_{m, m'}(q)$ being the independent response particle density matrix, given in the Appendix of Ref. 17, and $T_{nk, n'k', m, m'}(q)$ is the Coulomb energy form factor

$$\begin{aligned} T_{nk, n'k', m, m'}(q) = & \frac{2\pi}{q} \int_0^{Nd} \chi_n(k, z) \chi_{n'}^*(k', z) \\ & \times \chi_m^*(l, z') \chi_{m'}(l', z') e^{-q|z-z'|} dz dz'. \end{aligned}$$

In order to test the theory, a comparison with the quantum mobility obtained experimentally is needed. The quantum mobility of carriers in individual minibands can be extracted from the Shubnikov-de Haas (SdH) spectrum. As shown in Refs. 18 and 19, in a semiconductor superlattice each miniband manifests itself in the SdH experiment as a separate set of oscillatory components. Every miniband can be assigned to one of three categories: those of two-dimensional character and vanishing bandwidth, $\Delta_n = 0$; those of quasi-two dimensional character, described by a small dispersion and narrow bandwidth, $\Delta_n < \phi_n$, and those effectively three-dimensional, $\Delta_n > \phi_n$, where ϕ_n represents the energy distance between the Fermi level and the threshold of the miniband.

The contribution to the magnetoresistance of a miniband whose bandwidth is smaller than its Fermi energy, i.e. $\Delta_n < \phi_n$, will be described by¹⁹

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \rho_{xx}}{\rho_0} \sim & - \frac{X}{\sinh X} e^{-\alpha_n u} \{ 2J_0(\beta_n u) \cos \omega_n u \\ & + 8 \epsilon_n \text{Im}[e^{-i\beta_n u} \Phi(1/2, 2, i\beta_n u)] \sin \omega_n u \}, \quad (5) \end{aligned}$$

where $X = 2\pi^2 T/B$, T is the temperature in units of $\hbar^2/k_B m^* a_B^2$, $u = 1/B$, $\alpha_n = \pi/\mu_Q(n)$, $\mu_Q(n)$ is the quantum mobility in the n th miniband, $\beta_n = \pi\Delta_n$, $\omega_n = 2\pi(\phi_n - \Delta_n)$ and ϵ_n is a dimensionless parameter which is obtained by fitting the numerically calculated dispersion law, $E_n(k)$, to the expression

$$E_n(k) = \frac{\Delta_n}{2} (1 - \cos kd) - \epsilon_n \frac{\Delta_n}{2} (1 - \cos 2kd), \quad (6)$$

Equation (5) was obtained assuming the quantum mobility to be constant within a miniband. Note also that when the spacing between the doped layers is made very large ($d \rightarrow \infty$), the width of the minibands decreases ($\Delta_n \rightarrow 0$), and Eq. (5) takes the familiar form associated with an electron gas confined in two dimensions.²⁰

$$\frac{\Delta \rho_{xx}}{\rho_0} \sim -2 \frac{X}{\sinh X} e^{-\alpha_n u} \cos 2\pi \phi_n u. \quad (7)$$

In the most general case, Eq. (5) will be characterized by two oscillatory components, respective to the "belly" and "neck" extremal orbits of the mini-Fermi surface associated with the miniband; however, as shown in Ref. 19, in periodically δ -doped systems the neck orbit is not detectable. This conclusion is based upon the observation that in order for the neck orbit to be detectable, the energy-level broadening must be smaller than the miniband width and also smaller than the minigap to the higher-energy miniband. However, in periodically δ -doped systems these two conditions are never met simultaneously, hence each miniband will manifest itself with a single oscillatory component due to the belly orbit. This assertion leads us to conclude that in the case of periodically δ -doped semiconductors the quantum mobility appearing in Eq. (5) pertains to the belly orbit state. Therefore if we wish to test the quantum mobility theory developed above, the quantum mobility obtained from a fit of Eq. (5) to the experimental data should be compared to the output of Eq. (4) at the wave vector associated with the belly orbit (i.e., $k=0$ for minibands $E1, E3, \dots$, and $k=\pi/d$ for minibands $E2, E4, \dots$).

For those minibands whose bandwidth is larger than the Fermi energy, i.e. when $\Delta_n > \phi_n$, the magnetoresistance oscillations can be approximated by the usual expression associated with an unrestrained free electron gas in three dimensions,²¹

$$\frac{\Delta \rho_{xx}}{\rho_0} \sim -2 \frac{X}{\sinh X} \frac{e^{-\alpha u}}{\sqrt{u}} \cos \left(2\pi \phi_n u - \frac{\pi}{4} \right). \quad (8)$$

The quantum mobility in this case can similarly be obtained by fitting Eq. (8) to the isolated magnetoresistance oscillatory component.

III. EXPERIMENT

The δ -doped structures were grown at 640 °C by low pressure-MOVPE in an AIX 200 reactor at 20 mbar with a growth rate of 4.5 Å/s. The source materials were PH_3 (100%), TMIIn (trimethyl indium), and 1% SiH_4 diluted in H_2 . On (100) Fe-doped InP substrates, first a 0.3- μm -thick undoped buffer was grown, followed by a periodically δ -doped InP layer, and finally a 500-Å cap layer was deposited. The periodical structures are composed of either five or ten periods, with a spacing varying from 90 to 300 Å. The dopant layers were deposited during a 25-s growth interruption. The silane flux was triggered 2 s after growth interruption, and halted 2 s before the growth was resumed. In order to determine the width of the doped layer and the doping period, the capacitance-voltage profile (C - V) was measured for each sample, using an electrochemical profiler PN4300.

The Shubnikov-de Haas experiment was carried out in a superconducting magnet. The sample was placed in liquid He at 4.2 K. The magnetoresistance measurements were made in the constant-current mode, employing currents of $\sim 10 \mu\text{A}$, and using a four-contact geometry; the samples were approximately square, with contacts in the corners. The magnetoresistance oscillations were measured in magnetic fields of intensity up to 14 T.

IV. RESULTS

We obtained an experimental estimate of the quantum mobility in each of the populated minibands by using a sequential process, which consisted of the following steps: (1) determination of the characteristic width of the doped layer and of the doping period; (2) determination of the sheet carrier concentration n_s (this process outputs simultaneously the width, Δ_n , Fermi energy, ϕ_n , and dispersion factor, ϵ_n , for all minibands taken into consideration); (3) isolation of the magnetoresistance oscillations associated with individual minibands; and (4) determination of the quantum mobility of a populated miniband by fitting the appropriate equation [either Eq. (5) or (7)] to the isolated magneto-oscillatory component, with the quantum mobility being the single fitting parameter. In what follows, each of these steps is described in more detail.

A. Determination of the characteristic doping layer width and doping period

It has been shown by Ulrich *et al.*²² that the C - V spectrum of a δ -doped semiconductor is very sensitive to the spreading of the impurity atoms. In order to estimate the characteristic width of the doped layer in our samples, we proceeded in the following way. Sample No. 187 with a single Si δ layer was grown under the same growth conditions used for the periodically δ -doped samples. In order to take advantage of the fact that the C - V technique presents a higher resolution for a higher sheet concentration of confined carriers, sample No. 187 was more highly doped than the other samples used in this work. The areal density of confined carriers in this sample was obtained from the Shubnikov-de Haas spectrum by following the prescription described in Ref. 5. Using the density of carriers obtained from the SdH spectrum, theoretical C - V profiles were generated by resolving self-consistently Schrödinger and Poisson equations for the structure under bias; in the calculation of the C - V spectrum, the doped layer was assumed to be of Gaussian profile, and the width of the Gaussian was varied until the theoretical C - V spectrum achieved best agreement with the experimental one. A more detailed description of the C - V technique and theory is presented in Ref. 2. Figure 1 shows the C - V spectrum for sample No. 187. The theoretical curve shown in Fig. 1 was calculated assuming the donor layer to be of width 8 Å, and it reproduces very well the experimental C - V spectrum. This demonstrates that Si atoms in the δ -doping layers in our samples are spread over not more than 2 ML of InP.

