UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

Contribuições à Física das

Propriedades Eletrônicas das Heteroestruturas Semicondutoras

Tese apresentada ao Instituto de Física da

Universidade de São Paulo para obtenção do título de

Doutor em Ciências

por

Erasmus Assumpção de Andrada e Silva
Erasmus
Erasmus

Erasmus Assumpção de Andrada e Silva

São Paulo

1990

SBI-IFUSP

537.622

A 553c

D

e. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Andrada e Silva, Erasmo Assumpção de
Contribuições à física das propriedades eletrônicas das heteroestruturas semicondutoras. São Paulo, 1990.

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

Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof^o Dr. Ivan Costa da Cunha Lima

Unitermos: 1.Heteroestruturas semicondutoras; 2. Semicondutor dopado; 3.Impureza em poço quântico; 4. Superrede; 5.Propriedades eletrônicas; 6.Massa efetiva renormalizada; 7.Desordem; 8.Subbandas magnéticas.

Para minha esposa Maria Teresa.

Além de tudo o que ela representa para mim (entre outras coisas, muito amor), ela foi também quem mais me apoiou e ajudou na execução desta tese. Neste período, ela inclusive me deu a alegria maior da Carolina, nossa filha.

Índice

	Pag.
Dedicatória	ii
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	vii
Agradecimentos	viii
Resumo	x
Abstract	xii
 1. Introdução	 1
1.1 Heteroestruturas Semicondutoras	1
1.1.1 Poços Quânticos	3
1.1.2 Super-redes	5
1.1.3 Fio Quântico	7
1.2 Poço Quântico Dopado	8
1.3 Super-rede sob Campo Magnético Transversal.....	16
 2. Poço Quântico Fracamente Dopado e Compensado	 20
2.1 Impureza Isolada em Poço Quântico	20
2.2 Compensação e Modelo de Banda Clássica	27
2.3 Simulação Monte Carlo	30
2.4 Densidade de Estados e Coulomb <i>Gap</i>	32
2.5 Distribuição de Carga	40
2.6 Distribuição do Campo Elétrico nos Doadores Neutros	44
 3. Poço Quântico Altamente Dopado	 48
3.1 Modelo <i>Tight-Binding</i> Desordenado	48
3.2 Método de Matsubara e Toyosawa	51

3.3 Densidade de Estados para δ -doping no Poço Quântico	53
3.4 Desordem Diagonal e Não-Diagonal	56
3.5 Banda de Impureza no Fio Quântico	67
4. Quantização Magnética em Super-redes e Massa Efetiva Renormalizada	76
4.1 Campo Magnético Transverso e Tunelamento	76
4.2 Ressonância Ciclotrônica de Tunelamento	79
4.3 Necessidade de ir Além da Teoria de Massa Efetiva de uma Banda	81
4.4 Modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de Quatro Bandas	83
4.5 Massa Efetiva Renormalizada	89
5. Conclusão e Sugestões para Pesquisas Futuras	100
Apêndice A. Simulação Monte Carlo: Algoritmo	102
Apêndice B. Coulomb-Gap na Densidade de Estados	104
Apêndice C. Expansão Diagramática de Matsubara e Toyosawa.	106
Apêndice D. Solução Numérica da Equação de Schrodinger.	110
Referências	116

Lista de Figuras

Figuras	Pag.
1.1- Poço Quântico	4
1.2- Super-rede	6
1.3- Fio Quântico	9
1.4- Ilustração da Formação da Banda de Impureza	11
1.5- Semicondutor Fracamente Dopado - <i>bulk</i> -	12
1.6- Poço Quântico Fracamente Dopado (PQFD)	14
1.7- Órbitas Ciclotrônicas para Super-rede sob Campo Transverso	18
2.1- Energia de ligação para impureza doadora no poço quântico	23
2.2- Ajuste polinomial para $\varepsilon(z_i)$	25
2.3- Densidade de estados (DE) para um PQFD em função da compensação	34
2.4- DE no limite fracamente compensado	35
2.5- Coulomb <i>Gap</i> no poço quântico	37
2.6- Energia de Fermi em função da compensação	38
2.7- DE para um PQFD variando com a largura do poço	39
2.8- DE no limite altamente diluído	41
2.9- Distribuição dos doadores neutros - variação com a compensação	42
2.10- Distribuição dos doadores neutros - variação com a concentração	43
2.11- Distribuição do campo elétrico sobre os doadores neutros - componente z	46
2.12- Distribuição do campo elétrico sobre os doadores neutros - componente paralela à interface	47
3.1- Transformada de Fourier da integral de transferência $V(\vec{R})$	55
3.2- DE para δ - <i>doping</i> no centro de um poço quântico de diferentes larguras	56
3.3- DE para δ - <i>doping</i> entre o centro e a interface de um poço quântico	57
3.4- DE para δ - <i>doping</i> na interface de um poço quântico	58
3.5- Largura da banda de impureza de um δ - <i>doping</i> no poço quântico	59
3.6- DE para diferentes larguras de poço e concentrações de impurezas	61

3.7- Exemplo da deformação da DE em função da posição da camada	64
3.8- Parâmetro η em função de z_i e L	65
3.9- DE para um poço quântico altamente dopado em três aproximações	66
3.10- Energia de ligação para impureza no centro do fio quântico	71
3.11- DE para um fio quântico quadrado em função do lado L	73
3.12- DE para um fio quântico quadrado em função da concentração de impurezas	74
4.1- Potencial efetivo de uma super-rede sob campo magnético transversal forte	78
4.2- Espectro de ressonância ciclotrônica de tunelamento. Super-rede de AlAs/GaAs .	80
4.3- Perfil de potencial de uma super-rede de AlAs/GaAs em várias aproximações	82
4.4- Minibandas X e Γ para uma super-rede de AlAs(10Å)/GaAs(70Å)	85
4.5- Parametrização do modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de quatro bandas	88
4.6- Ilustração da variação do potencial $V_{k_y}(z)$ em função de k_y	91
4.7- Funções envelope - estado fundamental e primeiro excitado	92
4.8- Funções envelope - segundo e terceiro estados excitados	93
4.9- Primeiros 5 níveis magneto-elétrico para $B = 10T$	95
4.10- Níveis magneto-elétricos quando $B = 4T$	96
4.11- Energia de ressonância em função do campo B - teoria e experimento	97
4.12- Energia de ressonância e variação da largura da barreira	99
C1- Diagramas da expansão de Matsubara e Toyosawa	108
D1- Ilustração do modelamento numérico da interface	113

Lista de Tabelas

Tabelas	Pag.
1. Coeficientes do polinômio de ajuste de $\varepsilon(z_i)$	26
2. Parâmetros de um poço quântico dopado	63

Agradecimentos

Agradeço imensamente ao meu orientador e amigo Prof. Ivan C. da Cunha Lima. Trabalhar com o Prof. Ivan tem sido uma valiosa experiência profissional e de vida. Devo a ele um começo de carreira que não poderia ter sido melhor. Agradeço por ter me introduzido nesta fascinante área da Física do Estado Sólido.

Devo agradecer muito também ao Prof. Lu Jeu Sham. Inicialmente pelos inesquecíveis dois anos que passei em seu grupo na Universidade da Califórnia, San Diego, e também pela orientação durante o trabalho do Capítulo 4 realizado em San Diego. A experiência das discussões que tive chance de ter com o Prof. Sham é inestimável. A sua incrível intuição e paixão pela Física continuarão me inspirando por muito tempo.

Gostaria ainda de agradecer:

- aos meus colegas na UCSD: Dr. Yan-Ten Lu, Dr. Saadi Lamari e Dr. Takeshi Uenoyama as inúmeras discussões enriquecedoras que tivemos;
- ao Prof. Sergei Baranovskii uma colaboração e amizade que estimo muito;
- à Maria Teresa Amarante e à Marília P. de Carvalho a revisão da tese;
- aos meus colegas Paulo Emmel, Carlos Eduardo Leal e Paulo Rappl (que "salvou" a minha vida no exterior) as suas contribuições;
- ao Prof. J.R. Leite e todo o Departamento de Matérias e Mecânica do IFUSP a oportunidade de obter meu doutoramento nesta instituição .

Aproveito a oportunidade para lembrar também aqueles que me deram apoio decisivo no começo da minha carreira: Prof. A. Ferreira da Silva, Prof. N. J. Parada, Prof. R. Galvão e Prof. S. R. Salinas.

Por fim, é um prazer agradecer ao CNPq e ao INPE, em particular o Laboratório Associado de Materiais e Sensores, o apoio que viabilizou a execução deste trabalho.

Resumo da Tese

Esta tese compõe-se de contribuições à física das propriedades eletrônicas das heteroestruturas semicondutoras. São investigadas propriedades eletrônicas das duas heteroestruturas básicas: o poço quântico e a super-rede.

Considera-se o poço quântico dopado com impurezas rasas e estudam-se as suas propriedades eletrônicas nos regimes de poço fraco e altamente dopado. No caso de baixa densidade de impurezas é feita uma simulação Monte Carlo. É utilizado um modelo semi-clássico de banda de impureza. A interação elétron-elétron é incluída de forma exata e são calculadas as seguintes propriedades do estado fundamental à temperatura zero: densidade de estados de uma partícula, distribuição de carga, energia de Fermi e distribuição do campo elétrico sobre os doadores neutros, todas em função do grau de compensação, da densidade de impurezas e da largura do poço.

É observada uma grande dependência com a compensação. Os resultados são explicados à luz da competição entre os efeitos de desordem e confinamento. É observada a ocorrência de Coulomb *Gap* característico de sistemas bidimensionais. Mostra-se que a distribuição de carga possui largura e constante de decaimento determinados independentemente pela compensação e pela concentração de impurezas, respectivamente. Tais resultados são importantes para a caracterização de poços quânticos puros.

No limite altamente dopado parte-se de um modelo *tight-binding* desordenado e calcula-se a densidade de estados de uma partícula formada devido ao *overlapping* entre os estados localizados; utiliza-se o método de Matsubara e Toyosawa para a obtenção da média sobre configurações. Discutem-se os efeitos da desordem diagonal introduzida pelo potencial de confinamento os quais são comparados com os da desordem não-diagonal. São apresentados resultados para a densidade de estados em função do grau de confinamento e concentração de impurezas para poços e fios quânticos.

São estudadas as propriedades eletrônicas das super-redes sob campo magnético transversal à direção de crescimento. Mostra-se que esta configuração é ideal para o estudo

das características básicas das super-redes: a estrutura de minibandas e o tunelamento. Calculam-se as sub-bandas de condução utilizando a teoria de massa efetiva de muitas bandas. Introduce-se a idéia de massa efetiva renormalizada para barreiras semicondutoras. Comparam-se os resultados com dados experimentais de ressonância ciclotrônica. A ótima concordância obtida demonstra a grande importância e a utilidade do conceito de massa efetiva renormalizada para barreiras semicondutoras, que é uma maneira nova e simples de lidar com as soluções evanescentes.

Abstract

This thesis is composed of contributions to the theory of electronic properties of semiconductor heterostructures. Electronic properties of the basic two heterostructures (quantum well and superlattice) are investigated.

A quantum well doped with shallow impurities is considered and its electronic properties are studied in both limits: lightly and heavily doped. In the first case a Monte Carlo simulation technique is used. A semiclassical impurity band model is used. The electron-electron interaction is included exactly and properties of the ground state such as the density of single particle states, the charge distribution, the Fermi energy and the electric field distribution on the neutral donors are calculated, all of them as a function of the degree of compensation, the impurity concentration and the width of the well.

A great dependency with the compensation is observed. The results are explained by the competition between the effects of disorder and confinement. The existence of a Coulomb Gap is verified. The charge distribution is shown to have a width and decay rate given by the degree of compensation and impurity concentration, in this order. Such results are important to characterize pure quantum wells.

On the heavily doped limit, a disordered tight-binding model is used and the density of states that is formed by the overlapping of localized states is calculated by using the method of Matsubara and Toyosawa for the configuration average. The diagonal disorder effect introduced by the confinement potential is considered and compared to that of the non-diagonal disorder. Results of the density of states as a function of the degree of confinement and impurity concentration for quantum wells and wires are presented.

The electronic properties of a superlattice under a magnetic field which is transversal to the growth direction are studied. It is shown that this configuration is ideal for the study of the basic characteristics of the superlattices: the subband structure and the tunneling. The

conduction subbands are calculated by using the theory of many bands effective mass. The idea of renormalized effective mass for barriers is introduced. The obtained level spacings are compared with cyclotron resonance experimental data (infrared absorption). The good agreement obtained demonstrates the importance and usefulness of the renormalized effective mass, which is a new and simple way to handle evanescent waves.

Capítulo 1

Introdução

Este capítulo constitui uma introdução às heteroestruturas semicondutoras. Ênfase especial é dada aos problemas do poço quântico dopado e da super-rede sob campo magnético transversal.

1.1 Heteroestruturas Semicondutoras

Heteroestruturas semicondutoras são estruturas formadas superpondo-se camadas de dois semicondutores diferentes. A possibilidade de fabricá-las com fatias de apenas algumas camadas atômicas de largura faz com que essas estruturas sejam essencialmente novos materiais com propriedades que diferem das de ambos os materiais constituintes. O avanço nas técnicas de crescimento eptaxial e a observação de efeitos de baixa dimensionalidade nestas

heteroestruturas foram e continuam sendo os principais responsáveis pelo desenvolvimento desta área da física dos semicondutores.

A técnica de crescimento mais utilizada na fabricação destas heteroestruturas é o MBE (*Molecular-Beam-Epitaxy*). O MBE é uma técnica de evaporação em ultra vácuo. A estrutura é crescida incidindo sobre um substrato quente feixes de átomos provenientes de diferentes câmeras aquecidas que contêm átomos e moléculas dos diferentes materiais (Gossard 1987). Os feixes são ativados e desativados através de um sofisticado sistema de controle que permite crescer a heteroestrutura desejada, com as larguras de camada desejadas. Hoje é possível o crescimento de camada atômica por camada atômica e a fabricação de interfaces quase perfeitas. Os trabalhos sobre heteroestruturas semicondutoras têm se concentrado nas estruturas de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ devido às condições favoráveis de crescimento dessas materias, à diferença quase nula entre seus parâmetros de rede e à estrutura de banda simples que elas apresentam.

A descontinuidade na largura da faixa proibida (*band gap*) em cada interface age como uma barreira de potencial que confina os portadores (elétrons e buracos) no material de menor *gap*. Os estados permitidos formarão um espectro discreto de níveis de energia devido ao efeito de quantização, análogo ao problema de uma partícula em uma caixa estudado em quase todos os livros texto de mecânica quântica. Caso o confinamento seja suficiente para produzir um espaçamento entre os níveis que seja maior que a energia térmica $k_B T$ e, ao mesmo tempo, maior que a largura dos próprios níveis, o movimento dos portadores terá um caráter bidimensional. As primeiras observações de efeitos de baixa dimensionalidade ocorreram na década de 60 em estruturas MOS - metal-óxido-semicondutor - (Ando *et al* 1982), graças aos avanços da tecnologia de semicondutores para aplicação em dispositivos eletrônicos. A bidimensionalidade dos portadores já foi observada em todas as diferentes heteroestruturas semicondutoras. Estes sistemas bidimensionais permitiram a observação experimental de inúmeros fenômenos físicos importantes entre os quais o fenômeno da localização fraca (Bergmann 1984) e o do efeito Hall quantizado (Prange *and* Girvin 1987).

Estes sistemas, além de várias vantagens práticas, têm ainda particular interesse para a física de muitos corpos devido à maior importância que a interação elétron-elétron assume em dimensionalidade reduzida.

1.1.1 Poços Quânticos

O poço quântico consiste em um *sandwich* de dois semicondutores, onde uma camada fina do de menor *gap* se encontra entre duas camadas grossas do de maior *gap* (figura 1.1a).

Os elétrons e os buracos perto do fundo da banda de condução (E_c) e do topo da banda de valência (E_v), respectivamente, determinam a maior parte das propriedades eletrônicas dos poços quânticos. E_c e E_v variam de material para material (figura 1.1b), formando um potencial efetivo para os portadores. Este novo potencial efetivo é a essência das heteroestruturas semicondutoras. Uma extensão da teoria de massa efetiva permite descrever os auto-estados no poço quântico por um produto de uma função de Bloch rapidamente oscilante por uma função envelope que varia suavemente na escala atômica. A função envelope, no caso do poço quântico, deve satisfazer a uma equação de Schrödinger efetiva, com um potencial quadrado como o da figura 1.1b. O movimento é quantizado na direção z de crescimento e livre nas direções perpendiculares. O espectro e a densidade de estados são como na figura 1.1c. Poços quânticos típicos de $100\text{\AA}$ produzem um espaçamento entre os níveis da ordem de 10meV .

Lasers têm sido fabricados à base de poços quânticos desde a década de 70. A densidade de estados quadrada (figura 1.1c) proporciona grandes vantagens para o funcionamento desses *lasers* (Narayanamurti 1984). A frequência do laser é facilmente ajustada variando a composição e a largura do poço. Heterojunções semicondutoras são também muito importantes tecnologicamente. Transistores e outros dispositivos óptico-eletrônicos de alta velocidade de resposta têm sido construídos à base de heterojunções de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Um potencial aproximadamente triangular é formado na interface destas estruturas e ocorre quantização análoga à do poço quântico descrita acima. Esta tese se concentra nos poços

Figura 1.1 - Poço Quântico a) esquema do *sandwich*, b) perfil dos limites de banda - potencial efetivo e c) densidade de estados e relação de dispersão.

quânticos e super-redes, as duas heteroestruturas básicas.

1.1.2 Super-redes

O conceito de super-redes foi introduzido por Esaki e Tsu (1970). Eles previram que tal estrutura apresentaria interessantes propriedades de transporte (vertical). Previram-se condutância negativa e oscilações de Bloch.

Super-redes são estruturas periódicas de poços quânticos com barreiras finas (figuras 1.2 a e b) que permitem a interação entre os poços quânticos vizinhos. Os estados discretos destes últimos, inicialmente degenerados quando isolados, dão origem a bandas e *gaps* de estados conhecidos respectivamente como minibandas e *minigaps*. Dentro da aproximação de massa efetiva, as super-redes são a realização experimental dos modelos de sólidos unidimensionais usados em livros de introdução ao estado sólido para apresentar a idéia de estrutura de bandas de energia. Esses modelos unidimensionais têm a vantagem de apresentar em muitos casos soluções analíticas. A figura 1.2 c mostra a estrutura de minibandas de uma super-rede. É importante notar, no entanto, que não existe *gap* na densidade de estados uma vez que a relação de dispersão da figura 1.2c não leva em conta o movimento paralelo às interfaces. Tal movimento é essencialmente igual ao do caso do poço quântico, exceto por uma diferença na massa efetiva. A super-rede representada na figura 1.2b tem alinhamento de bandas conhecido como alinhamento do tipo I, o *gap* menor encontrando-se totalmente dentro do *gap* maior. Outros tipos de alinhamento como o do tipo II, onde elétrons e buracos se concentram em diferentes materiais, também são possíveis e vêm atraindo atenção crescente nos últimos anos.

