

12/12/94

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS  
DE SUPER-REDES COM DOPAGEM PLANAR  
E DE HETEROESTRUTURAS EPITAXIAIS  
SEMICONDUCTORAS**

**Dmitri Beliaev**

Orientador

**Prof. Dr. José Roberto Leite**

**BANCA EXAMINADORA**

Prof. Dr. José Roberto Leite (IFUSP)	Tese apresentada ao Instituto
Prof. Dr. Paulo S. Guimarães (UFMG)	de Física da Universidade de
Prof. Dr. Eliermes A. Meneses (UNICAMP)	São Paulo para obtenção do
Prof. Dr. Luiz E. Oliveira (UNICAMP)	título de Doutor em Ciências.
Prof. Dr. José Kleber C. Pinto (EPUSP)	

*José Roberto Leite*

*Iberê Luiz Caldas*  
Prof. Iberê Luiz Caldas  
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

SÃO PAULO

1994



537.5

B 431-p

D

e.1

## FICHA CATALOGRÁFICA

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

Beliaev, Dmitri

Propriedades eletrônicas de super-redes com dopagem planar e de heteroestruturas epitaxiais semicondutoras. São Paulo, 1994.

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. Dr. José Roberto Leite

Unitermos: 1. Estrutura eletrônica; 2. Dopagem planar; 3. Super-redes; 4. Campo elétrico interno; 5. Fotorefletância; 6. Heteroestruturas.

USP/IF/SBI - 39/94



Prof. Dr. José Roberto Leite  
Presidente do Conselho de Administração  
1994

Prof. Dr. José Roberto Leite

"Ao jogar pedrinhas na água,  
olha os círculos delas se afastando,  
senão este será um vão entretenimento."

K.Prutkoff

## AGRADECIMENTOS

Ao Professor José Roberto Leite pela oportunidade posta à disposição, orientação solícita e generosa, compreensão, e apoio total.

Ao Professor Rolf Enderlein pela colaboração frutífera e benevolente, conversas edificantes, revisão do manuscrito, e vasta experiência adquirida.

À Professora Luisa Maria Ribeiro Scolfaro pela atenção amistosa constante, discussões indispensáveis, e ajuda inestimável na preparação e revisão do manuscrito.

Ao Júlio Antônio Nieri de Toledo Soares pela colaboração na parte experimental, interesse no trabalho, e convivência amistosa e agradável.

À Artemis Marti Ceschin pelo crescimento das amostras e coleguismo.

A todos os professores, colegas de pesquisa e de estudo, e aos amigos, os quais contribuíram direta ou indiretamente na evolução do trabalho e da vida.

Ao João Carlos pela confecção das figuras.

Ao CNPq pelo amparo financeiro.

# ÍNDICE

Resumo.....	i
Abstract.....	iii
INTRODUÇÃO GERAL.....	1
CAPÍTULO 1.	
Estrutura eletrônica de super-redes com dopagem planar...	10
1.1 Introdução.....	10
1.1.1. Dopagem tipo delta.....	10
1.1.2. Super-rede de deltas.....	13
1.2. Método de cálculo de estrutura eletrônica para super-rede de deltas.....	14
1.2.1. Descrição geral do modelo.....	14
1.2.2. Potencial de um elétron.....	15
1.2.3. Solução autoconsistente das equações de Schroedinger e de Poisson na aproximação da massa efetiva.....	20
1.3. Estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Si em GaAs.....	27
1.3.1. Descrição histórica e estado da arte.....	27
1.3.2. Estrutura eletrônica de super-redes de GaAs com dopagem planar de Si.....	30
1.3.3. Ocupações de sub-bandas e o limiar de energia (energia de corte) no espectro de fotoluminescência de excitação..	45
1.4. Estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Sb em Si.....	55
1.4.1. Campo de pesquisa.....	55
1.4.2. Resultados numéricos.....	56
1.4.3. Efeitos de acoplamento dos multi-vales relacionados ao mínimo da banda de condução do Si.....	67
1.5. Comentários finais.....	69
1.5.1. Análise comparativa e discussão dos resultados obtidos para super-redes de deltas em GaAs e Si.....	69
1.5.2 Futuras aplicações do método desenvolvido.....	70

## CAPÍTULO 2.

Campos elétricos internos em homo- e heteroestruturas semicondutoras.....	73
2.1. Introdução.....	73
2.2. Método de cálculo do perfil do campo elétrico interno.....	76
2.2.1. Cálculo do perfil do potencial e do campo elétrico no interior de homoeestruturas semicondutoras.....	76
2.2.2. Extensão do método para heteroestruturas compostas por camadas semicondutoras com dopagem tipo <b>n</b> .....	81
2.2.3. Procedimento de cálculo para heteroestruturas contendo camadas com dopagem tipo <b>n</b> e tipo <b>p</b> .....	85
2.2.4. Tratamento de heteroestruturas sob modulação óptica.....	87
2.3. Potencial e campo elétrico calculados numericamente.....	90
2.3.1. Perfis do potencial e do campo elétrico para homo- estruturas.....	90
2.3.2. Perfis do potencial e do campo elétrico para hetero- estruturas.....	93
2.4. Comentários finais.....	104

## CAPÍTULO 3.

Teoria da fotorefletância em heteroestruturas compostas por camadas inomogêneas.....	105
3.1. Introdução.....	105
3.1.1. Fotorefletância como espectroscopia de modulação.....	105
3.1.2. Fotorefletância aplicada à heteroestruturas.....	107
3.1.3. Objetivos do trabalho.....	110
3.2. Novo método de cálculo do coeficiente de reflexão em hetero- estruturas compostas por camadas inomogêneas.....	113
3.2.1. Formulação do problema.....	113
3.2.2. Solução da equação de onda pelo método da matriz de transferência.....	116
3.2.3. Determinação da matriz de transferência.....	118
3.2.4. Determinação do coeficiente de reflexão.....	121
3.2.5. Aplicação para o semi-espaço.....	123

3.3. Espectros de fotorefletância provenientes de homo- e hetero-estruturas inomogêneas tipo "bulk" .....	126
3.3.1. Investigação do espectro de fotorefletância proveniente do semi-espaço inomogêneo.....	126
3.3.2. Aplicação do método para heteroestruturas com camadas tipo "bulk" .....	134
3.4. Espectros de fotorefletância provenientes de poços quânticos.....	144
3.4.1. Discussão do problema.....	144
3.4.2. Estudo do espectro de fotorefletância em função da distância entre poço quântico e superfície da hetero-estrutura.....	145
3.5. Comentários finais.....	150
CONCLUSÕES.....	152
APÊNDICE A.	
Modelo teórico fenomenológico para transições ópticas nos espectros de fotorefletância provenientes das amostras com planos de dopagem tipo delta.....	158
APÊNDICE B.	
Desdobramento dos níveis de energia devido ao acoplamento de multi-vaies relegionados ao mínimo da banda de condução do Si causado pela flutuação do potencial no plano delta para super-redes de deltas tipo $n$ em Si. ....	170
REFERÊNCIAS.....	177

## RESUMO

Os resultados apresentados neste trabalho estão sistematizados em três partes. Em uma primeira etapa, efetuamos um estudo sistemático do comportamento da estrutura eletrônica em super-redes de deltas em função do período da super-rede e em função da concentração planar de dopantes. Uma nova abordagem, que se baseia no método celular e na solução autoconsistente das equações de Schroedinger e de Poisson, foi desenvolvida e aplicada para super-redes com dopagem planar tipo  $n$  em GaAs e em silício. Em ambos os casos, foi observada a transição de um comportamento eletrônico de carácter bi- para tridimensional conforme o período da super-rede diminui. No caso de super-redes de deltas de Si em GaAs foi empreendido o cálculo da energia de corte nos espectros de fotoluminescência de excitação. Uma boa concordância com as medidas experimentais foi obtida. O estudo da estrutura eletrônica para o caso de super-rede de deltas de Sb em Si foi pioneiro. Isto tornou os resultados de nossa investigação teórica de importância fundamental para experimentais e teóricos atuando na área. A concordância entre nossas previsões teóricas e dados experimentais da literatura demonstram a consistência e o poder da abordagem desenvolvida.

Em uma segunda etapa, foi efetuado o estudo da distribuição espacial do campo elétrico interno em heteroestruturas contendo camadas tipo "bulk", compostas por GaAs e (AlGa)As. Uma nova abordagem foi desenvolvida para a execução de cálculos dos perfis de potencial eletrostático e de campo elétrico, sem assumir a ionização total dos dopantes e a não-degenerescência do material. Nosso método transforma a equação de Poisson em uma equação

integral que deve ser resolvida autoconsistentemente. Os exemplos numéricos demonstram a aplicabilidade de nossa abordagem a sistemas reais. Perfis do campo elétrico calculados são usados para interpretar os espectros de fotorefletância.

Em uma terceira etapa, a teoria geral da fotorefletância de heteroestruturas semicondutoras foi desenvolvida neste trabalho para tornar a interpretação de espectros de fotorefletância precisa e de aplicação eficiente. Um novo método de cálculo do coeficiente de reflexão na presença de inhomogeneidade espacial da função dielétrica no interior de cada camada forneceu um novo patamar de compreensão dos espectros de fotorefletância. Este método é baseado na construção de uma matriz de transferência que inclui as inhomogeneidades no interior da camada de um modo integral. Portanto, para descrever uma camada de heteroestrutura é preciso ter apenas uma matriz de transferência. Os resultados de simulações numéricas de espectros da fotorefletância estão em uma concordância bastante boa com aqueles obtidos através de medidas ópticas. A eficiência de nosso método o torna aplicável à simulações tipo "on-line". Os resultados dos métodos anteriores são reproduzidos como casos limites de nossa abordagem geral.

## A B S T R A C T

The results presented in this work can be displayed along the following three lines. In the first we performed a systematical study of the electronic structure behavior in delta superlattices as a function of superlattice period and sheet doping concentration. A new approach, based on the cellular method and on the selfconsistent solution of Schroedinger and Poisson equations, was developed and applied to superlattices with n-type delta doping in GaAs and silicon. In both cases, a transition from bi- to three-dimensional electronic behavior with the decrease of superlattice period was observed. For Si delta-doping superlattices in GaAs we performed calculations of the energy threshold in the photoluminescence excitation spectra. A good agreement with experimentally measured values was observed. Our investigation of the electronic structure of Sb delta-doping superlattices in Si was a pioneer theoretical study. Due to this fact, the results of our work are of great importance for experimentalists and theoreticians acting in this area. The agreement between our theoretical predictions and the available experimental data demonstrates the consistency and the power of the developed approach.

Along the second line we studied electric field spatial distribution inside of heterostructures containing bulk layers of GaAs and (AlGa)As. A new approach was developed to calculate the electrostatic potential and electric field profiles, providing the possibility to take into account the incomplete ionization of impurities and the degeneracy of the materials. Our method transforms the Poisson equation into an integral equation, which must be solved selfconsistently. Numerical examples show the way to apply our

approach to real systems. Internal electric field profiles, calculated by means of our method are used to interpret photoreflectance spectra.

In the third line, a general theory of photoreflectance for semiconductor heterostructures was developed in this work to make the interpretation of photoreflectance spectra more precise and straightforward. A new method to calculate the reflection coefficient in the presence of weak spatial inhomogeneities of the dielectrical function inside each layer, provided us with a new degree of comprehension of the photoreflectance spectra. This method is based on the construction of a transfer matrix which includes the inhomogeneities inside the layer in an integral way. This explains why we need only one matrix to describe one layer of the heterostructure. Results of our numerical simulations are in very good agreement with data of optical measurements. The efficiency of our method makes it suitable for on-line simulations. The results of previous methods emerge from our general approach as limit cases.

## INTRODUÇÃO GERAL

Dentre os grandes avanços alcançados pelas técnicas de crescimento de materiais semicondutores a possibilidade de se obter interfaces abruptas e perfis de dopagem bem definidos tem recebido grande atenção [1-3]. Graças ao desenvolvimento das técnicas de crescimento epitaxial de cristais o confinamento espacial de portadores de carga (elétrons e/ou buracos) em estruturas semicondutoras tem tido grande progresso nos últimos anos. A possibilidade de ter os portadores quânticamente confinados em dimensões menores que três é de grande interesse básico e tecnológico, fornecendo a oportunidade de investigações experimentais relacionadas às propriedades de sistemas físicos bi-, uni- e zero-dimensional. Em particular, o confinamento bidimensional tem chamado muito a atenção nas últimas décadas pela possibilidade de sua utilização em dispositivos óptico-eletrônicos.

A dopagem chamada de 'planar', ou mais comumente de 'delta' ( $\delta$ ), consiste na tentativa de confinar átomos de impureza em uma única camada do semicondutor hospedeiro, perpendicular à direção de crescimento. O potencial de confinamento é criado dopando-se um cristal semicondutor de tal forma que os átomos de dopantes estejam estatisticamente distribuídos em um único plano. O sistema gerado por este tipo de dopagem tem sido vastamente estudado por apresentar características interessantes, como a geração de um potencial em forma de 'V' e de um gás de portadores de carga confinado neste potencial, dando origem, assim, a um sistema eletrônico quase bidimensional. Estes portadores se distribuem em torno do plano de dopagem ocupando as várias sub-bandas geradas pelo potencial de confinamento. Do ponto de vista tecnológico, este tipo de sistema eletrônico tem se tornado atraente pela sua

aplicação extremamente promissora em transistores de efeito de campo ( $\delta$ -FET) [4] e em super-redes **nipi**  $\delta$ -dopadas de faixa proibida mutável [5].

Este sistema tem sido investigado quanto às suas propriedades eletrônicas com a finalidade de determinar o efeito de difusão dos átomos de impureza para fora do plano de dopagem [6-8]. A técnica mais utilizada neste sentido tem sido as medidas de transporte com aplicação de campo magnético (magneto-transporte), mais conhecidas por medidas de Shubnikov-de-Haas, as quais fornecem informações bastante precisas sobre o sistema e têm confirmado a presença de um gás de portadores de carga com comportamento tipo bidimensional ocupando várias sub-bandas mesmo à temperatura de hélio líquido [6-8].

Por outro lado, a literatura é bastante controversa no que diz respeito às propriedades ópticas deste tipo de sistema. A mais marcante é a forma do potencial que provoca uma separação espacial dos portadores de carga (elétrons e buracos) fotogerados, os quais são "arrastados" em direções opostas, dificultando a recombinação entre eles. Entre as técnicas ópticas usadas no estudo desta estrutura citam-se a absorção na região infra-vermelha [9] e a espectroscopia de modulação em forma de fotorefletância (PR), [10-13], fotorefletância diferencial (DPR) [14] e eletrorefletância (ER) [13] que têm auxiliado na elucidação das propriedades ópticas destes sistemas. Porém, a interpretação teórica de dados experimentais de espectroscopia de modulação constituiu-se em motivo de controvérsia [10-19].

As tentativas de aplicar as técnicas de investigação óptica como fotoluminescência [20,21] e fotoluminescência de excitação [22] para estruturas semicondutoras com um único plano de dopagem delta permaneceram até um certo ponto incompletas, em virtude da falta de uma

compreensão teórica satisfatória dos mecanismos de recombinação dos portadores [21,22].

Este fato motivou a busca de estruturas que promovessem o confinamento de elétrons e buracos numa mesma região espacial, ou pelo menos em regiões próximas o suficiente para possibilitar a caracterização óptica das mesmas por meio de fotoluminescência e fotoluminescência de excitação [23-25]. Entre essas estruturas destacamos as que consistem num único plano de dopagem delta no meio de um poço quântico [24,25] ou próximo da superfície [20] (para adquirir o confinamento de portadores de carga minoritários) e as chamadas multi-deltas, que contêm múltiplos planos de dopagem tipo delta separados por camadas de material hospedeiro intrínsecas [23,24]. Nas estruturas multi-deltas, o potencial resultante é periódico, sendo o seu período dado pela distância entre os planos. A variação deste possibilita a observação da modificação do carácter do sistema de bidimensional (poços delta isolados) para tridimensional (super-rede) [23,24,26].

Para a interpretação dos espectros de fotoluminescência, fotoluminescência de excitação e fotorefletância à partir de primeiros princípios é necessário que se tenha os perfis reais das bandas de valência e de condução, os quais determinam a estrutura eletrônica e as ocupações de minibandas que se formam na região delta. Este problema já foi resolvido para sistemas tipo poço delta único [10,27-29]. Porém, os cálculos da estrutura eletrônica de sistemas tipo multi-deltas não se encontravam suficientemente completos [30,31]. Na referência [31], por exemplo, a simetria de translação da super-rede é levada em conta da mesma maneira como no caso de super-redes convencionais [32], e no cálculo da estrutura eletrônica do poço delta é utilizada a aproximação de Thomas-Fermi [33,34].

Portanto, os resultados são não autoconsistentes. Na referência [30], por outro lado, embora o cálculo seja autoconsistente (modelo de Hartree [35]), não são mostrados resultados para a dispersão em energia das minibandas ao longo da direção de crescimento. Além disso, nenhum dos métodos utilizados é aplicável para os casos onde existe anisotropia da massa efetiva. Por exemplo, não se aplicam no caso de super-rede de deltas em silício.

Os resultados de cálculos de super-redes de deltas têm sido fundamentais na interpretação de dados experimentais obtidos por meio de fotoluminescência [36] e de fotoluminescência de excitação [23,24], medidas de oscilações de Shubnikov-de-Haas [23,24], etc. Prevê-se que tais estudos teóricos serão de grande importância no estudo de mecanismos de transporte ao longo da direção de crescimento [37,38], da transição metal-semicondutor [37, 38], da transição Mott [37-39], do comportamento eletrônico sob ação de campos magnéticos [40], etc., bem como no desenvolvimento de novas abordagens e métodos que possam ser usados não somente para sistemas de multi-deltas, mas para vários tipos de heteroestruturas semicondutoras com ou sem simetria de translação.

Para sistemas com dopagem planar, como para quaisquer tipos de heteroestruturas investigadas por meio de espectroscopias ópticas de modulação (ER, PR, DPR) [41], o conhecimento da magnitude do campo elétrico oriundo da superfície e das interfaces, bem como da sua dependência com a direção de crescimento, será de importância fundamental, já que a função dielétrica no caso da aplicação dessas técnicas é modulada através da modulação do campo [42]. Este problema no caso de homoeestruturas tem recebido considerável atenção na literatura [43,44], porém, o mesmo foi resolvido somente dentro das aproximações de ionização total das impurezas e de ausência da degenerescência do material. Levando em consideração a

alta sensibilidade e boa resolução espectral das técnicas de espectroscopia de modulação [45] é muito desejável se ter uma abordagem precisa e geral de cálculo dos perfis do potencial e do campo elétrico para qualquer tipo de heteroestrutura, pois o último determina a forma dos espectros.

No caso de sistemas com planos de dopagem delta a possibilidade de tal cálculo será útil na avaliação do efeito do campo elétrico de superfície e interfacial sobre o perfil de potencial no poço delta. Os estados de superfície e de interface dando origem a campos elétricos internos resultam em níveis de energia permitidos dentro da faixa proibida dos semicondutores, correspondendo a funções de onda que são localizadas próximo à superfície ou interface. Estes níveis têm sua origem associada ao término da rede cristalina e conseqüentemente não são previstos por modelos de redes ou super-redes infinitas.

No caso de heteroestruturas em geral, o conhecimento exato dos perfis do potencial e do campo elétrico ao longo de toda a heteroestrutura, sujeita ou não à ação de um feixe de laser, ou seja, o conhecimento dos perfis modulados e não modulados permitirá o cálculo de espectros de PR a partir dos primeiros princípios. Isto será de grande utilidade na interpretação da forma dos espectros de espectroscopia de modulação, permitindo portanto uma maior precisão na análise de dados experimentais e na extração dos parâmetros de dispositivos semicondutores. Assim, a elaboração de um método geral de cálculo da distribuição espacial do campo elétrico e sua consideração na simulação teórica dos espectros de PR e ER, é um problema extremamente atual para ser resolvido e, de importância fundamental para ser aplicado ao estudo de propriedades elétro-ópticas de heteroestruturas contendo inhomogeneidades da função dielétrica devidas a campos elétricos internos.

Espectroscopias de ER e PR são técnicas poderosas na investigação dos estados eletrônicos de heteroestruturas incluindo dispositivos semicondutores planares. Tais sistemas contêm várias camadas de largura macroscópica ou, no caso de poços quânticos, mesoscópica, bem como composições de materiais homogêneos. Dentro de uma determinada camada macroscópica homogênea podem existir inomogeneidades espaciais fracas das constantes ópticas devido à presença das distribuições espaciais de carga diferentes de zero, assim como devido à existência de perfis inomogêneos de campos elétricos internos. Em todos os casos, tais inomogeneidades aparecerão dentro da camada por causa de perturbações induzidas pela modulação por meio de PR ou ER. Normalmente, no caso de heteroestruturas, além das inomogeneidades fracas internas de camadas existem as variações interfaciais das constantes ópticas passando de uma camada para outra. As últimas, geralmente, são as mais fortes.

O problema do cálculo dos espectros de modulação para tais heteroestruturas foi investigada por vários autores [46-48]. Nestes trabalhos, a heteroestrutura toda (ou seja, todas as camadas de materiais diferentes) foi dividida em múltiplos filmes, suficientemente finos para considerar cada um deles como espacialmente homogêneo. O método da matriz de transferência [49] foi usado para calcular a refletância de toda essa estrutura representada por múltiplos filmes. Essa abordagem é apropriada quando as variações da função dielétrica com a frequência e as inomogeneidades espaciais das constantes ópticas são fracas, mas causa várias dificuldades na ausência dessas condições [46,47]. Além dos problemas de caráter numérico, este método tem um lado conceitual negativo, pois trata as inomogeneidades fracas dentro de cada camada e as inomogeneidades interfaciais fortes da mesma maneira. O grande volume de operações matemáticas nos cálculos

computacionais resultam em problemas de precisão na forma do espectro final e na impossibilidade de usar este método para simulações do tipo "on-line". Devido a isso surgiu uma abordagem fenomenológica [50] que permite reduzir o tempo necessário de simulações computacionais tornando este tipo de cálculo factível. Porém, essa abordagem é restrita devido às várias aproximações e suposições usadas e não traz avanço na melhora conceitual do entendimento do problema.