To determine the doping periods of a sample, its C - V spectrum was measured. As an example, the C - V spectrum for sample No. 200 is shown in Fig. 2. The C - V concentration, N_{C-V} , presents oscillations as a function of the C - V

FIG. 1. Measured capacitance-voltage profile for sample No. 187 (square dots) for $T=300$ K. The theoretical C - V spectrum (full curve) was generated assuming $n_s = 8.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, and the Si atoms distributed according to a Gaussian function of full width at half maximum of $8 \text{ \AA}$.

depth, z_{C-V} . The oscillations seen in Fig. 2 display a periodicity of $176 \text{ \AA}$, which we take to be equal to the doping period of this structure; the doping periods obtained in the same way are shown in Table I for all samples studied.

B. Determination of the carrier population and miniband parameters

The overall sheet carrier concentration n_s for each sample was extracted from an analysis of its Shubnikov-de Haas spectrum. Figure 3(a) shows the magnetoresistance spectrum for sample No. 196, and Fig. 3(b) shows the Fourier transform of the SdH oscillations plotted against the inverse field. Prior to taking the Fourier transform, and with the motive of reducing the unwanted background of monotonous magnetoresistance, the magnetoresistance curves were differentiated. Each of the peaks seen in Fig. 3(b) corresponds to a belly orbit of one of the populated minibands; the peak positions determine the belly extremal cross sectional areas of the mini-Fermi surface in units of $\hbar/2\pi e$.

To determine n_s it was necessary to solve self-consistently Schrödinger and Poisson equations [Eqs. (2) and (3)] for each sample. In the calculation, the doping period was fixed at the value determined by the C - V measurement, and the Si atoms were taken to be distributed according to a Gaussian function with a full width at half maximum of $8 \text{ \AA}$ as deduced from the C - V spectrum. The only additional parameter in this calculation, the carrier concentration n_s , was varied until all theoretical frequencies of magnetoresistance oscillation, i.e. those corresponding to the belly cross-sections of the mini-Fermi surface, approximated simultaneously all of the frequencies of oscillation seen in the experimental Shubnikov-de Haas spectrum. (It should be pointed out that such a procedure will incorporate into the final result of n_s those carriers in the outer minibands with a low-density population, which are beyond the sensitivity of the Shubnikov-de Haas spectrum). The procedure used to determine n_s is described in more detail in Ref. 23. Results of the analysis of the C - V spectra and of the Shubnikov-de Haas oscillations are summarized in Table I.

For samples with a period less than $\sim 200 \text{ \AA}$ quantum oscillations associated with miniband $E3$ were not observed. This is an indication that in this range of doping periods the minigap between minibands $E2$ and $E3$ is less than the broadening of the energy levels, meaning that for all practical purposes minibands $E3$ and $E2$ merge into a single energy band. Under these circumstances only the belly orbit associated with miniband $E2$ will be manifested by magnetoresistance oscillations which will follow the three-dimensional behavior described by Eq. (8). At still shorter periods ($d < 150 \text{ \AA}$), miniband $E3$ becomes depleted of carriers.

In addition to the concentration of free carriers, the self-consistent calculations also output the Fermi energy ϕ_n , the width Δ_n , and the dispersion factor ϵ_n for all minibands; the parameters obtained are displayed in Table II.

C. Isolation of contributions of individual minibands to the magnetoresistance

Individual oscillatory components were separated from the rest of the magnetoresistance spectrum by applying a Fourier Gaussian bandpass filter; the bandpass filter param-

TABLE I. Parameters of the samples studied. The doping period d was obtained from the C - V spectrum of the sample. B_{E1}^{SdH} and B_{E1}^{Th} symbolize the experimental and theoretical frequencies of oscillation associated with the belly orbit in k space. The overall carrier concentration n_s shown gives the best agreement of theory with experiment.

Sample No.	No. of periods	d ($\text{\AA}$)	SdH Experiment (T)			Calculated (T)			n_s (cm^{-2})
			B_{E1}^{SdH}	B_{E2}^{SdH}	B_{E3}^{SdH}	B_{E1}^{Th}	B_{E2}^{Th}	B_{E3}^{Th}	
194	5	92.0	85.5	43.1		86.3	42.3		4.27×10^{12}
206	10	107	89.7	47.9		90.3	48.7		5.08×10^{12}
198	5	128	74.9	38.6		75.4	40.2		4.50×10^{12}
207	10	133	80.7	46.0		79.2	46.2		5.08×10^{12}
200	10	176	62.2	32.2		63.8	32.4	9.1	4.27×10^{12}
197	5	225	73.7	33.8		73.7	34.9	17.0	5.38×10^{12}
199	10	245	73.1	25.9	11.1	75.6	27.2	11.2	5.26×10^{12}
196	5	278	65.4	28.1	15.0	68.2	28.4	15.9	4.98×10^{12}
164	single		69.6	24.0	6.8	70.8	24.5	6.7	5.07×10^{12}

FIG. 2. Capacitance-voltage profile for sample No. 200. The periodicity of the peaks indicate that the doping period of this structure is 176 Å.

eters were the peak frequency and full width at half maximum (FWHM). This is illustrated in Figs. 4(a)–4(d) for sample No. 196. We have chosen sample No. 196 to exemplify the results of the Fourier filtering procedure because in this sample each miniband is associated with one of the patterns which can be exhibited by the magneto-oscillatory components in periodically δ -doped semiconductors: the fundamental miniband $E1$ bears zero bandwidth and is thus two dimensional, giving a magnetoresistance contribution which will obey Eq. (7); miniband $E2$ bears a narrow bandwidth $\Delta_2 < \phi_2$, which corresponds to a dimensionality intermediate between 2 and 3, and its magnetoresistance oscillations will obey Eq. (5); and miniband $E3$, which has a large bandwidth $\Delta_3 > \phi_3$ is effectively three-dimensional, implying that its magnetoresistance oscillations will be described by Eq. (8). Thus sample No. 196 can serve the purpose of illustrating the Fourier filtering procedure and of the process of fitting individual oscillations with theory under all of the circumstances which can occur.

Figure 4(a) shows the Fourier transform of the SdH curve; dashed lines show the filtered Fourier transform, with band-

FIG. 3. (a) Shubnikov-de Haas spectrum of sample No. 196. (b) Fourier transform of the Shubnikov-de Haas spectrum plotted against $1/B$ and differentiated for sample No. 196. The frequencies of oscillation associated with the belly orbits are indicated.

pass filter parameters adjusted to isolate one of the Fourier peaks seen. After the application of the bandpass filter, all steps leading to the isolated Fourier transform were reversed: an inverse Fourier transformation was applied, and the magnetoresistance oscillations were integrated numerically. Figures 4(b)–4(d) shows the isolated magnetoresistance oscilla-

TABLE II. Miniband parameters obtained from the theoretical model. The energy width and the Fermi energy for each miniband, Δ_n and ϕ_n , respectively, are the values obtained from a self-consistent solution of Schrödinger and Poisson equations using d and n_5 given in Table I. Parameter ϵ_n was obtained by fitting the numerically calculated dispersion law, $E_n(k)$, with Eq. (6), and it is indicated for minibands obeying the quasi-two-dimensional behavior of Eq. (5).