Super-rede pode ser definida como uma estrutura que possui além do potencial periódico da rede um potencial periódico em uma direção cujo período seja consideravelmente maior que o parâmetro de rede ¹. A super-rede discutida acima é conhecida como super-rede composicional. É possível fabricar super-redes por dopagem. Neste caso, o potencial

¹Dentro desta definição, o trabalho pioneiro em super-redes foi o de Keldysh (1962). Ali, o potencial periódico em uma dimensão é produzido por ondas sonoras.

Figura 1.2 - Super-rede. a) periodicidade na direção z , b) perfil do potencial efetivo - barreiras finas e c) estrutura de minibandas.

unidimensional é produzido por impurezas ionizadas periodicamente distribuídas. Entre os vários *reviews* já escritos sobre super-redes merecem citação os mais recentes de Silin (1985) e de Döhler (1990).

Os estados eletrônicos nas minibandas são estados estendidos. A condução de banda (por estados de Bloch) é então possível na direção de crescimento. Este transporte é um dos possíveis tipos de transporte vertical ². As oscilações de Bloch associadas a este transporte podem ser compreendidas da seguinte maneira. Suponha que um campo elétrico fraco E seja aplicado na direção de crescimento z . Na hipótese de o campo não induzir transições inter-minibandas, as equações de movimento semiclássicas podem ser usadas (Ashcroft and Mermin 1976). A velocidade vertical do elétron na minibanda n será dada por:

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(k_z)}{\partial k_z}, \quad (1.1)$$

onde $\varepsilon_n(k_z)$ representa a estrutura de minibandas esquematizada na figura 1.3c. Uma vez que $\varepsilon_n(k_z)$ é periódico em k_z com período igual a $2\pi/P$, a velocidade v_z será periódica no tempo com frequência $\omega = eEP/2\pi\hbar$, dado que $k_z(t) = k_z(0) - eEt/\hbar$. As oscilações de Bloch ainda não foram diretamente observadas, mas a estrutura de minibandas passou recentemente a ser observada, principalmente através de experimentos com campo magnético paralelo às interfaces (seção 1.3).

1.1.3 Fio Quântico

Combinando MBE com outras técnicas tais como *etching* químico e implantação de íons, estão sendo fabricados sistemas em que os portadores são confinados não só em uma, mas em duas direções (Stern 1990). Em confinamentos fortes o suficiente, os portadores se comportam como um gás de partículas em uma dimensão. Estes sistemas são conhecidos de forma geral como fios quânticos (*quantum wires*). Um exemplo idealizado de um fio

²Os outros tipos de transporte vertical, i.e., na direção de crescimento, são: transporte ativado e tunelamento resonante. Um bom *review* do assunto foi publicado por Capasso et al (1986).

quântico está esquematizado na figura 1.3, onde é mostrada a seção transversal de um fio quadrado. Elétrons e buracos no $GaAs$ são confinados no plano xy pela barreira de $AlGaAs$ e livres para se movimentar na direção z . O potencial de confinamento nos dispositivos reais pode variar bastante e, em geral, em uma das direções ele é descrito pelo termo harmônico da expansão ao redor do mínimo de potencial.

A idéia da fabricação destes sistemas surgiu em 1980 com Sakaki. Em seu artigo original, ele sugeria a fabricação de poços quânticos ultrafinos como sistemas de alta mobilidade. Sakaki mostrou que a mobilidade dos portadores em fios quânticos, limitada por espalhamento por impurezas, aumenta exponencialmente com a distância das impurezas remotas (fora do poço) ao centro do fio. Depois disso, muita atenção foi dada ao problema de impurezas em fios quânticos.

As impurezas não controladas que sempre ocorrem dentro do fio determinam muitas das propriedades ópticas e eletrônicas destes sistemas em baixas temperaturas. Vários cálculos independentes mostram que a energia de ligação de impurezas rasas nesses sistemas quase-unidimensionais é duas vezes maior que a similar em sistemas quase-bidimensionais. No final do Capítulo 3 serão apresentados cálculos da densidade de estados ligados a impurezas rasas em fio quântico em função das dimensões do fio e da concentração de impurezas. É feita também uma discussão do cálculo do estado ligado a uma impureza isolada dentro do fio.

1.2 Poço Quântico Dopado

Tanto no fio como no poço quântico encontram-se estados dos dois tipos de impurezas rasas: aceitadoras e doadoras. Para cada impureza doadora, dentro ou fora do poço, existe um estado de energia logo abaixo da primeira sub-banda. A energia do estado de impureza depende da posição dela ao longo da direção de crescimento e da forma do poço (i.e., do potencial de confinamento). As propriedades óptico-eletrônicas dos poços quânticos a baixas temperaturas são, como no *bulk*, determinadas pela estrutura da banda destes

Figura 1.3 - Esquema de um fio quântico quadrado.

estados de impureza. As impurezas são distribuídas aleatoriamente no espaço. O problema da estrutura eletrônica dos semicondutores dopados é um problema clássico da física dos sistemas desordenados. Uma característica básica destes sistemas é a sua densidade de estados, que pode ser determinada experimentalmente através de medidas de condutividade ativada, fotocondutividade e absorção no infravermelho em baixas temperaturas.

Por mais pura que seja a amostra, existem sempre impurezas residuais dos dois tipos. Mesmo neste limite de baixa concentração de impurezas, o potencial coulombiano de longo alcance das impurezas compensadas não permite que a interação entre as impurezas seja desprezada, o que faz com que o cálculo da densidade de estados seja um problema não trivial de muitos corpos. A concentração das impurezas residuais não desejadas é, em geral, tal que a distância média entre as impurezas é bem maior que o raio de Bohr efetivo. Diz-se neste caso que o poço está fracamente dopado.

Para a fabricação de certos dispositivos, é necessário dopar intencionalmente certa região da heteroestrutura com uma alta concentração de impurezas. Suponha que a dopagem seja feita em uma camada bem fina (δ — *doping*) que permita considerar todas as impurezas com a mesma coordenada z_i ao longo da direção de crescimento. Neste caso, uma banda de estados de impurezas se forma mesmo sem compensação, devido apenas ao *overlapping* (sobreposição) das funções de onda de elétrons ligados às impurezas vizinhas como esquematizado na figura 1.4.

A fim de deixar mais claro o papel da compensação no regime de baixa dopagem, é interessante analisar o caso do *bulk*. Um semicondutor fracamente dopado e não compensado à temperatura zero possui todas as suas impurezas neutras. Os estados ligados a diferentes impurezas são degenerados. A densidade de estados do tipo delta e a energia de Fermi são, neste caso, como esquematizado na figura 1.5a. A presença inevitável de impurezas minoritárias altera substancialmente este quadro.

Quando há compensação, são encontradas à temperatura zero todas as impurezas minoritárias ionizadas (impurezas aceitadoras na figura 1.5). O mesmo número de impurezas

BAIXA CONCENTRAÇÃO

ALTA CONCENTRAÇÃO

Figura 1.4 - Ilustração da formação de uma banda de impureza devido ao *overlapping* entre as funções de onda localizadas.

a) NÃO COMPENSADO

b) COMPENSADO

- + DOADOR IONIZADO
- o DOADOR NEUTRO
- ACEITADOR IONIZADO

Figura 1.5 - Semicondutor Fracamente Dopado (*bulk*). a) sem compensação, densidade de estados de impureza do tipo- δ e b) compensado, banda com largura finita devido ao potencial aleatório das impurezas ionizadas.

majoritárias também se encontra ionizado e o restante neutro. O potencial coulombiano das impurezas ionizadas é desordenado devido à posição aleatória das impurezas. A degenerescência dos estados ligados é então quebrada, dando lugar a uma banda de estados de impureza ou, simplesmente, a uma banda de impureza. A configuração de menor energia à temperatura zero apresenta correlação na posição das impurezas ionizadas. Esta correlação e, por conseqüência, a estrutura da banda de impureza, são altamente dependentes do grau de compensação. Quando k é pequeno, por exemplo, as impurezas ionizadas tendem a formar dipolos, i.e., ocorrência de doadores e aceitadores ionizados próximos. Os limites de baixa e alta compensação podem ser tratados aproximadamente com métodos analíticos devido à existência de um parâmetro pequeno em cada um destes limites. O estado de um elétron ligado depende da posição de todos os outros elétrons. Para cada configuração das impurezas tem-se um problema de muitos corpos. O método de simulação Monte Carlo é o único capaz de resolver o problema da estrutura da banda de impureza (densidade de estados, energia de Fermi, distribuição de carga, etc.) para qualquer grau de compensação. Praticamente toda a física dos semicondutores fracamente dopados e compensados foi desenvolvida pelo grupo de Leningrado e está descrita em detalhes no livro dos professores Shklovskii e Efros (1984). A teoria do poço quântico fracamente dopado (Capítulo 2) tem como base os resultados do grupo soviético.

Em relação ao semicondutor dopado descrito acima, o poço quântico fracamente dopado apresenta uma diferença principal, que é a dependência da energia do estado ligado com a posição ao longo da direção de crescimento. Isto se dá devido à quebra de simetria de translação na direção de crescimento. Portanto, os estados de impureza num poço fracamente dopado formam uma banda de impureza mesmo sem compensação. A figura 1.6 mostra o tipo de dependência da energia de ligação com a posição da impureza dentro do poço, bem como a forma da densidade de estados da banda de impureza neste limite de baixa concentração e sem compensação. O elétron é mais ligado à impureza no centro do poço. A largura de banda, neste caso, depende exclusivamente das dimensões e da

POÇO QUÂNTICO NÃO-COMPENSADO ($T = 0$)

Figura 1.6 - Esquema dos níveis de energia e densidade de estados de um poço quântico fracamente dopado e não-compensado. Repare que a energia de ligação é maior para impurezas no centro do poço. Devido a este máximo a densidade de estados apresenta um pico para esta energia.

composição do poço, independe da concentração de impurezas. As perguntas que se fazem agora são: Qual o efeito da compensação no caso do poço quântico? Como a dispersão em energia causada por ela se compara com a largura de banda discutida acima?

No Capítulo 2 apresenta-se um estudo completo da estrutura da banda de impureza de poços quânticos fracamente dopados e compensados via simulação Monte Carlo. São calculadas a densidade de estados, a energia de Fermi, a distribuição de cargas e a distribuição do campo elétrico sobre os doadores neutros em função da largura do poço de GaAs, do grau de compensação e da concentração de impurezas. Entre outros resultados, mostra-se que uma competição entre os efeitos de confinamento e desordem determinam as principais características da banda de impureza. Comprova-se a existência do Coulomb *Gap* na densidade de estados. Mostra-se que para poços de largura menor que $400\text{\AA}$, este *gap* é linear, característico de sistemas bidimensionais e que a distribuição de carga calculada nesta tese é útil na determinação experimental da concentração de impurezas e do grau de compensação. O modelo usado foi o da banda clássica e a interação elétron-elétron é tratada exatamente dentro do limite de estados localizados.

Quando o *overlap* das funções de onda não é desprezível, a formação da banda de impureza, como já foi dito, se dá de maneira diversa. No Capítulo 3 faz-se uma contribuição à física dos poços quânticos altamente dopados estudando a formação da banda a partir dos estados localizados através de um modelo de ligações fortes (*tight-binding*) desordenado. Calcula-se a densidade de estados na aproximação de um elétron para o caso de δ -doping dentro do poço. A média sobre as configurações é feita de acordo com o método de expansão diagramática de Matsubara e Toyosawa (1961). Apresentam-se resultados em função da largura do poço, da posição da camada dopada e da concentração de impurezas; estuda-se também o caso de camadas mais largas e comparam-se os efeitos das duas desordens: diagonal e fora da diagonal. A primeira está relacionada com a distribuição das impurezas ao longo da direção de crescimento e a segunda com a distribuição no plano da interface. Não são considerados os efeitos de correlação, compensação e hibridização com a banda de

condução.

1.3 Super-rede sob Campo Magnético Transversal

Campos externos são usados como ferramenta na investigação das propriedades eletrônicas dos semicondutores. A ressonância ciclotrônica, por exemplo, é um método clássico para determinar o valor da massa efetiva. A aplicação de campos magnéticos externos tem sido em particular muito útil no desenvolvimento da física das heteroestruturas semicondutoras. Com o campo paralelo à direção de crescimento é possível monitorar a ocupação das sub-bandas através das oscilações de Schubnikov-de Haas. Campos fortes podem, no entanto, alterar drasticamente a estrutura eletrônica do sistema e criar um novo problema. O Efeito Hall Quantizado é um exemplo da nova física das heteroestruturas semicondutoras sob campos magnéticos fortes. Muito trabalho foi e continua sendo feito nesta linha (ver, por exemplo, os *proceedings* das conferências bianuais *on The Application of High Magnetic Fields in the Physics of Semiconductors*).

Campos magnéticos fortes aplicados transversalmente à direção de crescimento têm sido usados para investigar as propriedades das super-redes. Através de espectros magneto-ópticos, J.C.Maan e colaboradores foram capazes de medir a largura das minibandas (Maan 1986, Belle *et al* 1985). S.J. Allen e colaboradores na Bellcore investigaram o problema da massa de tunelamento usando técnicas de ressonância ciclotrônica (Duffield *et al* 1986b, 1987, 1988). Nesta tese consideram-se o problema do cálculo das sub-bandas de condução e a interpretação dos resultados da experiência de ressonância ciclotrônica.

Esta configuração de campos cruzados, ou seja, campo magnético perpendicular ao campo elétrico, é peculiar. Ao contrário do caso de campos paralelos, as quantizações elétrica e magnética não são independentes. Os estados eletrônicos são estados híbridos e a relação de dispersão apresenta uma estrutura mais complicada. Foram observadas oscilações do tipo Schubnikov-de Haas em heterojunções (Doezema *et al* 1980) e δ -dopings (Zrenner *et al* 1986) muito menos regulares do que as oscilações usuais com campo paralelo

à direção de crescimento.

No caso da super-rede o fato de ser possível obter comprimentos magnéticos (raio da órbita ciclotrônica) comparáveis ao período da super-rede permite que sejam investigadas questões tais como: probabilidade e massa efetiva de tunelamento (Duffield *et al* 1987), localização (Sokoloff 1985) e estados magnéticos em potenciais periódicos (Harper 1967, Hofstadter 1976), entre outras (Allen *et al* 1987). Para ter uma idéia mais realista, estão esquematizadas na figura 1.7 órbitas ciclotrônicas correspondentes aos diferentes valores do campo magnético B sobre uma super-rede de período igual a $100\text{\AA}$.

A imagem clássica de órbitas ciclotrônicas é bastante útil na interpretação dos dados experimentais. No caso da ressonância ciclotrônica por exemplo, pode-se ver, com ajuda da figura 1.7, que quando o campo for pequeno a órbita englobará várias células unitárias e a energia do movimento (estado) do elétron não deverá depender apreciavelmente da posição da órbita ao longo da direção de crescimento. Neste caso, a super-rede será vista pelo elétron apenas como um novo meio homogêneo. Os níveis de energia serão aproximadamente degenerados como os níveis de Landau. A ressonância deverá apresentar um pico estreito cuja posição em energia cresce linearmente com a intensidade do campo B . Quando o campo é intenso, a situação é bastante diferente. A energia dos estados, neste caso, depende claramente da posição da órbita ciclotrônica correspondente. Na figura 1.7 estão esquematizadas duas órbitas em posições diferentes; uma centrada no poço e outra na barreira. O pico de ressonância sofrerá um alargamento. A posição do pico deverá saturar quando o tunelamento começar a ser o fator determinante à medida que o campo aumenta (será visto no Capítulo 4 que o pico é dominado pelos estados ligados à barreira). O espectro medido por Brozak *et al* (1990) apresenta exatamente este comportamento.

Quando se tenta explicar quantitativamente os dados experimentais, surge maior dificuldade no limite de campos intensos. É obviamente necessário lançar mão de um tratamento puramente quântico neste caso. A abrangência do problema, i.e., a idéia de analisar a questão para todo o espectro de valores do campo e de períodos da super-rede, sugere

ÓRBITAS CICLOTRÔNICAS

Figura 1.7 - Esquema comparativo das órbitas ciclotrônicas para uma super-rede sob campo transversal. As áreas hachuradas correspondem às barreiras. Quando o campo é pequeno ($\sim 4\text{T}$) o elétron tunela várias vezes antes de completar uma volta.

fortemente o uso da teoria de massa efetiva. No entanto, como o principal fenômeno (pelo menos neste limite de campos intensos) é o tunelamento, será necessário especial cuidado na descrição das soluções evanescentes na barreira. No Capítulo 4 parte-se de um modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de quatro bandas para descrever os semicondutores e reduz-se o problema do cálculo das sub-bandas de condução à solução de uma equação de Schrödinger unidimensional efetiva com uma massa efetiva renormalizada na barreira. A massa é renormalizada pela interação com a banda de valência. No caso de super-redes de *AlAs/GaAs* a massa efetiva do elétron ligado ao mínimo Γ na barreira de *AlAs* é reduzida de 35% em relação à do *bulk*. Ao contrário de outros cálculos mais simples (Capítulo 4), o modelo proposto reproduz os resultados experimentais sem nenhum parâmetro de ajuste. A introdução do conceito de massa renormalizada para barreiras semicondutoras é importante não só na área de transporte vertical mas também para a engenharia de dispositivos. O resultado é simples e geral e deve ser de grande utilidade.

Capítulo 2

Poço Quântico Fracamente Dopado e Compensado

Desenvolve-se e analisa-se neste Capítulo um modelo teórico para descrever os poços quânticos fracamente dopados e compensados (de Andrada e Silva *and* da Cunha Lima 1989a,b).

2.1 Impureza Isolada em Poço Quântico

Discute-se nesta seção o problema do cálculo do estado de um elétron ligado a uma impureza doadora em um poço quântico. Os resultados deste cálculo entram na base dos métodos que são usados para o estudo da estrutura da banda de impureza em ambos os limites: de poço fraco e altamente dopado. No primeiro caso, o *overlap* entre as funções de onda de elétrons ligados a diferentes impurezas pode ser desprezado e a solução do problema

da impureza isolada será importante para fornecer os níveis de energia dependentes da posição da impureza. Por outro lado, no limite de altas densidades de impurezas, as funções de onda do elétron ligado a uma impureza isolada formarão o conjunto de estados base do modelo *tight-binding* a ser adotado. Em ambos os casos, é através do problema da impureza isolada que a informação sobre as características do poço (composição, tamanho, etc.) entra no cálculo da banda de impureza.