Já que as simulações do tipo "on-line" são de grande importância devido ao uso industrial das técnicas de ER e PR [50], seria um grande avanço nessa área ter um método preciso e eficiente de cálculo dos espectros de modulação usando o mínimo possível de aproximações. Do ponto de vista teórico, seria interessante desenvolver a parte conceitual do problema criando um método que trate cada tipo de inhomogeneidade com sua abordagem específica.

O objetivo principal do presente trabalho está centralizado no modelamento teórico das super-redes e heteroestruturas semicondutoras, visando a aplicação dos resultados na descrição de suas propriedades eletrônicas. De fato, a investigação teórica apresentada nesse trabalho pode ser dividida em três segmentos diferenciados: Cálculo da estrutura eletrônica de super-redes de deltas (Capítulo 1); Cálculo dos perfis de potencial e de campo elétrico em heteroestruturas semicondutoras (Capítulo 2); Cálculo do espectro de espectroscopia de modulação em heteroestruturas compostas por camadas inhomogêneas (Capítulo 3).

Ressaltaremos aspectos gerais do método teórico, elaborado para cada tópico mencionado no parágrafo anterior, além de reportarmos detalhadamente a abordagem utilizada na simulação numérica das propriedades eletrônicas das estruturas em questão.

Desta forma consagra-se o Capítulo 1 deste trabalho à descrição do método teórico para cálculo da estrutura eletrônica de super-redes e heteroestruturas periódicas, bem como à aplicação deste método à investigação de super-redes de deltas de Si em GaAs e de super-redes de deltas de Sb em Si. Trata-se da solução autoconsistente das equações de Schroedinger e de Poisson. O método celular [51] neste trabalho pela primeira vez é aplicado ao cálculo da estrutura eletrônica de super-redes.

No Capítulo 2 descrevemos o cálculo de perfis do potencial e do campo elétrico em homo- e heteroestruturas semicondutoras. Apresentamos neste capítulo o método teórico geral desenvolvido para a implementação dos cálculos numéricos, exemplos de aplicação do último para amostras envolvendo GaAs e (GaAl)As, e resultados das simulações computacionais baseadas na solução autoconsistente da equação de Poisson.

O Capítulo 3 é dedicado ao desenvolvimento de um novo método de cálculo do coeficiente de reflexão para heteroestruturas compostas por camadas inomogêneas e à metodologia da utilização desse método no cálculo dos espectros de modulação para amostras envolvendo GaAs e (GaAl)As. Trata-se da introdução de uma matriz de transferência para camada inomogênea que incorpora os efeitos de inomogeneidades dessa camada de um modo integral. Os resultados do Capítulo 2, que fornecem os perfis do campo elétrico, são usados nos cálculos dos espectros de PR à partir de primeiros princípios, efetuados neste trabalho pela primeira vez. O efeito de Franz-Keldysh [52,53] é aplicado nas simulações da forma de linha no caso de heteroestruturas semicondutoras tipo "bulk". O efeito Stark é utilizado no cálculo da forma de linha da PR para sistemas contendo poços quânticos mesoscópicos. Os espectros teóricos são comparados com os experimentais demonstrando uma boa concordância qualitativa, bem como quantitativa.

Nas conclusões encontram-se discussões dos principais avanços alcançados neste trabalho, bem como das perspectivas de pesquisa, baseadas nos resultados destes três capítulos.

Incluimos ainda o Apêndice A, onde apresenta-se um novo modelo teórico [54] para transições ópticas nos espectros de modulação, provenientes das amostras com planos de dopagem tipo delta. Levamos em consideração, simultaneamente, a variação do campo elétrico e da faixa proibida efetiva ao longo da direção de crescimento. Esta abordagem fenomenológica, baseada no efeito de Franz-Keldysh, é útil na compreensão do mecanismo físico da PR nas estruturas contendo dopagem planar ou regiões degeneradas dentro da amostra.

No Apêndice B é apresentada, para super-redes de deltas tipo **n** em Si, a abordagem de cálculo do desdobramento de níveis de energia devido à inclusão dos efeitos de acoplamento dos multi-vales relacionados ao mínimo da banda de condução do silício, causado pela flutuação do potencial no plano delta.

## CAPÍTULO 1

# ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SUPER-REDES COM DOPAGEM PLANAR

### 1.1 INTRODUÇÃO

#### 1.1.1 Dopagem tipo delta

Este capítulo é dedicado a um tipo especial de dopagem de semicondutores, onde os dopantes são confinados em um ou mais planos da rede cristalina do semicondutor. Assim, a espessura da região dopada é comparada ao parâmetro de rede do cristal e é menor que outros comprimentos relevantes neste tipo de problema; por exemplo, o comprimento de onda de De Broglie do portador livre (elétron ou buraco). O fato de que a energia potencial altera-se significativamente na escala de um comprimento de onda dos portadores indica que o comportamento de tais portadores não pode ser tratado classicamente [55]. Isto causa a necessidade da inclusão de efeitos quânticos na descrição de sistemas com este tipo de dopagem.

Uma das técnicas de crescimento que tem se mostrado muito eficiente na obtenção de camadas semicondutoras com dopagem planar é a Epitaxia por Feixe Molecular (MBE). Tal eficiência está ligada ao grande controle dos parâmetros de crescimento oferecido por esta técnica [2,3]. Um plano de

átomos tipo delta é obtido seguindo-se um procedimento bem conhecido, baseado na interrupção do crescimento durante o processo de dopagem [56]. Tal perfil de dopagem pode ser matematicamente descrito pela função delta de Dirac. É por isso que a introdução dos planos de impurezas num cristal hospedeiro têm nome dopagem tipo delta.

É preciso inicialmente definir o que seria uma camada em forma de delta. A principal condição para que uma estrutura seja assim considerada é que os átomos do dopante estejam distribuídos numa camada com espessura menor que o confinamento quântico das sub-bandas eletrônicas do sistema [57]. Se esta condição é satisfeita, o resultado é a geração de um sistema bi-dimensional com um esquema de níveis de energia bem definido pela quantização do movimento dos portadores na direção do crescimento [58].

Neste caso os átomos de impureza estão, em princípio, situados em um único plano atômico do cristal. Sendo ionizadas, as impurezas formam uma lâmina contínua de carga, onde a fração de cobertura planar pelas impurezas pode chegar a diversos átomos de impureza por unidade de área de Bohr efetiva. Como dito anteriormente, a distribuição das impurezas pode ser descrita pela função delta de Dirac para o caso de não haver grande difusão dos dopantes ( $\leq 10\text{\AA}$ ).

Os portadores livres com origem nestas impurezas deveriam migrar para longe das mesmas devido à difusão. No entanto, a atração eletrostática entre os íons dos dopantes e os portadores introduz uma componente oposta a difusão. O equilíbrio entre estes dois efeitos é então atingido, fazendo com que os portadores tendam a se distribuir em torno das suas impurezas de origem. Devido à atração eletrostática, os portadores fornecidos pelas impurezas permanecem próximos a seus pares ionizados formando, assim, um

gás quase bidimensional no poço de potencial produzido pela lâmina de carga.

O efeito de quantização do movimento dos portadores na direção perpendicular ao plano de dopantes, ou seja na direção de crescimento, não pode ser desprezado. Ele se torna importante se a energia potencial, ou o potencial em si, descrito pelo fundo da banda de condução (ou topo da banda de valência), varia significativamente numa escala comparável ao comprimento de onda do portador em questão.

Nota-se que o potencial em forma de "V" proveniente da lâmina de carga produzida pelos dopantes representa um poço quântico fortemente atrativo para os portadores majoritários com origem nestas impurezas, enquanto o campo elétrico oriundo desta estrutura é repulsivo para os portadores minoritários, os quais permanecem em estados contínuos como partículas livres em três dimensões. Este fenômeno diminui muito a probabilidade de recombinação de pares elétron-buraco na região delta, e estima-se que, por este fato, o tempo de relaxação característico do sistema seja bastante elevado [59].

As tentativas de diminuir o tempo de relaxação confinando dois tipos de portadores, bem como as tentativas de aumentar o número de dispositivos por volume que poderia ser criado num semiconductor levaram recentemente à ampla investigação tanto experimental, como teórica de super-redes de deltas [13,23,24,26,30,31,37,38].

### 1.1.2. Super-rede de deltas

A primeira proposta de uma super-rede foi feita por Esaki e Tsu [60]. O princípio fundamental de criação de uma super-rede é a variação da composição do semiconductor ao longo da direção de crescimento que resulta na geração de um potencial periódico nesta direção. Neste tipo de estrutura existe a possibilidade de alterar o período do potencial. Com isto, é de se esperar que seja possível a observação de alguns efeitos quânticos dependentes das características da super-rede.

O enfoque principal desta parte do trabalho é a super-rede de deltas com um único tipo de dopagem. O sistema deste tipo representa uma sequência periódica de camadas delta-dopadas com o mesmo tipo de dopante e separadas por regiões não dopadas, exceto pela dopagem residual intrínseca. Neste caso, o período de tal super-rede é a separação espacial entre os planos de dopantes. É claro que as propriedades eletrônicas deste sistema dependem não sómente do período, mas também da concentração planar de dopantes, da pureza do cristal hospedeiro, etc.

O presente capítulo fornece um método de cálculo da estrutura eletrônica da super-rede de deltas baseado na solução autoconsistente das equações de Schroedinger e de Poisson. Este método é aplicado no caso de isotropia da massa efetiva (super-rede de deltas de Si em GaAs) [23,24], bem como no caso de anisotropia (super-rede de deltas de Sb em Si) [26], sistematizando e generalizando o estudo da super-rede de deltas e demonstrando a eficiência da abordagem desenvolvida.

## 1.2. MÉTODO DE CÁLCULO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA PARA SUPER-REDE DE DELTAS

### 1.2.1. Descrição geral do modelo

Visando a subsequente aplicação do presente método para estruturas contendo dopagem delta tipo  $n$ , vamos tratar os dopantes como doadores, tentando adquirir maior clareza na apresentação de nossa abordagem. Isto não obstante a aplicação deste método para super-redes com dopagem delta tipo  $p$ , já que a interação eletrostática elétron-doador tem a mesma origem que a interação buraco-aceitador tornando o poço delta atrativo para portadores majoritários.

Vamos descrever a super-rede de deltas tipo  $n$  como uma sequência infinita de camadas planas de doadores, perpendiculares à direção  $[001]$  do cristal hospedeiro, com uma mesma separação espacial entre elas. Vamos assumir que todos os doadores estão ionizados. Os elétrons com origem nestes doadores formam um gás de elétrons. Os elétrons interagem entre si e sofrem uma atração coletiva de todos os doadores ionizados.

Nossa abordagem envolve a aproximação de um elétron, usando o conceito do funcional da densidade local (LDA) [61]. Começaremos com a construção do potencial de um elétron.

### 1.2.2. Potencial de um elétron

O potencial de um elétron  $V(\mathbf{x})$  é composto por duas partes. Uma será designada  $V_{ed}(\mathbf{x})$  sendo oriunda da interação elétron-doador, e outra será designada  $V_{ee}(\mathbf{x})$  tendo sua origem na interação elétron-elétron. Assim podemos escrever:

$$V(\mathbf{x}) = V_{ed}(\mathbf{x}) + V_{ee}(\mathbf{x}) \quad (1.1)$$

#### *a) Interação elétron-doador*

Primeiramente vamos considerar a parte  $V_{ed}(\mathbf{x})$ . Escolheremos o sistema de coordenadas com o eixo  $z$  paralelo ao eixo [001] da super-rede e com os eixos  $x$  e  $y$  paralelos aos eixos [100] e [010], respectivamente. A probabilidade  $D(\mathbf{R})$  de achar um certo átomo doador numa posição  $\mathbf{R}=(R_x, R_y, R_z)$  depende somente de  $R_z$ , já que podemos considerar a dopagem nas direções  $x$  e  $y$  como homogênea. A condição de normalização para  $D(R_z)$  pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{1}{\delta} \int dR_z D(R_z) = 1, \quad (1.2)$$

onde  $\delta$  representa a extensão espacial da camada de dopagem delta ao longo do eixo  $z$ . Vamos descrever a posição do  $i$ -ésimo átomo doador da  $l$ -ésima camada de dopagem com o vetor-raio  $\mathbf{R}_{il}$ . Neste caso, a concentração de doadores por centímetro cúbico  $N_{DD}(\mathbf{x})$  fica:

$$N_{DD}(\mathbf{x}) = \sum_l \sum_i D(\mathbf{R}_{ilz} - ld_s) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_{il}), \quad (1.3)$$

com  $d_s$  sendo a distância entre os planos delta. Como demonstra a Eq.(1.3), a concentração de doadores exibe flutuações espaciais abruptas  $\Delta N_{DD}(\mathbf{x})$  em torno de seu valor médio  $\langle N_{DD}(\mathbf{x}) \rangle$ . O último pode ser expresso como:

$$\langle N_{DD}(\mathbf{x}) \rangle = N_D \frac{1}{\delta} \sum_l D(z - ld_s), \quad (1.4)$$

onde  $N_D$  designa a concentração planar da camada de dopagem delta. Como pode ser notado da Eq.(1.4)  $\langle N_{DD}(\mathbf{x}) \rangle$  depende somente de  $z$ . Portanto, podemos escrever

$$N_{DD}(\mathbf{x}) = \langle N_{DD}(z) \rangle + \Delta N_{DD}(\mathbf{x}). \quad (1.5)$$

A distribuição de carga de doadores  $eN_{DD}(\mathbf{x})$  cria um potencial eletrostático

$$V_{C\ ed}(\mathbf{x}) = \langle V_{C\ ed}(z) \rangle + \Delta V_{C\ ed}(\mathbf{x}), \quad (1.6)$$

onde  $\langle V_{C\ ed}(z) \rangle$  e  $\Delta V_{C\ ed}(\mathbf{x})$  designam as contribuições devidas à  $e\langle N_{DD}(z) \rangle$  e  $e\Delta N_{DD}(\mathbf{x})$ , respectivamente. A parte flutuante  $\Delta V_{C\ ed}(\mathbf{x})$  torna-se pequena em comparação com o valor médio  $\langle V_{C\ ed}(z) \rangle$  para posições  $\mathbf{x}$ , que ficam suficientemente longe da camada de dopagem delta. O sentido da expressão "suficientemente longe" é ligado ao espaçamento médio  $1/\sqrt{N_D}$  entre doadores no plano  $x$ - $y$ . Se a distância entre uma posição  $\mathbf{x}$  e qualquer plano

de dopagem é maior do que  $1/\sqrt{N_D}$ , o valor  $\Delta V_{C\ ed}(\mathbf{x})$  é, apenas, uma pequena perturbação do potencial eletrostático médio  $\langle V_{C\ ed}(z) \rangle$ . Elétrons que ocupam estados estendidos ficam quase sempre nestas posições. No caso de elétrons confinados, esta condição fica satisfeita se a extensão espacial das funções de onda de tais elétrons  $l_c$  é grande quando comparada com  $1/\sqrt{N_D}$ . Em outras palavras, deve ser satisfeita a condição

$$l_c \sqrt{N_D} > 1. \quad (1.7)$$

Nos casos típicos,  $l_c$  varia em torno de 100Å o que determina a concentração crítica  $N_D$  da ordem de  $10^{12}$  cm<sup>-2</sup>. A condição similar  $\delta \sqrt{N_D} > 1$  determina a relação entre a espessura da camada de dopagem delta e a concentração planar de doadores, a qual nos permite abstrair da espessura real da camada delta e do perfil exato de dopagem  $D(R_z)$ . Para as concentrações e espessuras típicas de dopagem delta esta condição também é satisfeita.

O potencial eletrostático  $V_{C\ ed}(\mathbf{x})$  não representa ainda a interação total elétron-doador. No caso geral, é preciso adicionar o potencial da célula central  $V_{CC\ ed}(\mathbf{x})$  que leva em consideração os efeitos da diferença entre o "caroço" da impureza e aquele dos átomos do cristal hospedeiro [62]. Devido à sua natureza de curto alcance o potencial da célula central contribui somente na parte flutuante  $\Delta V_{ed}(\mathbf{x})$  do potencial  $V_{ed}(\mathbf{x})$ . Portanto, o potencial total proveniente da interação elétron-doador pode ser escrito como

$$V_{ed}(\mathbf{x}) = \langle V_{C\ ed}(z) \rangle + \Delta V_{ed}(\mathbf{x}) \quad (1.8)$$

onde

$$\Delta V_{ed}(\mathbf{x}) = \Delta V_{C\ ed}(\mathbf{x}) + V_{CC\ ed}(\mathbf{x}) \quad (1.9)$$

### *b) Interação elétron-elétron*

Vamos agora descrever o potencial da interação elétron-elétron  $V_{ee}(\mathbf{x})$ . No esquema do funcional da densidade local, ele é decomposto em duas partes: o potencial de Hartree  $V_{H ee}(\mathbf{x})$  e o potencial de troca e correlação  $V_{XC ee}(\mathbf{x})$ . Estes potenciais são flutuantes na escala do tamanho do átomo, já que a densidade eletrônica  $n(\mathbf{x})$  flutua na presença do potencial periódico da rede cristalina. A substituição de  $n(\mathbf{x})$  pelo seu valor médio  $\langle n(z) \rangle$  é justificado se  $l_c$  é grande quando comparado com a constante da rede. Esta é uma condição que sempre é satisfeita. Portanto, pode-se escrever

$$V_{ee}(\mathbf{x}) = \langle V_{H ee}(z) \rangle + \langle V_{XC ee}(z) \rangle, \quad (1.10)$$

onde  $\langle V_{H ee}(z) \rangle$  e  $\langle V_{XC ee}(z) \rangle$  são os potenciais  $V_{H ee}(z)$  e  $V_{XC ee}(z)$  com  $n(\mathbf{x})$  substituído por  $\langle n(z) \rangle$ , respectivamente.

Finalmente, obtemos o potencial total de um elétron. Sua parte eletrostática, devida tanto a doadores, como a elétrons, pode ser expressa como

$$\langle V_C(z) \rangle = \langle V_{C ed}(z) \rangle + \langle V_{H ee}(z) \rangle. \quad (1.11)$$

Ela varia lentamente na escala do tamanho do átomo. Para levarmos em conta os efeitos de blindagem das impurezas usaremos, portanto, para a função dielétrica um valor constante da  $\epsilon(0) = \epsilon$ . A equação de Poisson correspondente é dada por:

$$\frac{d^2}{dz^2} \langle V_C(z) \rangle = - \frac{e^2}{\epsilon \epsilon_0} \left[ \langle n(z) \rangle - N_D \sum_l \frac{1}{\delta} D(z - ld_s) \right]. \quad (1.12)$$

O potencial de troca e correlação será tratado na aproximação de Hedin-Lundqvist [63]

$$\langle V_{XC\text{cc}}(z) \rangle = - \frac{e^2}{2\epsilon a_0^*} \frac{2}{\alpha \pi r_s} \left[ 1 + 0,7734x \ln(1 + x^{-1}) \right], \quad (1.13)$$

onde

$$\alpha = \left( \frac{4}{9\pi} \right)^{1/3},$$

$$r_s = \left[ \frac{4\pi a_0^{*3} \langle n(z) \rangle}{3e} \right]^{-1/3}$$

$$x = \frac{r_s}{21}, \quad (1.14)$$

e  $a_0^* = a_0 \epsilon / m^*$  sendo o raio de Bohr efetivo (note que as expressões (1.13) e (1.14) estão escritas em unidades gaussianas). No caso da anisotropia da massa efetiva do portador, a média geométrica dos valores longitudinal e transversal pode substituir o valor isotrópico  $m^*$  [26,28].

### *c). Potencial total*

Somando  $\langle V_C(z) \rangle$  e  $\langle V_{XC\ ee}(z) \rangle$ , e adicionando o potencial flutuante  $\Delta V_{ed}(\mathbf{x}) \equiv \Delta V(\mathbf{x})$ , o potencial total de um elétron fica dado por:

$$V(\mathbf{x}) = \langle V(z) \rangle + \Delta V(\mathbf{x}), \quad (1.15)$$

onde  $\langle V(z) \rangle$  representa um potencial suave que depende somente de  $z$ :

$$\langle V(z) \rangle = \langle V_C(z) \rangle + \langle V_{XC\ ee}(z) \rangle. \quad (1.16)$$

A parte suave  $\langle V(z) \rangle$  do potencial total  $V(\mathbf{x})$  pode ser tratada através da teoria da massa efetiva. A parte flutuante causa desvios da teoria da massa efetiva e pode ser levada em consideração através da teoria de perturbações.

### **1.2.3. Solução autoconsistente das equações de Schroedinger e de Poisson na aproximação da massa efetiva**

Com base no modelo recém descrito, verifica-se que a energia potencial, em ordem zero, é função apenas de  $z$ , e portanto, a função envelope  $F(\mathbf{x})$  de um elétron do gás pode ser escrita como produto de uma onda plana  $\exp(i\mathbf{k}_{xy}\cdot\mathbf{x})$  para o movimento dos elétrons no plano  $xy$  e a função envelope  $F(z)$  que descreve os efeitos do potencial na direção  $z$ . A função envelope que descreve um elétron no sistema tem, pois, a forma:

$$F(\mathbf{x}) = A \exp(i\mathbf{k}_{xy}\cdot\mathbf{x}) F(z), \quad (1.17)$$

onde  $\mathbf{k}_{xy} = (k_x, k_y)$  é o momentum representativo dos auto-estados de momentum no plano  $xy$ , e  $A$  é uma constante de normalização determinada a partir da condição de neutralidade de carga do sistema.

Adota-se neste tratamento a aproximação da massa efetiva, o que significa que os efeitos do potencial cristalino são incluídos nos parâmetros do material. Sendo assim, os elétrons do gás bidimensional podem ser descritos introduzindo a grandeza  $m^*$ , a qual representa a massa efetiva no caso da isotropia da superfície de Fermi [64] ou por tensor recíproco de massa efetiva  $M^{-1}$  no caso da anisotropia [65]. A primeira situação ocorre, por exemplo, na super-rede de deltas de Si em GaAs. A segunda é relevante para a super-rede de deltas de Sb em Si. Por motivos de maior clareza no entendimento da física do problema, vamos tratar estes dois casos separadamente, começando com o mais simples (super-rede de dopagem delta de Si em GaAs).