Sample No.	Δ_1 (meV)	ϕ_1 (meV)	ϵ_1	Δ_2 (meV)	ϕ_2 (meV)	ϵ_2	Δ_3 (meV)	ϕ_3 (meV)	ϵ_3
194	43.7	127.0	0.21	152.9	57.5			0.0	
206	26.4	130.2	0.16	105.8	68.8			0.0	
198	14.8	107.8	0.12	69.4	56.9			0.0	
207	11.0	118.3	0.09	61.0	64.0			0.0	
200	3.2	91.4	0.03	31.7	44.7			0.0	
197	2.8	107.1	0.00	11.4	45.4			0.0	
199	1.4	102.3	0.00	8.1	41.2	0.16		22.4	
196	0.0	95.5	0.00	4.6	35.9	0.11	19.9	19.0	
164	0.0	96.7	0.00	0.0	37.2	0.00	0.0	11.4	0.0

FIG. 4. (a) Fourier transform of the SdH spectrum for sample No. 196; dashed lines show the filtered Fourier transform used to isolate each of the peaks detected; (b)–(d) show the isolated oscillations due to minibands E_1 , E_2 , and E_3 , respectively.

tory components so obtained for sample No. 196. The isolated oscillations cover a smaller range of fields than the measured interval (0–14 T) because a certain interval at each end (the length of which is inversely proportional to the FWHM of the Fourier filter) is lost due to end effects (see, for instance, Ref. 24).

D. Experimental estimates for the quantum mobilities

The quantum mobility associated with each of the populated minibands was obtained from a fit with theory of the minibands' contribution to the magnetoresistance, isolated from the rest of the Shubnikov–de Haas spectrum as described in Sec. IV C. The individual oscillations were fitted using Eq. (5) when the miniband energy width was narrow ($\Delta_n < \phi_n$), or Eq. (8), when the miniband width was wide ($\Delta_n > \phi_n$). Parameters Δ_n , ϕ_n , and ϵ_n used in the fitting equation were fixed at the values given in Table II and the temperature was set to 4.2 K, as used in our experiments. The only remaining parameter, $\mu_Q(n)$, was adjusted for best agreement with the experiment. To illustrate the fitting procedure, the individual oscillations and the fitted

FIG. 5. Magnetoresistance oscillations associated with individual minibands for sample No. 196. Dots represent the oscillations obtained experimentally and the full curves correspond to the theory. (a) Isolated oscillations due to the fundamental miniband, E_1 and theoretical result by use of Eq. (5). (b) Same for miniband E_2 . (c) Isolated oscillations due to miniband E_3 and theoretical result obtained by use of Eq. (8).

curves for sample No. 196 are shown in Fig. 5; a fit with theory in this case yielded $\mu_Q(E_1) = 410 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, $\mu_Q(E_2) = 1320 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, and $\mu_Q(E_3) = 3650 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. All other samples underwent the same treatment, and the quantum mobility values obtained are plotted against doping period in Fig. 6.

V. COMPARISON WITH THEORY AND DISCUSSION

Experimental results showed that at a fixed doping period the quantum mobility increases with the index of the mini-

FIG. 6. Quantum mobility as a function of the doping period. Circles, crosses, and squares represent the experimental results corresponding to minibands E_1 , E_2 , and E_3 , respectively; dashed and full lines depict the theoretical result for $n_s = 4.3 \times 10^{12}$ and $5.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, respectively.

band. The experimental quantum mobilities associated with individual minibands are shown by dots in Fig. 6 as a function of the doping period d . At large values of d adjacent wells become uncoupled; the quantum miniband mobilities obtained for sample No. 164, which contains a single δ layer, is plotted in Fig. 6 at $d=800$ Å.

When the period is made shorter, the mobility in miniband $E1$ remains nearly unchanged. The experimental quantum mobility in miniband $E2$ does not show a smooth dependence on the doping period, which is attributed to the fluctuation in carrier density in the samples (see Table I) and to the limited accuracy of the experimental values of mobility. Nevertheless, the experimental data plotted in Fig. 6 shows clearly that in the region $d < 200$ Å the $E2$ quantum mobility decreases when the doping period is made shorter. Finally, the quantum mobility of carriers in miniband $E3$ could only be measured for periods greater than 230 Å, in which range the measured mobility attains a value of approximately $3500 \text{ cm}^2/\text{V s}$.

The theoretical quantum mobilities were calculated as a function of the doping period for carrier concentrations of $n_s = 4.3 \times 10^{12}$ and $5.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; these values correspond to the lower and upper limits of the free-carrier concentration in the samples studied. The input quantities were the Fermi energy, miniband energy spectrum, and wave functions, which were obtained from the solution of Schrödinger and Poisson equations as described in Sec. IV B. The quantum mobilities were calculated by using Eq. (4), assuming periodic boundary conditions in an interval of four doping periods, and incorporating into the calculations only the quantum states belonging to the three lowest energy minibands. Results of the theory are shown by lines in Fig. 6.

Figure 6 shows that for miniband $E1$ the theoretical quantum mobilities are in excellent agreement with the experimental ones. For excited minibands $E2$ and $E3$ there is an order-of-magnitude agreement between theory and experiment, although the overall agreement is not so good as for miniband $E1$. Nevertheless, it is to be noticed that the theory reproduces the main feature of the $E2$ quantum mobility dependence on d , i.e., a decrease toward short superlattice periods.

Our investigation can be summarized by stating that, at a given superlattice period, the quantum mobility is higher in more energetic minibands, and when the period is made shorter, the quantum mobilities decrease. The decreasing behavior toward short superlattice periods develops at $d \sim 300$ Å for miniband $E3$, but only at $d \sim 200$ Å for miniband $E2$; for miniband $E1$, theory predicts a decreasing behavior only when $d < 50$ Å. These results can be explained by the dependence of the binding length of carriers on the doping period d . As shown in Ref. 12 for δ -doped samples with a single doping layer and in Ref. 13 for gated δ -doped samples, the mobility is very sensitive to the mean distance between the impurity layer and the charge carriers. The mean distance between carriers confined in miniband Ei and an impurity layer at $z=0$ can be estimated by $\sqrt{\langle z^2 \rangle_{Ei}}$, where

$$\langle z^2 \rangle_{Ei} = N \int_{-d/2}^{+d/2} z^2 |u_i(k_{\text{Belly}}, z)|^2 dz. \quad (9)$$

A plot of $\sqrt{\langle z^2 \rangle_{Ei}}$ for a carrier density of $n_s = 4.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}/\text{V s}$ is shown in Fig. 7. A comparison of Figs. 7 and 6

FIG. 7. Mean distance between carriers confined in minibands $E1$, $E2$, and $E3$ as a function of the doping period for periodically δ -doped InP with $n_s = 4.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}/\text{V s}$. The calculation was made using Eq. (9).

shows that there is an outstanding correlation between the quantum mobility in a miniband, and the mean distance between its carriers and an impurity sheet.