Interessam aqui os estados ligados que ocorrem logo abaixo da primeira sub-banda. A energia de ligação destes estados ($\sim 10\text{meV}$) é em geral mais de uma ordem de grandeza menor que a barreira de potencial que o elétron sente na interface ($\sim 300\text{meV}$ para um poço de AsGaAl/AsGa). Pode-se, em primeira aproximação, considerar uma barreira infinita nas interfaces. Com esta simplificação e considerando uma banda de condução parabólica e isotrópica, a hamiltoniana efetiva toma a seguinte forma:

$$H = \frac{P^2}{2m^*} - \frac{e^2}{K\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} + V(z) , \quad (2.1)$$

onde m^* é a massa efetiva, K é a constante dielétrica, z_i é a coordenada z da impureza, $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a posição do elétron no plano das interfaces e

$$V(z) = \begin{cases} \infty & ; \quad |z| \geq L/2 \\ 0 & ; \quad |z| < L/2 \end{cases} \quad (2.2)$$

é o potencial de confinamento, sendo L a largura do poço. A origem das coordenadas corresponde à posição da impureza no plano xy e ao centro do poço na direção de crescimento z . A hamiltoniana é não separável e não apresenta solução analítica exata. Um método eficiente para a determinação do estado fundamental é o método variacional. Seguindo Bastard (1981) escolhe-se a seguinte família de funções:

$$\psi_\lambda(\vec{r}) = \begin{cases} N \cos(k_1 z) e^{-\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}/\lambda} & ; \quad |z| < L/2 \\ 0 & ; \quad |z| \geq L/2, \end{cases} \quad (2.3)$$

onde λ é o parâmetro variacional, N é o fator de normalização e $k_1 = \pi/L$ é o vetor de onda correspondente à primeira sub-banda. A energia do estado fundamental (aproximada pelo seu limite superior) é dada pelo mínimo da função $\varepsilon(\lambda) = \langle \psi_\lambda | H | \psi_\lambda \rangle$, que pode ser facilmente calculada, obtendo-se

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^* \lambda^2} - \frac{e^2 \pi N^2 \lambda}{2K} \left[1 + \frac{\cos(2k_1 z_i)}{1 + k_1^2 \lambda^2} - \frac{k_1^2 \lambda^2}{1 + k_1^2 \lambda^2} e^{-L/\lambda} \cosh(2z_i/\lambda) \right] \quad (2.4)$$

A energia dependerá da coordenada z_i da impureza, da largura do poço L e do material do poço através de m^* e K . A energia de ligação é dada por:

$$E_B = E_0 - \varepsilon = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*} - \varepsilon \quad (2.5)$$

Para cada valor de z_i e L , minimiza-se numericamente com alta precisão $\varepsilon(\lambda)$, dada pela equação (2.4), e obtém-se a energia de ligação através da equação (2.5). A figura 2.1 resume os resultados. Observa-se que a energia de ligação diminui quando a impureza se desloca do centro do poço em direção à interface. A função de onda do elétron ligado a uma impureza na interface é nula sobre a impureza devido à barreira de potencial, diminuindo a sua energia de ligação. Esta última também diminui com o aumento da largura do poço. O limite de $L = 0$ corresponde ao caso bidimensional com $E_B = 4Ry^*$ e o de $L = \infty$ (para impurezas no centro), ao caso tridimensional com $E_B = 1Ry^*$. Todos estes resultados estão em acordo qualitativo com as observações experimentais (Shanabrook 1986). Entre outros efeitos que devem ser incorporados para uma comparação mais quantitativa com a experiência estão a interação entre impurezas e a desordem, ambas abordadas nesta tese.

A dependência da energia do estado ligado com a coordenada z_i é muito bem descrita por um polinômio de quarta ordem do tipo :

$$E_L(z_i) = a_L z_i^4 + b_L z_i^2 \quad (2.6)$$

Os coeficientes a_L e b_L podem ser escolhidos de forma que os resultados numéricos da

Figura 2.1 - Energia de ligação de um doador em um poço quântico (Fonte: Bastard 1981).

minimização sejam reproduzidos pela expressão (2.6) com erros de no máximo 1% dentro do intervalo de valores de L de interesse experimental. A figura 2.2 mostra como a curva ajustada se compara com o resultado "exato" obtido pela minimização da equação (2.4) para duas larguras de poço. Na tabela 1 apresentam-se os valores dos coeficientes obtidos no ajuste. A origem das energias (de acordo com a equação (2.6)) corresponde, para qualquer valor de L , à energia do estado ligado a uma impureza no centro do poço. Esta expressão analítica para a energia em função de z_i será bastante útil, pois permitirá um rápido acesso às energias $\varepsilon(z_i)$ usadas durante a simulação Monte Carlo, que será responsável por uma diminuição considerável do tempo de processamento.

Vários refinamentos são possíveis no modelo de Bastard exposto acima. Inicialmente podem-se incluir os efeitos da barreira finita tanto em altura (Mailhiot *et al* 1982) como em espessura (Chaudhuri 1983, Lane and Greene 1986). Neste caso, devem ser levadas em consideração as diferenças na massa efetiva e na constante dielétrica dos diferentes materiais. Ocorrem também correções de não parabolicidade (Chaudhuri and Bajaj 1984), de renormalização da massa efetiva devido à interação elétron-fônon (Mason and Das Sarma 1986), da dependência espacial da constante dielétrica (Oliveira and Falicov 1986) e do potencial macroscópico das impurezas ionizadas (Colchesqui *et al* 1989). Todos estes efeitos, no entanto, representam correções não maiores do que 10%, exceto para poços muito finos ($L < 50\text{\AA}$). O modelo de Bastard é obviamente incorreto no limite de poços estreitos uma vez que ele apresenta, neste limite, uma energia de ligação que tende à do caso bidimensional e não ao valor esperado, i.e., ao valor da energia de ligação de uma impureza no material da barreira. Cálculos mais realistas mostram um máximo na energia de ligação à medida que L diminui. Além de pequenas, parte destas correções se cancelam. Enquanto, por exemplo, a inclusão de uma barreira de altura finita diminui a energia de ligação, a interação elétron-fônon a aumenta.

Uma vez que se está interessado na estrutura da banda de impureza de poços com $L > 100\text{\AA}$, que é ainda mais insensível a estas pequenas correções, usa-se aqui a solução

Figura 2.2 - Comparação entre o ajuste da equação (2.6) e a solução variacional - minimização da expressão (2.4).

Tabela 1 - Coeficientes do ajuste polinomial para a energia do estado ligado

	$L=1$	2	3	4	(a_0^*)
a	-14.26	-0.788	-0.128	-0.030	
b	7.506	1.706	0.676	0.336	

variacional de Bastard. Além de tudo, ela fornece uma função de onda analítica, o que facilita e deixa mais transparente os cálculos da banda de impureza do poço altamente dopado (Capítulo 3).

2.2 Compensação e Modelo de Banda Clássica

Começa aqui o estudo sobre os poços quânticos fracamente dopados (PQFD). Nos PQFDs a distância média entre as impurezas é muito maior que a constante de decaimento da função de onda do elétron localizado ao redor da impureza. Neste caso, se está no lado isolante e bem longe da transição metal-não-metal. Neste limite, a compensação é responsável por ambos os ingredientes básicos de um sistema eletrônico desordenado: pela interação elétron-elétron e pela variação da desordem. Com a presença de impurezas ionizadas devido à compensação, os elétrons podem se movimentar de impureza em impureza, emitindo ou absorvendo fônons. A interação entre eles passa a fazer efeito. O potencial dessas impurezas é suave quando a compensação é pequena e flutua crescentemente com o aumento da compensação.

A densidade de estados de impurezas do PQFD sem compensação possui, como já foi visto, uma largura de banda e uma estrutura de dois picos nos seus extremos de energia em vez da estrutura de tipo δ do *bulk* fracamente dopado. A largura de banda neste regime é da ordem de $1Ry^*$ ($\simeq 5,3meV$ para um poço de *GaAs* usando $K = 13.1$ e $m^* = 0.067m_0$) quando $L \sim 1a^*$. Ela aumenta com a diminuição de L e é independente da concentração de impurezas. Quando existe compensação o potencial coulombiano aleatório das impurezas ionizadas funciona como um outro mecanismo de dispersão de energia. Tipicamente esta interação coulombiana envolve energias da ordem de $2\sqrt{n_d}Ry^*$, onde n_d é a densidade superficial de doadores dada em unidades atômicas (número de impurezas por raio de Bohr efetivo quadrado, a^{*-2}). Para $n_d = 10^{10}cm^{-2}$, por exemplo, esta energia é $\sim 0,2Ry^*$. Por outro lado, a compensação também permite o rearranjo de cargas. Os doadores neutros

tendem a se acumular ao redor do centro do poço a fim de minimizar a energia, o que aumenta a energia de interação coulombiana. A competição entre os efeitos de compensação e de confinamento determina boa parte da estrutura da banda de impureza dos PQFDs e compensados.

O modelo utilizado aqui para descrever o PQFD é uma extensão do modelo de banda clássica desenvolvido para o caso do *bulk* (Efros *et al* 1979). Admite-se inicialmente que os estados eletrônicos ligados às N impurezas doadoras e às kN aceitadoras são todos localizados. São considerados poços do tipo n ; portanto, k variará de 0 a 1 e dará o grau de compensação do sistema. Admite-se também que a temperatura seja baixa o suficiente para que a ocupação dupla de uma mesma impureza possa ser desprezada e para que todas as impurezas aceitadoras e o mesmo número de doadoras estejam ionizadas. Considera-se as impurezas afastadas umas das outras o suficiente para poder desprezar o *overlapping* entre as funções de onda localizadas em impurezas vizinhas. Despreza-se também a variação do potencial coulombiano das impurezas ionizadas na região em que a função de onda é apreciável. Desse modo, pode-se tratar o sistema como composto de cargas pontuais. A estrutura da função de onda dos estados ligados não se altera e não entra explicitamente no problema ¹. Neste caso, a energia em unidades atômicas de um elétron ligado à impureza i localizada na posição $\vec{r}_i$ é dada por:

$$E_i = - \sum_{j(\neq i)}^N \frac{2(1 - n_j)}{r_{ij}} + \sum_{\nu=1}^{kN} \frac{2}{r_{i\nu}} + \varepsilon_L(z_i) , \quad (2.7)$$

onde r_{ij} é a distância entre os doadores i e j , e $r_{i\nu}$ é a distância entre o doador i e o aceitador ν . O primeiro termo representa a interação do elétron com os doadores ionizados, n_i é igual a 0 ou 1 caso o doador i esteja desocupado (ionizado) ou ocupado (neutro), respectivamente. O segundo termo corresponde à interação do elétron com os aceitadores. Existe uma componente quântica no modelo que aparece no último termo e corresponde à energia do

¹Para uma justificativa detalhada do modelo de banda clássica, ver Efros *and* Shclovskii (1985).

estado ligado (equação (2.4)) discutida na seção anterior. Por isto, este modelo é chamado de banda semiclássica de impureza (de Andrada e Silva *and* da Cunha Lima 1989b).

Quando não há compensação $k = 0$ e $n_j = 1$ qualquer que seja j . Neste limite, a equação (2.7) se reduz ao caso de impurazas isoladas com energia $E_i = \varepsilon_L(z_i)$.

É importante reparar que no regime de estados completamente localizados e sem dupla ocupação a interação elétron-elétron está sendo considerada exatamente na equação (2.7). Observe que a energia de um elétron depende da posição de todos os outros.

A solução do estado fundamental consiste na obtenção da distribuição dos $(1 - k)N$ elétrons sobre os N doadores que minimiza a energia total do sistema. Esta energia é simplesmente a soma das energia de todos os elétrons, isto é

$$E = \sum_{i \neq j} \frac{(1 - n_i)(1 - n_j)}{r_{ij}} - 2 \sum_{i, \nu} \frac{1 - n_i}{r_{i\nu}} + \sum_i n_i E_L(z_i) \quad . \quad (2.8)$$

Com tal distribuição, i.e., resolvendo o problema, podem-se calcular a densidade de estados de uma partícula, a energia de Fermi, etc. É importante notar que as distâncias r_{ij} e $r_{i\nu}$ são determinadas por uma configuração microscópica de impurezas distribuídas aleatoriamente. As propriedades macroscópicas devem ser obtidas através de uma média sobre todas as configurações.

É fácil ver a complexidade do problema. Mesmo sem o último termo, como no caso do *bulk*, o problema tem solução analítica aproximada apenas nos limites de compensação bem baixa ($k \ll 1$) ou bem alta ($(1 - k) \ll 1$)². Resolve-se a seguir o problema usando um método de simulação Monte Carlo que é o único método capaz de tratar o problema em todo o intervalo de compensações (Shklovskii *and* Efros 1984).

²Vale mencionar aqui o tratamento analítico de Emmel *et al* (1989) para o PQFD e fracamente compensado. No entanto, a conclusão a que se chegou foi que tal tratamento é ainda menos eficiente no caso do poço quântico devido aos efeitos de confinamento.

2.3 Simulação Monte Carlo

A simulação Monte Carlo começa com a distribuição aleatória das N impurezas doadoras e kN aceitadoras dentro de uma caixa retangular de altura L igual à largura do poço e base quadrada de área $A = N/n_d$. Desse modo, fixada a densidade superficial de doadores n_d , ao variar o número N de impurezas utilizadas na simulação, varia-se o tamanho da amostra. As impurezas são distribuídas utilizando um gerador de números aleatórios. São geradas coordenadas para cada impureza com probabilidade uniforme nos intervalos $0 < x, y < \sqrt{A}$ e $0 < z < L$. Deve-se ter sempre $\sqrt{A} \gg L$ grande o suficiente para evitar efeitos de tamanho finito (ao longo do plano da interface o sistema possui, como no *bulk*, simetria de translação e os efeitos de borda devem ser desprezíveis). No caso típico de $n_d = 10^{10} \text{cm}^{-2}$ e $L = 100 \text{\AA}$ obtém-se $\sqrt{A} = 200L$ para $N = 400$. Voltar-se-á a falar sobre os efeitos de borda mais adiante. O PQFD e compensado é portanto caracterizado por três parâmetros: n_d , k e L .

Para determinar a distribuição sobre os doadores dos $(1-k)N$ elétrons não-compensados que minimiza a energia total do sistema, segue-se o método introduzido pelo grupo do Instituto A.F. Ioffe em Leningrado no fim do anos setenta (Baranovskii *et al* 1979). O método foi originalmente proposto para investigar a ocorrência do Coulomb *Gap* na densidade de estados. Depois disso ele vem sendo amplamente utilizado por diversos grupos para o cálculo de várias propriedades ópticas e eletrônicas de sistemas desordenados com estados localizados (Grunewald *et al* 1982, Heain *et al* 1982, Davies *et al* 1984, Kogan *et al* 1981, Vignale 1987, Hadley *et al* 1988). O algoritmo já foi muito bem descrito em várias oportunidades na literatura (Efros and Shklovskii 1984, Davies *et al* 1984). Mesmo assim, é apresentada no Apêndice 1 a estrutura do programa.

A principal característica do método é fornecer como resultado pseudo-estados fundamentais, que são estados cuja energia aumenta com qualquer transição de um elétron. O verdadeiro estado fundamental é estável em relação a transições simultâneas de qualquer

número de elétrons. O pseudo-estado fundamental é em geral diferente para diferentes distribuições iniciais dos elétrons. Um estudo intensivo da distribuição de energias desses estados resultou na identificação do verdadeiro estado fundamental (Efros *and* Shklovskii 1984), mas o resultado importante foi o de que a densidade de estados encontrada, tirando uma média sobre os verdadeiros estados fundamentais de diferentes configurações de impurezas, revelou-se igual à mesma média sobre os primeiros pseudo-estados encontrados (i.e., pseudo-estados de uma distribuição inicial aleatória dos elétrons sobre os doadores). O resultado é muito importante na prática, uma vez que a busca pelo verdadeiro estado fundamental consome um tempo enorme de computação. Os resultados apresentados nesta tese são todos obtidos através de médias sobre pseudo-estados fundamentais. Este é o procedimento que os vários grupos na área têm adotado. Acredita-se também que estes pseudo-estados fundamentais possam ser os de interesse físico (Davies *et al* 1984). Foi utilizado neste trabalho N máximo igual a 800 para simular sistemas com $k = 0,01; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7$ e $0,9$. A largura do poço foi variada no intervalo de $L = 1$ a $4a^*$ ($a^* \simeq 98\text{\AA}$ para o *GaAs*). Foram usadas as seguintes densidades: $n_d = 10^8$ e 10^{10} cm^{-2} . Neste caso, a distância média entre as impurezas é igual a 100 e 10 vezes maior que a_{GaAs}^* , respectivamente. $\sqrt{A}$ é neste intervalo bem maior que L e a fração de impurezas perto da borda é bem menor que no caso do *bulk*. Considerando os resultados do *bulk*, pode-se concluir que os efeitos de borda para $N = 800$ podem ser desprezados também no caso do poço quântico. De fato, os resultados obtidos praticamente não se alteram quando N passa de 400 para 800. A eliminação dos efeitos de borda pode também ser feita com o uso de condições periódicas de contorno (Davies *et al* 1984). Os resultados a ser apresentados nas próximas seções são todos de médias sobre 30 configurações, com $N = 800$. As flutuações estatísticas da média sobre 30 configurações já são pequenas o suficiente para ser desprezadas.

2.4 Densidade de Estados e Coulomb-Gap

Uma vez encontrado o estado fundamental, ou seja, o conjunto dos números de ocupação $\{n_i\}$ que minimiza a energia total, podem-se calcular várias propriedades do sistema. Começa-se aqui com a densidade de estados (DE) de um elétron. Esta DE é aquela para adicionar ou retirar um elétron sem permitir o relaxamento do sistema. Tal DE é construída contando o número de estados por intervalo de energia (as energias são dadas pela expressão (2.7)) e fazendo uma média sobre os resultados correspondentes às diferentes configurações de impurezas.

São possíveis dois tipos de média. A média simples, aquela em que simplesmente somam-se os histogramas e divide-se o resultado pelo número de configurações, e a média conhecida como média- E_F (μ -average). Esta última consiste em somar os histogramas após o alinhamento das energias de Fermi, que são em geral diferentes para diferentes configurações. De acordo com os resultados do *bulk*, obtiveram-se também densidades de estado que, longe da energia de Fermi, são independentes do tipo da média. Devido à flutuação da energia de Fermi, a média simples não permite a análise da estrutura da DE ao redor de E_F . Para tal é imperativo o uso da média E_F .

Os histogramas de contagem do número de estados são compostos de 50 intervalos de energia que cobrem todo o espectro, bem como de subdivisões vinte vezes mais finas usadas na média- E_F em torno da energia de Fermi. Estes valores foram escolhidos para obter a precisão desejada ao longo de todo o espectro. Os resultados obtidos são apresentados através de curvas suaves das quais os histogramas nunca se desviam mais de 10%.