*a) Equação da massa efetiva para super-rede de deltas de Si em GaAs*

Devido à simetria translacional no plano  $xy$  e à isotropia da superfície de Fermi a equação de Schroedinger tridimensional pode ser separada nas equações unidimensionais. Neste caso a energia total, na aproximação de bandas parabólicas, é dada pela somatória de auto-valores na forma:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m^*}. \quad (1.18)$$

O segundo termo da Eq.(1.18) provém do movimento livre dos elétrons nas direções  $x$  e  $y$  paralelas às camadas de dopagem, enquanto o auto-valor  $E_n$  associado à  $n$ -ésima sub-banda é obtido através da solução da equação de Schroedinger unidimensional ao longo do eixo  $z$  da super-rede, que pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \langle V(z) \rangle \right] F_n(z) = E_n F_n(z). \quad (1.19)$$

Usando o método celular [51,66], esta equação pode ser resolvida dentro de um só período da super-rede.

Para resolver a equação (1.19) num só poço delta são necessárias as condições de contorno. De acordo com o método celular podemos escrever:

$$F_n(d_s/2) = \exp(ik_z d_s) F_n(-d_s/2) \quad (1.20a)$$

e

$$F_n'(d_s/2) = -\exp(ik_z d_s) F_n'(-d_s/2), \quad (1.20b)$$

onde  $k_z$  é o número de onda na direção  $z$ . As expressões (1.20) asseguram a continuidade da função envelope, e de sua derivada nas fronteiras da célula unitária da super-rede.

Portanto, a função envelope  $F_n(z)$  e o autovalor de energia  $E_n$  da sub-banda número  $n$  dependem de  $k_z$  somente através das condições de contorno (1.20a) e (1.20b). Cabe notar que a função envelope ganha mais um índice. Nós vamos usar para a função envelope o símbolo  $F_{nk_z}(z)$  e para o autovalor

de energia  $E_{nk_z}$ , indicando quais foram as condições de contorno usadas na solução da Eq.(1.19).

No processo autoconsistente a Eq.(1.12) deve ser resolvida com a densidade eletrônica dada por

$$\langle n(z) \rangle = \sum_{nk_z} N_{nk_z} |F_{nk_z}|^2. \quad (1.21)$$

À temperatura zero, a função de distribuição dos elétrons em energia é dada por  $\Theta(E_F - E_{nk_z})$ , onde  $E_F$  designa a energia de Fermi e  $\Theta$  designa a função de Heaviside. Com isso, tratando a super-rede como um sistema quantizado em uma dimensão, podemos obter os coeficientes de ocupação das sub-bandas:

$$N_{nk_z} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} [E_F - E_{nk_z}] \Theta(E_F - E_{nk_z}) \quad (1.22)$$

A solução autoconsistente das equações (1.12), (1.19), (1.21) e (1.22) fornece o perfil da densidade de carga, a estrutura das sub-bandas eletrônicas, a posição do nível de Fermi, o potencial efetivo, etc., para qualquer tipo de super-rede de deltas no caso de massa efetiva isotrópica. Os resultados obtidos na aplicação desta abordagem para a super-rede de deltas de Si em GaAs serão apresentados e analisados no item 1.3.

Conhecendo a solução do problema no caso descrito acima passaremos para discussão do nosso método no caso mais complexo envolvendo a anisotropia da massa efetiva.

*b) Equação da massa efetiva para super-rede de deltas de Sb em Si*

Para escrever a equação da massa efetiva é necessário relembrar a estrutura da banda de condução do Si. Ela é composta por seis vales localizados nos seguintes pontos:  $\mathbf{k}^x = (2\pi\zeta/a, 0, 0)$ ,  $\mathbf{k}^{-x} = (-2\pi\zeta/a, 0, 0)$ ,  $\mathbf{k}^y = (0, 2\pi\zeta/a, 0)$ ,  $\mathbf{k}^{-y} = (0, -2\pi\zeta/a, 0)$ ,  $\mathbf{k}^z = (0, 0, 2\pi\zeta/a)$ ,  $\mathbf{k}^{-z} = (0, 0, -2\pi\zeta/a)$ ; próximos a seis pontos equivalentes tipo X da fronteira da zona de Brillouin ( $\zeta = 0,85$ ) [64]. As massas efetivas são anisotrópicas para cada vale: a componente  $m_l^*$  aplica-se ao longo do eixo do vale, enquanto a componente  $m_t^*$  é atribuída à direção perpendicular a este eixo. Devido à estrutura da banda de condução que envolve seis vales, a função envelope é representada por um vetor de seis componentes:  $[F^x(\mathbf{x}), F^{-x}(\mathbf{x}), F^y(\mathbf{x}), F^{-y}(\mathbf{x}), F^z(\mathbf{x}), F^{-z}(\mathbf{x})]$ . Esta função envelope deve obedecer a um conjunto de equações acopladas que na representação de Fourier fica expressa na forma [65]:

$$\sum_{j'} \sum_{k'} \left( \left[ \frac{\hbar^2}{2} \langle \mathbf{k} - \mathbf{k}^j | M^{-1} | \mathbf{k}' - \mathbf{k}^{j'} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}' \rangle \right] \delta_{j'j} + \langle \mathbf{k} | \Delta V | \mathbf{k}' \rangle \right) F^{j'}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}^{j'}) =$$

$$= E_j F_j(\mathbf{k} - \mathbf{k}^j). \quad (1.23)$$

Aqui  $M^{-1}$  designa o tensor recíproco de massa efetiva. A somatória sobre  $j'$  estende-se sobre todos os vales. De acordo com o item 1.2.2,  $\Delta V$  pode ser tratado como uma perturbação. Na aproximação de ordem zero, as equações podem ser separadas para cada vale. Por exemplo, para o vale  $z$  temos:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_l^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_t^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \langle V(z) \rangle \right) F^z(\mathbf{x}) = E_z F^z(\mathbf{x}) \quad (1.24)$$

A mesma equação é válida também para o vale  $-z$ . Para o vale  $x$  podemos escrever

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_t^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_l^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \langle V(z) \rangle \right) F^x(\mathbf{x}) = E_x F^x(\mathbf{x}) \quad (1.25)$$

Equações equivalentes à anterior podem ser escritas para os vales  $-x$ ,  $y$ ,  $-y$ . Para os vales  $z$  e  $-z$  a massa longitudinal  $m_l^*$  usa-se ao longo do eixo  $[001]$  da super-rede; enquanto para os vales  $x$ ,  $-x$ ,  $y$  e  $-y$  usa-se a massa transversal  $m_t^*$ . Vamos chamar estes dois tipos de vales como longitudinal e transversal. Visto que as equações para a função envelope são as mesmas para os vales do mesmo tipo, os autovalores correspondentes também são idênticos. Isto significa que cada autovalor longitudinal é duas vezes degenerado, enquanto cada autovalor transversal apresenta a degenerescência de quatro vezes. O potencial flutuante  $\Delta V(\mathbf{x})$  remove a degenerescência. Este fato é esperado já que o mesmo ocorre com os estados fundamentais de doadores em Si [62] quando a degenerescência de vale desaparece. Este fenômeno será discutido em mais detalhes no item 1.4.3.

As soluções das equações (1.24) e (1.25) nas direções  $x$  e  $y$  são ondas planas. Como foi feito para as super-redes de deltas de Si em GaAs, a parte que depende de  $z$  é obtida através do método celular [66]. As condições de contorno para as funções envelope expressas por (1.20) ficam neste caso dadas por:

$$F_n^j(d_s/2) = \exp(ik_z d_s) F_n^j(-d_s/2) \quad (1.26a)$$

$$F_n^j(d_s/2) = - \exp(ik_z d_s) F_n^j(-d_s/2) \quad (1.26b)$$

onde  $j$  é o índice que denota o vale.

Neste caso, na solução da equação de Poisson (1.12) deve ser usada a seguinte expressão para a densidade eletrônica:

$$\langle n(z) \rangle = \sum_{nj k_z} N_{nk_z}^j \left| F_{nk_z}^j(z) \right|^2 \quad (1.27)$$

Assumindo a temperatura igual a zero a função de distribuição eletrônica em energia pode ser escrita como  $\Theta(E_F - E_{nj}(k_z))$ , onde  $E_F$  é a energia de Fermi do sistema e  $\Theta$  é a função degrau de Heaviside. Levando isso em conta podemos escrever a expressão para os coeficientes de ocupação:

$$N_{nk_z}^j = \frac{m_{\parallel j}^*}{\pi \hbar^2} [E_F - E_{nj}(k_z)] \Theta(E_F - E_{nj}(k_z)) \quad (1.28)$$

onde  $m_{\parallel j}^* = m_l$  se  $j = z, -z$  e  $m_{\parallel j}^* = (m_l m_t)^{1/2}$  se  $j = x, -x, y, -y$ . A equação (1.28) é escrita assumindo que a superfície de Fermi fica dentro da primeira Zona de Brillouin da super-rede. Isto é justificado para energias menores do que  $\sim 500$  meV.

Os resultados dos cálculos numéricos envolvendo a solução autoconsistente das equações (1.12), (1.24), (1.25), (1.27), (1.28) serão discutidos, junto com a análise da natureza física do comportamento eletrônico no caso de super-rede de deltas de Sb em Si, no item 1.4.

### 1.3. ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SUPER-REDES DE DELTAS DE Si EM GaAs

#### 1.3.1. Descrição histórica e estado da arte

A primeira tentativa de modular o potencial cristalino de um semicondutor através de dopagem foi feita por Ploog et al [67]. Neste trabalho os autores relatam a obtenção de uma sequência periódica de camadas muito finas de dopagem alternada. O resultado foi um potencial periódico unidimensional na direção de crescimento, obtido através da variação periódica das impurezas no material hospedeiro.

Nestas estruturas foi comprovada a possibilidade de se monitorar a faixa proibida efetiva, a estrutura das sub-bandas bidimensionais e o coeficiente de absorção [68-70]. A estrutura de sub-bandas tem origem na divisão das bandas de energia do material semicondutor, devido à presença de mini-faixas proibidas nestas últimas. Foi mostrado ainda que tanto a largura como o espaçamento entre as sub-bandas quase bidimensionais poderiam ser ajustados pela escolha apropriada de parâmetros da estrutura.

O passo seguinte no desenvolvimento de estruturas periódicas obtidas por variação de dopagem foi a introdução de planos delta de impurezas numa camada de um material homogêneo. Dois tipos de estruturas foram então construídas. As chamadas 'dente de serra', nas quais alterna-se o tipo de impureza (doadora/aceitadora) em planos consecutivos, e a super-rede de deltas ( $\delta - i - \delta - i$ ), em que o tipo de dopante não é variado [71].

Recentemente, muitos trabalhos experimentais e teóricos têm sido feitos para a super-rede de dopagem planar do tipo dente de serra. Schubert [5] estudou as propriedades ópticas deste tipo de estrutura. Mais recentemente, Wen-Chau Liu et al estudaram as aplicações deste tipo de super-rede usando sua propriedade de resistência diferencial negativa [72].

Assim como nas super-redes ( $n - i - p - i$ ) tratadas por Ploog e Döhler [70] e Döhler e Ruden [73], o interesse pelas estruturas tipo dente de serra (nome devido à forma da modulação no perfil das bandas) está baseado na monitoração da faixa proibida efetiva das mesmas. Foi mostrado que a faixa proibida pode assumir valores consideravelmente menores que aquela do material hospedeiro. A variação do período das super-redes leva à modificação da própria estrutura de sub-bandas, podendo-se controlar o tempo de recombinação através da superposição das funções de onda de elétrons e buracos. Transições devidas à recombinação de portadores nas várias sub-bandas foram observadas em medidas de fotoluminescência [74,75] e absorção [5] para estas estruturas. A modulação dos processos de recombinação pela variação da potência de excitação também foi relatada nesses trabalhos.

Em nosso trabalho, restringimo-nos ao caso de super-rede dopada com o mesmo tipo de dopante (tipo  $n$ ). Estruturas tipo ( $\delta - i - \delta - i$ ), as super-redes de deltas de um único tipo de dopagem, são obtidas introduzindo-se uma camada do material hospedeiro entre planos adjacentes de um mesmo tipo de dopante. Se a espessura da camada que separa os planos é variada (de amostra para amostra) pode-se modificar consideravelmente o sistema em relação aquele para um poço delta isolado. Isto faz com que super-redes de deltas tenham sido vastamente investigadas tanto do ponto de vista teórico [30,31,76] quanto experimental [36, 76-80].

Porém, muitos resultados reportados nestas estruturas não consideram o efeito do confinamento dos buracos. No entanto, qualquer análise das propriedades ópticas das mesmas deve considerar este efeito, que, como será visto neste trabalho, tem papel fundamental na interpretação dos resultados. Como um exemplo de tal análise cuidadosa pode ser destacado o trabalho [36] investigando a dependência da energia de corte no espectro de fotoluminescência em função dos parâmetros de amostra.

Do ponto de vista teórico, para super-redes de deltas em GaAs foi demonstrado que o período  $d_s$  afeta fortemente as propriedades eletrônicas de tais sistemas. Resultados de cálculos anteriores [30,31,76] demonstraram que o esquema característico de níveis de energia de um poço delta isolado é substituído por um conjunto de minibandas de largura finita, refletindo o comportamento eletrônico típico para super-redes quando  $d_s$  decresce.

Neste trabalho, usando o método descrito no seção 1.2, nós investigamos a transição que ocorre nos múltiplos poços delta de Si em GaAs, observando a mudança das propriedades eletrônicas quase bi-dimensionais (relativos a um poço delta isolado) para as tridimensionais (de super-rede). Uma manifestação clara desta transição é analisada em função do período de dopagem  $d_s$  e em função da concentração planar de dopagem  $N_D$ . Os resultados teóricos são comparados com resultados de medidas ópticas (fotoluminescência de excitação) e elétricas (oscilações Shubnikov-de-Haas), demonstrando a alta eficiência e precisão da abordagem desenvolvida. O cálculo dos estados confinados de buraco é aplicado para a investigação teórica da dependência da energia de corte com a geometria e com a dopagem da amostra.

### 1.3.2. Estrutura eletrônica de super-redes de GaAs com dopagem planar de Si

Vamos partir da situação do poço delta isolado para descrever qual é o efeito da aproximação dos planos de dopagem sobre os elétrons que formam o gás quase bidimensional. Para tal, deve-se sempre ter em mente que a forma e a profundidade do poço de potencial dependem da densidade e da distribuição dos dopantes.

Para grandes espaçamentos entre planos adjacentes, como será visto em seguida, permanece válido o quadro que descreve a estrutura eletrônica de um poço delta isolado, ou seja, um esquema de níveis de energia bem definido, discreto. Por outro lado, quando o espaçamento é diminuído, os elétrons nos níveis de energia mais altos começam a sentir os efeitos dos potenciais devidos aos poços adjacentes. O acoplamento destes estados se reflete na sua dispersão em energia dando origem a sub-bandas de largura finita, a qual deve aumentar conforme aumenta o acoplamento entre os poços. Por outro lado, os níveis de energias mais baixos tendem a se manter não acoplados até espaçamentos bem menores.

O mesmo pode ser expresso em outras palavras. O acoplamento entre os poços remove a degenerescência dos níveis de energia. Este acoplamento é devido ao fato de que os estados dos elétrons são estendidos por toda a super-rede e não somente dentro de um só poço delta. Este acoplamento também pode ser interpretado pela possibilidade de tunelamento quântico dos elétrons entre os poços. Este efeito para a "super-rede" composta somente de dois poços é analisado na referência [81]. Independentemente de sua simplicidade, este modelo revela a essência física que existe por trás deste efeito e é útil na compreensão do problema em questão. A probabilidade de

tunelamento diminui conforme a altura da barreira entre os poços aumenta. É por isso que a largura de sub-bandas a energias baixas é menor em comparação com a dispersão em energia dos estados de elétron mais altos.

Por outro lado, a altura da barreira diminui e o acoplamento aumenta quando o período da super-rede  $d_s$  decresce. Deve, assim, existir uma transição de um sistema com características de poço delta isolado para a situação de múltiplos poços quânticos e, conseqüentemente, para a condição de uma super-rede de deltas, conforme  $d_s$  decresce. Vale notar que enquanto para uma super-rede de GaAs/AlGaAs [70], a espessura da barreira para que a largura da sub-banda seja considerável ( $\sim 10$  meV) é de aproximadamente  $30\text{\AA}$ , para super-redes de deltas com período menor que  $160\text{\AA}$  (para concentração planar  $\sim 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ ) esta condição já é atingida. Resultados de cálculos da estrutura eletrônica com variação do espaçamento os quais comprovam o comportamento acima serão mostrados e discutidos abaixo.

No que diz respeito à banda de valência, pode-se considerar que o perfil do potencial deve seguir o da banda de condução, porém com efeito inverso para os buracos. Isto é, o que representa um poço de potencial atrativo para elétrons na banda de condução tem o papel de barreira para os buracos na banda de valência. Assim, tomando-se o esquema para dois planos adjacentes, a região entre eles forma um poço de potencial para os buracos, com o limite quântico podendo ser atingido quando o espaçamento  $d_s$  decresce.

A característica principal destas estruturas é a possibilidade de confinar os buracos fotogerados, ao contrário do que acontece para o poço delta isolado, cujo potencial que confina os elétrons na banda de condução é repulsivo para os buracos na banda de valência. Se planos adjacentes são localizados suficientemente próximos, o sistema criado dá origem a um

potencial de confinamento para buracos na região entre eles. O valor de  $d_s$  para o qual o limite quântico é alcançado depende, obviamente, das características do potencial de confinamento de elétrons na banda de condução.

*a) Dependência da estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Si em GaAs com a variação do período da super-rede*

De forma a elucidar alguns aspectos do comportamento das super-redes de deltas de Si em GaAs com a variação do espaçamento entre os planos de dopagem foram realizados cálculos autoconsistentes baseados no método desenvolvido (secção 1.2). Foi empreendido um estudo sistemático da passagem do comportamento eletrônico de carácter bidimensional (regime de poço delta isolado) para tridimensional. Antes de discutir os resultados, faremos alguns comentários sobre a escolha dos valores das grandezas físicas utilizadas no cálculo.

Os valores da massa efetiva de elétron livre em GaAs e da constante dielétrica do GaAs foram assumidos serem iguais a  $0,068m_0$  e 12,5, respectivamente [82], onde  $m_0$  é a massa de repouso do elétron. A concentração de íons do dopante no plano  $N_D = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  foi escolhida sendo o valor típico, em torno da qual oscilam as concentrações planares de Si em GaAs, obtido no processo de crescimento de tais estruturas pela técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) [83]. Como será visto em seguida, esta concentração de doadores dá origem à uma estrutura de sub-bandas bastante rica. Isto também foi levado em consideração na escolha dos

parâmetros de dopagem. De acordo com a seção 1.2, todos os átomos de Si foram considerados ionizados.

O espaçamento entre os poços delta foi variado entre 800 e 40Å, cobrindo toda a passagem do regime de poço delta isolado para o regime de super-rede. A distribuição dos átomos de dopante foi tomada como sendo uniforme, com uma espessura de 10Å. Esta aproximação corresponde à estimativa, baseada nos parâmetros do equipamento de crescimento em nosso laboratório. A justificativa da uniformidade é de que a forma exata da distribuição das impurezas não influencia significativamente a estrutura eletrônica do sistema como foi demonstrado em [84].

Os resultados de cálculos efetuados com estes valores nominais dos parâmetros relevantes ao sistema fornecem algumas informações gerais sobre o comportamento das estruturas com variação do período da super-rede  $d_s$ . As principais características destas estruturas são mostradas na Tabela 1.1. São elas: a profundidade do poço (ou seja, altura máxima da barreira entre os poços),  $V$ ; a energia do nível de Fermi em relação ao fundo do poço,  $E_F$ ; as energias mais baixas das sub-bandas de elétrons,  $E_i$ ; a dispersão de cada sub-banda dada por  $\Delta E_i = |E_i(k_z=0) - E_i(k_z=\pi/d_s)|$ ; e as ocupações das sub-bandas,  $n_i$ .

Visando a aplicação futura desta investigação à interpretação de dados de fotoluminescência de excitação, foram calculados os estados confinados de buraco pesado. A abordagem usada neste estudo merece um comentário. O cálculo da estrutura de sub-bandas de buraco foi feito utilizando a equação (1.19) com valor da massa efetiva do buraco pesado  $m^* = 0,45m_0$  [82]. As condições de contorno para a função envelope de buraco foram equivalentes às expressões (1.20a) e (1.20b), mas com o ponto  $z = 0$  do eixo  $z$  no meio de dois planos de dopagem delta e equidistante deles. Visto que a concentração

Tabela 1.1. Características da estrutura eletrônica das super-redes de deltas em função do período  $d_s$ , obtidas através dos cálculos autoconsistentes para  $N_D = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . A unidade de V,  $E_F$ ,  $E_i$ ,  $\Delta E_i$ ,  $H_0$ , e  $\Delta H_0$  é meV. Os valores de ocupações de sub-bandas eletrônicas  $n_i$  são dados em unidades de  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ .

$d_s(\text{Å})$	800	400	220	160	100	70	40
V	115,6	109	94,3	78,3	63,6	50,1	30,5
$E_F$	116,4	116,6	116,8	116,5	122	131,2	120,3
$E_0$	47	47	46	42,3	33,8	25,6	14,7
$\Delta E_0$	0	0	1,7	9,5	42,7	102	337
$n_0$	1,98	1,98	2,01	2,11	2,5	3	3
$E_1$	92,6	92	87	85	104	-	-
$\Delta E_1$	0	1,4	20,7	52,3	154	-	-
$n_1$	0,68	0,69	0,84	0,89	0,5	-	-
$E_2$	107	105	112	-	-	-	-
$\Delta E_2$	0	8,3	51	-	-	-	-
$n_2$	0,26	0,33	0,14	-	-	-	-
$E_3$	115	-	-	-	-	-	-
$\Delta E_3$	-	-	-	-	-	-	-
$n_3$	0,08	-	-	-	-	-	-
$H_0$	1,7	5,4	11,3	13,1	19,2	20,5	15,2
$\Delta H_0$	0	0	0	0	1,5	9	45,3

de portadores fotogerados no caso de fotoluminescência de excitação à baixas temperaturas é desprezível em relação a portadores com sua origem nas impurezas ionizadas, não há necessidade de um cálculo autoconsistente para se obter as sub-bandas de buraco. A baixa concentração de portadores fotogerados é devida às baixas potências do feixe de laser utilizado. O potencial usado no cálculo da estrutura de sub-bandas de buraco é o potencial obtido autoconsistentemente para a banda de condução invertido, já que a carga do buraco é inversa em relação à carga do elétron.