VI. CONCLUSION

The Shubnikov-de Haas oscillations were measured for periodically δ -doped InP as a function of the doping period in samples with a density of carriers around $\sim 4.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ per doped layer and doping period in the range 90–300 Å. It is verified that each miniband manifests itself in the SdH spectrum through a single oscillatory component, which corresponds to the belly extremal orbit of its mini-Fermi surface. The quantum oscillations associated with individual minibands were isolated from the underlying magnetoresistance spectrum by Fourier techniques. From the individual oscillatory components, the quantum mobility for each miniband was estimated.

A theoretical model for the quantum mobility was developed, which yields a fair agreement with the experimental results. The theoretical model predicts that the mobilities will increase with the miniband index, and the mobilities decrease when the doping period is made shorter. The onset of the decreasing behavior occurs at $d \sim 200$ Å for miniband $E2$, and below $d \sim 50$ Å for miniband $E1$. The dependence of the quantum mobility in an individual miniband on the distance between dopant sheets shows a salient correlation with the same dependence of the mean distance between its carriers and the doped layer. This demonstrates that the mean distance between confined carriers and impurities is the determinant of the absolute value of carrier mobility which can be achieved in δ -doped systems.

ACKNOWLEDGMENTS

Calculations were performed using the facilities of the Laboratório de Computação Científica Avançada da Universidade de São Paulo (LCCA-USP). A.B.H. acknowledges support by FAPESP, Grant No. 94/5645-7, and CNPq, Grant No. 306335/88.

- ¹E. F. Schubert, *Doping in III-V Semiconductors* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993), p. 433.
- ²E. F. Schubert, in *Epitaxial Microstructures*, edited by A. C. Gosard, Semiconductors and Semimetals Vol. 40 (Academic Press, New York, 1994), p. 1.
- ³R. Drouot, S. D. Parker, E. Skuras, R. A. Stradling, R. L. Williams, R. B. Beal, and J. J. Harris, in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II*, edited by G. Landwehr (Springer-Verlag, Berlin, 1989), p. 199.
- ⁴S. Yamada and T. Makimoto, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1022 (1990).
- ⁵P. M. Koenraad, B. F. A. van Hest, F. A. Blom, R. van Dalen, M. Leys, J. A. A. J. Perenboom and J. H. Wolter, *Physica B* **177**, 485 (1992).
- ⁶O. Mezrin and A. Shik, *Superlatt. Microstruct.* **10**, 107 (1991).
- ⁷O. A. Mezrin, A. V. Shik, and V. O. Mezrin, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 664 (1992).
- ⁸L. R. González, J. Krupski, and T. Szwacka, *Phys. Rev. B* **49**, 11 111 (1994).
- ⁹G. -Q. Hai, N. Studart, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **52**, 8363 (1994).
- ¹⁰G. -Q. Hai and N. Studart, *Phys. Rev. B* **52**, R2245 (1995).
- ¹¹P. M. Koenraad, A. F. W. van de Stadt, J. M. Shi, G. Q. Hai, N. Studart, P. Vansant, F. M. Peeters, J. T. Devreese, J. A. A. J. Perenboom, and J. H. Wolter, *Physica B* **211**, 426 (1995).
- ¹²A. B. Henriques, *Phys. Rev. B* **53**, 16 365 (1996).
- ¹³L. C. D. Gonçalves and A. B. Henriques, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 203 (1997).
- ¹⁴D. Schneider, D. Rürup, A. Plichta, H. Grubert, A. Schalchetzki, and K. Hansen, *Z. Phys. B* **95**, 281 (1994).
- ¹⁵D. K. Schroder, *Semiconductor Material and Device Characterization* (Wiley, New York, 1990), p. 43.
- ¹⁶L. Hedin and B. Lundqvist, *J. Phys. C* **4**, 2064 (1971).
- ¹⁷R. Fletcher, E. Zaremba, M. D'lorio, C. T. Foxon, and J. J. Harris, *Phys. Rev. B* **41**, 10 649 (1990).
- ¹⁸A. B. Henriques and L. C. D. Gonçalves, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 585 (1993).
- ¹⁹A. B. Henriques, *Phys. Rev. B* **50**, 8658 (1994).
- ²⁰P. T. Coleridge, R. Stoner, and R. Fletcher, *Phys. Rev. B* **39**, 1120 (1989).
- ²¹L. M. Roth and P. N. Argyres, in *Physics of III-V Compounds*, edited by R. Willardson and A. Beer, Semiconductors and Semimetals Vol. 1, (Academic Press, New York, 1996), p. 159.
- ²²B. Ulrich, E. F. Schubert, J. B. Stark, and J. E. Cunningham, *Appl. Phys. A* **47**, 123 (1988).
- ²³A. B. Henriques, L. C. D. Gonçalves, P. L. Souza, and B. Yavich, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 190 (1996).
- ²⁴W. H. Press, B. P. Flannery, A. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, New York, 1987), pp. 407-411.

Quantum transport in periodically δ -doped GaAsA.B. Henriques¹, L.C.D. Gonçalves¹, N.F. Oliveira, Jr.¹, S.M. Shibli¹, P.L. Souza², B. Yavich^{2,*}¹ Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, Brazil² Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica, Rua Marques de São Vicente 225, 22453-900 Rio de Janeiro, Brazil

Received: 14 April 1997

Abstract. The Shubnikov-de Haas spectra of GaAs samples with a periodical doping with Si were measured at 4.2 K using fields of 0–14 T. From the Shubnikov-de Haas spectrum the quantum mobilities associated with individual minibands were estimated for each sample. The sheet density of Si atoms in each doping plane was fixed at approximately $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ in all samples and the doping period was varied in the range 40–1000 Å. The quantum mobilities obtained experimentally are compared with theoretical calculations using the random phase approximation to describe the screened interaction between electrons and charged impurities. The theory describes qualitatively the results of the experiment, i.e. an increase of the quantum mobility with the index of the miniband, and a decrease in the mobility in all minibands when the doping period is made shorter (with a weak maximum at intermediate values of the doping period). Various possible improvements of the model are suggested.

PACS: 73.20.Dx; 73.50.Jt; 73.61.Ey

1. Introduction

Planar, or δ -doped semiconductors have attracted interest in recent years in respect to their technological applications and fundamental physics [1, 2]. The electronic structure of these systems can be modeled in the effective mass approximation [3, 4, 5, 6] which allows to explain the main characteristics of their optical and transport properties [7, 8]. The spreading of the dopant atoms around the doped plane of the host crystal has been studied by various experimental techniques such as X-rays [9, 10], scanning tunneling microscopy [11] and capacitance-voltage profiling [12], indicating that localization of dopants within at most 2 monolayers of the host crystal can be readily achieved using advanced epitaxial growth techniques.

One important aspect of δ -doped semiconductors is that in such systems it is possible to obtain a high-conductance

channel of electrons, which favours their application in electronic devices. The conductance of the sample can be enhanced still further by introducing a number of equally spaced δ -doped planes in the host crystal [1, 2] (periodically δ -doped semiconductor). A relevant parameter of a periodically δ -doped semiconductor is the distance between dopant sheets, d . At large values of d , the δ -wells are uncoupled, and electrons become fully localized around a given sheet with charged impurities; the mobility of these electrons is limited due to their strong Coulomb interaction with the impurity sheet. When d is reduced, the coupling between δ -wells increases; an increasing amount of electrons will interact simultaneously with several impurity sheets, which results in a reduction of their mobility.

In the present work, we present an experimental study of the electron mobility dependence upon the spacing between impurity layers in periodically δ -doped GaAs. The set of samples used had a nearly constant areal density of impurities, with a doping period covering the range of 40–1000 Å. Estimates of the quantum mobilities in the individual minibands were made from the Shubnikov-de Haas (Sdh) spectra of the samples at 4.2 K in fields of 0–14 T. The experimental mobilities are compared with the theoretical values obtained by using the RPA theory developed recently for the quantum mobility of periodically δ -doped semiconductors [13].