Na figura 2.3 são mostradas as DEs obtidas com diferentes graus de compensação. A largura do poço é de $1a^*$ e a dopagem é de $n_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. A origem das energias corresponde à energia $E_L(0)$ do elétron ligado a uma impureza no centro do poço. A primeira sub-banda começa na posição correspondente à energia de ligação de tal elétron. Neste caso, i.e. para $L = 1a^*$, tem-se $E_B(0) \simeq 2,3 \text{ Ry}^*$. Repare que a banda de impureza

se encontra sempre fora da banda de condução.

Observa-se que, com o aumento da compensação, os rabos (*tails*) induzidos pela desordem aumentam e toda a banda se desloca para a região de menores energias, o que aumenta a energia de ativação. Situação similar ocorre no *bulk* (Efros *et al* 1979). Quando a compensação é alta, o estado fundamental apresenta doadores neutros (estados ocupados) que ocorrem próximo dos doadores ionizados, o que reduz bastante a energia dos primeiros.

Uma compensação diferente de zero permite que os elétrons se movimentem pulando de impureza em impureza (imagine um processo de resfriamento para atingir o estado fundamental). Dessa forma eles passam a ocupar preferencialmente doadores localizados na região central do poço a fim de minimizar a energia do sistema. O que ocorre na DE do poço não compensado à medida que impurezas aceitadoras vão sendo introduzidas pouco

a pouco é, portanto, uma diminuição do pico no limite superior de energias e, como já foi dito, a formação dos *tails*. Isto pode ser visto na curva correspondente a $k = 0,1$ da figura 2.3 e em mais detalhes na figura 2.4. É também interessante notar na figura 2.4 que a simulação numérica no limite de compensação bem baixa ($k = 0,01$) reproduz muito bem os resultados analíticos do poço não compensado.

A DE possui sempre um mínimo (onde a DE vai a zero) exatamente na energia de Fermi, energia essa que separa os estados ocupados dos estados vazios à temperatura zero. Este *gap* suave que se forma na energia de Fermi é conhecido como *Coulomb Gap*. A ocorrência deste *gap* foi prevista em 1975 por Efros e Shklovskii. Simulações Monte Carlo comprovaram a sua existência no caso do *bulk* e mostraram que ele se dá devido à interação coulombiana de longo alcance³. Um potencial blindado com decaimento exponencial, por exemplo, não produz tal *gap* na DE. A forma com que a DE se aproxima de zero na energia de Fermi depende da dimensionalidade do sistema (Apêndice B). Ela se aproxima linearmente se o sistema for bidimensional e quadraticamente em três dimensões, por exemplo.

³Vale mencionar que no Efeito Hall fracionário os *gaps* no espectro de excitações são também resultado direto da interação coulombiana entre os elétrons (MacDonald *et al* 1990).

Figura 2.3 - Densidades de estados de impureza para um poço quântico fracamente dopado.
 Efeitos da compensação.

Figura 2.4 - Densidade de estados no limite de baixas compensações.

O Coulomb *Gap* pode ser observado indiretamente através de medidas de transporte a temperaturas bem baixas. Davis e Franz (1986) observaram-no mais diretamente em espectros de fotoemissão. Nos cálculos deste trabalho obteve-se o Coulomb *Gap* em todas as diferentes combinações de L , k e n_d . A figura 2.5 mostra o Coulomb *Gap* em mais detalhes. Vê-se nitidamente que a DE é linear nas proximidades de E_F ($D(E) \propto |E - E_F|$), o que indica um carácter bidimensional da banda de impureza dos poços quânticos investigados, i.e., com $1a_0^* < L < 4a_0^*$.

A energia de Fermi é dada pela média das energias do estado ocupado de mais alta energia e do estado desocupado de menor energia. É traçada na figura 2.6 E_F em função de k para poços de diferentes larguras e com $n_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. As barras de erro correspondem às flutuações (crescentes com k) encontradas. Observa-se que E_F é fracamente dependente da largura do poço neste intervalo de L . Apenas em baixas compensações é possível perceber uma pequena diferença. Quanto mais estreito o poço maior a energia de Fermi. Este é um efeito de confinamento ligado ao fato de que a largura de banda do poço não compensado cresce com a diminuição de L . Como para todos os valores de L foi fixada a origem das energias na energia mínima, tem-se neste caso uma energia de Fermi crescente acompanhando a energia máxima.

Os resultados mostram que tanto a energia de Fermi como toda a estrutura da banda de impureza de um poço quântico fracamente dopado são razoavelmente insensíveis ao valor de L , ao menos no intervalo de $L = 1a_0^*$ a $4a_0^*$. A figura 2.7 dá um exemplo de como as DEs de diferentes L s se comparam.

No limite de concentrações de impurezas bem baixas, as flutuações do potencial coulombiano são bem pequenas. No limite extremo elas podem ser desprezadas e a DE não será perturbada. A DE manterá a estrutura de dois picos do caso não compensado. Neste caso o grau de compensação determinará apenas a posição da energia de Fermi. O Coulomb *Gap* será extremamente estreito. Tem-se E_F tendendo a $E_L(0)$, a origem das energias usada na figura, à medida que k se aproxima de 1, como esquematizado na linha tracejada da figura

Figura 2.5 - Coulomb Gap - detalhe da densidade de estados nas proximidades da energia de Fermi para diferentes valores de k e de L .

Figura 2.6 - Energia de Fermi em função do grau de compensação k e para vários valores da largura do poço L ($n_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$). A linha tracejada representa o limite extremamente diluído de impurezas.

Figura 2.7 - Exemplo da pequena variação da densidade de estados em função da largura do poço.

2.6. De acordo com a figura 2.8, conclui-se que na prática dopagens com $n_d \leq 10^8 \text{cm}^{-2}$ já configuram este limite. De fato, a energia de interação coulombiana média ($2\sqrt{n_d}Ry^*$) quando $n_d = 10^8 \text{cm}^{-2}$ representa apenas 2% da largura de banda sem compensação.

2.5 Distribuição de Carga

A maior parte da informação experimental sobre semicondutores e poços quânticos puros (fracamente dopados) a baixas temperaturas vem da resposta óptica dos doadores neutros, cujas propriedades dependem antes de mais nada da posição deles ao longo da direção de crescimento. O conhecimento da distribuição dos doadores neutros ao longo desta direção é de extrema importância. Esta distribuição é característica do poço quântico e não tem similar no *bulk*. Mostra-se neste trabalho que sua forma é ditada em aspectos independentes pela compensação e pela concentração de impurezas. Os resultados a este respeito servem para a caracterização de poços quânticos puros.

Depois de encontrar o pseudo-estado fundamental de cada configuração, são selecionados os doadores neutros e distribuídos em pequenos intervalos do eixo z de acordo com as suas coordenadas z_i . A largura L do poço foi dividida em 50 intervalos e as flutuações no resultado final foram sempre menores que 5%.

São mostrados nas figura 2.9 e 2.10 os resultados obtidos. Os gráficos correspondem à densidade linear de doadores neutros por doador em função de z , de forma que a integral da distribuição é igual a $(1 - k)$.

Na figura 2.9 mostra-se como a distribuição varia com o grau de compensação. Vê-se que o número de doadores neutros nas proximidades das interfaces ($|z| \simeq L/2$) é sempre pequeno quando a compensação é finita. O acúmulo de doadores neutros no centro do poço fica mais pronunciado com o aumento do grau de compensação. A forma da distribuição varia sensivelmente com k . A largura à meia altura (linhas horizontais na figura), por exemplo, cresce com a compensação. Com o método apresentado nesta tese pode-se calcular numericamente, com alta precisão, a função que descreve esta dependência e usá-la na

Figura 2.8 - Densidade de estados no limite de concentrações bem baixas de impurezas - limite extremamente diluído.

Figura 2.9 - Distribuição de Carga - distribuição de doadores neutros por doador para diferentes graus de compensação. Estão assinaladas as meias larguras à meia altura. Reparem que estas diminuem com k .

Figura 2.10 - Distribuição de doadores neutros variando com a concentração de impurezas.

Quanto maior a concentração mais suave é a distribuição.

determinação do grau de compensação da amostra.

A dependência da distribuição dos doadores neutros com a concentração de impurezas pode ser compreendida com a ajuda da figura 2.10. À medida que n_d diminui as flutuações do potencial de Coulomb diminuem e a separação espacial entre os doadores neutros e ionizados vai ficando mais brusca. O grau de decaimento da distribuição é uma medida de n_d .

Viu-se, portanto, que a distribuição dos doadores neutros calculada nesta tese serve para a caracterização de poços quânticos puros, ou seja, para a determinação da concentração de impurezas residuais e do grau de compensação. A caracterização de poços quânticos puros é de extrema importância tecnológica. Ela serve para selecionar e aprimorar técnicas de crescimento de heteroestruturas semicondutoras. Vale mencionar que já foram observadas

correlações entre o espectro magnético no infravermelho e a distribuição de doadores neutros em poços quânticos (Jarosik *et al* 1985) e super-redes (Duffield *et al* 1986). Existe uma expectativa de que experimentos similares sejam capazes de determinar num futuro próximo a distribuição dos doadores neutros.

2.6 Distribuição do Campo Elétrico nos Doadores Neutros

O campo elétrico estático produzido pelas impurezas causa deslocamento e levantamento da degenerescência (*splitting*) dos níveis atômicos dos doadores neutros (efeito Stark). Tal campo elétrico varia de doador neutro para doador neutro. A absorção óptica intra-impureza apresenta um espectro de linhas alargadas devido a esta variação do campo elétrico responsável por uma dispersão no efeito Stark (Larsen 1973, Kogan *and* Van Lien 1981). Em muitos casos este é o mecanismo de alargamento dominante. A maior dificuldade no cálculo deste alargamento reside na determinação da distribuição do campo elétrico nos doadores neutros. Aqui também o método de simulação Monte Carlo se revela o único capaz de calcular tal distribuição em função da compensação. O campo elétrico no doador

i, em unidades de Ry^*/ea^* , é dado por:

$$\vec{E}_i = -2 \sum_{j=1}^N (1 - n_j) \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}^3} + 2 \sum_{\nu=1}^{kN} \frac{\vec{r}_{i\nu}}{r_{i\nu}^3} . \quad (2.9)$$

Obteve-se a distribuição $F(E)$ do valor absoluto das componentes paralela e perpendicular à interface. Após encontrado o pseudo-estado fundamental calcula-se o campo em cada doador neutro e constroem-se os histogramas exatamente da mesma forma como nos casos da DE e da distribuição de carga. Os resultados são apresentados nas figura 2.11 e 2.12 para as componentes paralela e perpendicular, respectivamente. Novamente as flutuações do histograma em relação às curvas são sempre desprezíveis apesar de crescerem com a compensação. O poço em questão tem $1a^*$ de largura e uma concentração de 10^{10} impurezas por cm^2 .

Inicialmente vê-se que a componente z do campo é bem pequena, em geral 100 vezes menor que a componente paralela (repare a diferença nas unidades usadas nas figuras). Isto está de acordo com a suposição de que o potencial de depleção das impurezas ionizadas pode ser desprezado no cálculo do estado ligado. Devido à simetria do poço, o valor mais provável de E_z , como esperado, é igual a zero. A componente no plano xy ocorre distribuída numa região muito mais larga de valores. Como no *bulk*, encontra-se uma distribuição com o máximo em valores finitos e que crescem com a compensação. Devido à baixa dimensionalidade do poço quântico, esta variação é bem mais acentuada aqui do que no *bulk*. Estes resultados sobre a distribuição do campo elétrico nos doadores neutros deverão ser utilizados em cálculos futuros do alargamento de linha de absorção intra-impureza devido ao efeito Stark. Cálculos similares no *bulk* têm sido usados para diagnóstico da compensação e da concentração de impurezas (Baranovskii *et al* 1987, 1988). O próximo capítulo trata do caso do poço quântico altamente dopado.

Figura 2.11 - Distribuição do valor absoluto da componente E_z paralela à direção de crescimento do campo elétrico sobre os doadores neutros.

Figura 2.12 - Distribuição da componente $E_{//}$ paralela à interface.

Capítulo 3

Poço Quântico Altamente Dopado

Passa-se a considerar o problema de um poço quântico altamente dopado (de Andrada e Silva *and* da Cunha Lima 1987b, de Andrada e Silva *et al.* 1988a,b).

3.1 Modelo *Tight-Binding* Desordenado

Dependendo da concentração de impureza, uma das duas maneiras de tratar as propriedades eletrônicas dos semicondutores dopados é mais recomendada. Quando estados de condução estão ocupados, usa-se uma base de estados de elétrons livres e considera-se o espalhamento pelo potencial aleatório das impurezas. Diminuído a concentração de impurezas, espalhamentos múltiplos eventualmente passam a dominar e os elétrons começam a se localizar nas proximidades dos átomos de impureza. Nesta faixa de concentração é

interessante usar o método das ligações fortes (*tight-binding*). Neste método usa-se uma base de estados localizados. Começando do lado isolante, a concentrações bem baixas, vê-se uma banda de impureza se formando à medida que o *overlapping* entre as funções de onda aumenta com a concentração.

Seguindo esta segunda linha, parte-se da hamiltoniana de um elétron em um poço quântico altamente dopado que, escrita na base de estados localizados, é dada por:

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} V_{ij} |i\rangle\langle j| \quad , \quad (3.1)$$

onde os índices i e j correm por todas as impurezas. As funções de base são do tipo

$$\langle \vec{r} | i \rangle = \psi(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (3.2)$$

e descrevem um elétron ligado à impureza i com energia $\varepsilon = \varepsilon(\vec{R}_i)$, onde $\vec{R}_i$ representa a posição da impureza i . Os elementos de matriz V_{ij} são conhecidos como integrais de transferência. A baixas temperaturas os estados excitados têm ocupação muito baixa e pouca influência nas propriedades eletrônicas do sistema. Restringindo-se ao estado fundamental, utiliza-se para as funções (3.2) acima, a solução variacional discutida na seção 2.1.

Supondo simetria de translação no plano xy , o elemento diagonal, como discutido, dependerá apenas da posição z da impureza, i.e.,

$$\varepsilon_i = \varepsilon(z_i) \quad (3.3)$$

A coordenada z_i é uma variável aleatória cuja distribuição é dada pelo perfil de dopagem na direção z . Diz-se então que existe uma desordem diagonal. O tipo de desordem diagonal considerada neste trabalho é típico do poço quântico. Existem outros tipos de desordem diagonal que podem ocorrer tanto no *bulk* como no poço quântico, entre as quais se encontram o potencial das impurezas ionizadas e as distorções da rede. Nos cálculos a seguir consideram-se a distorção da rede e a compensação desprezíveis.

Os elementos não diagonais, que dependem da separação entre as impurezas, são dados por :

$$V_{ij} = V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \langle i | H | j \rangle \quad . \quad (3.4)$$

Na base das coordenadas a hamiltoniana é dada por

$$H = h_i + \sum_{j \neq i} V(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad , \quad (3.5)$$

onde h_i é a hamiltoniana de um elétron ligado a uma impureza num poço quântico (impureza i neste caso). Esta é a hamiltoniana cujo estado fundamental foi obtido na seção 2.1. Substituindo-a em (3.4) obtém-se

$$V_{ij} = \langle i | h_i + V(\vec{r} - \vec{R}_j) + \sum_{l \neq i, j} V(\vec{r} - \vec{R}_l) | j \rangle \quad , \quad (3.6)$$

o que dá:

$$V_{ij} = \varepsilon(z_i) \langle i | j \rangle + \langle i | V(\vec{r} - \vec{R}_j) | j \rangle + \sum_{l \neq i, j} \langle i | V(\vec{r} - \vec{R}_l) | j \rangle \quad . \quad (3.7)$$

Em primeira aproximação podem-se desprezar os termos de três centros, bem como o proporcional ao *overlapping* em comparação com o segundo termo, e usar ¹

$$V(\vec{R}) = \int \psi^*(\vec{r} - \vec{R}) \frac{e^2}{k|\vec{r} - \vec{R}|} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad . \quad (3.8)$$

A desordem relacionada com a aleatoriedade em $\vec{R}$ é chamada de desordem não-diagonal. O modelo descrito pela hamiltoniana (3.1), usado neste trabalho, apresenta ainda as seguintes aproximações:

¹Correções de não ortogonalidade podem ser facilmente incorporadas. Os seus efeitos são pequenos. A largura da banda, por exemplo, praticamente não se altera. O *tail* mais longo no entanto muda de lado (Yonezawa *et al* 1976).

- 1) despreza a interação elétron-elétron;
- 2) considera uma concentração alta o suficiente para que efeitos quânticos sejam importantes e, ao mesmo tempo, baixa o suficiente para que se possam desprezar os efeitos da hibridização da banda de impureza com a banda de condução.

Tal modelo é útil não só por representar bem certas condições experimentais, mas também por ser sensivelmente mais tratável do que outros modelos mais realistas. Ele é, em particular, adequado para os objetivos deste capítulo, que envolvem o estudo da formação da banda de impureza a partir do lado isolante da transição metal-isolante, procurando identificar o papel dos dois tipos de desordem em função das dimensões do poço e da concentração de impureza. Concentrar-se-á na estrutura da densidade de estados média do sistema desordenado. Matsubara e Toyosawa desenvolveram em 1961 um método para calcular a média sobre configurações da função de Green de um elétron em um sistema desordenado de impurezas descrito por um modelo *tight-binding*.

3.2 Método de Matsubara e Toyosawa

O método de Matsubara e Toyosawa (MT) para o cálculo de médias configuracionais é um método usual e bastante conhecido na física dos semicondutores dopados. Apesar de o trabalho original de Matsubara e Toyosawa ter sido escrito de forma bastante compreensível, existem vários trabalhos que descrevem o método em detalhes (Ferreira da Silva 1979, Fabbri 1984, Perondi 1986). Uma vez que o interesse deste trabalho está mais ligado à discussão da física dos poços quânticos dopados do que à crítica do método de MT, apenas uma breve descrição do método será dada.

A densidade de estados $D(\epsilon)$ da banda de impureza é calculada a partir da função de Green média das hamiltonianas (3.1), correspondentes a diferentes configurações (repare que a hamiltoniana depende da configuração de impurezas), através da relação (Mahan 1981):

$$D(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{n_d} \sum_i < G_{ii}(\varepsilon + i0^+) > , \quad (3.9)$$

onde $< G_{ii} >$ é o elemento diagonal i da função de Green retardada média. Dentro da aproximação de massa efetiva, considera-se uma distribuição uniforme de impurezas em todo o espaço. Neste caso a média sobre todas as configurações possíveis será dada por

$$< G > = \frac{1}{(L^d)^N} \int d^d R_1 \cdots d^d R_N G_\Gamma , \quad (3.10)$$

onde G_Γ é a função de Green ligada à hamiltoniana H_Γ correspondente à configuração $\Gamma = \{\vec{R}_i\}$ de impurezas, N é o número total de impurezas, d é a dimensão do espaço em que as impurezas estão distribuídas e L^d é o seu volume.