A energia no topo da primeira sub-banda de buracos pesados, medida a partir do fundo do poço de potencial, e a sua dispersão,  $H_0$  e  $\Delta H_0$ , respectivamente, também estão apresentados na Tabela 1.1. Como a energia de corte no caso de fotoluminescência de excitação é a energia mais baixa a partir da qual começam a ocorrer as transições ópticas entre os portadores da banda de valência e os da banda de condução (absorção), as sub-bandas de energia advindas de buracos leves por estarem mais afastados do topo da banda de valência não contribuem para o cálculo da energia de corte.

Vários aspectos importantes dos resultados do cálculo da estrutura eletrônica da super-rede de deltas podem ser destacados no que se refere ao comportamento do sistema com a variação de  $d_s$ . O comportamento da estrutura de sub-bandas na banda de condução como função do período da super-rede é apresentada na Figura 1.1, juntamente com a profundidade dos poços delta e a posição do nível de Fermi. A Figura 1.2 contém a representação esquemática de sub-bandas em relação à energia de Fermi  $E_F$ .

Podemos observar na Figura 1.1 que, enquanto a profundidade do poço de potencial decresce monotonicamente, quando  $d_s$  é diminuído, o nível de Fermi permanece praticamente constante para  $d_s$  maiores que 160Å. Para  $d_s$  menores que 160Å, a energia de Fermi começa a crescer indicando que o

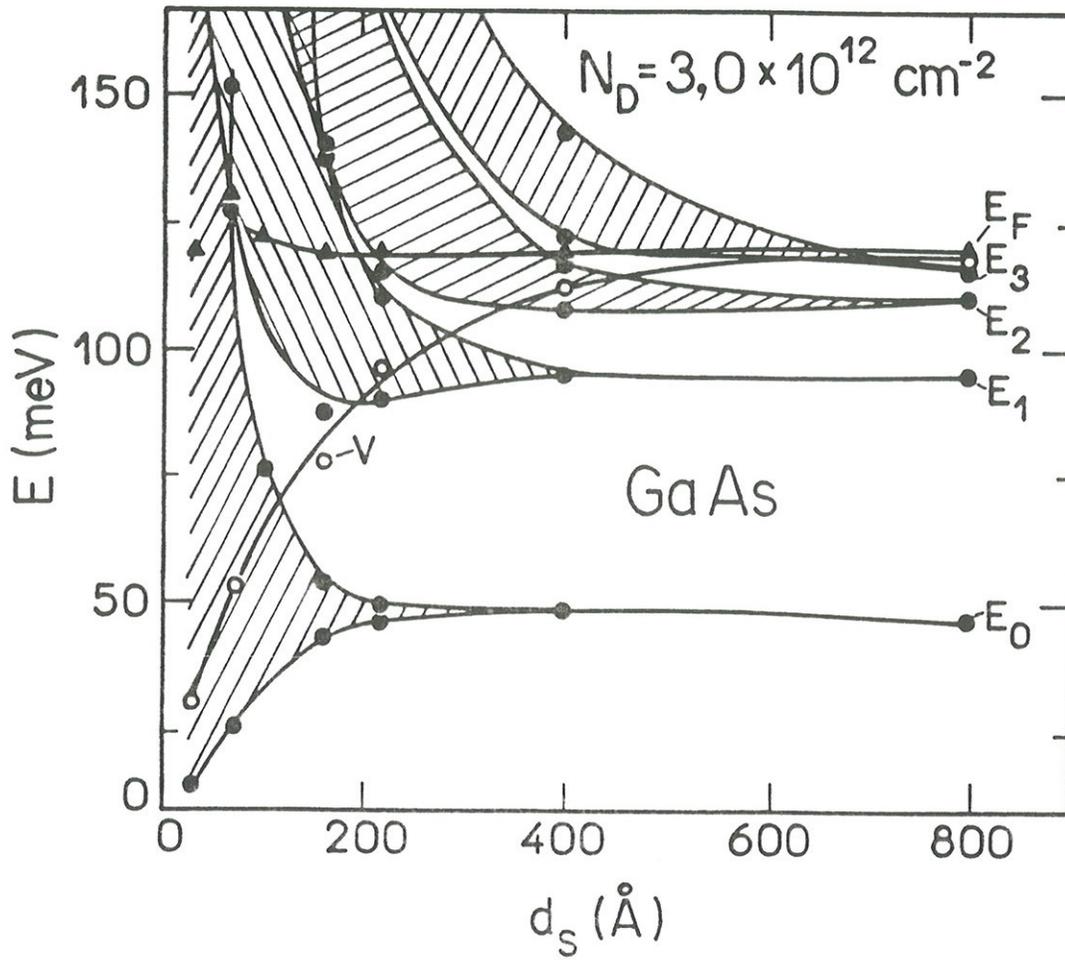


Figura 1.1. Dependência dos parâmetros das super-redes de deltas com  $N_D = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , com o espaçamento entre os planos de dopagem.  $\bullet$  indica  $E_i$ , energia do  $i$ -ésimo nível eletrônico,  $\blacktriangle$  indica  $E_F$ , posição do nível de Fermi,  $\circ$  indica  $V$ , altura da barreira de potencial entre os poços. (As linhas cheias foram desenhadas para guiar os olhos).

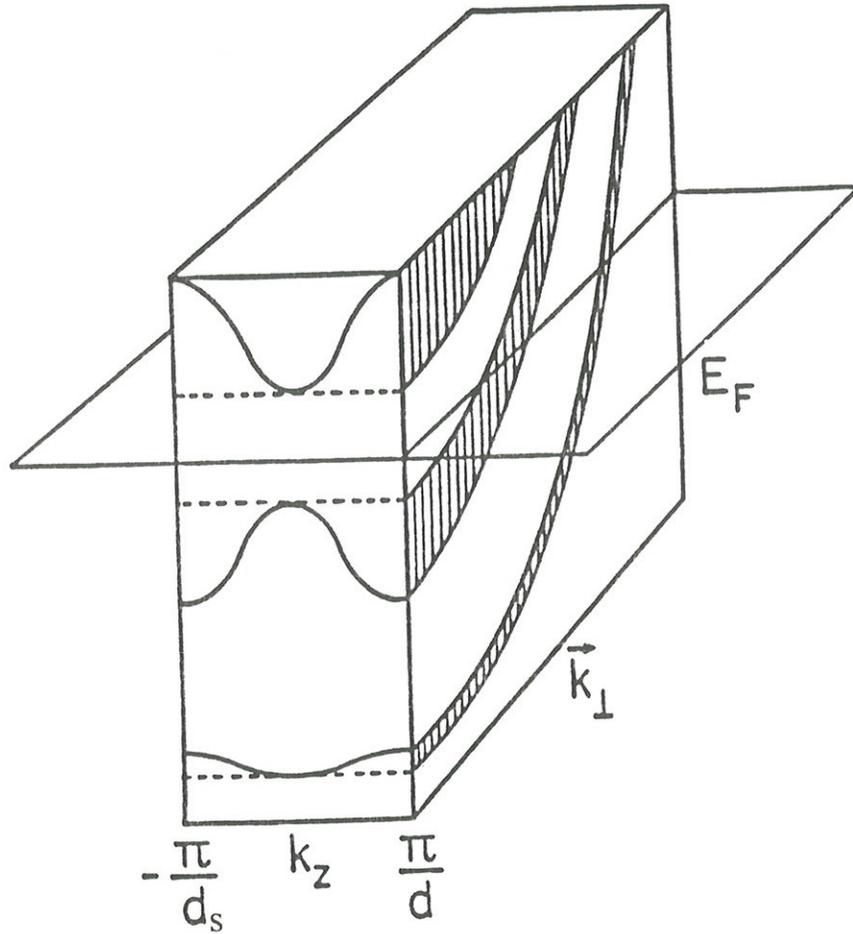


Figura 1.2. Representação esquemática de sub-bandas eletrônicas da super-rede em relação à energia de Fermi  $E_F$ .

poço não é mais capaz de "alojar" todos os elétrons com origem nos seus átomos de Si, devido simplesmente ao decréscimo da espessura geométrica. Isto poderia ser considerado como o começo da passagem do comportamento bidimensional para o tridimensional. Porém, as características bidimensionais ainda predominam. As sub-bandas são repelidas para cima (para dentro da banda de condução), mantendo as mini-faixas de energias proibidas entre elas. Assim, devendo ficar acima das sub-bandas eletrônicas preenchidas, cresce a energia de Fermi.

Conforme o espectro dos estados eletrônicos permitidos torna-se contínuo ( $d_s \leq 70\text{Å}$ ) a energia de Fermi decresce novamente (veja triângulos na Fig.1.1), mostrando que o comportamento eletrônico já é essencialmente tridimensional. Esta conclusão pode ser obtida de uma outra maneira, fazendo uma análise diferente. Comparando a posição do nível de Fermi com a altura da barreira, por exemplo, no caso  $d_s = 40\text{Å}$  (vide Tabela 1.1 e Figura 1.1) pode-se perceber que a maior parte dos estados eletrônicos preenchidos se estende por cima da barreira, o que os torna praticamente livres em três dimensões. Isto faz com que o sistema passe a apresentar características tridimensionais.

Quanto aos níveis de energia nota-se que, embora o estado fundamental só apresente uma dispersão considerável para  $d_s \leq 160\text{Å}$ , para o primeiro nível isto ocorre para um período  $d_s = 220\text{Å}$ , e assim por diante. Quanto maior é o índice da sub-banda, maior é o valor de  $d_s$  a partir do qual o nível de energia começa a dar lugar a uma mini-banda com largura finita. Este fato está diretamente relacionado com a probabilidade de tunelamento do elétron por baixo da barreira. À medida que mini-bandas se alargam o espaçamento entre elas (mini-faixa proibida) diminui. Conforme  $d_s$  decresce, podemos ainda observar que ocorre uma diminuição na população das sub-

bandas mais altas, ainda que o nível de Fermi, no regime bidimensional, assumia valores cada vez mais altos dentro da banda da condução.

Segundo foi mostrado nesta análise dos resultados para  $d_s$  pequenos o esquema de níveis de energia característico dos sistemas bidimensionais é substituído por um esquema de mini-bandas, apresentando a dispersão em energia. Este comportamento está de acordo com o que tem sido relatado na literatura no caso daquelas super-redes convencionais [60]. Isto explica a mudança drástica no perfil do espectro de fotoluminescência de excitação a qual foi observada experimentalmente [23,24]. Os perfis muito abruptos, que são esperados para sistemas estritamente bidimensionais seguindo a forma da sua densidade de estados [1,85], são substituídos, quando  $d_s$  decresce, por perfis suaves típicos de um sistema tridimensional.

Podemos, portanto, dizer que o que foi obtido nos nossos resultados está associado a uma mudança do carácter de comportamento eletrônico de bi- para tridimensional. É importante ressaltar que o carácter tridimensional fica ainda mais claro observando o aparecimento de dispersão também para os estados da banda de valência. Para  $d_s \leq 70\text{\AA}$  os níveis de energia para buracos apresentam dispersão significativa, com valores que chegam a aproximadamente 45meV para a amostra com  $d_s = 40\text{\AA}$  (vide Tabela 1.1).

As Figuras 1.3, 1.4, e 1.5 visualizam esquematicamente a passagem dos poços delta isolados para a super-rede de deltas. Cabe se fazer um comentário: para  $d_s \leq 40\text{\AA}$  não é muito correto analisar o sistema como uma super-rede. Nesta região, à medida que  $d_s$  decresce, ocorre mais uma transição de super-rede de deltas para GaAs degenerado (dopado fortemente com Si). A queda na energia de Fermi entre  $d_s = 70\text{\AA}$  e  $d_s = 40\text{\AA}$  (vide triângulos na Figura 1.1) pode ser considerado como uma indicação desta mudança estrutural.

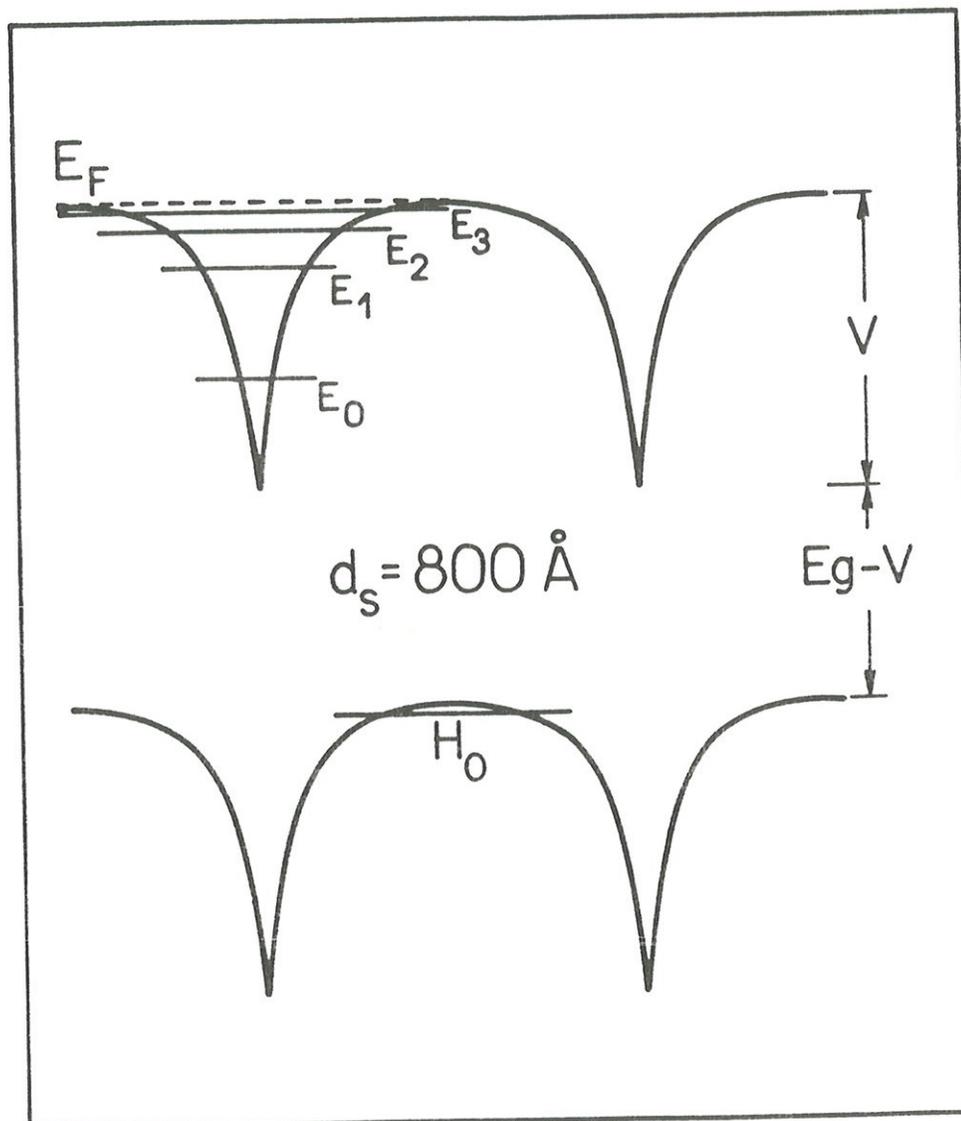


Figura 1.3. Esquema das bandas de elétrons e de buracos para a super-rede de deltas com  $d_s = 800 \text{ \AA}$  e  $N_D = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . (A forma do potencial e as energias são aquelas extraídas dos cálculos autoconsistentes.)

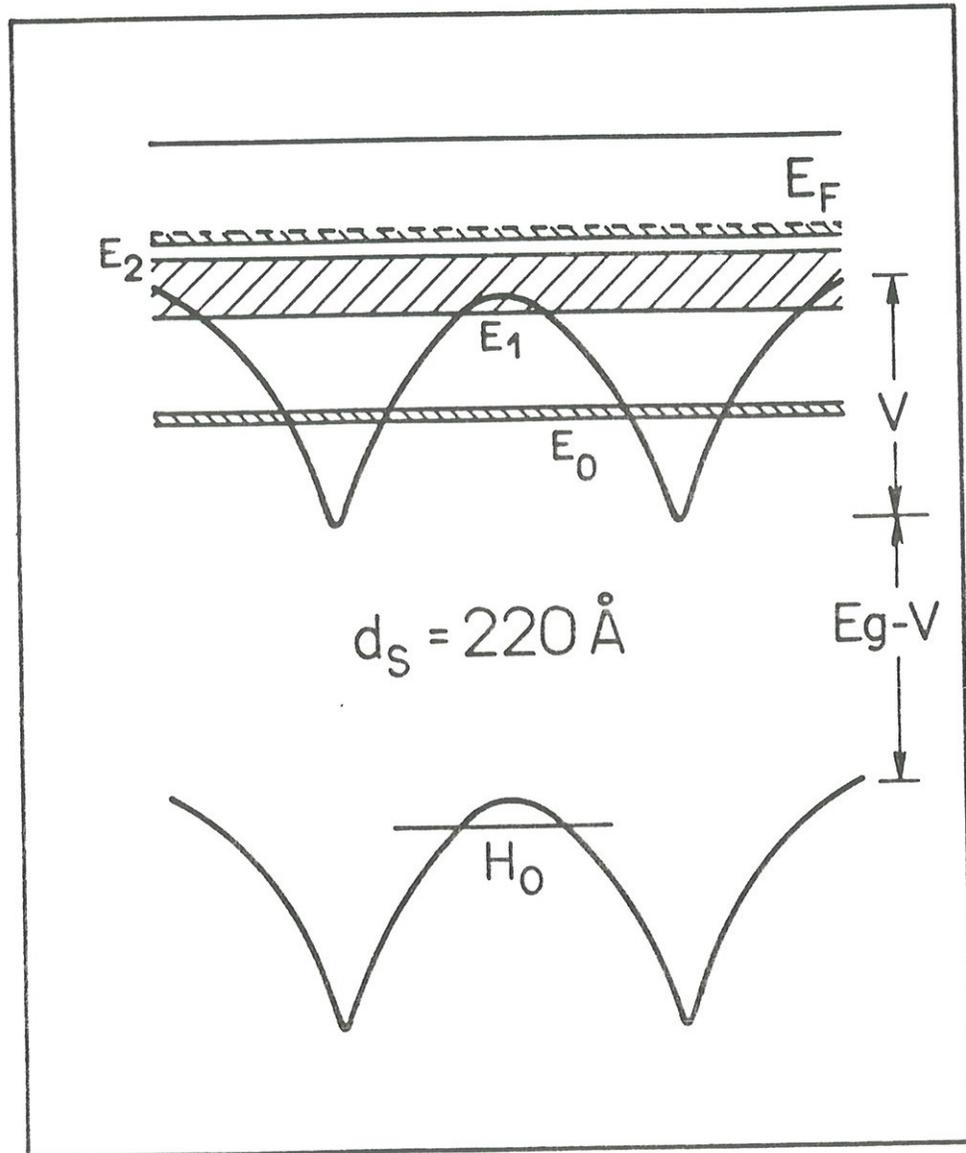


Figura 1.4. Esquema das bandas de elétrons e de buracos para a super-rede de deltas com  $d_s = 220 \text{ \AA}$  e  $N_D = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . (A forma do potencial e as energias são aquelas extraídas dos cálculos autoconsistentes.)

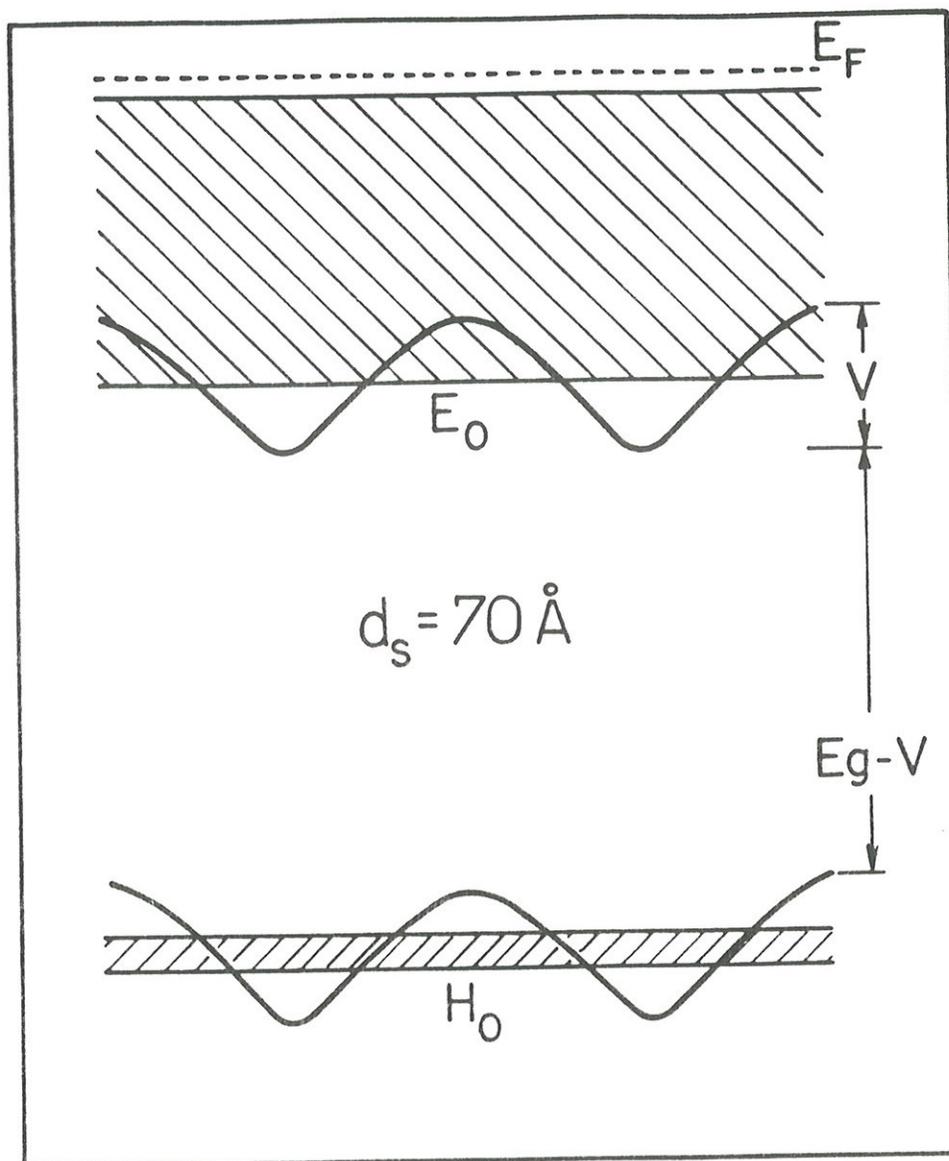


Figura 1.5. Esquema das bandas de elétrons e de buracos para a super-rede de deltas com  $d_s = 70 \text{ \AA}$  e  $N_D = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . (A forma do potencial e as energias são aquelas extraídas dos cálculos autoconsistentes.)