2. Experimental

The δ -doped structures were grown at a Varian GEN II MBE system. The substrate temperature was 540 °C, determined with an Ircon V series pyrometer, with the emissivity set at 0.70. A ratio of As₂ and Ga beam equivalent pressure around 20 was chosen. These growth conditions ensure a (2×4) As stabilized surface reconstruction during MBE growth. In all samples, a MBE undoped GaAs buffer layer was grown before doping. The growth rate for MBE was estimated to be 1.5 $\mu\text{m/h}$. According to these growth rates, the layer spacing was estimated, which was varied from 1000 Å down to 40 Å, while the doping level per period was kept constant in order to give concentrations of about $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

The Shubnikov-de Haas experiment was carried out in a superconducting magnet. The sample was placed in

* e-mail: ahenriques@if.usp.br

Table 1. Parameters of the samples studied. The doping period d was obtained from the C-V spectrum of the sample. B_{E1}^{SdH} and B_{E1}^{Th} symbolize the experimental and theoretical frequencies of oscillation associated with the belly orbit in k -space. The overall carrier concentration n_s shown gives the best agreement of theory with experiment

Sample	$d(\text{\AA})$	SdH Experiment (T)			Calculated (T)			$n_s (\text{cm}^{-2})$
		B_{E1}^{SdH}	B_{E1}^{Th}	B_{E2}^{SdH}	B_{E1}^{Th}	B_{E2}^{Th}	B_{E3}^{Th}	
DN16	38	94.5	—	—	—	—	—	1.93×10^{12}
DN27	66	63.0	—	—	—	—	—	1.84×10^{12}
DN24	95	52.4	—	—	—	—	—	2.01×10^{12}
DN30	127	47.5	21.9	—	47.9	21.7	—	2.34×10^{12}
DN26	219	33.3	15.2	—	33.1	16.1	—	2.07×10^{12}
DN32	389	39.6	10.5	4.79	35.5	12.7	6.4	2.47×10^{12}
DN38	611	41.5	10.2	2.3	36.5	12.1	4.5	2.57×10^{12}
DN31	950	45.3	11.5	5.06	35.5	11.7	3.8	2.48×10^{12}

liquid He at 4.2 K. The magnetoresistance measurements were made in constant current mode, employing currents of $\sim 10 \mu\text{A}$, and using a four-contact geometry; the samples were approximately square, with contacts in the corners. The magnetoresistance oscillations were measured in magnetic fields of intensity up to 14 T.

3. Experimental determination of the miniband mobilities

As shown in [4, 5], in periodically δ -doped semiconductors each miniband manifests itself in the Shubnikov-de Haas spectrum (SdH) as a separate oscillatory component. The oscillatory contribution to the magnetoresistance from a miniband whose bandwidth is smaller than its Fermi energy, i.e. $\Delta_n < \phi_n$, will be [5]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim -\frac{X}{\sinh X} e^{-\alpha_n u} \{ 2J_0(\beta_n u) \cos \omega_n u + 8\epsilon_n \text{Im} [e^{-i\beta_n u} \Phi(1/2, 2, 2i\beta_n u)] \sin \omega_n u \}, \quad (1)$$

where $X = 2\pi^2 T/B$, T is the temperature in units of $\hbar^2/k_B m^* a_B^2$, $u = 1/B$, $\alpha_n = \pi/\mu_Q(n)$, $\mu_Q(n)$ is the quantum mobility in the n th miniband, $\beta_n = \pi\Delta_n$, $\omega_n = 2\pi(\phi_n - \Delta_n)$, ϵ_n is a dimensionless dispersion factor determined by the coupling strength between neighboring wells and $\Phi(\alpha, \beta, \gamma)$ is the degenerate hypergeometric function. The oscillatory magnetoresistance contribution from a miniband whose bandwidth is larger than the Fermi energy, i.e. $\Delta_n > \phi_n$, can be approximated by the usual expression associated with an unrestrained free electron gas in three dimensions [14]

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_0} \sim -2 \frac{X}{\sinh X} \frac{e^{-\alpha_n u}}{\sqrt{u}} \cos \left(2\pi\phi_n u - \frac{\pi}{4} \right). \quad (2)$$

The carrier concentration, n_s , was determined for each sample from the frequencies detected in its Shubnikov-de Haas spectrum, as described in [13]. In such a procedure, the Schrödinger and Poisson equations for the superlattice are solved simultaneously with n_s as a variable input parameter. The value of n_s is varied until the theoretical SdH frequencies achieve best agreement with the experimental ones. Results of such an analysis are summarized in Table 1. In addition to the concentration of free carriers, the analysis of the

Table 2. Miniband parameters obtained from a simultaneous solution of Schrödinger and Poisson equations for the periodic structure using d and n_s given in Table 1. Δ_n and ϕ_n are the energy width, Fermi energy and dispersion factor for the n th miniband, respectively

Sample	Δ_1 (meV)	ϕ_1 (meV)	ϵ_1	Δ_2 (meV)	ϕ_2 (meV)	ϵ_2	Δ_3 (meV)	ϕ_3 (meV)	ϵ_3
DN16	168.8	168.8	—	—	—	—	—	—	—
DN27	100.8	100.8	—	—	—	—	—	—	—
DN24	95.9	95.9	—	—	—	—	—	—	—
DN30	27.1	83.2	0.20	96.5	37.6	—	—	—	—
DN26	3.7	57.5	0.06	26.1	28.1	0.10	57.1	0.8	—
DN32	0.0	61.7	0.00	2.6	22.0	0.00	12.0	11.1	—
DN38	0.0	63.6	0.00	0.0	21.1	0.00	1.6	7.8	—
DN31	0.0	61.0	0.00	0.0	20.3	0.00	0.0	6.5	—

Shubnikov-de Haas spectrum also outputs the Fermi energy, ϕ_n , the width, Δ_n , and the dispersion factor, ϵ_n , for all minibands; the parameters so obtained are displayed in Table 2. To isolate the oscillatory magnetoresistance associated with a given miniband from the rest of the Shubnikov-de Haas spectrum Fourier filtering techniques were used. Figure 1 illustrates this procedure for sample DN30. Figure 1a shows the raw magnetoresistance spectrum at 4.2 K; Fig. 1b shows the Fourier transform of the SdH curve plotted against inverse field; dashed lines show the filtered Fourier transform, with band-pass filter parameters adjusted to isolate one of the Fourier peaks seen.

Prior to taking the Fourier transform, and with the motive of reducing the unwanted background of monotonous magnetoresistance, the magnetoresistance curves were differentiated. After the application of the bandpass filter, all steps leading to the isolated Fourier transform were reversed; an inverse Fourier transformation was applied, and the magnetoresistance oscillations were integrated numerically. Figure 1c-d shows the isolated oscillatory components so obtained for sample DN30. The isolated oscillations cover a smaller range of fields than the measured interval (0–14 T) because a certain interval at each end (the length of which is inversely proportional to the FWHM of the Fourier filter) is lost due to end effects (see, for instance, [15]).