O método de MT é um método para o cálculo desta média. Inicialmente desenvolvido para 3 dimensões, ele pode ser escrito para um número d qualquer de dimensões (desde que o sistema seja infinito). Como mostrado no Apêndice C, a função de Green média é dada por :

$$< G_{ii}(\varepsilon + i0^+) > = \frac{\xi(\varepsilon)}{\varepsilon} , \quad (3.11)$$

sendo a função $\xi(\varepsilon)$ solução da seguinte equação integral:

$$1 - \frac{1}{\xi(\varepsilon)} = \frac{n_d \xi(\varepsilon)}{(2\pi)^d \varepsilon^2} \int d^d k \frac{V^2(\vec{k})}{1 - \frac{n_d \xi(\varepsilon)}{\varepsilon} V(\vec{k})} , \quad (3.12)$$

onde n_d é a concentração de impurezas por cm^d e

$$V(\vec{k}) = \int d\vec{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) \quad (3.13)$$

é a transformada de Fourier da integral de transferência (*hopping integral*).

Portanto, o procedimento para o cálculo da densidade de estados média é o seguinte: i) obter $V(\vec{k})$; ii) inseri-lo na equação (3.12); iii) resolver (3.12) numericamente; iv) obter $D(\varepsilon)$ através da equação (3.9).

3.3 Densidade de Estados para δ – doping no Poço Quântico

Na aproximação de MT é importante a suposição de um sistema infinito e homogêneo (Apêndice C). Devido à quebra de simetria de translação na direção de crescimento, o caso geral de um poço quântico altamente dopado continua intratável. A complicação neste caso de elétrons independentes e sem compensação reside exclusivamente no cálculo da média configuracional.

Neste trabalho é adotada a seguinte estratégia. Considera-se inicialmente o caso de um δ – doping no poço quântico. Este sistema além do interesse experimental apresenta a simplificação de desordem diagonal zero (consideram-se todas as impurezas com o mesmo z_i). Calculam-se, via método de MT bidimensional, as densidades de estados correspondentes a diferentes posições da camada de impureza, diferentes concentrações e larguras do poço. Em seguida, considera-se na seção 3.4 o problema de camadas dopadas mais largas. Introduce-se ali um método para o cálculo da densidade de estados que inclui ambas as desordens e discute-se o alcance de sua validade.

Considere as impurezas distribuídas em uma camada bem fina, comparada com a largura do poço e com a distância média entre as impurezas. A dispersão nas energias de ligação será desprezível e tratar-se-á o problema de centros atrativos distribuídos aleatoriamente no plano definido por $z = z_i$. A integral de transferência é dada pela equação (3.8) com $\vec{R} = R_x\hat{x} + R_y\hat{y}$ (um vetor no plano xy). A dependência na posição z_i do plano de impurezas entrará através das funções de onda $\psi(\vec{r})$ (equação (2.3)). O cálculo da transformada de Fourier de $V(\vec{r})$ é simples, mas longo. Ao final obtém-se :

$$V(\vec{k}) = 4\pi^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz \left[\left(\epsilon_i - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) A_k^2(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial A_k(z)}{\partial z} \right)^2 \right], \quad (3.14)$$

onde:

$$A_k(z) = \frac{1}{\lambda f^3(k)} [1 + |z - z_i| f(k)] e^{-|z - z_i| f(k)} N \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right), \quad (3.15)$$

com

$$f(k) = \frac{\sqrt{1 + \lambda^2 k^2}}{\lambda}. \quad (3.16)$$

A derivada de $A_k(z)$ pode ser obtida facilmente e a integral de $-\frac{L}{2}$ a $\frac{L}{2}$ é feita numericamente. Mostram-se na figura 3.1 os resultados para $V(k)$ e como eles variam com a posição do plano de impurezas. Foram usados $z_i = 0$ (centro do poço), $\frac{L}{4}$ e $\frac{L}{2}$. $V(k)$ decai mais rapidamente à medida que a energia de ligação diminui, o que corresponde a estados mais estendidos.

Conhecendo $V(k)$, resolve-se a equação (3.12) e encontra-se a densidade de estados. A densidade de estados obtida para diferentes larguras de poço aparece nas figuras 3.2 a 3.4 para distintos z_i s. De maneira geral é obtida uma largura de banda que cresce com o confinamento, i.e., com a diminuição de L . O mesmo comportamento foi observado antes na banda de impureza em camada de inversão em sistemas MOS (de Andrada e Silva and da Cunha Lima 1987a). Com o aumento do confinamento, a função de onda do estado ligado é obrigada a se espalhar no plano xy , aumentando o *overlapping*. A largura de banda pode ser medida pelo desvio quadrático médio :

$$\Gamma_{z_i}(L) = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (\varepsilon^2 - \bar{\varepsilon}^2) D_{z_i}^L(\varepsilon) \right]^{1/2}. \quad (3.17)$$

A figura 3.5 mostra o $\Gamma_{z_i}(L)$ obtido. Observe que para uma densidade fixa de impurezas ($n_d = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$) e uma mesma largura de poço, quanto mais próximo o δ -doping estiver

Figura 3.1 - Transformada de Fourier da integral de transferência $V(\vec{R})$.

Figura 3.2 - Densidade de Estados de impureza para um δ - *doping* no centro de um poço quântico. São mostrados resultados com diferentes valores da largura do poço. A banda se estreita com o aumento de L ($n_d = 10^{10} cm^{-2}$).

Figura 3.3 - O mesmo que a figura anterior com o δ - *doping* posicionado a meio caminho do centro em direção à interface.

Figura 3.4 - O mesmo que as figuras anteriores agora com o δ - doping na interface.

Figura 3.5 - Dispersão das bandas obtidas em função da largura do poço e da posição da camada dopada.

da interface, mais estreita será a banda de impurezas.

Por fim, mostra-se na figura 3.6 o comportamento geral da densidade de estados usando o mesmo eixo das energias e incluindo a variação com a densidade n_d . Repare que na maioria dos casos a banda de impureza obtida ocorre separada da banda de condução (a linha vertical marca o começo da primeira sub-banda). Uma das principais conclusões a que se chegou refere-se à obtenção de larguras de banda comparáveis à dispersão na energia de ligação (desordem diagonal), o que indica que ambas as desordens são importantes no poço quântico altamente dopado.

3.4 Desordem Diagonal e Não-Diagonal

Na seção anterior foi tratado o caso de um perfil de impureza do tipo $P(z) = \delta(z - z_i)$. O caso de um perfil $P(z)$ geral é muito mais complexo. Existe, no entanto, uma simplificação importante que pode ser feita em certas circunstâncias.

Considere uma camada de impureza de lagura Δ ($\Delta < L$) dentro do poço quântico. Suponha agora que você calcule a DE para um δ -doping colocando todas as impurezas em um mesmo plano e obtenha resultados que independem da posição do plano dentro da camada Δ . Este seria o caso se a integral de transferência

$$V_{ij} = V(z_i, z_j, \vec{\rho}_i, \vec{\rho}_j) \quad , \quad (3.18)$$

onde $\vec{\rho}_i$ é o vetor posição da impureza i no plano xy , fosse insensível ao valor de $z_i (= z_j)$. De qualquer forma as densidades de estados correspondentes às diferentes posições z_i do plano aparecem deslocadas no eixo das energias devido à variação da energia de ligação. Portanto, se este for o caso, uma boa aproximação para a densidade de estados de impureza da camada Δ será:

$$D(\varepsilon) = \int dz_i P(z_i) D_{z_0}^{2D}(\varepsilon - \varepsilon(z_i)) \quad , \quad (3.19)$$

Figura 3.6 - Densidades de Estado de δ - dopings em diferentes posições e com diferentes densidades de impureza em um mesmo eixo de energia. A linha vertical à direita assinala o início da primeira sub-banda não-perturbada.

onde $D_{z_0}^{2D}(\varepsilon)$ é a densidade de estados calculada na versão bidimensional do método de Matsubara e Toyosawa para um plano qualquer z_0 dentro da camada. É importante perceber que $D_{z_0}^{2D}(\varepsilon)$ deve ser calculada para a densidade de impureza superficial total da camada de largura Δ .

É claro que quanto menor for a razão $\Delta/\bar{R}$ entre a largura da camada e a distância mais provável entre as impurezas no plano xy , melhor será tal aproximação. Quando $\Delta \rightarrow 0$ isto é óbvio e quando $\bar{R} \rightarrow \infty$ é razoável supor $\vec{R}_{ij} \simeq \vec{\rho}_{ij}$. A tabela 2 apresenta os valores da concentração de impurezas e largura de camada. N_s e N_v correspondem à concentração superficial e volumétrica de impurezas respectivamente. A aproximação (3.19) deverá ser válida apenas quando $\frac{\Delta}{\bar{R}} \ll 1$. Pode-se ver que para $N_v < 10^{16} \text{cm}^{-3}$ e $\Delta < 100 \text{\AA}$ esta condição é satisfeita. O interesse maior está no limite superior deste intervalo.

A fim de verificar a aplicabilidade da aproximação, deve-se de alguma forma quantificar a variação de $D_{z_i}^{2D}(\varepsilon)$ com z_i . Para isso decidiu-se comparar as densidades de estados mais discrepantes dentro da camada. Devido à simetria de reflexão para uma camada concêntrica com o poço, por exemplo, compara-se $D_0^{2D}(\varepsilon)$ com $D_{z_{\max}}^{2D}(\varepsilon)$. Uma vez que a densidade de estados por impureza é normalizada a um, pode-se definir o seguinte parâmetro de similaridade:

$$\eta_{ab} = \frac{1}{2} \int d\varepsilon |D_{z_a}^{2D}(\varepsilon) - D_{z_b}^{2D}(\varepsilon)| \quad . \quad (3.20)$$

Na figura 3.7 η , que ocorre no intervalo de 0 a 1, representa metade da área hachurada. Foi calculado o valor de η em função da largura da camada centrada para dois valores da concentração de impureza e duas larguras do poço. O resultado é apresentado na figura 3.8. A partir da figura, pode-se concluir que camadas centradas de até $\frac{L}{2}$ de largura podem ser tratadas na aproximação (3.19); η neste intervalo não passa de 0,05.

Mostra-se na figura 3.9 uma comparação entre três aproximações no cálculo da densidade de estados. A curva pontilhada representa o caso onde apenas a desordem diagonal

Tabela 2 - Parâmetros relevantes para o estudo de poços quânticos dopados. N_s e N_v são dados em unidades de cm^{-2} e cm^{-3} respectivamente. $\bar{R} = 1/\sqrt{2\pi N_s}$ e $N_v = N_s \Delta$. As situações com caráter bidimensional são aquelas com $\Delta/\bar{R} \gg 1$.

N_v	Δ (Å)							
	20		60		100		140	
	$\Delta/\bar{R}$	N_s	$\Delta/\bar{R}$	N_s	$\Delta/\bar{R}$	N_s	$\Delta/\bar{R}$	N_s
10^{15}	.007	2×10^8	.037	6×10^8	.079	1×10^9	.131	1.4×10^9
10^{16}	.022	2×10^9	.116	6×10^9	.250	1×10^{10}	.410	1.4×10^{10}
10^{17}	.071	2×10^{10}	.368	6×10^{10}	.787	1×10^{11}	1.31	1.4×10^{11}

Figura 3.7 - Exemplo da variação na estrutura da densidade de estados calculada via método de MT bidimensional em função da posição da camada dopada. A área hachurada corresponde a duas vezes η .

Figura 3.8 - Parâmetro η (definição no texto) em função da posição z_i ; uma medida da deformação da banda de impureza.

Figura 3.9 - Densidade de Estados de impureza para um poço quântico dopado em três aproximações: i) via método de MT bidimensional (desordem não-diagonal apenas) - linha contínua -; ii) considerando apenas a desordem diagonal (limite diluído) - linha pontilhada - e iii) resultado do uso da equação (3.19) (considerando ambas as desordens) - linha tracejada -.

é levada em conta; a curva contínua é aquela em que só a desordem não-diagonal é considerada; finalmente a curva tracejada é o resultado do uso da aproximação (3.19), que inclui ambas as desordens. Utilizaram-se $L = 200\text{\AA}$, $\Delta = 100\text{\AA}$ e $N_v = 0,5 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$. A conclusão a que se chega é que nesta situação a desordem não-diagonal contribui com maior peso e que a desordem diagonal é responsável pelo surgimento de um rabo a altas energias.

O cálculo acima assume um perfil uniforme de impurezas,

$$P(z) = \frac{1}{\Delta} = \text{const} \quad . \quad (3.21)$$

O efeito de um perfil diferente na equação (3.19) foi investigado (de Andrada e Silva *et al* 1988b). O uso de um perfil mais realista, onde a concentração de impurezas é maior no centro e menor nas bordas da camada dopada, não altera significativamente os resultados obtidos acima.

A aproximação (3.19) é certamente útil e importante no estudo dos poços quânticos altamente dopados. No entanto, é ainda necessário continuar a investigação sobre os efeitos da desordem, de preferência uma investigação diretamente ligada a um projeto experimental.

3.5 Banda de Impureza no Fio Quântico

Em busca de novos efeitos, a tendência natural da física das heteroestruturas semicondutoras foi reduzir ainda mais a dimensionalidade dos sistemas. Na pesquisa desta tese também foi natural indagar sobre os efeitos da diminuição de mais uma dimensão na estrutura da banda de impureza. Nesta seção são apresentados cálculos da densidade de estados de impureza em um fio quântico (de Andrada e Silva *et al* 1988c).

Exatamente como no caso dos sistemas bidimensionais, assim que a idéia de estruturas unidimensionais foi lançada, deu-se considerável atenção ao problema de impurezas rasas

nestes sistemas. Lee e Spector (1984) resolveram o problema do estado ligado a uma impureza localizada no eixo de um fio cilíndrico de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ na aproximação de barreira infinita. Bryant (1984) estendeu os cálculos incluindo os efeitos de barreira finita e observou uma diminuição na energia de ligação bem como a ocorrência de um máximo no lugar da divergência do átomo de hidrogênio em uma dimensão. Brum (1985) estudou a variação da energia de ligação em função da posição da impureza no plano transversal ao eixo do fio. A energia de ligação diminui à medida que a impureza se afasta do centro do fio. Esses, como outros, eram todos resultados qualitativamente esperados à luz dos resultados para os sistemas bidimensionais. Observaram-se, no entanto, energias de ligação sensivelmente maiores no fio do que no poço.

Neste trabalho, como em todos os citados acima, é usada uma solução variacional para o estado fundamental de um elétron ligado a uma impureza doadora rasa dentro de um fio quântico. No caso de uma impureza na origem das coordenadas, parte-se da seguinte família de funções envelopes:

$$\psi(\vec{r}) = \phi(x, y)\eta(z) \quad , \quad (3.22)$$

onde

$$\phi(x, y) = N_\alpha \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right) e^{-\alpha(x^2+y^2)} \quad (3.23)$$

e

$$\eta(z) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha z^2} \quad , \quad (3.24)$$

sendo α o parâmetro variacional e L o lado do fio quadrado (figura 1.3). Normalizando, obtém-se que $\langle \psi | \psi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle \langle \eta | \eta \rangle = 1$ implica em

$$N_\alpha = \left(2 \int_0^{L/2} dx \cos^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-2\alpha x^2}\right)^{-1} . \quad (3.25)$$

Estas funções do tipo gaussiana têm a grande vantagem de ser separáveis e, ao mesmo tempo, fornecer energias diferentes não mais que 1% das obtidas com funções mais exatas do tipo 1s. A hamiltoniana efetiva em unidades atômicas é dada por:

$$H = -\nabla^2 + V(x, y) - \frac{2}{r} \quad , \quad (3.26)$$

onde $V(x, y)$ é o potencial de confinamento. Na aproximação de barreira infinita, $V(x, y) = 0$ (origem das energias) dentro do fio, i.e., no GaAs, e infinito fora. Separando ao máximo as variáveis escreve-se

$$H = H_0(x, y) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{r} \quad (3.27)$$

e a energia $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ será dada por:

$$E = \langle \phi | H_0 | \phi \rangle + \langle \eta | -\frac{\partial^2}{\partial z^2} | \eta \rangle + \langle \psi | -\frac{2}{r} | \psi \rangle \quad (3.28)$$

$$= E_0 + \alpha + E_{Coul.} \quad (3.29)$$

As energias E_0 e $E_{Coul.}$ foram calculadas numericamente em função de α a partir de:

$$E_0 = 4N_\alpha \int_0^{L/2} dx \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-\alpha x^2} \right) \right]^2 \quad (3.30)$$

e

$$E_{Coul.} = -2L^2 N_\alpha \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_0^1 \int_0^1 dx dy \cos^2\left(\frac{\pi x}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\pi y}{2}\right) e^a K_0(0) \quad , \quad (3.31)$$

onde $a = -\alpha L^2(x^2 + y^2)/4$ e K_0 é a função de Bessel modificada de ordem zero. Finalmente, a energia de ligação é dada por:

$$E_B = \varepsilon_0 - E, \quad (3.32)$$

onde

$$\varepsilon_0 = \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle, \quad (3.33)$$

sendo ϕ_0 a solução do poço sem impureza para o estado fundamental (primeira sub-banda):

$$\phi_0(x, y) = \frac{2}{L} \cos \frac{\pi x}{L} \cos \frac{\pi y}{L} \quad (3.34)$$

dentro do fio e zero fora. Substituindo ε_0 na equação (3.32) obtém-se:

$$E_B(L) = 2 \frac{\pi^2}{L^2} - E(L). \quad (3.35)$$

A figura 3.10 mostra os resultados obtidos para a energia de ligação em função do valor L do lado da seção quadrada do fio. A energia E é calculada e minimizada em relação a α . A impureza se localiza no centro do fio.

O caso geral de uma distribuição de impureza no fio segundo um perfil qualquer $P(x, y)$ é, pela mesma razão que no caso do poço, intratável no limite altamente dopado. A desordem diagonal é similar à do poço quântico, com a diferença de que a energia do estado ligado no caso do fio depende não só de uma, mas de duas coordenadas da posição da impureza. Tal energia possui um mínimo para a impureza localizada no centro do fio. Considerando as impurezas distribuídas ao redor do centro do fio pode-se, em primeira aproximação, tomar $E_i(x, y) \simeq E_i(0)$. Eliminando dessa forma a desordem diagonal, a dispersão em energia devida ao *overlapping* das funções de onda pode ser obtida através da versão unidimensional do método de MT. De fato, densidades lineares típicas da ordem de 10^4 impurezas por centímetro correspondem à distâncias média entre impurezas da ordem de $10^4 \text{ \AA}$, que em geral é bem maior que L . É uma razoável aproximação considerar todas as impurezas distribuídas ao longo do eixo z no centro do fio.

Figura 3.10 - Energia de ligação para um elétron ligado a uma impureza doadora localizada no centro do fio quântico.