Os resultados discutidos aqui revelam também uma transição para  $d_s \leq 220\text{\AA}$  referente ao aparecimento de estados eletrônicos estendidos acima da barreira. Como dissemos anteriormente isto implica na existência de elétrons quase livres na banda de condução. Quando o número de tais elétrons fica considerável, pode-se esperar a ocorrência de uma transição semicondutor-metal [37-39].

*b) Estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Si em GaAs em função da concentração de dopantes*

Este estudo tem por objetivo a demonstração das modificações da estrutura eletrônica relevantes à variação da concentração de átomos de Si,  $N_D$ . O comportamento das sub-bandas em função de  $N_D$  é apresentado na Figura 1.6 para um espaçamento fixo entre os poços  $d_s = 300\text{\AA}$ .

Os níveis de energia ficam mais profundos quando a densidade de doadores aumenta. Este efeito é acompanhado por uma diminuição na dispersão das sub-bandas mais baixas. Este comportamento indica que o confinamento de elétrons fica mais pronunciado às concentrações mais altas de dopante. Em outras palavras, o aumento da dopagem faz com que a maior parte dos elétrons ocupe os estados essencialmente bidimensionais.

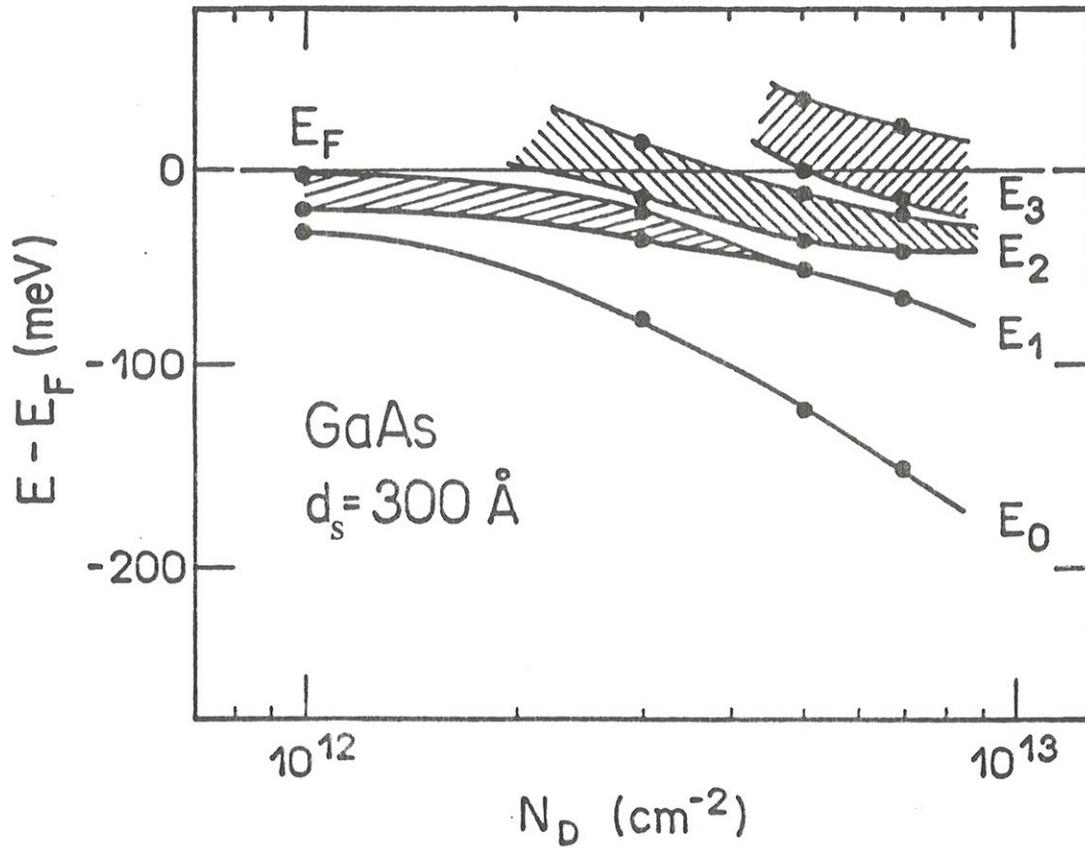


Figura 1.6. Estrutura eletrônica da super-rede de deltas em relação à energia de Fermi,  $E_F$ , como função da concentração planar de dopantes  $N_D$  ( $d_s = 300 \text{ \AA}$ ).

### **1.3.3. Ocupações de sub-bandas e o limiar de energia (energia de corte) no espectro de fotoluminescência de excitação**

Após o estudo da estrutura eletrônica deste tipo de super-rede, o método desenvolvido foi aplicado para interpretar as propriedades eletrônicas e ópticas das amostras crescidas no nosso laboratório. Oito amostras, com o período da super-rede variando entre 40 e 1000Å foram investigadas por experiências de fotoluminescência de excitação e Shubnikov-de-Haas [23,24]. Os resultados experimentais apresentados no presente trabalho para fins de comparação com as previsões teóricas foram extraídos das referências [23,24,86].

#### *a) Estudo de ocupações das sub-bandas eletrônicas*

Para que os resultados da aplicação do nosso método teórico possam auxiliar efetivamente na comparação com os dados experimentais foi necessário levar em conta as pequenas diferenças encontradas entre amostras. Por isso, os cálculos autoconsistentes foram efetuados para estas estruturas considerando tanto a concentração de íons do dopante, quanto a densidade de portadores no gás, como iguais à soma das densidades por sub-banda obtidas nas medidas de Shubnikov-de-Haas. Na Tabela 1.2 os valores teóricos das ocupações das sub-bandas obtidas são comparados àqueles obtidos experimentalmente.

Munidos destas informações podemos prosseguir à discussão e realizar as comparações entre os resultados extraídos dos cálculos teóricos e aqueles medidos por meio das experiências de magneto-transporte.

Tabela 1.2. Valores da concentração planar de dopantes,  $N_D$ , e ocupações de sub-bandas,  $n_i$ , para amostras tipo multi-delta, obtidas por medidas de magneto-transporte, em comparação com valores extraídos dos cálculos autoconsistentes usando o valor experimental de  $N_D$ .

$d_s(\text{Å})$	$N_D(\times 10^{12} \text{cm}^{-2})$	$n_i (\times 10^{12} \text{cm}^{-2})$							
		$n_0$		$n_1$		$n_2$		$n_3$	
		exp.	teo.	exp.	teo.	exp.	teo.	exp.	teo.
1000	3,07	2,4	2,02	0,57	0,69	0,1	0,27	-	0,07
800	2,94	2,26	1,94	0,53	0,66	0,15	0,26	-	0,08
400	2,84	2,01	1,88	0,59	0,65	0,25	0,3	-	-
220	2,60	1,68	1,80	0,92	0,75	-	0,05	-	-
160	2,98	2,05	2,10	0,93	0,88	-	-	-	-
100	2,80	2,8	2,39	-	0,41	-	-	-	-
70	3,4	3,4	3,4	-	-	-	-	-	-
40	4,8	4,8	4,8	-	-	-	-	-	-

Para amostras com espaçamentos grandes (vide Tabela 1.2), podemos observar que a teoria pode prever a ocupação de sub-bandas além daquelas vistas por medidas de Shubnikov-de-Haas. As diferenças entre os próprios valores das ocupações,  $n_i$ , podem ser consideradas como razoáveis se levamos em conta que os cálculos realizados não incluem os efeitos de não-parabolicidade. Este efeito é considerado importante em sistemas em que os níveis de energia podem estar muito acima do fundo da banda de condução, o que ocorre nestas estruturas. Além disso, não foi levado em consideração o problema da difusão de dopantes nas amostras reais. Neste caso a distribuição dos átomos de dopantes pode variar de um poço para outro, e a consideração de que a distribuição dos átomos de Si é uniforme e de espessura de  $10\text{\AA}$ , pode não fornecer uma idéia muito precisa sobre a forma do potencial, e conseqüentemente sobre os níveis das sub-bandas e suas ocupações.

Na Tabela 1.3 são apresentados as características das super-redes de deltas como obtidas através dos cálculos autoconsistentes usando as concentrações de dopagem planar que correspondem às amostras em questão e que foram fornecidas na Tabela 1.2. Analisando estes resultados, podemos chegar às mesmas conclusões sobre a passagem do sistema bi- para o sistema tridimensional, que já foram obtidas através da análise sistemática feita no item 1.3.2. Retomemos esta análise brevemente, levando em conta as ocupações de sub-bandas eletrônicas.

Quando  $d_s$  decresce podemos notar que cada vez menos sub-bandas estão ocupadas. Se observamos os valores da profundidade do potencial,  $V$ , podemos notar que estes decrescem monotonicamente com a aproximação dos planos (vide Tabela 1.3). Isto faz com que os níveis que estavam confinados no potencial para períodos grandes, estejam no contínuo acima

Tabela 1.3. Características da estrutura eletrônica da super-rede de deltas, obtidas através dos cálculos autoconsistentes usando os valores de concentração,  $N_D$ , apresentados na Tabela 1.2. Os valores de  $V$ ,  $E_F$ ,  $E_i$ ,  $\Delta E_i$ ,  $H_0$ , e  $\Delta H_0$  são dados em meV.

$d_s(\text{Å})$	1000	800	400	220	160	100	70	40
$V$	118,2	106,7	104,3	82,6	78	59,6	55	48
$E_F$	118,4	114,6	111,6	104,6	115,9	116	148	192
$E_0$	47,2	46,22	45,2	41,4	42,1	31,7	28,4	23,2
$\Delta E_0$	0	0	0	2,5	9,5	43,4	101	332
$E_1$	94,1	91,3	90,1	79,8	84,8	101	-	-
$\Delta E_1$	0	0	1,5	20,7	52,4	154	-	-
$E_2$	108,8	105,5	101	102,8	136	254	-	-
$\Delta E_2$	0	1	8,6	52,2	105	274	-	-
$E_3$	116,4	113,84	-	-	-	-	-	-
$\Delta E_3$	0	2	-	-	-	-	-	-
$E_4$	118	-	-	-	-	-	-	-
$\Delta E_4$	2	-	-	-	-	-	-	-
$H_0$	1	1,7	5,3	10,4	13	18,4	22,1	23,7
$\Delta H_0$	0	0	0	0	0	1,7	8	41,7

deste potencial quando  $d_s$  diminui. Outro efeito devido à diminuição das barreiras para os elétrons nos níveis mais altos é que, mesmo antes de entrar no contínuo, estes começam a apresentar uma dispersão em energia. Conforme discutido anteriormente, estes níveis dão lugar à mini-bandas características de super-redes. Estes valores da dispersão, os quais aumentam com a diminuição de  $d_s$ , são também mostrados na Tabela 1.3. Este mesmo efeito foi observado para os níveis de buracos, na banda de valência, com valores consideráveis da largura das mini-bandas para amostras com  $d_s = 40$  e  $70\text{Å}$ . Porém, as larguras de sub-bandas de buraco pesado são sempre menores em comparação com os valores da dispersão de sub-bandas de elétron, devido a um simples fato de que a massa efetiva do buraco pesado é maior que a massa efetiva do elétron.

*b) Cálculo do limiar de energia (energia de corte) para a interpretação de espectros de fotoluminescência de excitação*

Antes de descrever a abordagem utilizada para cálculos da energia de corte, cabe ressaltar o efeito de confinamento de buracos na banda de valência, a partir da criação do potencial na banda de condução. Uma vez atingido o limite quântico, as energias das sub-bandas para buracos podem assumir valores não desprezíveis (vide Tabelas 1.1 e 1.3). Torna-se então necessário levar em conta estas energias na interpretação dos resultados das medidas ópticas.

Para estimar o limiar de energia no espectro de fotoluminescência de excitação, foi usado um modelo simples [36] no qual é suposto que as transições que dominam os espectros são basicamente aquelas verticais e diretas no espaço real, mostradas no esquema da Figura 1.7. Uma vez

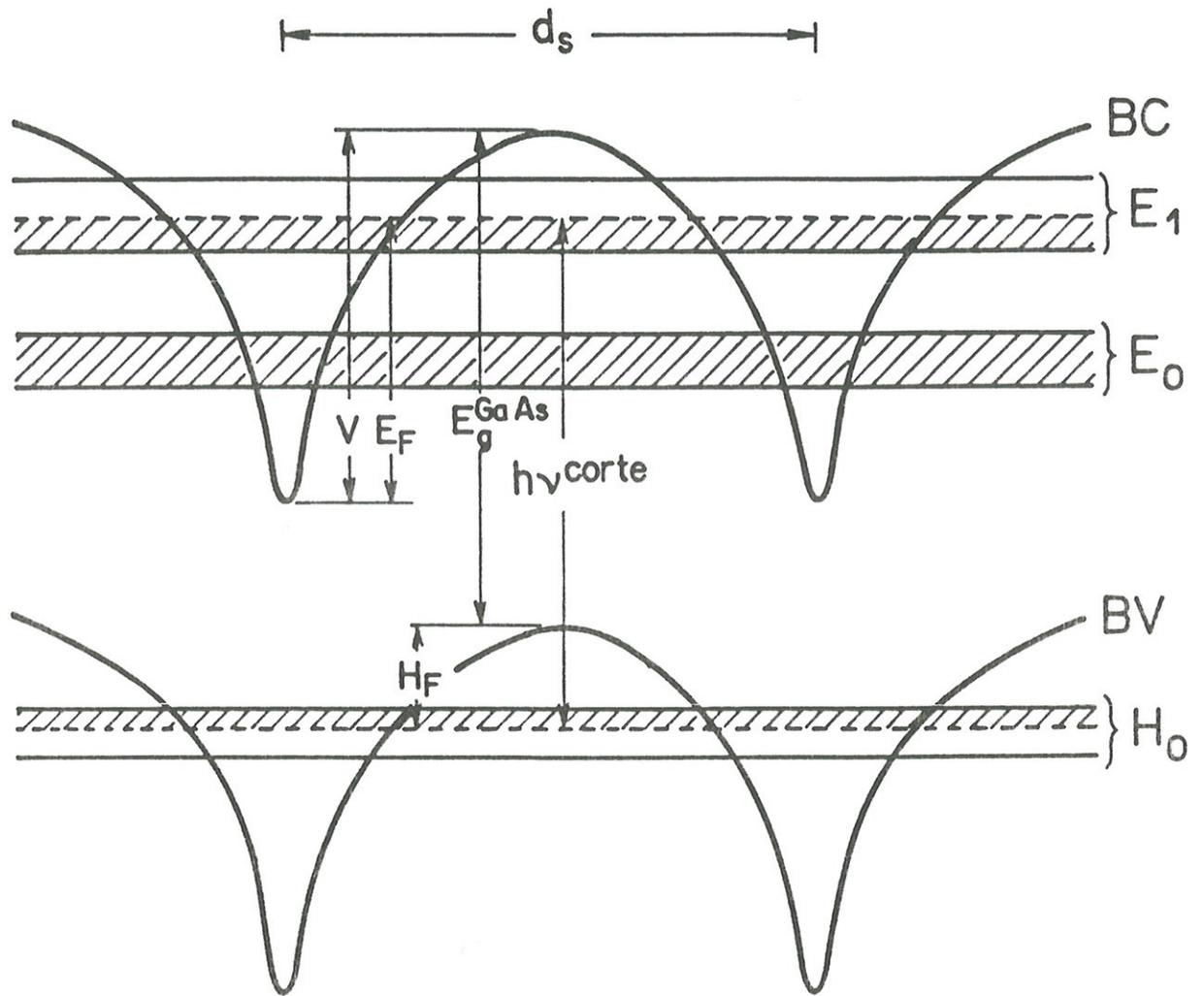


Figura 1.7. Diagrama esquemático das bandas de valência (BV) e de condução (BC), indicando as energias envolvidas na equação (1.29).

conhecidas a posição do nível de Fermi e a profundidade, do poço,  $V$ , torna-se possível chegar a um valor da energia de corte através da expressão:

$$h\nu^{\text{corte}} = E_g^{\text{GaAs}} - V + E_F - H_F \quad (1.29)$$

considerando o nível de Fermi para buracos,  $H_F$ , igual à energia do estado fundamental para buracos pesados  $H_0(k_z=0)$ , levando em conta as condições de realização das medidas envolvendo a concentração desprezível de portadores foto gerados. As medidas foram feitas a baixos níveis de potência de excitação, de forma a não provocar grande alteração na densidade de portadores o que levaria a modificações na própria forma do potencial.

Na Tabela 1.4 apresentamos os valores teóricos da energia de corte, estimados a partir da expressão (1.29). Os valores da energia de corte extraídos dos espectros de fotoluminescência de excitação são também mostrados na tabela para comparação.

No que diz respeito à interpretação dos dados da Tabela 1.4, vale relembrar os aspectos mais interessantes mostrados pelos resultados. Temos o deslocamento do espectro da fotoluminescência para altas energias quando  $d_s$  decresce. Este comportamento obtido experimentalmente coincide com a previsão teórica do comportamento da energia de corte.

Comparando os valores teóricos para a energia de corte com aqueles experimentais encontrados nos espectros de fotoluminescência de excitação podemos observar uma discrepância. Como foi discutido na comparação das ocupações das sub-bandas, parte destas discrepâncias pode ter origem em algumas considerações feitas nos cálculos. Devemos acrescentar também que, ao tomarmos o valor da faixa proibida fundamental do GaAs (1.5192eV) para  $E_g^{\text{GaAs}}$ , não estamos levando em conta a renormalização da faixa proibida em

Tabela 1.4. Comparação entre os valores teóricos da energia de corte,  $h\nu^{corte}$ , calculados pela expressão (1.29), e aqueles experimentais, extraídos dos espectros de fotoluminescência de excitação [23,24].

$d_s(\text{Å})$		40	70	100	160	220
$h\nu^{corte}$ (eV)	teo.	1,687	1,634	1,593	1,570	1,551
	exp.	1,662	1,6	1,585	1,563	1,541

semicondutores degenerados [87]. Este efeito aparece sob a forma de uma diminuição da faixa proibida efetiva do material. Assim, os valores teóricos da energia de corte apresentados na Tabela 1.4 podem estar sendo superestimados. A correção do valor da faixa proibida de um material devida a esse efeito varia em função da concentração de impurezas indo de 10meV para  $N_{DD} = 10^{17}\text{cm}^{-3}$  até aproximadamente 40meV para  $N_{DD} = 10^{19}\text{cm}^{-3}$ . Pensando-se em termos da densidade de doadores por unidade de volume, esta cresce quando  $d_s$  diminui explicando assim o aumento da discrepância observada na Tabela 1.4 para os valores menores do período da super-rede. (Por exemplo, para a concentração planar  $N_D = 3 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$  e  $d_s = 40\text{Å}$  obtemos uma densidade por unidade de volume  $N_{DD} = N_D/d_s = 7,5 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ ).

Em resumo, nossos resultados para super-redes de deltas deixam clara a existência de forte confinamento de buracos nestas estruturas. Este efeito, juntamente com o deslocamento do nível de Fermi são os responsáveis pelo comportamento apresentado pela energia de corte. Estes resultados estão de acordo com a mudança de caráter do comportamento eletrônico de bi- para tridimensional, discutida na análise da dependência das ocupações de minibandas com o espaçamento. Algumas discrepâncias entre os resultados dos cálculos autoconsistentes e dados experimentais sugerem que o tratamento deste tipo de sistema requer extremo cuidado na avaliação dos fenômenos que regem o seu comportamento.

A aplicação do nosso método (secção 1.2) para o cálculo da estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Si em GaAs foi um passo muito importante, tanto na familiarização com este tipo de problema, quanto na melhora da própria abordagem. Após ser testado num sistema bastante

simples e investigado por vários grupos (super-rede de deltas de Si em GaAs), o nosso método foi aplicado para cálculo da estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Sb em Si. O fato de termos disponível este método permitiu empreender este tipo de cálculo pela primeira vez, tornando os resultados inéditos, além de serem de grande valor para vários grupos de pesquisa, teóricos, bem como experimentais. A aplicação do nosso método para super-redes de deltas de Sb em Si será discutida na próxima secção.

## 1.4. ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SUPER-REDES DE DELTAS DE Sb EM Si

### 1.4.1. Campo de pesquisa

Enquanto sistemas com dopagem delta em GaAs estiveram sujeitos a estudos intensos tanto teóricos, quanto experimentais (vide por exemplo as referências [7,23,24,36,88-91]), a investigação de dopagem delta em Si é mais recente devido, principalmente, às dificuldades encontradas no controle à incorporação precisa de dopantes durante o crescimento de Si por MBE [92,93]. Recentemente a utilização das técnicas de MBE à baixas temperaturas e de MBE acoplada com o crescimento epitaxial de fase sólida de amostras orientadas paralelamente ao planos (001), evidenciaram perfis de dopagem delta com a espessura à meia altura  $\leq 20\text{Å}$ , para ambos os tipos de dopagem: tipo n (Sb) e tipo p (B) [94,95]. As propriedades elétricas incluindo a mobilidade dos portadores de carga das camadas de dopagem planar em Si foram investigadas recentemente por meio de medidas de Hall nos sistemas tipo delta isolado e tipo multi-delta [96,97]. Como em GaAs, as concentrações de portadores livres observadas nas super-redes de deltas em Si são suficientemente maiores quando comparadas com aquelas nos planos delta isolados [96]. Os níveis de energia formados no poço de potencial induzido em Si pela dopagem delta de Sb em uma única camada foram estudados por experiências de tunelamento ressonante [28].