The quantum mobility corresponding to a given miniband was estimated by fitting the isolated magnetoresistance oscillations associated with it by either (1) or (2), with the quantum mobility being the single fitting parameter. The individual oscillations were fitted using (1) when the miniband energy width was narrow ($\Delta_n < \phi_n$), or (2), when the miniband width was wide ($\Delta_n > \phi_n$). Parameters Δ_n , ϕ_n and ϵ_n used in the fitting equation were fixed at the values given in Table 2 and the temperature was set to 4.2 K as used in our experiments. The only remaining parameter, the quantum mobility $\mu_Q(n)$, was adjusted for best agreement with the experiment. To illustrate the fitting procedure, the individual oscillations and the fitted curves for sample DN30 are shown in Fig. 1c-d; a fit with theory in this case yielded $\mu_Q(E1) = 504 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ and $\mu_Q(E2) = 1094 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. All other samples underwent the same treatment, and the quantum mobility values obtained are plotted against doping period in Fig. 2.

Fig. 1. a Shubnikov-de Haas spectrum for sample DN30 at 4.2 K; b Fourier transform of the SdH spectrum depicted in (a); dashed lines show the filtered Fourier transform used to isolate each of the peaks detected; c Isolated oscillations associated with the fundamental miniband, E1 (dots) and theoretical result (full curve) by use of (1); d Isolated oscillations associated with miniband, E2 (dots) and theoretical result (full curve) by use of (2)

4. Calculation of miniband quantum mobilities in the RPA

In this section effective atomic units are used, whereby the units of mass, length and energy are the effective mass m^* , the effective Bohr radius $a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2}$ and the effective Hartree $H = \frac{\hbar^2}{m^* a_B^2}$, respectively. For GaAs, we assume $m^* = 0.067 m_0$ and $\epsilon = 12.6$, which gives $a_B = 99 \text{ \AA}$ and $H = 11.6 \text{ meV}$.

Fig. 2. Quantum mobility as a function of the doping period. Circles, crosses and squares represent the experimental results corresponding to minibands E1, E2 and E3, respectively; the lines depict the theoretical result for $n_D = 2.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$

The scattering rate of electrons from a given quantum state for $T = 0 \text{ K}$ can be obtained from the Fermi golden rule, taking the Coulomb interaction between electrons and ionized impurities to be the scattering mechanism. Considering the scattering processes of carriers at the Fermi surface, one obtains for the quantum lifetime of the state k of the n th electronic miniband in the random phase approximation (RPA):

$$\mu_Q^{-1}(n, k) = \frac{S}{\pi} \sum_{n', k'} \int_0^\pi |V_{nk, n'k'}^{TQ}(q_{nk, n'k'})|^2 d\varphi \quad (3)$$

where the summation extends over the quantum states (n', k') which lie below the Fermi level (i.e. $\phi_{n'k'} > 0$),

$$q_{nk, n'k'} = 2^{1/2} [\phi_{nk} + \phi_{n'k'} - 2\sqrt{\phi_{nk}\phi_{n'k'}} \cos \varphi]^{1/2},$$

the integration variable φ is the angle of scattering formed between vectors $k_\perp$ and $k'_\perp$, and

$$|V_{nk, n'k'}^{TQ}(q)|^2 = \left(\frac{2\pi}{q} \right)^2 \frac{N_d}{S} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \left| \sum_{m, m'} \epsilon_{nkn'k', m, m'}^{-1}(q) \times \int_0^L \chi_m(l, z) \chi_{m'}^*(l', z) e^{-iqz - idl} dz \right|^2$$

represents the statistical average of the matrix elements of the two-dimensional Fourier transform of the scattering potential. In the latter equation the summation extends over all the electronic energy levels, N_d is the areal density of single charged donor atoms in each doping period, distributed along the z -direction in a plane of zero thickness, d is the superlattice period, $L = Nd$ is the Born-von Karman period, and $\epsilon_{nkn'k', m, m'}^{-1}(q)$ is the dielectric matrix which is given by

$$\epsilon_{nkn'k', m, m'}^{-1}(q) = \delta_{nm} \delta_{kk'} \delta_{n'n} \delta_{m'm'} + A_{m, m'}^{-1}(q) T_{nkn'k', m, m'}(q),$$

with $A_{mlm'l'}(q)$ being the independent response particle density matrix, given in the Appendix of [16], and $T_{kn'k',mlm'l'}(q)$ is the Coulomb energy form factor

$$T_{kn'k',mlm'l'}(q) = \frac{2\pi}{q} \int_0^L \chi_n(k, z) \chi_{n'}^*(k', z) \times \chi_{n'}^*(l, z') \chi_{m'}(l', z') e^{-q|z-z'|} dz dz'.$$

In these equations, $\chi_n(k, z)$ represents the superlattice Bloch wave function in miniband n at the wave vector k , obtained from a self-consistent solution of Schrödinger and Poisson equations for the periodically δ -doped structure, as described in [4].

For comparison with the experiment, results of the theoretical calculations of the miniband quantum mobilities obtained through (3) at the wave vector k associated with the belly orbit ($k = 0$ for minibands $E1$, $E3$ and $k = \pi/d$ for miniband $E2$) are shown by solid lines in Fig. 2.

5. Discussion

The experimental quantum mobilities associated with individual minibands are shown by dots in Fig. 2 as a function of the doping period d . The experiment shows that at any doping period d the quantum mobility increases with the miniband index. At large values of d the wells are uncoupled, and the results for the sample with a period of $d = 1000$ Å are similar to reports on the subband quantum mobilities measured for isolated δ -wells [17]. As the distance between neighboring wells is decreased, the miniband mobilities show a tendency to decrease. More extended minibands show a greater sensitivity to the coupling between adjacent wells: when d is reduced from 1000 Å to 400 Å the mobility in miniband $E3$ decreases almost 4-fold, whereas less extended states $E2$ and $E1$ show no distinct change in their quantum mobilities. Below 400 Å the mobility in miniband $E2$ decreases, whereas in miniband $E1$ a decrease in mobility is detected only below $d \sim 100$ Å.

Such a behavior of the quantum mobility is interpreted in terms of the changes in the Coulomb interaction between electrons in a given miniband and the charged impurities. Because of their longer mean distance to the impurity sheet, electrons in more energetic minibands are scattered with less efficiency and display a higher quantum mobility. At large values of d , the wells are uncoupled, and electrons interact only with the charged impurities around which they are localized. When d is decreased, the coupling increases, and electrons begin to interact simultaneously with several impurity sheets, which reduces their mobility. When d is decreased from a large value, more energetic subbands belonging to adjacent wells begin to couple sooner than less energetic ones, hence the onset of a decreasing mobility towards $d = 0$ in more energetic minibands occurs at larger values of d than for less energetic ones. It is worth noting that when d is reduced, the miniband mobilities attain a weak maximum before the rapid decrease at still shorter values of d . Such a mobility enhancement has also been observed in samples with two δ -layers [18], and it occurs because of a smaller overlap between the electronic charge density and the δ -layer at intermediate values of d [13].