De acordo com o procedimento discutido na seção 3.2, deve-se inicialmente calcular a transformada de Fourier da integral de *hopping*. Neste caso, em que se consideram as impurezas distribuídas ao longo do eixo do fio (direção z), a integral de *hopping* será do tipo:

$$V(z_0) = \langle \psi(\vec{r} + z_0 \hat{z}) | -\frac{2}{r} | \psi(\vec{r}) \rangle . \quad (3.36)$$

Usando ψ dada pela equação (3.22) e pela expressão (3.26), obtém-se:

$$V(z_0) = \langle \phi(x, y) \eta(z + z_0) | H - H_0 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} | \phi(x, y) \eta(z) \rangle . \quad (3.37)$$

Usando agora as soluções conhecidas de H e H_0 , obtém-se:

$$V(z_0) = (E - E_0) S_\eta(z_0) + \langle \eta(z + z_0) | \frac{\partial^2}{\partial z^2} | \eta(z) \rangle , \quad (3.38)$$

onde

$$S_\eta(z_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \eta(z - z_0) \eta(z) . \quad (3.39)$$

Tomando a transformada de Fourier, obtém-se facilmente

$$V(k) = (E - E_0 - k^2) e^{-k^2/2\alpha} . \quad (3.40)$$

A expressão acima é então substituída na equação (3.12) com $d=1$; esta última é resolvida numericamente e a densidade de estados é obtida através da equação (3.9). Os resultados obtidos são apresentados nas figuras 3.11 e 3.12. A variação da densidade de estados em função de L para um valor típico da concentração de impurezas, como mostrado na figura 3.11, é similar à encontrada no caso do poço quântico.

Quanto mais largo é o fio, mais estreita é a banda de impureza. A dispersão em energia é, por exemplo, de $\simeq 2,4 Ry^*$ quando $L = 2a^*$. Este valor é comparável à energia de

Figura 3.11 - Densidade de Estados de impureza em um fio quântico em função do lado L da seção quadrada do fio.

Figura 3.12 - Densidade de Estados para o fio quântico em função da concentração de impurezas.

ligação ($\simeq 2,8 Ry^*$). As densidades de estados são razoavelmente simétricas e ocorrem consideravelmente afastadas da primeira sub-banda. Na figura 3.12 mostra-se a densidade de estados correspondente a diferentes concentrações de impurezas. À medida que o número de impurezas aumenta, a densidade de estados vai ficando cada vez mais assimétrica e se aproxima da banda de condução assinalada pela linha vertical na figura.

Capítulo 4

Quantização Magnética em Super-redes e Massa Efetiva Renormalizada

O trabalho deste Capítulo foi desenvolvido junto com o Prof. Lu Jeu Sham na Universidade da Califórnia em San Diego (de Andrada e Silva *and* Sham 1990). Os principais resultados compõem a parte teórica do trabalho de Brozak *et al* (1990).

4.1 Campo Magnético Transverso e Tunelamento

Campos magnéticos fortes e transversais à direção de crescimento têm sido usados para o estudo da estrutura de minibandas e do tunelamento em super-redes. A fim de deixar mais clara a conexão entre campo transversal e tunelamento, imagine um modelo

simples de uma banda para descrever uma super-rede sob um campo magnético forte. Na aproximação de massa efetiva e para o caso em que a órbita ciclotrônica está centrada na barreira, o problema se reduz ao da solução da equação de Schrödinger em uma dimensão com um potencial do tipo representado na figura 4.1 ¹. O potencial será uma superposição da parábola magnética e do potencial periódico da super-rede. As outras barreiras da super-rede que não aparecem ocorrem em energias mais altas e não interessam na presente discussão. Os estados ϕ_0 e ϕ_1 de mais baixa energia serão como esquematizados na figura 4.1.

Considere agora o sistema inicialmente no estado $\psi = \phi_0 + \phi_1$, que representa uma situação em que o elétron está localizado no lado esquerdo da barreira. Ele não é um estado estacionário e, portanto, evoluirá no tempo. Não se preocupando com a normalização e colocando $\hbar = 1$, tem-se:

$$\psi(t) = e^{-i\varepsilon_0 t} \phi_0 + e^{-i\varepsilon_1 t} \phi_1, \quad (4.1)$$

que pode ser escrito como:

$$\psi(t) = e^{-i(\varepsilon_0 + \varepsilon_1)/2t} [(\phi_0 + \phi_1)\cos(\frac{\omega}{2}t) + (\phi_0 - \phi_1)\sin(\frac{\omega}{2}t)], \quad (4.2)$$

onde $\omega = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$. Vê-se que o sistema oscilará periodicamente entre os estados $\phi_0 + \phi_1$ e $\phi_0 - \phi_1$, o que significa que o elétron tunelará periodicamente de um lado para o outro da barreira. A frequência de oscilação, proporcional à probabilidade de tunelamento, é dada pela metade do espaçamento entre os níveis.

O espaçamento entre estes níveis em função da intensidade do campo magnético para o caso de uma super-rede de AlAs/GaAs foi calculado nesta tese. Os resultados foram comparados com o espectro de ressonância ciclotrônica. A ótima concordância obtida mostra que o modelo utilizado no cálculo descreve corretamente o tunelamento. A seguir

¹Um potencial deste tipo é obtido quando se usa o *gauge* de Landau, como será visto na seção 4.4.

Figura 4.1 - Super-rede sob campo magnético transversal e tunelamento. Esquema do potencial efetivo.

é feita uma breve discussão da experiência de ressonância ciclotrônica de tunelamento (Brozak *et al* 1990).

4.2 Ressonância Ciclotrônica de Tunelamento

O primeiro grupo a examinar os efeitos de um campo magnético transversal na estrutura de minibandas de uma super-rede foi o de J.C.Maan e colaboradores no Instituto Max Planck (Maan 1987). Foram observados por eles níveis de Landau bem definidos que desapareciam quando a energia ciclotrônica ultrapassava a largura da minibanda. Esta foi uma das primeiras observações experimentais de uma minibanda. No entanto, a técnica experimental utilizada foi a de magneto-luminescência interbandas, cujo espectro carrega informações da complicada estrutura da banda de valência e dos efeitos excitônicos.

Para o transporte vertical, as experiências de ressonância ciclotrônica desenvolvidas na Bellcore são uma prova mais direta (Allen *et al* 1987). A ressonância nesta configuração de campo transversal implica a execução por parte do elétron de um movimento quântico coerente ao redor do campo que envolve tunelamento. É possível determinar a taxa de tunelamento e massa efetiva de transporte vertical (Duffield *et al* 1986b). A ressonância foi observada como uma absorção no espectro de transmissão no infravermelho longínquo com campo fixo. A superrede é pura e a absorção é fraca devido à baixa concentração de portadores. São utilizadas técnicas especiais para o aumento da sensibilidade na medida (Brozak *et al* 1990).

Na figura 4.2 são mostrados os espectros obtidos com uma super-rede de AlAs/GaAs. As camadas de GaAs e AlAs usadas foram de $\sim 70\text{\AA}$ e $\sim 10\text{\AA}$, respectivamente, em cada período. Percebe-se que, apesar de outras estruturas, o espectro apresenta um pico de ressonância bem definido. Na região de campos fracos a posição do pico em energia cresce linearmente com a intensidade do campo, como numa ressonância ciclotrônica usual. À medida que o campo cresce dois efeitos são observados. Inicialmente percebe-se um alargamento na ressonância. Em segundo lugar nota-se que a posição do pico tende a

Figura 4.2 - Espectro de transmissão de uma super-rede de AlAs/GaAs sob campo magnético transversal à direção de crescimento. Ressonância Ciclônica de Tunelamento (Brozak *et al* 1990).

saturar (i.e., parar de crescer com o campo). Estes comportamentos, como discutido na introdução, podem ser interpretados com a ajuda da imagem clássica de órbitas ciclotrônicas.

Comparando a posição do pico com a energia de ressonância do *bulk* e considerando o comportamento com o campo, é possível identificar a ressonância observada na figura 4.2 como sendo ligada à barreira (Duffield *et al* 1987), ou seja, a ressonância correspondente à transição do estado fundamental para o primeiro estado excitado, ambos com órbitas guias centradas na barreira (similares a ϕ_0 e a ϕ_1 da seção anterior). Por esta razão, o fenômeno é conhecido como ressonância ciclotrônica de tunelamento.

No entanto, para explicar satisfatoriamente os dados experimentais acima, é necessário desenvolver uma análise quântica quantitativa.

4.3 Necessidade de ir além da Teoria de Massa Efetiva de uma Banda

Junto com as primeiras experiências mencionadas acima, apareceram também as primeiras tentativas de modelamento teórico; as que obtiveram maior sucesso envolviam a solução da equação de Shrödinger na aproximação de massa efetiva usual de uma banda.

Nesta aproximação a super-rede é representada por um potencial periódico como o ilustrado na figura 4.3a. Este potencial corresponde ao perfil delineado pelo mínimo da banda de condução ao longo da direção de crescimento. No entanto, é necessário que este mínimo tenha a mesma simetria em ambos semicondutores (Bastard 1989). No caso da super-rede de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ com x pequeno, por exemplo, trabalha-se sempre com estados Γ em ambas as camadas. Além da contribuição do campo aplicado, esses cálculos incluem também a variação da massa efetiva correspondente. Os resultados obtidos explicam os dados experimentais apenas qualitativamente (Duffield *et al* 1987, Belle *et al* 1985), os quais se mostram bastante sensíveis às mudanças nos parâmetros tais como altura da barreira, *band-offset* e massa efetiva. Um acordo quantitativo melhor é obtido ajustando os parâmetros. Mas não há justificativa satisfatória para este procedimento.

Figura 4.3 - Perfil de potencial efetivo em super-redes. a) potencial simples de uma banda. b) bandas de valência e de condução para uma super-rede de AlAs/GaAs. c) perfil dos mínimos Γ e X na mesma super-rede.

Uma razão simples para a falha da aproximação de massa efetiva de uma banda pode ser compreendida da seguinte maneira. Considere o interessante caso da super-rede de AlAs/GaAs. A figura 4.3b apresenta o esquema do potencial efetivo para ambos: elétrons e buracos (ligados ao ponto Γ). Em geral as sub-bandas de condução magnéticas importantes são as de mais baixa energia e ocorrem próximas do fundo da banda de condução do GaAs. Neste caso, a aproximação parabólica (i.e., de uma banda) é razoável para o GaAs. No entanto o elétron estará tunelando no AlAs com energia bem menor que o limite da banda de condução ($\sim 1\text{eV}$ abaixo do *band-edge*). De fato, pode-se observar na figura 4.3b que ele estará em energia praticamente tão perto do limite da banda de condução quanto do limite da banda de valência. Neste caso, é claro que a aproximação parabólica não representa corretamente a constante de decaimento da função de onda evanescente na barreira de AlAs e que a banda de valência deve ser levada em consideração.

Para obter uma representação melhor das soluções evanescentes na barreira, um modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de quatro bandas é adotado para descrever ambos os semicondutores. São derivadas fórmulas de conexão para as funções envelopes de quatro componentes através da interface. Uma vez que os estados de interesse são aqueles próximos do fundo do poço, é feita uma expansão com a energia do elétron medida a partir do fundo do poço servindo de parâmetro pequeno em comparação com as energias de *gap* e com o *band-offset*. Como resultado, a hamiltoniana $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 4x4 é reduzida a uma equação de massa efetiva de uma banda com uma massa efetiva renormalizada na barreira, a qual depende do *band-offset*.

4.4 Modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de Quatro Bandas

Aqui a discussão se concentra nas experiências de Brozak *et al* discutidas acima, nas quais a super-rede usada é composta de períodos com camada de $\sim 70\text{\AA}$ de GaAs e de $\sim 10\text{\AA}$ de AlAs. Esta super-rede de AlAs/GaAs é interessante para a investigação do tunelamento não só por formar uma barreira alta para os elétrons Γ , mas também pelo fato da a estrutura eletrônica desses semicondutores ser bem conhecida e definida, ao contrário

do que ocorre com as ligas de $Al_xGa_{1-x}As$.

Superredes de AlAs/GaAs têm atraído muita atenção também em conexão com o problema da chamada interação $\Gamma - X$. O AlAs é um semiconductor de *gap* indireto. A sua banda de condução tem seu mínimo no ponto X . O potencial efetivo para elétrons X numa superrede de AlAs/GaAs apresenta poços no AlAs e barreiras no GaAs (figura 4.3c). Dependendo das larguras das camadas, pode ocorrer uma mistura na região de interesse entre as mini-bandas derivadas dos diferentes mínimos (Lu and Sham 1989). Para avaliar a importância da interação $\Gamma - X$ nas experiências de Brozak *et al*, foi feita uma estimativa da posição dos níveis Γ e X utilizando o modelo de Kronig-Penney. Foram calculadas através de dois potenciais de Kronig-Penney com a mesma escala de energia (figura 4.3c) as mini-bandas de estados dos dois tipos. Os resultados correspondentes aos parâmetros das experiências aparecem na figura 4.4. A primeira mini-banda do vale X acontece neste caso mais de $150meV$ acima da primeira mini-banda Γ . Como a interação $\Gamma - X$ se revela essencialmente através de *anti-crossings* e os estados Γ de interesse estão bem separados dos estados X , a interação $\Gamma - X$ pode neste caso ser desprezada.

Seguindo a filosofia $\vec{k} \cdot \vec{p}$ utiliza-se o conjunto completo das funções de Bloch no ponto Γ para expandir a parte periódica daquelas com $k \neq 0$.

$$u_{\vec{k}} = \sum_i a_i(\vec{k}) u_i(\vec{r}) \quad . \quad (4.3)$$

Restringindo-se ao espaço limitado constituído pelas bandas de condução de simetria S e de valência de simetria P, e desprezando tanto a interação spin-órbita como termos quadráticos em k a hamiltoniana efetiva será do tipo (Kane 1957):

$$H = \begin{pmatrix} V + \Delta & k_x P & k_y P & k_z P \\ k_x P & V - \Delta & 0 & 0 \\ k_y P & 0 & V - \Delta & 0 \\ k_z P & 0 & 0 & V - \Delta \end{pmatrix} \quad . \quad (4.4)$$

Figura 4.4 - Estrutura de minibandas de uma super-rede de AlAs/GaAs com camadas de $10\text{\AA}/70\text{\AA}$; resultado de dois cálculos Kronig-Peney independentes.

A interação spin-órbita é desprezada, pois ela afeta principalmente a banda de valência, e o interesse é pelas sub-bandas de condução. Tanto V quanto Δ dependem da coordenada z ao longo da direção de crescimento (figura 4.5a). Em cada camada, V representa a energia no centro do *gap* e Δ , a metade da energia de *gap*. Os valores que estas funções assumem na barreira ou no poço são assinalados com os sufixos b ou p . Em termos das energias de *gap* e do *band-offset* Q , definido como sendo a razão entre a descontinuidade na banda de condução e a diferença nas energias de *gap*, a descontinuidade em V é dada por:

$$V_b - V_p = (2Q - 1)(\Delta_b - \Delta_p). \quad (4.5)$$

As soluções deste modelo para o *bulk* consistem em uma banda duplamente degenerada (sem contar o spin) de buracos pesados (hh) com massa efetiva infinita, de uma banda de elétrons (e) e uma de buracos leves (lh) com a mesma massa efetiva (figura 4.5b).

Dentro da aproximação de massa efetiva k_α deve ser substituído pelo operador (Luttinger and Kohn 1955):

$$-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + \frac{e}{\hbar c} A_\alpha, \quad (4.6)$$

onde A_α é a componente α do potencial vetor. O campo magnético é escolhido na direção x . No *gauge* de Landau toma-se $\vec{A} = (0, -Bz, 0)$. As funções de onda serão do tipo:

$$\psi = \sum_{i=1}^4 F_i u_i; \quad i = s, P_x, P_y, P_z. \quad (4.7)$$

F_i é a função envelope correspondente à função de base u_i . Os três estados degenerados da banda de valência são: u_{P_x} , u_{P_y} e u_{P_z} . Considera-se que as funções de base u_i e o elemento de matriz P são os mesmos em ambos os materiais, o que garante a conservação do fluxo de carga através da interface (White and Sham 1981, Bastard 1982).

Como nem x nem y aparecem explicitamente na hamiltoniana efetiva, as funções envelope podem ser tomadas da forma:

$$F_i = f_i e^{i(k_x x + k_y y)} \quad (4.8)$$

e as auto-energias serão então dadas por:

$$\begin{pmatrix} V + \Delta - E & Pk_x & P(k_y - \frac{z}{l^2}) & -iP\frac{d}{dz} \\ Pk_x & V - \Delta - E & 0 & 0 \\ P(k_y - \frac{z}{l^2}) & 0 & V - \Delta - E & 0 \\ -iP\frac{d}{dz} & 0 & 0 & V - \Delta - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_s \\ f_x \\ f_y \\ f_z \end{pmatrix} = 0, \quad (4.9)$$

onde $l = \sqrt{\hbar c / eB}$ é o comprimento magnético. Medindo B em unidades de Tesla tem-se $l = 256,56 / \sqrt{B} \text{Å}$. As três últimas equações relacionam f_x , f_y e f_z com f_s . Utilizando estas equações para eliminar f_x , f_y e f_z da primeira equação, reduz-se o problema à seguinte equação para f_s :

$$\frac{\hbar^2}{2l^2} \left[-\frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, E)} \frac{d}{dz} + \frac{(z - k_y)^2 + k_x^2}{m(z, E)} \right] f_s + [V(z) + \Delta(z) - E] f_s = 0, \quad (4.10)$$

onde agora z e k_α são dados em unidades de l e $1/l$ respectivamente, e

$$m(z, E) = \frac{\hbar(E - V(z) + \Delta(z))}{2P^2}. \quad (4.11)$$

Para deduzir as condições de contorno na interface, introduz-se uma região bem fina na interface; integra-se a equação (4.10) e faz-se com que a largura da camada tenda a zero. As condições obtidas são f_s contínua e

$$\frac{1}{m(z, E)} \frac{d}{dz} f_s \quad (4.12)$$

contínuo.

Figura 4.5 - Parametrização energética da super-rede no modelo de duas bandas e solução do modelo para o *bulk* (i.e., V e Δ constantes).