Do ponto de vista teórico, somente o poço delta isolado foi investigado até o momento [28,97,98]. Embora na literatura existam dados experimentais sobre o sistema contendo múltiplos poços delta em Si, não existia um estudo

teórico sistemático das propriedades eletrônicas de super-redes de deltas. Nos próximos itens apresentamos os resultados de cálculos auto-consistentes da estrutura eletrônica para sistemas contendo múltiplos planos de dopagem tipo *n* paralelos aos planos (001) do cristal de Si. Estes cálculos foram efetuados para valores diferentes da concentração planar de dopagem  $N_D$  e do período de super-rede  $d_s$ . Analisamos a influência de  $N_D$  e  $d_s$  nas energias de sub-bandas, dispersões das mini-bandas e ocupações de sub-bandas eletrônicas. A mudança da posição do nível de Fermi e do perfil do potencial em função da concentração de dopagem planar e em função do espaçamento entre os planos adjacentes de dopagem é apresentada e discutida na análise da transição do comportamento eletrônico de caráter bi- para tridimensional.

#### 1.4.2. Resultados numéricos

A distribuição dos átomos doadores usada em nossos cálculos foi tomada como uniforme com espessura de 10Å. As concentrações de dopantes foram variadas de  $8,0 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  à  $3,0 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ , que é a faixa típica de valores de dopagem planar usados em Si. As distâncias entre camadas delta,  $d_s$ , cobrem o intervalo de 50 a 300Å. As super-redes de deltas com espaçamentos maiores apresentam características similares ao caso de um poço delta isolado. À  $d_s = 300\text{Å}$  este regime praticamente é atingido. No mínimo duas sub-bandas eletrônicas estão ocupadas para concentrações planares da faixa mencionada acima.

Os valores das massas efetivas transversal e longitudinal e da constante dielétrica do Si foram assumidos serem iguais a  $0,1905m_0$ ,  $0,9163m_0$ , e 12,1, respectivamente [82].

*a) Estrutura eletrônica de super-redes de deltas de Sb em Si em função do período da super-rede para diferentes concentrações de dopagem*

Discutiremos a seguir as modificações da estrutura eletrônica e do perfil do potencial com a variação do período  $d_s$ . Na Figura 1.8 é mostrado o comportamento das sub-bandas  $E_{nj}$ , a profundidade do poço de potencial  $V$ , e a posição do nível de Fermi em função do espaçamento  $d_s$  para  $N_D = 8,0 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . Com essa concentração de dopantes, somente três sub-bandas estão ocupadas (com exceção do caso  $d_s \sim 50 \text{Å}$ ):  $E_{0l}$  e  $E_{1l}$  as quais correspondem aos níveis longitudinais (oriundos da massa efetiva longitudinal  $m_l^*$ ) bidegenerados, e  $E_{0t}$  que designa o estado fundamental do nível transversal (oriundo da massa efetiva transversal  $m_t^*$ ) quadridegenerado. (No caso  $d_s = 50 \text{Å}$ , a sub-banda  $E_{1l}$  fica desocupada devido ao decréscimo do nível de Fermi.)

Para  $d_s \geq 150 \text{Å}$ , o sistema se comporta como um poço delta isolado, enquanto com a diminuição de  $d_s$  o comportamento de super-rede passa a predominar. A profundidade do poço de potencial  $V$  permanece praticamente constante, exibindo um decréscimo suave para  $d_s < 100 \text{Å}$ . O mesmo tipo de comportamento é observado para o nível de Fermi, sempre ficando por baixo da barreira do potencial. Podemos observar que, atingindo a condição do contínuo dos estados de energia da banda de condução no caso  $d_s = 50 \text{Å}$ , os elétrons não estão ainda tridimensionais, no sentido de serem os "elétrons livres", já que estão confinados dentro de cada poço por barreiras de potencial.

Nas Figuras 1.9 e 1.10 é apresentada a dependência das posições das sub-bandas  $E_{nj}$  e do nível de Fermi  $E_F$  para  $N_D = 1,3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$  e  $6,5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ,

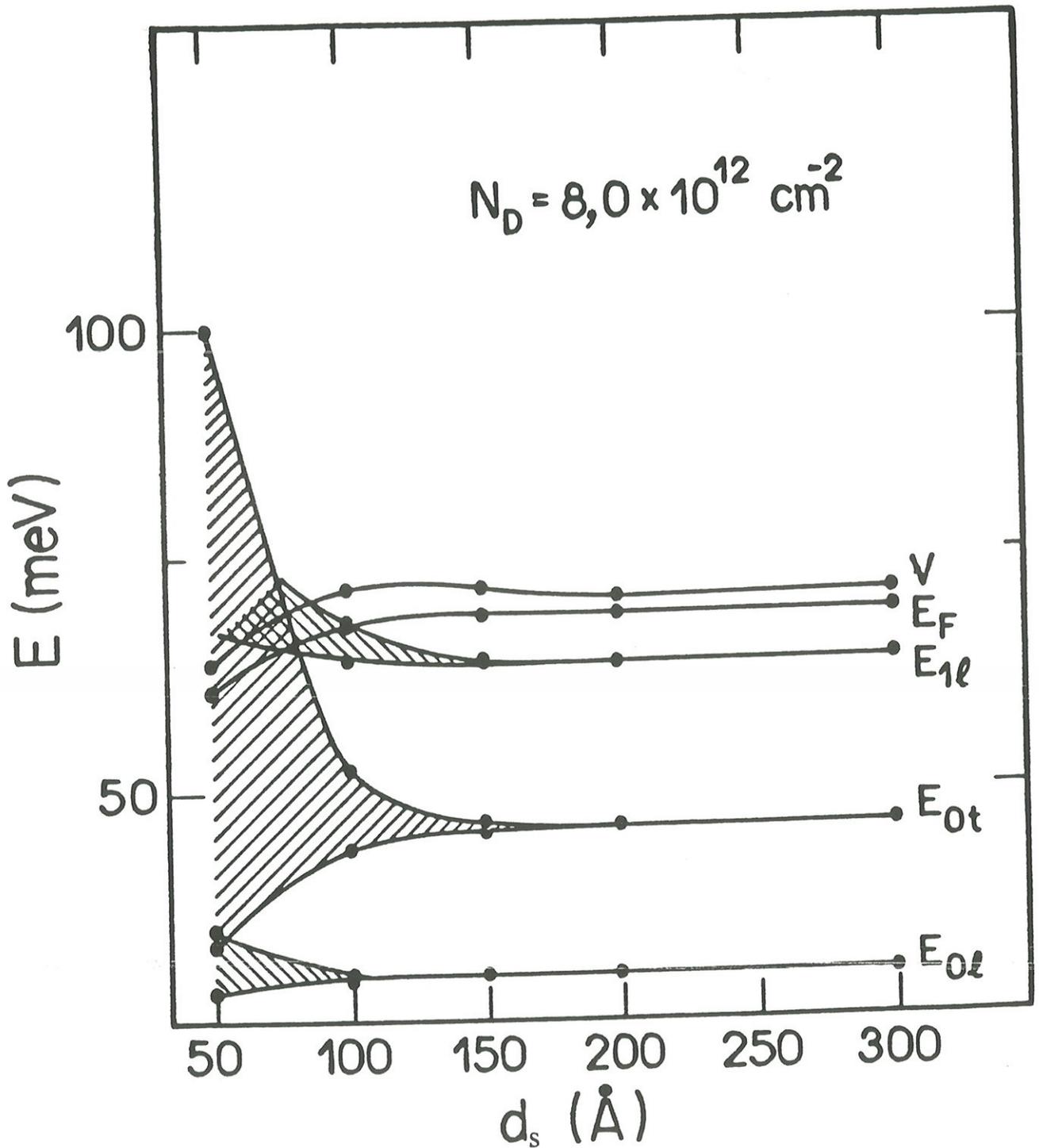


Figura 1.8. Energias de sub-bandas  $E_{nj}$ , altura da barreira de potencial  $V$ , e posição do nível de Fermi  $E_F$  como função do período  $d_s$  para concentração de dopantes  $N_D = 8,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  em Si. Todas as energias são dadas em relação ao fundo do poço delta.

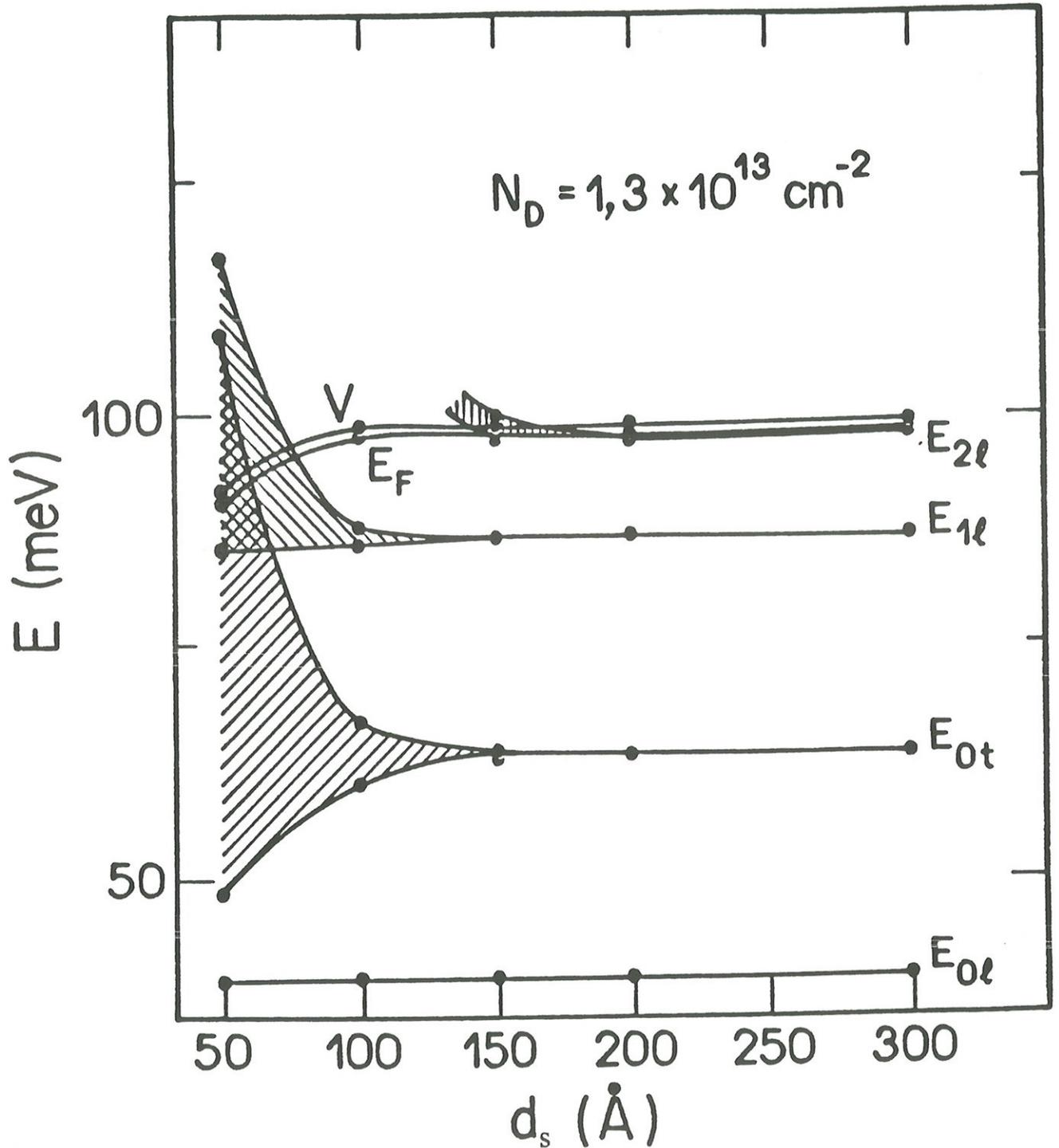


Figura 1.9. Energias de sub-bandas  $E_{nj}$ , altura da barreira de potencial  $V$ , e posição do nível de Fermi  $E_F$  como função do período  $d_s$  para concentração de dopantes  $N_D = 1,3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  em Si. Todas as energias são dadas em relação ao fundo do poço delta.

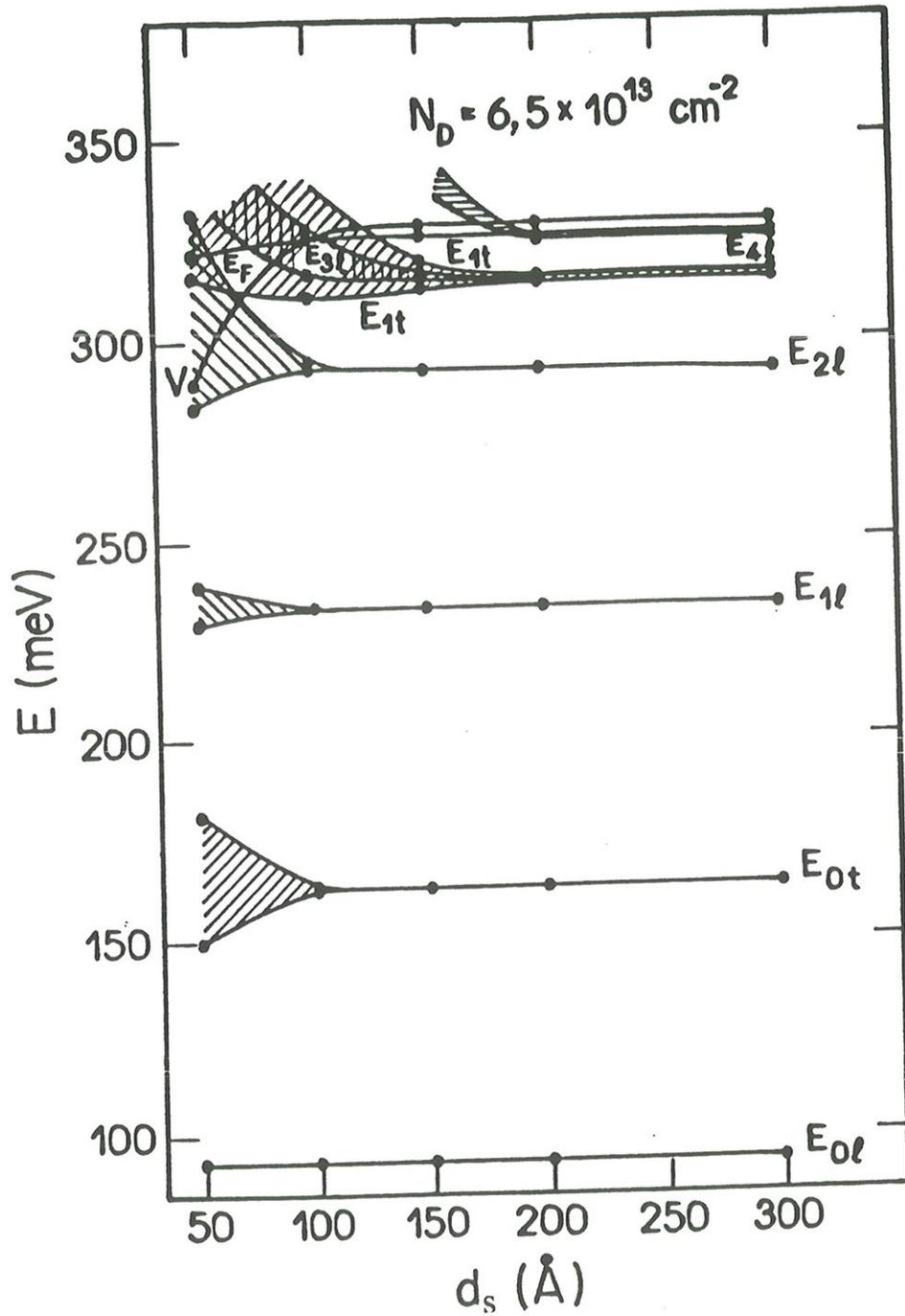


Figura 1.10. Energias de sub-bandas  $E_{nj}$ , altura da barreira de potencial  $V$ , e posição do nível de Fermi  $E_F$  como função do período  $d_s$  para concentração de dopantes  $N_D = 6,5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  em Si. Todas as energias são dadas em relação ao fundo do poço delta.

respectivamente. Como é esperado, as sub-bandas mais altas começam a ficar preenchidas conforme o aumento da concentração de dopantes  $N_D$ . Para a dopagem mais alta (vide Figura 1.10), além de cinco sub-bandas longitudinais  $E_{0l}$ ,  $E_{1l}$ ,  $E_{2l}$ ,  $E_{3l}$ , e  $E_{4l}$ , as duas primeiras sub-bandas transversais  $E_{0t}$  e  $E_{1t}$  estão ocupadas.

A análise conjunta das Figuras 1.8 a 1.10 nos permite extrair as conclusões que expomos a seguir.

Como é esperado, a profundidade do poço de potencial  $V$ , e a energia de Fermi  $E_F$  aumentam conforme o aumento de  $N_D$  para toda a faixa de valores de  $d_s$ . Para  $d_s \leq 150\text{\AA}$ , o comportamento de super-rede aparece em todos os casos. Os níveis de energia discretos dão lugar às mini-bandas. Isto é um indício de que os poços delta começam a interagir entre si.

Com aumento da concentração  $N_D$  a dispersão em energia das sub-bandas mais baixas diminui. Para  $N_D > 1,0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ , o estado fundamental  $E_{0l}$  já não apresenta dispersão nenhuma. Para  $d_s > 150\text{\AA}$ , o sistema se comporta praticamente como um poço delta isolado; as larguras das minibandas ocupadas mais altas (mais próximas ao nível de Fermi) são muito pequenas ( $\leq 7 \text{meV}$ ).

A transição do comportamento eletrônico bi para essencialmente tridimensional (aquele do elétron livre) é observado somente para altas densidades de dopagem  $N_D > 2,0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ , e para os períodos pequenos  $d_s \sim 50\text{\AA}$ . Somente nestes casos o nível de Fermi foi encontrado acima da barreira do potencial entre os poços delta adjacentes.

Os resultados discutidos acima estão de acordo com as medidas de Hall [96], efetuadas numa série de super-redes de deltas de Sb em Si com  $d_s = 50\text{\AA}$ . Essas medidas revelaram algumas discrepâncias entre a concentração bidimensional extraída dos dados de medidas de Hall e aquela

prevista através dos parâmetros do equipamento de crescimento para  $N_D < 1,0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ . Os resultados dos cálculos apresentados aqui para  $N_D = 8,0 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  e  $d_s = 50 \text{Å}$  demonstram que para a concentração de doadores tão pequena, a dispersão em energia das sub-bandas é bastante grande. Aparece o continuum dos estados permitidos na banda de condução, e a aproximação bidimensional para a densidade de estados, usada na extração de dados das medidas de Hall, começa a falhar.

*b) Estrutura eletrônica e ocupações de sub-bandas em função da densidade de dopagem planar nas super-redes de deltas de Sb em Si*

As mudanças que sofrem as energias de sub-bandas  $E_{nj}$  e o potencial  $V$ , conforme a concentração  $N_D$  varia, são mostradas na Figura 1.11, para  $d_s = 50 \text{Å}$ . Os níveis de energia começam a ficar mais profundos com o aumento da concentração de doadores. Este processo é acompanhado pela diminuição da dispersão das sub-bandas mais baixas. Isto indica que o confinamento de elétrons é fortalecido para altas densidades de dopagem. As ocupações das sub-bandas, para variações do período da super-rede  $d_s$  entre 50 e 300 Å, são apresentadas na Tabela 1.5, para  $N_D = 8,0, 13,0, \text{ e } 65,0 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . Como é esperado, as ocupações das sub-bandas mais baixas tornam-se praticamente insensíveis em relação ao período da super-rede para mais altas concentrações de dopagem. A maioria dos elétrons ocupam estados de energia quase bidimensionais, os quais são mais próximos ao fundo do poço delta. Porém, cabe mencionar que a concentração total dos elétrons os quais ocupam sub-bandas longitudinais (determinadas pelo valor de massa efetiva  $m_l$ ) é aproximadamente a mesma que a dos elétrons nos estados transversais

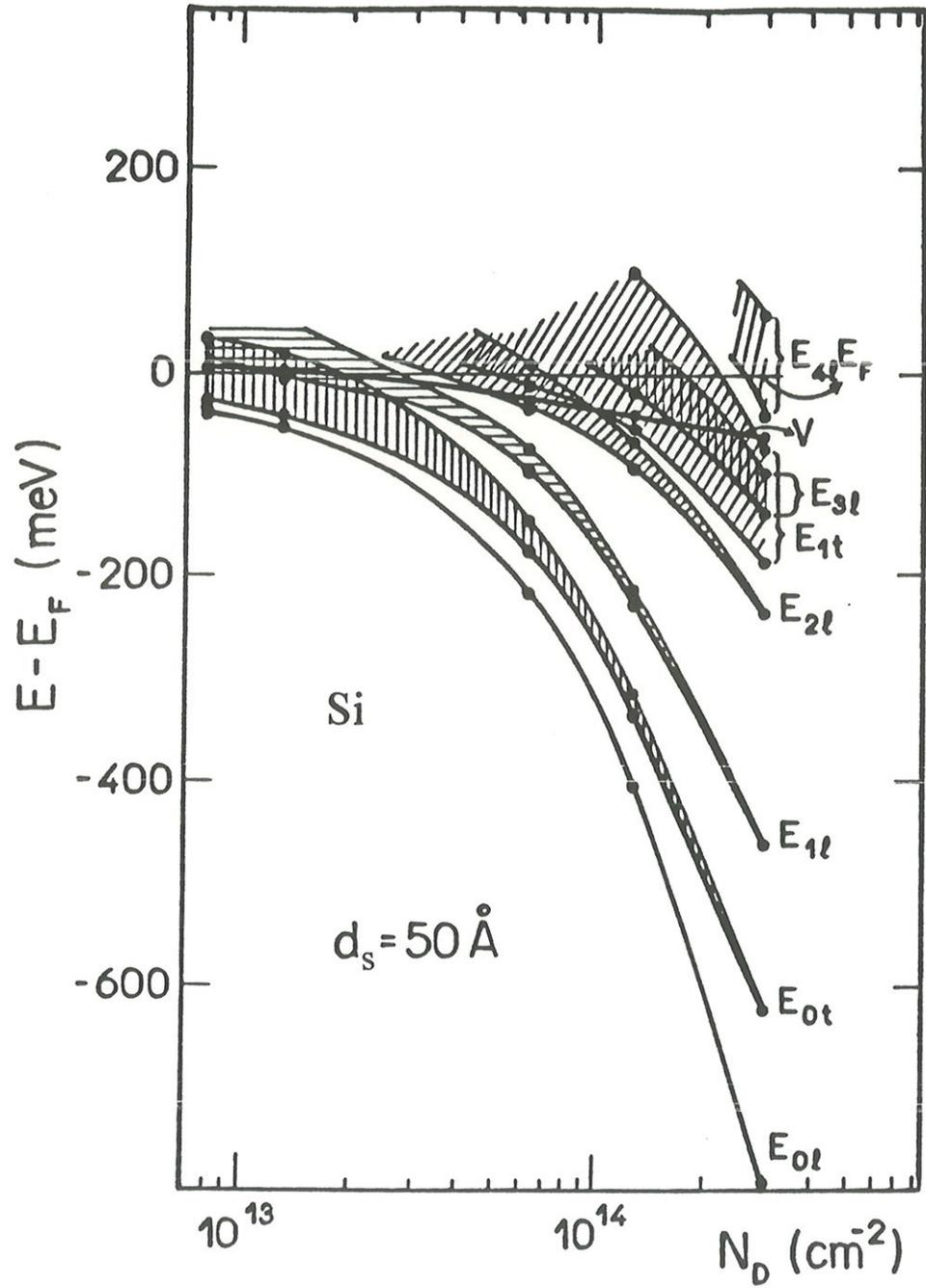


Figura 1.11. Dependência das energias  $E_{nj}$  e da altura da barreira  $V$  com a concentração planar de dopantes  $N_D$ , para  $d_s = 50 \text{ \AA}$ . Energias são dadas em relação ao nível de Fermi  $E_F$ .