The theoretical quantum mobilities were calculated as a function of the doping period for carrier concentrations of $n_3 = 2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. The quantum mobilities were calculated by using (3) assuming periodic boundary conditions in an interval of 4 doping periods, and incorporating into the calculations only the quantum states belonging to the 3 lowest energy minibands. Results of the theory are shown by lines in Fig. 2. The theoretical quantum mobilities display the same features as the experimental ones, i.e. an increase with the miniband index at a fixed spacing between the δ -wells and a rapid decrease when d is reduced below a certain value, which is larger for more extended minibands. However, good quantitative agreement between theory and experiment occurs for the lowest energy miniband $E1$ only, and is not so good for the excited states $E2$ and $E3$. The discrepancy between theory and experiment can be linked to the restrictions made in the theoretical calculations. Our numerical calculations did include only a fixed number of electronic states; however, as demonstrated by Hai *et al.*, the contributions to the dielectric matrix which arise from states above the Fermi energy lead to a reduction in the theoretical quantum mobilities, the effect being greater upon the more extended minibands [17]. Another relevant effect not accounted for in the theory is the finite width of the doped layers, which also leads to an overestimation of the quantum mobilities in excited minibands [19]. Finally, the effects of non-parabolicity were ignored in the calculations; given that the confinement energy for electrons at the Fermi level is around 100 meV, the non-parabolicity should also contribute to a reduction in the theoretical values of quantum mobility.

6. Conclusion

The Shubnikov-de Haas oscillations were measured for periodically δ -doped GaAs as a function of the doping period in samples with a density of carriers around $\sim 2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ per doped layer and doping period in the range 40–1000 Å. The quantum oscillations associated with individual minibands were isolated from the background magnetoresistance spectrum by Fourier techniques. From the individual oscillatory components, the quantum mobility for each miniband was estimated. It is obtained that at a given superlattice period, the quantum mobility is higher in more energetic minibands, and when the period is made shorter, the quantum mobilities decrease. These results are explained in terms of the dependence of the binding length of carriers on the doping period d .

Numerical calculations of the miniband quantum mobility were made in the RPA, and it is obtained a dependence on the doping periodicity in qualitative agreement with the experimental results, although the quantitative agreement is not fully satisfactory for the excited minibands. Various limiting factors of the theory which could be improved upon were indicated.

Numerical calculations were made using the facilities of the Laboratório de Computação Científica Avançada da Universidade de São Paulo (LCCA-USP). The authors acknowledge support by FAPESP, CNPq and CAPES.

References

1. Schubert, E.F.: *Doping in III-V semiconductors* p.433; Cambridge: Cambridge University Press 1993
2. Schubert, E.F.: Delta-doping of semiconductors: electronic, optical and structural properties of materials and devices. *Semiconduct. Semimet.* 40, 1 (1994)
3. Degani, M.: *Phys. Rev. B* 44, 5560 (1991)
4. Henriques A.B., Gonçalves, L.C.D.: *Semicond. Sci. Technol.* 8, 585 (1993)
5. Henriques, A.B.: *Phys. Rev. B* 50, 8658 (1994)
6. Domínguez-Adame, F., Méndez, B., Maciá, E.: *Semicond. Sci. Technol.* 9 263 (1994)
7. Maciel, A.C., Tatham, M., Ryan, J.F., Wodcock, J.M., Nahory, R.E., Harbison, J.P., Flores, L.T.: *Surf. Sci.* 228, 251 (1990)
8. Zheng, X., Carns, T.K., Wang, K.L., Wu, B.: *Appl. Phys. Lett.* 62, 504 (1993)
9. Hart, L., Fahy, M.R., Newman, R.C., Fewster, P.F.: *Appl. Phys. Lett.* 62, 2218 (1993)
10. Keimel, J., Krutzenbichler, A., Fritsch, G.: *Physica B* 188, 253 (1994)
11. Johnson, M.B., Koenraad, M.B., van der Vlieten, W.C., Salenink, H.W.M., Wulter, J.H.: *Phys. Rev. Lett* 75, 1606 (1995)
12. Yavich, B., Souza, P.L., Pamplona-Pires, M., Henriques, A.B., Gonçalves, L.C.D.: *Semicond. Sci. Technol.* 12, 481 (1997)
13. Henriques, A.B., Gonçalves, L.C.D., Oliveira, N.F., Souza, P.L., Yavich, B.: *Phys. Rev. B* 55, 13072 (1997)
14. Roth, L.M., Argyres, P.N.: *Magnetic quantum effects, Semiconductors and Semimetals* 1, 159 (1966)
15. Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, A.A., Vetterling, W.T.: *Numerical Recipes*. New York: Cambridge University Press 1987, pp.407-411.
16. Fletcher, R., Zaremba, E., D'lorio, M., Foxon, C.T., Harris, J.J.: *Phys. Rev. B* 41, 10649 (1990)
17. Hai, G.-Q., Studart, N., Peeters, F.M.: *Phys. Rev. B* 52, 8363 (1994)
18. Hai, G.-Q., Studart, N., Peeters, F.M.: *Phys. Rev. B* 52, 11273 (1995)
19. Henriques, A.B.: *Phys. Rev. B* 53, 16365 (1996)

phys. stat. sol. (a) 164, 133 (1997)

Subject classification: 73.20.Dx; 71.45.Gm; 78.20.Ls; S7.11

Band Gap Renormalization in Periodically Delta-Doped Semiconductors

A. B. HENRIQUES (a), S. OBUKHOV (a), L. C. D. GONÇALVES (a),
P. L. SOUZA (b), and B. YAVICH (b)

(a) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318,
05315-970 São Paulo, Brazil

(b) Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica,
Rua Marques de São Vicente 225, 22453-900 Rio de Janeiro, Brazil

(Received September 5, 1997)

The photoluminescence of periodically δ -doped InP was measured at 4.2 K in magnetic fields of intensity between 0 and 14 T. The samples has a nearly constant carrier density of $5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and doping period varying from 130 to 245 Å. A well defined fan diagram associated with the optical recombination of electrons in the E2 miniband and photoexcited holes is obtained. Extrapolation of the Landau level fan diagram to zero field allows us to estimate the band gap renormalization (BGR). The BGR decreases rapidly when the period of the superlattice is increased. The BGR observed can be accounted for by the density of non-confined (three-dimensional) electrons present in the structure.

Periodically δ -doped semiconductors form a type-II superlattice in which a high density electron gas is confined by a periodic potential along the growth direction. The dimensionality of the electronic structure can be tuned between 2 and 3 by varying the spacing between the δ -sheets [1]. These properties make periodically δ -doped structures an attractive system in which to study many-body phenomena as a function of the dimensionality of the electron gas confined in the system, which is the purpose of the present study. Band gap renormalization (BGR) is one such effect, which consists of the lowering of the single-particle energy states due to exchange and correlation effects. The BGR is manifested in a band gap which is narrower than observed for the same non-degenerate material [2]. For a homogeneous 3D system, theoretical calculations in the random phase approximation suggest that the BGR varies like $n^{1/3}$ [2], where n is the particle volume density. For bulk n-InP (one-component 3D plasma) the experimental estimate of the BGR at 4.2 K fits a $n^{1/3}$ dependence as follows [3]:

$$\text{BGR}^{3D} (\text{eV}) = 2.25 \times 10^{-8} [n (\text{cm}^{-3})]^{1/3}. \quad (1)$$

If we now imagine the physical system to be compressed into a narrow planar space (thereby reducing its dimensionality from 3 to 2) we would expect the BGR to increase, given the enhancement of Coulomb interaction between the charge carriers. This is indeed the case: for a fixed interparticle separation, the BGR is always greater in 2D than in 3D (see [4] and references therein).