4.5 Massa Efetiva Renormalizada

A equação (4.10) se parece com uma equação de Schrödinger mas não é uma equação de autovalores, uma vez que o operador hamiltoniana depende de E . Ela pode a princípio ser resolvida autoconsistentemente. Para os níveis de condução, no entanto, existe uma maneira muito mais simples e elegante. Neste caso

$$\varepsilon = E - V_p - \Delta_p, \quad (4.13)$$

ou seja, a energia medida a partir do fundo do poço é um parâmetro pequeno comparado com as outras energias envolvidas no problema. Escrita em termos de ε e utilizando a relação (4.5), obtém-se:

$$\frac{1}{E - V(z) + \Delta(z)} = \begin{cases} \frac{2}{\varepsilon + 2\Delta_p} = \frac{1}{\Delta_p} [1 + \frac{\varepsilon}{2\Delta_p} + \dots] & \text{no poço} \\ \frac{2}{\varepsilon + 2\tilde{\Delta}_b} = \frac{1}{\tilde{\Delta}_b} [1 + \frac{\varepsilon}{2\tilde{\Delta}_b} + \dots] & \text{na barreira,} \end{cases} \quad (4.14)$$

onde

$$\tilde{\Delta}_b = \Delta_b - Q(\Delta_b - \Delta_p). \quad (4.15)$$

A energia da primeira subbanda de condução pode ser estimada (figura 4.4) em $\varepsilon \sim 60 \text{ meV}$, o que dá: $\frac{\varepsilon}{2\Delta_p} \simeq 0,04$ e $\frac{\varepsilon}{2\tilde{\Delta}_b} \simeq 0,02$. Na aproximação de primeira ordem, obtém-se:

$$m(z, E) = \begin{cases} m_p^* & \text{no poço} \\ \tilde{m}_b^* = m_b^* - Q(m_b^* - m_p^*) & \text{na barreira,} \end{cases} \quad (4.16)$$

onde

$$m_{p,b}^* = \frac{\hbar^2 \Delta_{p,b}}{P^2} \quad (4.17)$$

são as massas efetivas do *bulk*.

Obteve-se assim uma equação de Shrödinger efetiva com condições de contorno Ben Daniel-Duck (1966) e massa efetiva renormalizada. No poço, a massa efetiva renormalizada é igual à do *bulk*, o que não ocorre na barreira. Isto explica por que um simples cálculo de massa efetiva com apenas uma banda consegue reproduzir bem os dados experimentais com uma massa efetiva diferente da do *bulk*. A massa efetiva renormalizada na barreira é sempre menor que a do *bulk* e depende do *band-offset* Q . Usando $1,52\text{eV}$ para a energia de *gap* do GaAs, $3,13\text{eV}$ para a do AlAs e $Q = 0,66$ (Madelung 1987), $m_p^* = 0,067m_e$ resulta em $\tilde{m}_b^* = 0,09m_e$, o que significa uma redução de 35% do valor do *bulk* ($m_b^* = 0,15m_e$). A inclusão do termo seguinte na expansão (4.14) altera a massa efetiva renormalizada em menos 3%. Este valor para a massa efetiva na barreira de AlAs concorda com a constante de propagação imaginária correspondente da estrutura eletrônica calculada por Schulman e Chang (1985).

Com a massa renormalizada (4.16), pode-se resolver a equação (4.10) com alta precisão pelo método dos elementos finitos. O procedimento do cálculo numérico está descrito em detalhes no Apêndice D. A equação (4.10) com a massa efetiva renormalizada transforma-se numa equação de autovalores do seguinte tipo:

$$\left[-\frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + V_{k_y}(z)\right] f_n = \varepsilon_n f_n \quad . \quad (4.18)$$

Os níveis de energia do elétron serão dados por:

$$E_n(k_y, k_x) = \varepsilon_n(k_y) + k_x^2 \quad . \quad (4.19)$$

Observe que devido à periodicidade da super-rede $V_{k_y}(z)$ e, portanto, $\varepsilon_n(k_y)$ são periódicos em k_y . O valor de k_y corresponde à posição do centro da órbita ciclotrônica. A figura 4.6 mostra esquematicamente o potencial V_{k_y} para dois valores de k_y . O primeiro representa o caso da órbita centrada na barreira ($k_y = 0$) e o segundo, o da órbita centrada no poço. Nas figuras 4.7 e 4.8 mostra-se a amplitude da função envelope obtida para os quatro primeiros

Figura 4.6 - Ilustração da variação do potencial efetivo $V_{k_y}(z)$ em função de k_y .

Figura 4.7 - Funções envelope para os estados fundamental e primeiro excitado com $k_y = 0$ (i.e., órbita centrada na barreira), com $B = 14T$, onde l_B é o comprimento magnético.

Figura 4.8 - Outros estados excitados.

níveis com $k_y = 0$. Percebe-se que as funções se alastram por vários períodos da super-rede. Estes estados são degenerados devido à periodicidade de $\epsilon_n(k_y)$. Eles são, no entanto, menos degenerados que os níveis de Landau.

Na figura 4.9 são mostrados os 5 primeiros níveis ($\epsilon_n(k_y), n = 0, \dots, 4$) calculados para uma super-rede de AlAs/GaAs com $L_p = 73,6\text{\AA}$ e $L_b = 10,8\text{\AA}$ e sob campo $B = 10T$ em função do centro da órbita ciclotrônica $R_z = k_y l^2$ com origem no centro de uma barreira. A título de referência, aparece na figura à esquerda a primeira minibanda da super-rede em $B=0$. Repare a alta dispersão dos níveis quando ultrapassam a primeira minibanda. Quando o campo é menor, a dispersão é menor (figura 4.10), o que está em acordo qualitativo com os resultados experimentais.

O espectro de absorção (figura 4.2) é dominado pela ressonância ligada à barreira, a qual corresponde às transições entre níveis com $R_z = 0$. O pico de absorção ocorre no comprimento de onda que corresponde à energia de transição assinalada na figura 4.9. Na figura 4.11 é comparada a energia de transição calculada com a posição do pico dominante no espectro de absorção em função da intensidade do campo. Estão ali representados pela linha tracejada os resultados da teoria de massa efetiva comum de uma banda, i.e., sem a massa efetiva renormalizada. Nota-se inicialmente que a utilização da massa efetiva renormalizada resulta em uma sensível melhora na descrição dos dados experimentais. Quando o campo é pequeno, as órbitas ciclotrônicas são grandes, o elétron passa mais tempo no GaAs e a massa efetiva renormalizada tem menor efeito.

A convolução do espectro com uma função de alargamento de linha por espalhamento e resolução do aparelho desloca a posição do pico um pouco acima de sua verdadeira posição (Brozak *et al* 1990). Levando em conta este efeito, espera-se qualitativamente que a concordância melhore ainda mais.

Aparecem também na figura os resultados obtidos com o campo paralelo à direção de crescimento. Neste caso, a linha tracejada corresponde à massa efetiva no ponto Γ no GaAs e a linha contínua, à massa ciclotrônica calculada. Esta última é maior que a primeira

Figura 4.9 - Primeira minibanda com $B=0$ e os primeiros 5 níveis magnéticos com $B=10\text{T}$ e $k_x = 0$ em função da posição do centro da órbita. L representa o período da super-rede. A linha tracejada corresponde aos resultados sem o uso da massa efetiva renormalizada.

Figura 4.10 - Níveis magneto-elétricos agora com $B=4\text{T}$.

Figura 4.11 - Comparação entre as energias ciclotrônicas medidas experimentalmente e as calculadas nesta tese com campo magnético aplicado paralelamente (círculos) e transversalmente (quadrados) à direção de crescimento. A linha contínua corresponde aos cálculos com a massa efetiva renormalizada e a tracejada, aos cálculos com a massa do *band-edge*.

devido à contribuição da função de onda que penetra na barreira.

Por fim, a figura 4.12 mostra a dependência da energia ciclotrônica com a largura do poço L_p e da barreira L_b com o período fixo. As curvas pontilhadas mostram o efeito de se aumentar ou diminuir a largura da barreira $1/4$ de uma camada atômica ($0,6\text{\AA}$). A alta sensibilidade que se observa demonstra a importância de ambos, modelo teórico e experiência, para a Física do tunelamento através de barreiras semicondutoras.

Figura 4.12 - Sensibilidade do modelo e da experiência com variações na largura da barreira (com o período fixo). As linhas tracejadas são o resultado de aumentar e de diminuir a barreira 1/4 de uma camada atômica.

Capítulo 5

Conclusão e Sugestões para Pesquisas Futuras

Esta tese apresentou um modelo teórico e discutiu as propriedades eletrônicas básicas de um poço quântico fracamente dopado e compensado. Obtiveram-se resultados importantes como a distribuição dos doadores neutros e o Coulomb-*Gap* bidimensional. Abre-se com esta tese uma ampla área de pesquisa. Partindo dos resultados obtidos e utilizando os métodos apresentados, é possível investigar por exemplo as propriedades ópticas ligadas à absorção por impureza e as propriedades de transporte por estados localizados via mecanismo de *hopping*.

A pesquisa em transporte via *hopping* intensificou-se recentemente com os desenvolvimentos ligados aos efeitos de interferência quântica. No entanto, a maior parte dos trabalhos continua sendo sobre sistemas idealizados. Seria interessante obter resultados mais

diretamente comparáveis com a experiência e aproveitar as vantagens e todo o esforço concentrado nas heteroestruturas semicondutoras.

Com o surgimento de experiências com poços quânticos dopados que investigam efeitos de compensação (Stepniewski *et al* 1989), aumenta o interesse de estender as simulações desta tese para o caso de temperatura finita como já foi feito no caso do *bulk*.

Como visto, o Coulomb-*Gap* ocorre na energia de Fermi que separa os estados ocupados dos desocupados. Estes estados próximos a E_F estão separados no espaço por grandes distâncias. A inclusão do *overlapping* num tratamento quântico não destrói o Coulomb-*Gap*. A pesquisa nesta área renovou seu interesse com o efeito Hall fracionário (Efros, a ser publicado).

A simulação Monte Carlo desta tese pode ser facilmente adaptada para obter as propriedades eletrônicas de fios quânticos fracamente dopados e compensados. O interesse em fios quânticos tem crescido bastante e tais resultados serão certamente importantes.

O conhecimento envolvido no Capítulo 3 desta tese sobre estruturas altamente dopadas deve ser aplicado na investigação dos efeitos da desordem, em geral ignorados, nos sistemas com δ -*doping* de maior importância tecnológica.

Dentro do estudo das sub-bandas de condução de uma super-rede sob campo magnético transversal, foi introduzido nesta tese o conceito de massa efetiva renormalizada. Resta ainda explorar este conceito em outros problemas de transporte vertical como, o tunelamento ressonante por exemplo.

De maneira geral a massa efetiva renormalizada é útil nos cálculos das subbandas de condução das super-redes com semicondutores de *gap* estreito e das super-redes do tipo II.

Os efeitos do spin do elétron foram completamente desprezados. Existe nesta área uma quantidade enorme de trabalho que só agora começa a ser feito (Potemski *et al* 1989, Uenoyama and Sham 1990, Freeman *et al* 1990, de Andrada e Silva and Sham a ser publicado). O spin do elétron influencia a polarização da radiação.

Apêndice A

Simulação Monte Carlo: Algoritmo

É apresentado neste apêndice o algoritmo utilizado na simulação Monte Carlo para minimizar a energia total do sistema e encontrar a distribuição de elétrons no estado fundamental. O algoritmo é essencialmente o mesmo que o originalmente introduzido por Baranovskii *et al* (1979).

Na primeira parte do programa faz-se uso de um gerador de números aleatórios para gerar as coordenadas das impurezas e a distribuição inicial dos $(1 - k)N$ elétrons sobre os N doadores.

Através da equação (2.7) são calculadas a seguir as energias E_i para todos os doadores. Feito isso seleciona-se, entre os estados ocupados, o de maior energia ε_v , e entre os desocupados, o de menor energia ε_c .

Quando $\varepsilon_v > \varepsilon_c$, como em geral é o caso, chama-se uma sub-rotina para formatar uma energia de Fermi (sub-rotina E_F), ou seja, fazer com que os estados ocupados sejam os de menor energia. Isto é feito da seguinte maneira: transfere-se o elétron no sítio com energia ε_v para o sítio desocupado com menor energia ε_c ; recalculam-se todas as energias E_i e acham-se os novos valores para ε_v e ε_c . Se ε_v continuar maior que ε_c o processo será repetido até que $\varepsilon_c > \varepsilon_v$.

A próxima etapa consiste em minimizar a energia do sistema em relação a transições de um elétron. Quando um elétron no sítio i é transferido para um sítio j desocupado, a energia total do sistema sofre a seguinte variação:

$$\Delta_{ij} = \varepsilon_j - \varepsilon_i - \frac{2}{r_{ij}} . \quad (\text{A.1})$$

Isto decorre da equação (2.8) para a energia total, mas também pode ser visto como sendo a energia necessária para criar um par elétron-buraco. No estado fundamental, por definição, esta variação de energia deve ser positiva qualquer que seja o par de estados i ocupado e j desocupado. O programa testa o sinal de Δ_{ij} para todos os pares ij . Quando um Δ_{ij} negativo é encontrado, o elétron é transferido do sítio i para o sítio j e a sub-rotina E_F é chamada novamente.

Quando todos Δ_{ij} forem positivos, parte-se para o cálculo das propriedades do pseudo-estado fundamental encontrado (densidade de estados, energia de Fermi, etc.). Os resultados de cada configuração são armazenados e no final é feita uma média sobre todas as configurações. Na prática, o número de configurações utilizadas é ditado por uma tolerância preestabelecida nas flutuações estatísticas.

Apêndice B

Coulomb-*Gap* na Densidade de Estados

Dá-se aqui uma breve introdução à origem e forma do Coulomb-*Gap* na densidade de estados de uma partícula de sistemas desordenados com estados localizados. A discussão aqui segue a exposição dada por Shklovskii e Efros (1984).

O Coulomb-*Gap* se origina da expressão do apêndice anterior para a variação da energia total com a transição de um elétron:

$$\Delta_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i - \frac{2}{r_{ij}} . \quad (\text{B.1})$$

Ela será sempre positiva para o estado fundamental qualquer que seja o par de estados i ocupado e j desocupado. Isto implica que:

$$\varepsilon_j - \varepsilon_i > \frac{2}{r_{ij}} . \quad (B.2)$$

Portanto os estados i e j , ambos com energia perto de E_F , devem estar bem separados no espaço. Considere os estados com energia dentro de uma faixa estreita ao redor de E_F de largura $\bar{\varepsilon}$. Estados de ambos os lados de E_F nesta faixa estarão separados por uma distância mínima $r = 2/\bar{\varepsilon}$. Portanto, a concentração desses estados

$$n(\bar{\varepsilon}) = \int_{E_F - \bar{\varepsilon}/2}^{E_F + \bar{\varepsilon}/2} D(E) dE \quad (B.3)$$

não pode ser menor que $(\frac{\bar{\varepsilon}}{2})^d$ onde d é a dimensão do espaço, de onde se conclui que a densidade de estados,

$$D(E) = \frac{d}{dE} n(E) , \quad (B.4)$$

deve ir a zero pelo menos tão rapidamente quanto E^{d-1} .

Efros (1976) foi mais além e concluiu que $D(E) = \alpha E^{d-1}$ é de fato a forma de decaimento correta da densidade de estado no Coulomb-Gap. Ele também foi capaz de calcular a constante α , que é independente do valor da compensação e da concentração de impurezas.

Apêndice C

Expansão Diagramática de Matsubara e Toyosawa

O método de Matsubara e Toyosawa lida com a desordem não diagonal. Por simplicidade, a origem das energias foi escolhida de forma a eliminar a parte diagonal da hamiltoniana que, portanto, fica da seguinte forma:

$$H = \sum_{ij} V_{ij} |i\rangle\langle j| . \quad (\text{C.1})$$

Procura-se aqui calcular a média configuracional da seguinte função de Green de uma partícula:

$$G_{ii}(\omega) = \langle i | \frac{1}{\omega - H} | i \rangle . \quad (\text{C.2})$$

Para tanto, expande-se a função de Green acima usando a seguinte igualdade:

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z} + \frac{1}{z} H \frac{1}{z-H} = \frac{1}{z} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{H}{z} \right)^n \right], \quad (6.3)$$

o que dá:

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega} \left(1 + \frac{V_{ii}}{\omega} + \frac{\sum_j V_{ij} V_{ji}}{\omega^2} + \frac{\sum_{j,k} V_{ij} V_{jk} V_{ki}}{\omega^3} + \dots \right) \quad (6.4)$$

$$= \frac{1}{\omega} \xi(\omega) . \quad (6.5)$$

Toma-se agora a média sobre as configurações (equação (3.10)),

$$\langle G_{ii}(\omega) \rangle = \frac{\langle \xi(\omega) \rangle}{\omega}, \quad (6.6)$$

com

$$\langle \xi(\omega) \rangle = 1 + \sum_{\nu=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{\nu} \frac{n_d^{\mu}}{\omega^{\nu+1}} \int d^d R_1 \cdots \int d^d R_{\mu} V(R_{i_1}) \cdots V(R_{\nu i}) \quad (6.7)$$

V_{ii} foi incluído em $\varepsilon_i = \varepsilon$ que, por sua vez, foi escolhido como a origem das energias. Cada termo da expansão acima pode ser visto como um trajeto que parte do sítio (impureza) i , passa por ν impurezas, sendo apenas μ delas distintas, e volta para o sítio de partida i . Diagramaticamente a expansão pode ser representada pela série da figura C1a.

À medida que o número de impurezas intermediárias aumenta, gráficos cada vez mais complicados vão sendo possíveis. No entanto, é possível selecionar uma família de diagramas dominantes e efetuar uma soma infinita. Seguindo Matsubara e Toyosawa, inicia-se classificando os termos de acordo com o número de vezes que as trajetórias correspondentes voltam à impureza i . A série é reescrita como mostrado na figura C1b. Repare que nenhuma aproximação foi feita até agora. O problema consiste em calcular η . A função de Green média será dada por:

a)

$$\langle \xi \rangle = 1 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots$$

Diagram 1: A horizontal line with two vertices labeled i and j , connected by a loop.

Diagram 2: A horizontal line with three vertices labeled i , j , and k , connected by two loops.

Diagram 3: A horizontal line with three vertices labeled i , j , and k , connected by three loops.

$$0_i = n \int d^d R_i \quad e \quad \frac{V_{ij}}{\omega}$$

b)

$$\langle \xi \rangle = 1 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots$$

Diagram 1: A horizontal line with two vertices labeled i and j , connected by a loop.

Diagram 2: A horizontal line with three vertices labeled i , j , and k , connected by two loops.

Diagram 3: A horizontal line with four vertices labeled i , j , k , and l , connected by three loops.

$$= 1 + \eta + \eta^2 + \eta^3 + \dots = (1 - \eta)^{-1}$$

c)

$$\text{diagram 1} = \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots$$

Diagram 1: A vertical line with a circle at the top.

Diagram 2: A vertical line with a dot at the top.

Diagram 3: A vertical line with two dots at the top.

Diagram 4: A vertical line with three dots at the top.