Tabela 1.5. Ocupações de sub-bandas,  $n_n^j$ , para a estrutura multi-delta em Si para diferentes concentrações  $N_D$  e períodos  $d_s$ .

$N_D (\times 10^{12} \text{cm}^{-2})$	$n_n^j (\times 10^{12} \text{cm}^{-2})$	$d_s (\text{\AA})$				
		300	200	150	100	50
8,0	$n_0^l$	3,33	3,32	3,30	3,19	2,77
	$n_0^t$	4,22	4,24	4,28	4,48	5,23
	$n_1^l$	0,45	0,44	0,42	0,33	—
13,0	$n_0^l$	5,08	5,08	5,07	4,97	4,47
	$n_0^t$	6,83	6,82	6,85	7,07	8,07
	$n_1^l$	1,02	1,02	1,00	0,95	0,45
	$n_2^l$	0,07	0,08	0,07	—	—
65,0	$n_0^l$	20,04	20,03	20,02	19,99	19,70
	$n_0^t$	31,04	31,03	31,00	30,92	32,87
	$n_1^l$	7,99	7,98	7,96	7,91	7,99
	$n_2^l$	2,96	2,94	2,91	2,80	3,30
	$n_1^t$	2,06	2,15	2,31	2,65	1,14
	$n_3^l$	0,87	0,83	0,79	0,73	—
	$n_4^l$	0,04	0,02	—	—	—

(regidos pelo valor de massa efetiva  $m_t$ ). Esta situação permanece válida para toda a faixa de concentrações de doadores e para toda a faixa de espaçamentos entre os planos.

Como pode ser observado na Figura 1.11, para as concentrações de dopagem maiores do que  $2,0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ , uma parte dos elétrons já começa a exibir o comportamento tridimensional. Porém, a percentagem de tais elétrons é muito baixa ( $\sim 1-2\%$  da concentração total). No entanto, estes elétrons podem causar um aumento notável da mobilidade ao longo da direção [001]. Experiências futuras serão necessárias para comprovar esta previsão.

O comportamento das sub-bandas eletrônicas  $E_{nj}$  e do nível de Fermi  $E_F$ , para espaçamento  $d_s = 100 \text{Å}$ , é apresentado na Figura 1.12. Qualitativamente o caráter das mudanças ocorridas com o aumento da concentração  $N_D$  é o mesmo em relação ao caso anterior. Como é esperado, devido ao período maior, os estados tridimensionais correspondentes ao regime da super-rede aparecem para concentrações de dopagem muito mais altas ( $N_D \sim 7 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ). Cabe notar que, às mesmas concentrações de dopantes, neste caso  $d_s = 100 \text{Å}$ , a dispersão em energia de todas as sub-bandas é menor do que no caso  $d_s = 50 \text{Å}$  (vide Figura 1.11).

Os espectros das sub-bandas de energia mostrados nas Figuras 1.11 e 1.12 foram obtidos sem levar em conta o acoplamento entre os vales diferentes da banda de condução de Si [64]. A não consideração deste acoplamento é justificada enquanto a estrutura fina dos níveis de energia não é importante, como por exemplo no caso da interpretação de medidas de transporte. Para interpretação das medidas ópticas, por outro lado, o desdobramento dos níveis de energia devido ao acoplamento dos multi-vales relacionados ao mínimo da banda de condução do Si começa a ficar importante.

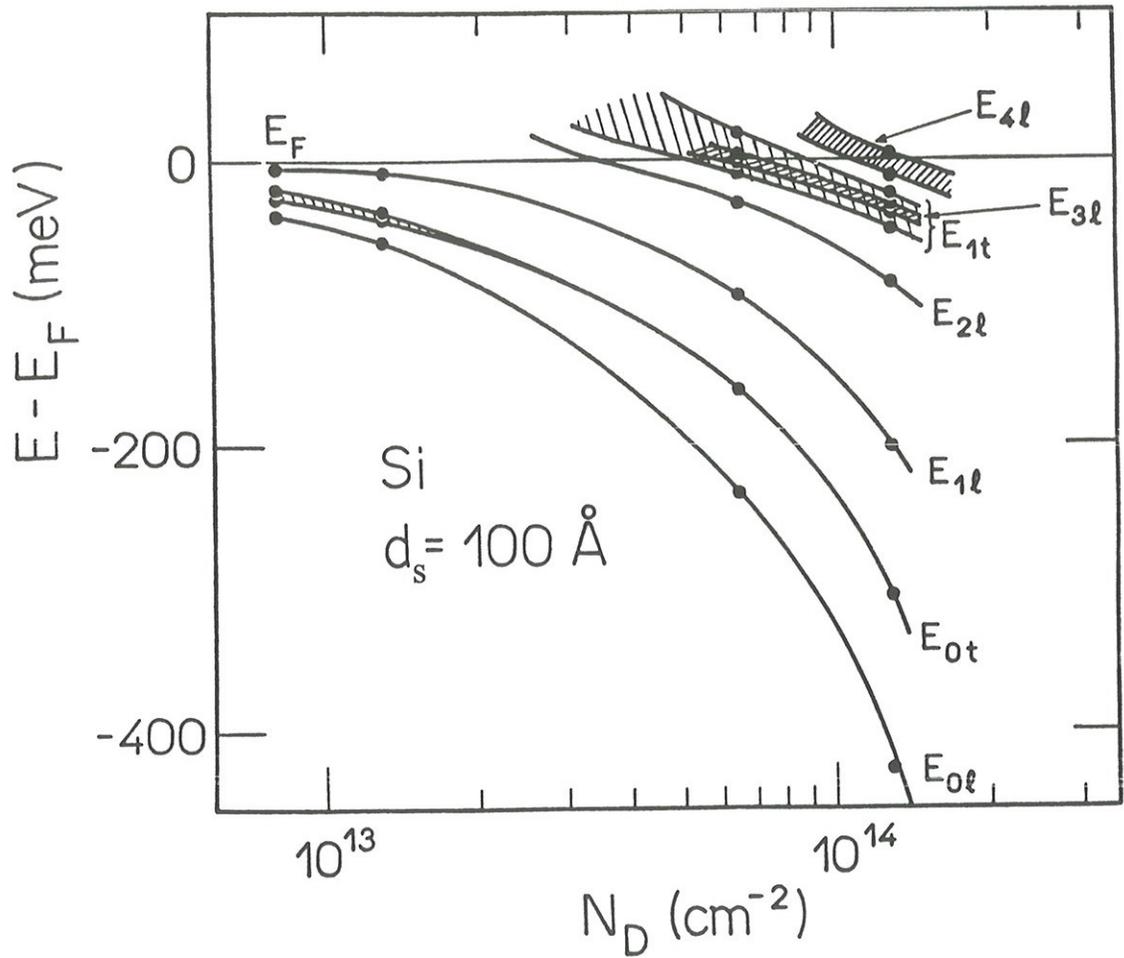


Figura 1.12. Dependência das energias  $E_{nj}$  com a concentração planar de dopantes  $N_D$ , para  $d_s = 100 \text{ \AA}$ . Energias são dadas em relação ao nível de Fermi  $E_F$ .

### 1.4.3. Efeito do acoplamento dos multi-vales relacionados ao mínimo da banda de condução do Si

O estudo deste efeito, conforme feito por nós, encontra-se descrito na referência [26] e é apresentado no Apêndice B. Como foi demonstrado, o desdobramento dos níveis de energia no poço delta existe, dentro de nosso modelo, somente para estados pares e aumenta conforme aumenta a localização da função envelope do elétron. Portanto, o desdobramento dos níveis de energia, devido ao potencial flutuante no plano delta  $\Delta V(x)$ , é maior para concentrações  $N_D$  maiores. Isto tem sua explicação na maior localização dos elétrons à concentrações mais altas (vide item anterior). O desdobramento é maior para os estados eletrônicos mais baixos, tornando-se desprezível para todos os estados acima dos estados fundamentais (transversal e longitudinal). Isto porque a localização do elétron nos estados fundamentais é muito mais pronunciada em relação aos outros.

O valor do desdobramento depende do valor da função envelope no plano delta e do valor da parte flutuante  $\Delta V(x)$  do potencial no mesmo plano. Para estados com um número ímpar de nós, a função envelope  $F_n^j(0)$  torna-se zero, eliminando o desdobramento destes estados. Para estados sem nós ( $n = 0$ ) ou para estados com um número par de nós, o valor de  $F_n^j(0)$  é diferente de zero, causando o aparecimento do desdobramento. Nos cálculos, para o valor da grandeza  $\Delta V(x)$  foi adotado o valor do potencial Coulombiano não blindado, de acordo com o procedimento empreendido em [99] para cálculos da energia de desdobramento de um doador isolado em Si.

Para calcular o desdobramento dos estados fundamentais seguindo a abordagem apresentada no Apêndice B foram utilizados os valores da função

envelope, obtidos através dos cálculos numéricos, feitos de acordo com a seção 1.2. Para o período de super-rede  $d_s = 300\text{\AA}$  no caso de  $N_D = 8,0 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ , os valores 10,4meV e 21,6meV foram obtidos para a energia de desdobramento dos estados fundamentais longitudinal e transversal, respectivamente. O último valor corresponde à energia do desdobramento devido ao acoplamento de vales diferentes do nível  $1s$  do estado fundamental de Sb em Si ( 21,15meV conforme a referência [99]).

Conclui-se, portanto, da discussão apresentada neste ítem, que o acoplamento dos multi-vales ligados ao mínimo da banda de condução do Si, induzido pela flutuação do potencial no plano delta não altera as conclusões apresentadas nos ítems anteriores.

## 1.5. COMENTÁRIOS FINAIS

### 1.5.1. Análise comparativa e discussão dos resultados obtidos para super-redes de deltas em GaAs e Si

Antes de finalizar o Capítulo 1, cabe dedicar algum espaço à análise comparativa da transição do comportamento eletrônico de bi- para tridimensional nos sistemas contendo múltiplos poços delta tipo n em GaAs e Si. É importante ressaltar que esta transição nas super-redes de poços delta em Si ocorre para concentrações de doadores mais altas e para espaçamentos menores do que em GaAs. Isto se deve ao fato que para Si os valores de  $m_t^*$  e  $m_l^*$  são maiores do que o valor da massa efetiva do elétron livre na banda de condução do GaAs. As ocupações dos níveis nos poços delta são proporcionais aos valores da massa efetiva do elétron no plano  $x-y$  (vide equações (1.22) e (1.28)). Portanto, o nível eletrônico (ou sub-banda) no poço delta em Si é capaz de acomodar mais elétrons no caso da mesma (em Si e em GaAs) posição energética do nível de Fermi em relação ao nível eletrônico em questão. Deste modo, para as mesmas concentrações planares de dopantes no Si e no GaAs a energia de Fermi da super-rede em Si é menor. Isto faz com que o nível de Fermi em Si fique abaixo da barreira de potencial que separa os poços, mesmo para espaçamentos bem pequenos (vide, por exemplo, a Figura 1.8). Ou seja, não existem estados eletrônicos ocupados que se estendam por cima da barreira.

Para períodos de super-rede pequenos e concentrações de dopantes baixas, a estrutura eletrônica da super-rede de deltas em Si é interessante e bem diferente daquela em GaAs. Nas super-redes de deltas em Si a condição,

do contínuo de estados eletrônicos pode ser atingida na situação em que todos os elétrons de um poço estão confinados pela barreira de potencial (vide Fig. 1.8), e a interação entre os poços ocorre devido à possibilidade de tunelamento quântico dos elétrons, causando a dispersão em energia das sub-bandas. Neste caso, o comportamento eletrônico é um comportamento de super-rede, com a densidade de estados completamente diferente do modelo bidimensional [35,85]. Mas o elétron não é totalmente tridimensional, já que o comportamento dele não é aquele do elétron livre da banda de condução.

### 1.5.2. Futuras aplicações do método desenvolvido

O nosso método, na forma como ele é aplicado para o cálculo da estrutura eletrônica da super-rede de deltas em Si, pode ser utilizado na investigação sistemática das propriedades eletrônicas de super-redes de deltas de Be em GaAs. Isto é, o sistema com dopagem planar tipo p. A banda de valência do GaAs nas vizinhanças do centro da Zona de Brillouin é caracterizada por três curvas, havendo duas bandas degeneradas no centro, uma conhecida como buraco leve, e a outra, banda de buraco pesado; a terceira denomina-se banda de buracos "split-off", oriunda da separação provocada pela interação spin-órbita. A separação entre as duas primeiras e a última é da ordem de 340meV [100]. A banda de buracos "split-off" é deslocada para energias mais baixas da banda de valência, de tal modo que quase sempre é maior do que a profundidade do poço no caso de dopagem delta tipo p. Por isso pode-se trabalhar só com buraco leve e buraco pesado.

A única diferença em relação à dopagem delta tipo n em Si que surge nas simulações computacionais (além dos valores diferentes de parâmetros do

material) é o cálculo das ocupações dos estados. Assumindo a anisotropia das massas efetivas do buraco leve e do buraco pesado nas vizinhanças do ponto  $\Gamma$  da Zona de Brillouin, o mesmo valor da massa que descreve o movimento da partícula na direção [001] deve ser usada no cálculo das ocupações dos níveis da energia correspondentes.

Esta nossa abordagem já foi aplicada para o cálculo da banda de valência no caso de super-rede de deltas de Be em GaAs. Embora esta abordagem não leve em conta a descrição rigorosa das bandas de valência, os resultados obtidos concordam qualitativamente com resultados apresentados nas referências [101,102], onde foi utilizado o formalismo de Luttinger-Kohn [103].

Qualitativamente a estrutura da banda de valência do Si é igual àquela do GaAs. Só que o valor da separação spin-órbita é de 44meV [64], o que é muito menor em comparação com GaAs. Deste modo, a presença dos níveis de buracos separados, ocupados à concentrações típicas de dopagem, não pode ser desprezada no cálculo da estrutura eletrônica de super-redes em Si. Portanto, para ser aplicado para a investigação de super-redes de deltas de B em Si, por exemplo, o nosso método deve ser desenvolvido incluindo no cálculo a presença de três tipos de buraco com massas efetivas diferentes, já que a profundidade típica do poço delta tipo  $p$  em Si é  $\geq 100\text{meV}$  [97].

Nosso método não se restringe somente a super-redes de deltas e pode ser utilizado no cálculo das propriedades eletrônicas de super-redes convencionais. Este nosso método permite sua reelaboração para aplicação nos sistemas físicos unidimensionais tais como fios quânticos [104].

Como foi demonstrado nas referências [27,44] os campos elétricos internos podem alterar a estrutura eletrônica do poço delta único. O mesmo efeito é esperado para super-redes e heteroestruturas em geral. Conhecendo

os campos elétricos de superfície e interfaciais, é possível extrair conclusões mais precisas sobre propriedades eletrônicas das amostras, através da introdução de correções oriundas destes campos. Deste modo, o seguinte Capítulo 2 consagra-se ao cálculo dos campos elétricos internos em homo e heteroestruturas.

## CAPÍTULO 2

# CAMPOS ELÉTRICOS INTERNOS EM HOMO- E HETEROESTRUTURAS SEMICONDUCTORAS

### 2.1. INTRODUÇÃO

A aplicação de campos elétricos no interior das estruturas semicondutoras é um dos meios mais amplamente utilizados para o controle eficiente da operação de dispositivos. Este conceito está intimamente ligado à concepção dos primeiros transistores de efeito de campo, nos quais a quantidade de portadores no canal de transporte é modificada pela aplicação de campo elétrico externo que modifica a distribuição original dos campos elétricos internos. Uma idéia similar é usada no caso da investigação de estruturas semicondutoras por meio das técnicas de modulação óptica, tais como eletrorefletância, fotorefletância e fotorefletância diferencial, quando os perfis internos do campo elétrico são modulados ou pela aplicação do campo elétrico externo, no primeiro caso, ou pela injeção do laser que muda a carga superficial e/ou interfacial, nos dois últimos. É inegável, portanto, a relevância de se compreender bem a distribuição espacial do campo elétrico interno para usá-la no cálculo da estrutura eletrônica de dispositivos semicondutores ou na análise de dados experimentais de medidas ópticas.

Os campos elétricos internos, ou seja inerentes à estrutura semicondutora, podem ser provenientes só da superfície, como no caso de

homoestrutura, bem como da superfície e da(s) interface(s), como no caso de heteroestrutura. Os campos elétricos superficiais e interfaciais são oriundos dos estados de superfície e interface, respectivamente, os quais correspondem a níveis profundos dentro da faixa proibida dos semicondutores. Os estados de superfície em semicondutores têm sido previstos teoricamente [105] e observados experimentalmente (vide por exemplo [106]) desde a década de 1930. Estes níveis têm sua origem associada ao término do cristal. O seu comportamento elétrico é bastante parecido àquele observado em níveis de impurezas; já tendo sido observados estados de superfície tanto com caráter doador como aceitador de elétrons.

No caso de se tratarem de estados aceitadores, o equilíbrio eletroquímico caracteriza-se pela presença de uma lâmina de cargas negativas na superfície, e de uma região espacial de carga positiva prologando-se no interior do material. No caso da existência de estados doadores na superfície do semiconductor, será verificada no equilíbrio a formação de um plano carregado positivamente na superfície e de uma região de carga negativa penetrando no interior da amostra.

O rearranjo de cargas, ocasionado pela presença dos estados de superfície dá, assim, origem a um campo elétrico não nulo no interior do material, que promove a curvatura das bandas de valência e de condução. De fato, este campo elétrico oriundo de cargas acumuladas na superfície pode, em certos casos, penetrar profundamente na amostra semicondutora. O mesmo permanece válido para os campos elétricos provenientes dos estados de interface, no caso de heteroestrutura.

O entendimento físico da distribuição espacial dos campos elétricos no interior da homo- ou heteroestrutura é muito mais simples do que a compreensão física da natureza e das propriedades destes estados, já que

existe, na realidade, toda uma área da Física moderna da matéria condensada que se preocupa em profundidade com a Física de superfície (referente à superfície de GaAs, por exemplo, vide ref.[107]). Porém, o cálculo dos perfis de campo elétrico interno representam um problema sério no sentido de simulações numéricas. Devido a isto, normalmente a distribuição espacial do campo elétrico interno é calculada na aproximação de bandas parabólicas. Neste caso, a segunda derivada do potencial sofre a descontinuidade no final da região de depleção (aproximação de Schottky). Existem algumas tentativas escassas de achar a solução exata do problema, mas de acordo com nosso conhecimento da literatura supõe-se a não-degenerescência da camada de semiconductor em questão e a ionização completa de todos os átomos dopantes do material [43,44,108]. Isto porque, neste caso existe a possibilidade de escrever a solução do problema analiticamente para material homogêneo [108] e diminuir o tempo dos cálculos computacionais no caso de heteroestrutura [43].

A alta resolução das técnicas de espectroscopia de modulação, por exemplo, demandam os perfis exatos do potencial e do campo elétrico para a interpretação adequada dos espectros. Neste capítulo é apresentado um método que permite calcular os campos elétricos internos, e que não envolve as aproximações mencionadas acima. Tentando atingir a maior clareza na apresentação, o método é explicado primeiramente no caso de semiconductor tratado como espaço semi-infinito, e após é estendido para heteroestruturas. Os exemplos numéricos, envolvendo GaAs e (GaAl)As, demonstram o poder da abordagem, visando uma elucidação do comportamento físico dos sistemas.