In this work we obtained an experimental estimate of the BGR in periodically δ -doped InP. In order to estimate the BGR, we measured the photoluminescence of the samples at 4.2 K in magnetic fields of intensity between 0 and 14 T. The samples had

Table 1

Parameters of the samples studied. The doping period, d , was obtained from $C-V$ profiling of the samples [6]; the confinement energy E_2 , the potential barrier V_0 and the electronic charge density at mid-distance between two impurity sheets were obtained from the Shubnikov-de Haas measurements on the samples [6]; the transition energy $h\nu_{E2}$ was obtained by a fit of Eq. (2) to the experimental fan diagram; and the BGR was estimated through Eq. (5)

sample	d (Å)	E_2 (eV)	V_0 (eV)	$\rho(d/2)$ cm ⁻³	$h\nu_{E2}$ (eV)	BGR (eV)
207	133	0.104	0.092	2.30×10^{15}	1.406	0.037
200	176	0.095	0.093	1.01×10^{16}	1.405	0.025
199	245	0.118	0.130	0.55×10^{16}	1.403	0.017

similar carrier concentrations (about 5.0×10^{12} cm⁻²), which were measured from the Shubnikov-de Haas effect [5]; the doping period, d , was obtained from capacitance-voltage profiles of the samples [5, 6]; results are summarized in Table 1. Also shown in Table 1 are parameters of the electronic structure of the samples, taken from [5], which are relevant in the present context.

Fig. 1 shows the photoluminescence of the samples; a broad PL emission detected above the band gap of bulk InP is due to electronic transitions between the confined electron gas and photoexcited holes [7].

When a magnetic field is applied parallel to the growth direction, the PL develops a weak Landau level structure, as seen in Fig. 1b for sample No. 200. In order to better resolve the

Fig. 1

Fig. 1. a) PL spectra of the samples indicated by numbers. The band gap of bulk InP, E_g , and the bound exciton transition are indicated; the shaded area above the InP band gap is associated with transitions between confined electrons and photoexcited holes; b) magneto-PL spectra for sample No. 200. The intensity of the magnetic field corresponding to each curve is obtained by following the baseline to the right hand side

Fig. 2

Fig. 2. PL intensity at fixed photon wavelength as a function of the magnetic field intensity for sample No. 200. The photon wavelength corresponding to each curve is indicated

Landau level structure, the PL intensity at a fixed photon energy was measured as a function of the magnetic field. The PL intensity (at fixed photon energies) showed Shubnikov-de Haas-like oscillations, as shown in Fig. 2. We assume that the Landau level structure seen is due to transitions between the valence band and Landau levels belonging to the first excited electron miniband, which we denote by $E2$. Such an assumption is justified by the fact that the broadening of the electronic energy levels is a factor of 3 greater for the $E1$ miniband than for the $E2$ miniband [5], making the $E1$ Landau level structure much weaker than the $E2$ one. Under these conditions, the optical transitions which give rise to the magneto-PL spectrum can be represented schematically as is shown in Fig. 3b.

For a photon energy fixed at $h\nu_0$, the maxima in PL intensity determine the magnetic field at which a given $E2$ Landau level crosses energy $h\nu_0$. Therefore, using the magneto-PL depicted in Fig. 2, the Landau level fan diagram can be built and it is shown in Fig. 4 for all samples.

We will make the simplifying assumption that the BGR effect is described by a rigid shift of the conduction band towards the valence band, which is reasonably accurate for the short-period samples. According to the schematic representation shown in Fig. 3, the Landau level fan diagram will be determined by the energies

$$h\nu_{E2}(N, B) = h\nu_{E2} + \lambda^{E2}(N, B), \quad (2)$$

where

$$h\nu_{E2} = E_G - \text{BGR} - V_0 + E2. \quad (3)$$

V_0 is the height of the periodic potential, $E2$ is the confinement energy of the second miniband, and $\lambda^{E2}(N, B)$, $N = 0, 1, \dots$, are the energies of the $E2$ Landau levels. We approximated $\lambda^{E2}(N, B)$ by

$$\lambda^{E2}(N, B) = \lambda_{N0}^{E2} [1 + \alpha(E2 + \lambda_{N0}^{E2})], \quad (4)$$

where $\alpha = -0.58$ is the non-parabolicity correction [3] and $\lambda_{N0} = (\hbar e B / m^*) (N + 1/2)$. The holes are assumed to be localized: a likely source of hole localization are the fluctuations in the electrostatic potential of the ionized point impurities which are distributed within the δ -layers. The experimental Landau levels (dots in Fig. 4) were fitted simultaneously using Eq. (2) with $h\nu_{E2}$ being the single adjustable parameter. The energy sep-

Fig. 3

Fig. 3. Schematic representation of a) the confining potential and b) optical transitions which give rise to magneto-PL spectrum

Fig. 4

Fig. 4. Landau level fan diagram for samples a) 207, b) 200 and c) 199. Dots are the experimental results and solid curves are the best fits obtained by using Eq. (2)

Fig. 5. Dots correspond to the BGR given in Table 1. The solid curve is given by Eq. (1)

aration, $h\nu_{E2}$, yielded by the fit, determines the BGR to be given by

$$\text{BGR} = E_C - V_0 + E2 - h\nu_{E2}. \quad (5)$$

where $E_C = 1.433$ eV [3], and the values V_0 , $E2$ were taken from Table 1 for each sample.

The BGR obtained in this way is shown in Table 1. We can see that the BGR decreases when the superlattice period increases; in other words, as the dimensionality of the electron gas progresses from 3 to 2, the BGR decreases. This behaviour is exactly opposite to our earlier reasoning that in a 2D system a larger BGR should be observed. This apparent contradiction is explained by the type-II character of the superlattice formed by δ -doping a semiconductor periodically: electrons and holes are confined in alternate layers and thus are spatially separated. For a short-period superlattice the electronic structure is 3D, and we expect the experimental BGR to agree with the result of Eq. (1). However, when the doping period d is large, photo-excited holes and electrons will become uncorrelated due to their spatial separation. Our experimental values of BGR can be explained solely by the contributions arising from 3D electrons in the structures. From a self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations for each sample, with the sample parameters taken from [5], we obtained the spatial density of electrons along the axis of the superlattice, $p(z)$. The value of the electron density at mid-distance between δ -layers, i.e. the exact position where the photo-excited holes are localized, is shown in Table 1 for all structures. The BGR as a function of the electron density in the position of the hole is plotted in Fig. 5: the solid curve corresponds to Eq. (1). The agreement with BGR predicted by Eq. (1) is an indication that in periodically δ -doped semiconductors the BGR observed is determined by the amount of three-dimensional (unbound) electrons present in the structure.

Acknowledgement. This work was supported by Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, Grant No. CNPq 306335/88.

References

- [1] A. B. HENRIQUES and L. C. D. GONÇALVES, *Surf. Sci.* **305**, 343 (1994).
- [2] S. SCHMITT-RINK, D. S. CHEMLA, and D. A. B. MILLER, *Adv. Phys.* **39**, 89 (1989).
- [3] D. SCHNEIDER, D. RÜRP, A. PLICHTA, H.-U. GRUBERT, A. SCHLACHETZKI, and K. HANSEN, *Z. Phys. B* **93**, 251 (1994).
- [4] S. DAS SARMMA, R. JALALABERT, and S.-R. YANG, *Phys. Rev. B* **41**, 8288 (1990).
- [5] A. B. HENRIQUES, L. C. D. GONÇALVES, N. F. OLIVEIRA, JR., P. L. SOUZA, and B. YAVICH, *Phys. Rev. B* **55**, 13072 (1997).
- [6] L. C. D. GONÇALVES, A. B. HENRIQUES, P. L. SOUZA, and B. YAVICH, *Semicond. Sci. Technol.*, press.
- [7] A. B. HENRIQUES and L. C. D. GONÇALVES, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 585 (1993).