Figura C1 - Diagramas do método de Matsubara e Toyosawa.

$$\langle G_{ii}(\omega) \rangle = \frac{1}{\omega} \frac{1}{1 - \eta} . \quad (C.8)$$

A idéia de Matsubara e Toyosawa para o cálculo de η consiste inicialmente em somar apenas os diagramas ilustrados na figura C1c. Esta escolha favorece as trajetórias que não passam mais de uma vez pela mesma impureza. Quanto maior e mais homogênea for a concentração de impurezas, melhor deverá ser a aproximação. Posteriormente MT aproximam:

$$\bullet_i = \langle \xi \rangle n_d \int d^d R_i . \quad (C.9)$$

Nesta aproximação η será dado por:

$$\eta = \frac{n_d \langle \xi \rangle}{\omega^2} \int d^d R_1 V(\vec{R}_1) V(-\vec{R}_1) \quad (C.10)$$

$$+ \frac{n_d^2 \langle \xi \rangle^2}{\omega^3} \int d^d R_1 d^d R_2 V(\vec{R}_1) V(\vec{R}_2) V(-\vec{R}_1 - \vec{R}_2) + \dots , \quad (C.11)$$

onde a origem das coordenadas corresponde à posição da impureza i . Escrevendo $V(\vec{R})$ em função de sua transformada de Fourier, i.e., usando:

$$V(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k e^{i\vec{R} \cdot \vec{k}} V(\vec{k}) , \quad (C.12)$$

obtem-se:

$$\eta = \frac{n_d \langle \xi \rangle}{\omega^2 (2\pi)^2} \int d^d k V^2(\vec{k}) \left[1 + \frac{n_d \langle \xi \rangle V(\vec{k})}{\omega} + \left(\frac{n_d \langle \xi \rangle V(\vec{k})}{\omega} \right)^2 + \dots \right] \quad (C.13)$$

$$= \frac{n_d \langle \xi \rangle}{\omega^2 (2\pi)^2} \int d^d k \frac{V^2(\vec{k})}{1 + \frac{n_d \langle \xi \rangle V(\vec{k})}{\omega}} . \quad (C.14)$$

Finalmente, usando a equação (C.8) para eliminar η , obtém-se a equação integral (3.12) utilizada nos cálculos da densidade de estados no Capítulo 3.

Apêndice D

Solução Numérica da Equação de Schrödinger

Discute-se neste apêndice a solução numérica da seguinte equação de Schrödinger unidimensional:

$$\left[-\frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + \frac{(z - k_y)^2}{m^*(z)} + V(z)\right]\phi(z) = E\phi(z) , \quad (D.1)$$

onde

$$V(z) = \sum_{-\infty}^{+\infty} v(z - np) ; \quad v(z) = \begin{cases} V_0 & |z| \leq L/2 \\ 0 & |z| > L/2 \end{cases} \quad (D.2)$$

é o potencial da super-rede, sendo L a largura dos poços, p o seu período e

$$m^*(z) = \begin{cases} m_b & \text{na barreira} \\ m_w & \text{no poço} \end{cases} . \quad (0.3)$$

Esta é a equação (4.10) na aproximação da massa efetiva renormalizada. Como em cada região, no poço ou na barreira, tanto $V(z)$ como $m^*(z)$ são constantes, a equação acima tem como solução geral em cada região as funções parabólicas cilíndricas. Isto a princípio permite a resolução da equação através do método da matriz de transferência. Mas as funções parabólicas cilíndricas são conhecidas em representação integral ou expansão assintótica e o uso de tabelas e interpolações se faz necessário (Abramowitz *and* Stegun 1965). Tendo em vista um inevitável tratamento numérico, o fato de os auto-estados $\phi(z)$ serem neste caso todos estados ligados ($\phi(z) \rightarrow 0$ quando $|z| \rightarrow \infty$) sugere fortemente o uso do método dos elementos finitos (Zienkiewicz *and* Morgan 1983). O método, além de simples e geral, fornece resultados com uma precisão alta e diretamente controlável.

O método consiste em discretizar a equação e transformar o problema naquele de diagonalizar uma grande matriz simétrica e trigonal. Parte-se de um conjunto (*mesh*) regular de pontos $\{z_n\}$; $n=0, \dots, N$ com $z_n - z_{n-1} = \Delta$. Os limites z_0 e z_N são simetricamente dispostos em relação ao potencial de modo que $\phi(z_0) = \phi(z_N) = 0$. Usando este *mesh* de pontos para discretizar a equação, obtém-se (para simplificar as expressões considera-se por hora $m^*(z) = \text{const.} = 1$):

$$-\frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta} + [(z_l - k_y)^2 + V_l]\phi_l = E\phi_l , \quad (0.4)$$

onde $\phi_l = \phi(z_l)$ e $V_l = V(z_l)$. É fácil ver que o problema se reduz então ao de diagonalizar a seguinte matriz:

$$\begin{pmatrix} a_1 & -1 & & & \\ -1 & a_2 & -1 & & \\ & -1 & a_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & a_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (D.5)$$

onde

$$a_n = 2 + \Delta^2[(z_n - k_y)^2 + V_n - E] . \quad (D.6)$$

É em geral necessário trabalhar com valores grandes de N ($\sim 500 - 100$) para obter uma precisão satisfatória. A precisão pode ser controlada monitorando a variação dos resultados em função de N . O problema de diagonalizar matrizes grandes é imensamente simplificado quando estas, como neste caso, são simétricas e trigonais. A diagonalização é feita numericamente com bastante rapidez e obtêm-se de uma só vez $(N - 1)$ auto-energias. Como em geral o *mesh* escolhido é tal que a condição $\phi(z_0) = \phi(z_N) = 0$ seja satisfeita apenas pelos estados de mais baixa energia, as $(N - 1)$ auto-energias E_n serão aproximações cada vez piores das verdadeiras auto-energias à medida que n cresce. Uma vez conhecido E_n , $\phi_n(z)$ pode ser facilmente obtida integrando a equação. Nos cálculos desta tese foi exigida uma convergência dos resultados com tolerância de 1%.

O método dos elementos finitos permite que a interface seja modelada através de diferentes tipos de discretizações possíveis. A figura D1 mostra, por exemplo, dois tipos diferentes de discretização. O tipo 1 representará uma interface mais branda e o tipo 2, uma mais brusca. Considerando agora a diferença nas massas efetivas dos materiais, obtém-se as seguintes matrizes:

Tipo 1

Tipo 2

Figura D1 - Dois tipos distintos de discretização que representam diferentes modelos de interface.

Tipo 1.

$$\begin{pmatrix} a_1^\omega & -1 & & & & & \\ -1 & a_2^\omega & -1 & & & & \\ & -1 & a_3^i & -\gamma & & & \\ & & -\gamma & a_4^b & -\gamma & & \\ & & & -\gamma & a_5^i & -1 & \\ & & & & -1 & a_6^\omega & \ddots \\ & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (0.7)$$

onde

$$\gamma = \frac{m_w}{m_b}, \quad (0.8)$$

$$a_n^\omega = 2 + (\Delta z_n)^2, \quad (0.9)$$

$$a_n^i = (1 + \gamma) + \frac{\Delta^2}{2}[(1 + \gamma)z_n^2 + V_0], \quad (0.10)$$

$$a_n^b = 2\gamma + \Delta^2(\gamma z_n^2 + V_0). \quad (0.11)$$

Os índices ω , i e b representam o poço, a interface e a barreira, respectivamente. Repare que neste exemplo a barreira tem espessura igual a 2Δ .

Tipo 2.

$$\begin{pmatrix} a_1^\omega & -1 & & & & & \\ -1 & a_2^{i\omega} & -\beta & & & & \\ & -\beta & a_3^{ib} & -\gamma & & & \\ & & -\gamma & a_4^b & -\gamma & & \\ & & & -\gamma & a_5^{ib} & -\beta & \\ & & & & -\beta & a_6^{i\omega} & -1 \\ & & & & & -1 & a_7^\omega & \ddots \\ & & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (0.12)$$

onde

$$\beta = \frac{1+\gamma}{2} , \quad (0.13)$$

$$a_n^\omega = 2 + (\Delta z_n)^2 , \quad (0.14)$$

$$a_n^{i\omega} = \frac{3+\gamma}{2} + (\Delta z_n)^2 , \quad (0.15)$$

$$a_n^{ib} = \frac{1+3\gamma}{2} + \Delta^2[\gamma z_n^2 + V_0] , \quad (0.16)$$

$$a_n^b = 2\gamma + \Delta^2(\gamma z_n^2 + V_0) . \quad (0.17)$$

Neste caso, a barreira tem 3Δ de largura.

Os resultados relevantes para esta tese se mostraram pouco sensíveis ao tipo de discretização empregada. Espera-se que as considerações acima sejam mais importantes em sistemas onde a estrutura da interface tenha maior efeito, como em heterojunções, por exemplo.

*

Referências

- Abramowitz, M. and Stung, I.A. (Eds) *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York 1965).
- Allen, S.J., Duffield, T., Bhat, R., Koza, M., Tamargo, M.C., Harbison, J.P., DeRosa, F., Hwang, D.M., Grabbe, P. and Rush, K.M. (1987), *Proceedings of the International Conference on the Application of High Magnetic Fields on Semiconductor Physics 1986*, pg. 184.
- Ando, T., Fowler, A.B. and Stern, F. (1982), *Rev. of Modern Phys.* **54**, 437.
- Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. *Solid State Physics* (Holt-Saunders, 1976).
- Baranovskii, S., Efros, A.L., Gelmont, B.L. and Shklovskii, B.I. (1979) *Journal of Physics C* **12**, 1023.
- Baranovskii, S., Shklovskii, B. I., and Efros, A. L. (1984), *Soviet Physics - JETP* **60**, 1031.

- Baranovskii, S., Gel'mont, B.L., Golubev, V.G., Ivanov-Omskii, V.I. and Osutin, A.V. (1987), *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **46**, 405.
- Baranovskii, S., Gel'mont, B.L., de Andrada e Silva, E. A. and da Cunha Lima, I.C. (1988), *Sov. Phys. Semiconductors* **22**, 1002.
- Bastard, G. (1981), *Physical Review B* **24**, 4714.
- Bastard, G. (1982), *Physical Review B* **25**, 7584.
- Bastard, G., *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (les éditions de physique, 1989).
- Belle, G., Maan, J.C. and Weimann, G. (1985), *Solid State Communications* **56**, 65.
- Ben Daniel, D.J. and Duke, C.B. (1966), *Physical Review* **152**, 683.
- Bregman, G. (1984), *Phys. Reports* **107**, 1.
- Brozak, G., de Andrada e Silva, E.A., Sham, L.J., DeRosa, F., Miceli, P., Schwarz, S., Harbison, J.P., Florez, L.T. and Allen, Jr., S.J. (1990), *Physical Review Letters* **64**, 471.
- Brum, J.A. (1985), *Solid State Communications* **54**, 179.
- Bryant, G.W. (1984), *Physical Review B* **29**, 6632.
- Capasso, F., Mohammed, K. and Cho, A.Y. (1986), *IEEE J. Quantum Electronics* **QE-22**, 1853.
- Chaudhuri, S. (1983), *Physical Review B* **28**, 4480.
- Chaudhuri, S. and Bajaj, K.K. (1984), *Physical Review B* **29**, 1803.
- Colchesqui, B. C., Emmel, P., de Andrada e Silva, E. A., and da Cunha Lima, I. C. (1989), *Physical Review B* **40**, 12513.

- Davies, J. H., *and* Franz, J. R. (1986), *Physical Review Letters* **57**, 475.
- Davies, J. H., Lee, P. A., *and* Rice, T. M. (1984), *Physical Review B* **29**, 4260.
- de Andrada e Silva, E. A., *and* da Cunha Lima, I. C. (1987a), *Physical Review Letters* **58**, 925.
- de Andrada e Silva, E. A., *and* da Cunha Lima, I. C. (1987b), *Solid State Communications* **64**, 113.
- de Andrada e Silva, E. A., da Cunha Lima, I. C., Ferreira da Silva, A., *and* Leal, C. E., (1988a), *Surface Science* **196**, 352.
- de Andrada e Silva, E. A., da Cunha Lima, I. C., Ferreira da Silva, A., *and* Leal, C. E., (1988b), *Physical Review B* **37**, 8228.
- de Andrada e Silva, E. A., da Cunha Lima, I. C. *and* Ferreira da Silva, A., (1988c), *Physical Review B* **37**, 8537.
- de Andrada e Silva, E. A., *and* da Cunha Lima, I. C. (1989a), *Modern Physics Letters B* **3**, 815.
- de Andrada e Silva, E. A., *and* da Cunha Lima, I. C. (1989b), *Physical Review B* **39**, 10101.
- de Andrada e Silva, E.A. *and* Sham, L.J. (1990), *Bulletin of the APS*
- Döhler, G.H. (1990), *Electron in Superlattices*, Lecture Notes for the Spring College in Condensed Matter, ICTP.
- Doezema, R.E., Nealon, M. *and* Whitmore, S. (1980), *Physical Review Letters* **45**, 1593.
- Duffield, T., Bhat, R., Koza, M., Tamargo, M.C., Harbison, J.P., De Rosa, G., Hwang, D.M., Grabbe, P. *and* Allen, S.J. (1986a), *Solid State Communications* **60**, 557.

- Duffield, T., Bhat, R., Koza, M., De Rosa, G., Hwang, D.M., Grabbe, P. and Allen, S.J. (1986b), *Physical Review Letters* **56**, 2724.
- Duffield, T., Bhat, R., Koza, M., De Rosa, Rush, K. M. and Allen, S.J. (1987), *Physical Review Letters* **59**, 2693.
- Duffield, T., Bhat, R., Koza, M., De Rosa, G., Hwang, D.M., Grabbe, P. and Allen, S.J. (1988), *Solid State Communications* **65**, 1483.
- Efros, A. L., and Shklovskii, B. I. (1975), *Journal Physics C* **8**, 149.
- Efros, A. L. (1976), *Journal of Physics C* **9**, 2021.
- Efros, A. L., Van Lien, N., and Shklovskii, B. I. (1979), *Journal Physics C* **12**, 1869.
- Efros, A. L., and Shklovskii, B. I. (1985) *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, Efros, A. L., and Pollak, M. (Eds.) (Elsevier, New York, 1985) Capítulo 5.
- Emmel, P., de Andrada e Silva, E. A., and da Cunha Lima, I. C. (1989), *Physical Review B* **40**, 3394.
- Esaki, L. and Tsu, R. (1970), *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61.
- Fabbri, M. (1984), *Correlação e Desordem em Semicondutores Dopados*, Tese de Doutorado, Instituto Tecnológico da Aeronáutica.
- Ferreira da Silva. A. (1979), *A Study of Disorder and Correlation Effects in Impure Semiconductors*, Tese de Doutorado, Linkoping University.
- Freeman, M.R., Awshalom, D.D., Hong, J.M. and Chang, L.L. (1990), *Physical Review Letters* **64**, 2430.
- Gossard, A.C., *Third Brazilian School of Semiconductors*, Eds. C.E.T. Gonçalves da Silva, L. E. Oliveira and J.R. Leite (World Scientific 1987), pg. 64.

- Grunewald, M., Ponemann, B., Schweitzer, L., e Wiirtz, D. (1982), Journal Physics C **15**, L1153.
- Hadley, B.D., Pollak, M. *and* Ortunho, M. (1988), Physical Review B **37**, 9006.
- Harper, P.G. (1955), Proc. Phys. Soc. London **A58**, 879.
- Heain, C.J., McInnes, J.A. and Butcher, P. (1982), Journal of Physics C **15**, 5013.
- Hofstadter (1976), Physical Review B **14**, 2239.
- Jarosik, N.C., McCombe, B.D., Shanabrook, B.V., Comas, J., Ralston, J. *and* Wicks, G. (1985), Physical Review Letters **54**, 1283.
- Kane, E.O. (1957), J. Phys. Chem. Solids **1**, 249.
- Keldysh, L.V. (1962), Soviet Physics - Solid State **4**, 1658.
- Kogan, Sh. M. *and* Van Lien, N. (1981), Sov. Phys. Semiconductors **15**, 26.
- Kogan, Sh. M., Van Lien, N. *and* Shklovskii, B.I. (1981), Sov. Phys. JETP **51**, 971.
- Lane, P. *and* Greene, R.L. (1986), Physical Review B **33**, 5871.
- Larsen, D.M. (1973), Physical Review B **8**, 535.
- Lee, J. *and* Spector, H.N. (1984), J. Vac. Sci. Technol. **B2**, 16.
- Lu, Y-T. *and* Sham, L.J. (1989), Physical Review B **40**, 5567.
- Luttinger, J.M. *and* Kohn, W. (1955), Phys. Rev. **97**, 869.
- Maan, J.C. (1986), Superlattices and Microstructures **2**, 557.
- Maan, J.C. (1987), Festkörperprobleme **27**, 137.

- MacDonald, A.A., Platzman, P.M. and Boebinger, G.S. (1990), *Physical Review Letters* **65**, 775.
- Madelung, O., *Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- Mahan, G.D., *Many-Particle Physics*, (Plenum, 1981).
- Mailhot, C., Chang, Y.-C., and McGill, T. C. (1982), *Physical Review B* **26**, 4449.
- Mason, B. A., and Das Sarma, S. (1986), *Physical Review B* **33**, 8379.
- Matsubara, T. and Toyosawa, Y. (1961), *Prog. Theor. Phys.* **26**, 739.
- Narayamurti, V. (1987), *Physics Today*, oct., pg. 24.
- Oliveira, L.E. and Falicov, L.M. (1986), *Physical Review B* **34**, 8676.
- Perondi, L.F. (1986), *Influência dos Estados de Impureza e de Condução sobre as Propriedades Eletrônicas de Semicondutores Dopados*, Dissertação de Mestrado, INPE.
- Potemski, M., Maan, J.C., Fasolino, A., Ploog, K. and Weimann, G. (1989), *Physical Review Letters* **63**, 2409.
- Prange, R.E. and Girvin, S.M. (Eds.), *The Quantum Hall Effect*, (Spring Verlag 1987).
- Sakaki, H. (1980), *Jpn. J. Appl. Physics* **19**, L735.
- Shanabrook, B.V. (1986), *Surface Science* **170**, 449.
- Shklovskii, B.I. and Efros, A.L. (1980), *Sov. Phys. Semiconductors* **14**, 487.
- Shklovskii, B.I. and Efros, A.L., *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Spring-Verlag, New York, 1984).
- Shulman, S.A. and Chang, Y.-C. (1985), *Physical Review B* **31**, 2056.

Silin, A.P. (1985), Soviet Physics Usp. **28**, 972.

Sokoloff (1985), Phys. Reports **126**, 189.

Stepniewski, R. Huant, S., Martinez, G. and Etienne, B. (1989), Physical Review B **40**, 9772.

Stern, F. (1990), *Quantum Wires and Quantum Dots*, Lecture Notes Spring College in Condensed Matter, ICTP, Trieste IT.

Uenoyama, T. and Sham, L.J. (1990), Physical Review Letters **64**, 3070.

White, S.R. and Sham, L.J. (1981), Physical Review Letters **47**, 879.

Vignale, G. (1987), Physical Review B **36**, 8192.

Yonezawa, F., Ishida Y. and Martino, F. (1976), Journal of Physics F **6**, 1091.

Zienkiewicz, O.C. and Morgan, K., *Finite Elements and Approximations* (J.Willey & Sons 1983).

Zrenner, A., Reisinger, H., Koch, F., Ploog, K. and Maan, J.C. (1986), Physical Review B **33**, 5607.