## 2.2 MÉTODO DE CÁLCULO DO PERFIL DO CAMPO ELÉTRICO INTERNO

### 2.2.1. Cálculo do perfil do potencial e do campo elétrico no interior de homoestruturas semicondutoras

Vamos considerar um material semicondutor que ocupa o semi-espaço infinito e é dopado homogeneamente com dopante tipo n. Vamos denominar sua concentração eletrônica de  $n(z)$  e a concentração de doadores ionizados de  $N_D^+(z)$ . Neste caso, a densidade total de carga  $\rho(z)$  pode ser expressa como

$$\rho(z) = -e [n(z) - N_D^+(z)] . \quad (2.1)$$

Vamos supor que o gás dos elétrons não é degenerado em  $z = -\infty$ . Esta suposição é completamente diferente daquela mencionada na seção 2.1 sobre a não-degenerescência da região do material em questão. No nosso caso a degenerescência, para qualquer valor finito de  $z$ , pode ocorrer devido à variação do potencial eletrostático  $\varphi(z)$ , o qual, em geral, é diferente do valor do potencial no infinito  $\varphi(-\infty)$ . Já que somente a variação do potencial tem sentido físico, e não o seu valor em si, podemos escolher para este último o valor nulo:

$$\varphi(-\infty) = 0. \quad (2.2)$$

A concentração eletrônica  $n(z)$  pode ser escrita como [109]:

$$n(z) = n_{\infty} \exp[(E_c - E_F)/kT] F_{1/2}[(E_F + e\varphi(z) - E_c)/kT]. \quad (2.3)$$

Aqui

$$n_{\infty} = N_c \exp[(E_F - E_c)/kT] \quad (2.4)$$

é a concentração eletrônica no em  $z = -\infty$ ,  $N_c$  é a densidade efetiva de estados na banda de condução,  $E_F$  é a energia de Fermi, e  $E_c$  é a energia do fundo da banda de condução. O símbolo  $F_{1/2}$  usa-se para designar a integral tipo Fermi de ordem 1/2:

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{\exp(x - \eta) + 1} \quad (2.5)$$

A concentração de doadores ionizados é dada pela expressão [109]:

$$N_D^+(z) = N_D \frac{n_1}{n_1 + n_{\infty} \exp[e\varphi(z)/kT]}, \quad (2.6)$$

Onde  $N_D$  designa a concentração de doadores, a qual assumimos como homogênea, e  $n_1$  se expressa da seguinte maneira:

$$n_1 = \frac{1}{2} N_c \exp(-E_B/kT). \quad (2.7)$$

Aqui o símbolo  $E_B$  é usado para designar a energia de ligação do doador. Em  $z = -\infty$ , a condição da neutralidade de carga deve ser obedecida, isto é, temos a relação entre  $n_\infty$  e  $N_D$ :

$$n_\infty - N_D \frac{n_1}{n_1 + n_\infty} = 0. \quad (2.8)$$

Usando este resultado podemos escrever a expressão para a densidade de carga:

$$\rho(z) = -en_\infty \left\{ \exp[(E_c - E_F)/kT] F_{1/2}[(E_F + e\varphi(z) - E_c)/kT] - \frac{n_1 + n_\infty}{n_1 + n_\infty \exp(e\varphi(z)/kT)} \right\}. \quad (2.9)$$

O potencial eletrostrático deve obedecer à equação de Poisson:

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} = -\frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \rho(z). \quad (2.10)$$

Duas condições de contorno são necessárias para poder resolver esta equação. Uma é sugerida pelo fato de que em  $z = -\infty$ , o campo elétrico se anula, ou seja:

$$\varphi'(z)|_{z=-\infty} = 0, \quad (2.11)$$

e a outra deve refletir o fato que  $\varphi(z)$  para  $z = 0$  deve ser igual à barreira de potencial na superfície  $V_s$ :

$$\varphi(z)|_{z=0} = V_s . \quad (2.12)$$

Devido ao fato da presença do potencial  $\varphi(z)$  no lado direito da equação de Poisson (2.10), o problema que envolve as equações (2.10), (2.11), e (2.12) só pode ser resolvido numericamente. Para simplificar os cálculos numéricos, este problema, primeiramente, foi transformado em uma equação integral, dada por:

$$\varphi(z) = V_s + \frac{1}{\varepsilon \varepsilon_0} \int_0^z dz' \int_{z'}^{-\infty} dz'' \rho(z'') \quad (2.13)$$

onde  $\rho(z)$  é dado pela equação (2.9). As condições de contorno (2.11) e (2.12) para  $\varphi(z)$  são garantidas automaticamente por esta equação.

Devido ao fato que  $\varphi'(z)$  se anula para  $z \rightarrow -\infty$ ,  $\varphi(z)$  torna-se, nesta região, uma constante. Isto faz com que a densidade de carga  $\rho(z)$ , expressa pela equação (2.9), também assuma um valor constante para  $z \rightarrow -\infty$ . Este valor deve ser igual a zero, senão a solução  $\varphi(z)$  da equação integral (2.13) vai divergir para  $z \rightarrow -\infty$ . Para que  $\rho(z)$  se anule, o potencial  $\varphi(z)$  também deve se anular de acordo com a equação (2.9). Neste sentido, a equação integral (2.13) com  $\rho(z)$  dado pela equação (2.9) reproduz automaticamente a condição de normalização  $\varphi(-\infty) = 0$ , não sendo necessário que a relação (2.2) fosse assumida.

Já que o potencial eletrostático entra no lado direito da equação integral (2.13) através da expressão (2.9), a equação (2.13) deve ser resolvida da forma autoconsistente. A integral dupla em (2.13) pode ser transformada em uma soma de duas integrais simples usando o método da integração por partes:

$$\int_0^z dz' \int_{z'}^{-\infty} dz'' \rho(z'') = z \int_z^{-\infty} dz' \rho(z') + \int_0^z dz' z' \rho(z'). \quad (2.14)$$

Deste modo, a integração numérica em (2.13) relevante ao problema do cálculo do potencial eletrostático e, portanto, do campo elétrico interno, foi simplificada.

Antes de passar para o mesmo problema no caso de heteroestruturas, cabe fazer um comentário. Usando o resultado (2.14) em (2.13) e analisando a solução para  $z = -\infty$ , podemos chegar à expressão seguinte para o potencial na superfície:

$$V_s = -\frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \int_{-\infty}^0 dz z \rho(z). \quad (2.15)$$

A integral na equação acima representa o momento de dipólo elétrico da distribuição de carga. A expressão (2.15) constitui o resultado simples e bem conhecido do eletromagnetismo que, na região do dipólo, a variação do potencial é proporcional à densidade de momento de dipólo. Esta demonstração analítica mostra a consistência de nossa abordagem.

### 2.2.2. Extensão do método para heteroestruturas compostas por camadas semicondutoras com dopagem tipo $n$

Começaremos a consideração de heteroestruturas aplicando a abordagem desenvolvida na seção anterior para estruturas contendo camadas semicondutoras tipo  $n$ . Depois de obter as expressões matemáticas que descrevem este tipo de amostra, abordaremos o caso mais geral e complicado, quando estão presentes camadas com tipos de dopagem diferentes. Procurando demonstrar mais explicitamente a física do problema e diminuir o volume de expressões matemáticas, restringiremos nossa análise à heteroestruturas compostas por GaAs e (GaAl)As, já que neste caso existe possibilidade de simplificar o formalismo. De outro lado, o interesse em relação à estas estruturas é determinado pela análise posterior de espectros obtidos em experiências de espectroscopia de modulação para amostras envolvendo estes materiais e que discutiremos no Capítulo 3.

Por simplicidade, vamos assumir que todas as camadas da heteroestrutura estão homogeneamente dopadas com átomos doadores. Vamos designar a concentração de doadores na  $n$ -ésima camada por  $N_{Dn}$ . A condição de dopagem homogênea dentro de cada camada não impede que as concentrações  $N_{Dn}$  possam variar de uma camada para outra. O substrato da amostra também será considerado como semicondutor tipo  $n$ , com concentração de dopantes  $N_{Dsub}$ .

No caso de heteroestrutura, o potencial eletrostático é também descrito pela equação de Poisson (2.10) com as mesmas condições de contorno dadas pelas expressões (2.11) e (2.12), as quais já foram usadas na seção anterior para a homoeestrutura. Mudanças começam a aparecer no cálculo da densidade de carga  $\rho(z)$ . Concentrações eletrônicas  $n(z)$  e  $n_{\infty}$  ainda são dadas

pelas expressões gerais (2.3) e (2.4), mas com  $N_c$  e  $E_c$  tendo valores diferentes para camadas diferentes. Em outras palavras, elas tornam-se funções de  $z$ :  $N_c(z)$  e  $E_c(z)$ .

Na aproximação de banda parabólica, a concentração efetiva de estados na banda de condução pode ser expressa como [109]

$$N_c = 2 \left( \frac{m^* kT}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (2.16)$$

A dependência de  $N_c$  com  $z$  devida à diferença da massa efetiva do elétron ocorre somente quando passamos uma interface entre camadas compostas por materiais diferentes. Estas diferenças entre as massas efetivas são pequenas nos sistemas compostos por ligas tipo (GaAl)As [82]. Por isso, vamos considerar  $N_c$  como constante através de toda a heteroestrutura.

Neste caso a concentração eletrônica  $n(z)$  fica dada por:

$$n(z) = n_\infty \exp[(E_c - E_F)/kT] F_{1/2}[(E_F + e\phi(z) - E_c)/kT], \quad (2.17)$$

onde  $\phi(z)$  pode ser escrito da seguinte maneira:

$$e\phi(z) = e\varphi(z) - \Delta E_c(z) \quad (2.18)$$

com

$$\Delta E_c(z) = E_c(z) - E_{c \text{ sub}} \quad (2.19)$$

representando a descontinuidade na banda de condução no ponto  $z$  em relação ao substrato. Com  $E_{c \text{ sub}}$  sendo o fundo da banda de condução no

substrato, podemos escrever uma expressão similar à (2.4) para a concentração eletrônica no substrato no em  $z = -\infty$ :

$$n_{\infty} = N_c \exp[(E_F - E_{c \text{ sub}})/kT]. \quad (2.20)$$

Para a concentração de doadores ionizados podemos aplicar a expressão (2.6), com  $N_D$  e  $n_1$  sendo funções dependentes de  $z$ . A dependência de  $n_1$  com  $z$  provém da dependência da densidade efetiva de estados  $N_c$ , (já foi desprezada como discutimos anteriormente), e da dependência com a energia de ligação do doador  $E_B$ . A energia de ligação varia em função da massa efetiva do elétron no material e da função dielétrica estática  $\epsilon$ . Visto que ambas sofrem variações pequenas nos sistemas compostos por ligas do tipo (GaAl)As [82], podemos considerar o valor de  $E_B$  também como constante.

Aplicando a condição da neutralidade de carga (2.8) para o substrato da heteroestrutura podemos obter a relação entre  $n_{\infty}$  e  $N_{D \text{ sub}}$ . E assim, obtemos para a concentração de doadores ionizados  $N_D^+(z)$  na  $n$ -ésima camada a seguinte expressão:

$$N_D^+(z) = n_{\infty} \left( \frac{N_{Dn}}{N_{D \text{ sub}}} \right) \frac{n_1 + n_{\infty}}{n_1 + n_{\infty} \exp[e\phi(z)/kT]}. \quad (2.21)$$

Pela analogia com a seção anterior, a densidade total de carga é dada por:

$$\rho(z) = -en_{\infty} \left\{ \exp[(E_c - E_F)/kT] F_{1/2}[(E_F + e\phi(z) - E_c)/kT] - \left( \frac{N_{Dn}}{N_{D \text{ sub}}} \right) \frac{n_1 + n_{\infty}}{n_1 + n_{\infty} \exp[e\phi(z)/kT]} \right\}. \quad (2.22)$$

Esta densidade total de carga foi usada na equação integral (2.13) para a realização dos cálculos numéricos do potencial eletrostático  $\varphi(z)$ .

O procedimento descrito acima funciona também no caso da existência de cargas interfaciais. Vamos assumir que a concentração interfacial de doadores  $N_D^{if}$  é dada por:

$$N_D^{if}(z) = \sum_n N_{Dn}^{if} \delta(z - z_n^{if}) \quad (2.23)$$

onde  $N_{Dn}^{if}$  designa a concentração planar de doadores, e  $z_n^{if}$  designa a posição da  $n$ -ésima interface. Podemos assumir, por simplicidade, que os doadores de todas as interfaces têm a mesma energia de ligação, igual à energia de ligação do doador no "bulk". Neste caso, à expressão para a densidade total de carga dada em (2.22) devemos somar a seguinte contribuição devida às cargas interfaciais:

$$\rho^{if}(z) = en_\infty \sum_n \left( \frac{N_{Dn}^{if}}{N_{Dsub}} \right) \delta(z - z_n^{if}) \frac{n_1 + n_\infty}{n_1 + n_\infty \exp[e\phi(z)/kT]} \cdot \quad (2.24)$$

Devido à presença da função delta, a integral dupla na equação (2.13) sobre este termo pode ser calculada facilmente. Dessa forma, a equação então obtida deve ser resolvida de acordo com o procedimento descrito anteriormente.

Tendo, então, discutido a extensão do método ao estudo de heteroestruturas com dopagem tipo **n**, passaremos agora ao tratamento de sistemas contendo camadas com diferentes tipos de dopagem.

### 2.2.3. Procedimento de cálculo para heteroestruturas contendo camadas com dopagem tipo *n* e tipo *p*

Para calcular o potencial eletrostático, neste caso, assumiremos também que o potencial  $\varphi(z)$  e o campo elétrico se anulam em  $z = -\infty$ . Na superfície ( $z = 0$ ), o potencial deve ser igual à  $V_s$ . Portanto, permanecem válidas as condições de contorno (2.11) e (2.12), e a equação integral (2.13). As diferenças aparecem na expressão para a densidade total de carga  $\rho(z)$  [109,110]:

$$\rho(z) = e[N_D^+(z) - n(z) - N_A^-(z) + p(z)] \quad (2.25)$$

onde  $n(z)$ ,  $p(z)$ ,  $N_D^+(z)$ , e  $N_A^-(z)$  são, respectivamente, as concentrações de elétrons, de buracos, de doadores ionizados, e de aceitadores ionizados. Expressando as quantidades  $n(z)$ ,  $p(z)$ ,  $N_D^+(z)$ , e  $N_A^-(z)$  em termos do potencial eletrostático  $\varphi(z)$  seguindo a metodologia das seções 2.2.1 e 2.2.2 chegamos à equação integral (2.13). Devido ao fato que o potencial  $\varphi(z)$  novamente aparece no lado direito da equação (2.13), devemos resolver o problema de maneira autoconsistente.

Para dar um exemplo, vamos considerar uma camada de material dopada com aceitadores, crescida sobre um substrato de semiconductor tipo *n*. Vamos designar a posição da interface por  $z^{if}$ . Por simplicidade, podemos assumir a dopagem homogênea dentro de cada material e desprezar os efeitos devidos aos portadores de carga minoritários. Usando as expressões da referência [109], que descrevem a densidade efetiva de estados de buraco, obtemos a seguinte equação para a densidade total de carga:

$$\rho(z) = e \begin{cases} -N_A \left[ \frac{p_1}{p_1 + N_V \exp\left(-\frac{E_F + e\phi(z)}{kT}\right)} \right] + N_V \exp\left(-\frac{E_F + e\phi(z)}{kT}\right) & z^{if} < z < 0 \\ n_\infty \left[ \frac{n_1 + n_\infty}{n_1 + n_\infty \exp\left(\frac{e\phi(z)}{kT}\right)} - \exp\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right) F_{V/2}\left(\frac{E_F + e\phi(z) - E_c}{kT}\right) \right] & z < z^{if} \end{cases} \quad (2.26)$$

Aqui  $N_A$  é a concentrações de aceitadores na camada tipo **p**,  $N_V$  designa a densidade efetiva de buracos na banda de valência,  $p_1$  é determinado pela energia de ligação do aceitador e tem o mesmo sentido que  $n_1$  (vide expressão (2.7)), e  $\phi(z)$  é expresso por:

$$\phi(z) = \varphi(z) + \begin{cases} (E_{Fp} - E_{Fn})/e & z^{if} < z < 0 \\ 0 & z < z^{if} \end{cases} \quad (2.27)$$

onde  $E_{Fp}$  e  $E_{Fn}$  são as posições do nível de Fermi em relação ao fundo da banda de condução nas camadas com dopagem tipo **p** e tipo **n**, respectivamente. Neste caso, é assumida a não-degenerescência da camada dopada com aceitadores. Esta suposição é razoável visto que a densidade efetiva dos estados na banda de valência é muito maior do que aquela na banda de condução, devido ao fato da massa efetiva do buraco ser maior do que a do elétron. Estimativa de  $N_C$ , usando a expressão (2.16) fornece o valor  $N_C \sim 4,2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Expressão equivalente é válida para os buracos [109], só

que com a massa efetiva correspondente, fornecendo o valor  $N_V \sim 1,9 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ . Portanto, podemos usar a aproximação de Boltzmann na análise da densidade de buracos, ao invés de aplicar o formalismo da integral de Fermi usado para os elétrons, facilitando os cálculos.

Conhecendo a densidade total de carga  $\rho(z)$  da equação (2.26) e resolvendo a equação integral (2.13) autoconsistentemente com esta densidade, podemos obter o potencial eletrostático  $\varphi(z)$  relevante ao problema. A primeira derivada da função  $\varphi(z)$  fornecerá a distribuição do campo elétrico interno.

Antes de discutir os resultados dos cálculos numéricos, cabe fazer aqui algumas observações sobre o uso de toda a abordagem apresentada neste capítulo nos casos em que as heteroestruturas estão sujeitas à modulação por feixe de laser.

#### **2.2.4 Tratamento de heteroestruturas sob modulação óptica**

A investigação de heteroestruturas por meio de técnicas de modulação óptica exige a elaboração dos métodos de cálculo dos campos elétricos no interior das amostras expostas à luz do laser. Este assunto é bastante complicado porque envolve toda a teoria de interação da luz com a matéria. Neste momento vamos fazer apenas alguns comentários relevantes à aplicação de nossa abordagem, levando em conta o efeito fotoelétrico.

A iluminação da amostra por um feixe de luz com energia dos fótons maior do que a energia da faixa proibida do semiconductor resultará na criação de pares elétron-buraco, uma vez que os elétrons da banda de valência são excitados para a banda de condução. Na presença do campo elétrico interno,

estes pares se separam. Os portadores fotogerados se moverão para as regiões espaciais de carga, recombinando-se com as cargas de superfície ou interfaciais, e atenuando os campos elétricos provenientes destas regiões. O efeito deste fenômeno é que as bandas de energia do semiconductor tendem à condição de bandas planas. O aplainamento das bandas depende da intensidade do feixe do laser. A fotorefletância baseia-se neste mecanismo de modificação (modulação) do campo elétrico pelos portadores fotogerados [111].

Dentro do formalismo da nossa abordagem, tal aplainamento das bandas de energia do semiconductor significa a redução do potencial superficial  $V_s$ . Se a condição de bandas planas é atingida, o potencial de superfície sujeito à modulação  $V_{sM}$  é igual à zero. Se a potência do laser não é suficiente para atingir esta condição, o potencial da superfície fica dentro dos limites  $0 < V_{sM} < V_s$ . Deste modo, a descrição correta do sistema depende da escolha certa do parâmetro  $V_{sM}$ . Ele poder ser calculado teoricamente, bem como pode ser extraído dos espectros da fotorefletância.

A teoria do efeito fotoelétrico sob condições típicas de medidas de fotorefletância é desenvolvida na referência [112]. Esta teoria leva em consideração efeitos tais como, fotogeração dos portadores de carga, separação espacial destes portadores (devida à existência do campo elétrico), difusão térmica dos portadores, e a sua recombinação. Na referência [112] é demonstrado que o valor do potencial eletrostático na superfície pode ser deduzido através de medidas da dispersão em frequência dos sinais de fotorefletância.

Sob ação da luz, a concentração de portadores de carga dentro da estrutura não é mais determinada somente pela concentração de dopantes. Cabe notar que a intensidade do feixe de laser muda com a profundidade

dentro do sistema devido à absorção óptica. Portanto, a concentração de portadores fotogerados é uma função de  $z$ . Sob algumas condições, este efeito pode ser incluído no nosso formalismo pela substituição das concentrações  $N_{Dn}$ ,  $N_{An}$ , e  $N_{Dsub}$  por funções  $N_{Dn}(z)$ ,  $N_{An}(z)$ , e  $N_{Dsub}(z)$  que representariam a distribuição de carga correspondente ao equilíbrio dinâmico que é atingido pelo sistema quando exposto à iluminação. A escolha destas funções é um problema físico em si, mas deve ser satisfeita a condição  $N_{Dsub}(z) \rightarrow N_{Dsub}$  quando  $z \rightarrow -\infty$ .

## 2.3. POTENCIAL E CAMPO ELÉTRICO CALCULADOS NUMÉRICAMENTE

### 2.3.1. Perfis do potencial e do campo elétrico para homoestruturas

O método descrito na seção 2.2 pode, em princípio, ser aplicado para o cálculo de potenciais e campos elétricos oriundos da superfície ou interface em qualquer tipo de semicondutor intrínseco ou dopado. Mas os exemplos numéricos apresentados aqui abrangem somente as ligas tipo (GaAl)As visando o uso dos resultados destes cálculos na interpretação de dados experimentais obtidos em nosso laboratório.

Para compreender melhor no caso mais simples o comportamento do potencial e do campo elétrico em sistemas semicondutores, foi primeiramente realizado o estudo da distribuição espacial do campo elétrico numa camada homogênea de GaAs. Os cálculos numéricos executados neste caso representaram um teste para o formalismo desenvolvido. Os resultados apresentados e discutidos abaixo tinham por objetivo a melhor familiarização com os métodos da solução autoconsistente da equação integral (2.13) proveniente da equação de Poisson.

Para os parâmetros deste cálculo foram escolhidos os valores típicos relevantes às camadas de GaAs, crescidas por MBE. Nós assumimos que a concentração eletrônica  $n_{\infty}$  nas regiões distantes da superfície ( $z = -\infty$ ) é igual a  $6,7 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ , e que a energia de ligação do doador tem o valor  $E_B = 5,84 \text{meV}$  (como no caso de Si em GaAs). A temperatura do sistema é considerada como ambiental ( $T = 300\text{K}$ ). Para o potencial na superfície foi

assumido o valor  $-0,7\text{eV}$  em relação ao fundo da banda de condução onde foi colocado o zero para a energia. Este valor está de acordo com dados experimentais os quais apontam para a existência, na superfície do GaAs, de estados profundos próximos ao meio da faixa proibida [106].

A Figura 2.1 mostra os perfis calculados do potencial  $\varphi(z)$ , do campo elétrico  $F(z)$ , e da densidade de carga total  $\rho(z)$ . Podemos ver que a condição (2.2) é obtida automaticamente de acordo com a discussão feita na seção 2.2. Cabe notar que estes resultados demonstram um simples fato matemático que diz que a primeira derivada de uma função parabólica é uma linha reta. Dessa forma, numericamente chegamos à comprovação da aproximação de bandas parabólicas que se usa na abordagem de Schottky [109]. É interessante ressaltar aqui que a espessura da região de depleção obtida através dessa aproximação é igual a  $1203\text{\AA}$ . A linha pontilhada na parte (b) da Figura 2.1 representa o perfil do campo elétrico obtido na aproximação de Schottky. Na Figura 2.1(c), a linha pontilhada refere-se à densidade total de carga correspondente à condição de bandas parabólicas (aproximação de Schottky).

Tendo verificado a validade da nossa abordagem no caso de homoestrutura procedemos para discussão dos resultados de cálculos efetuados para os sistemas mais complexos.

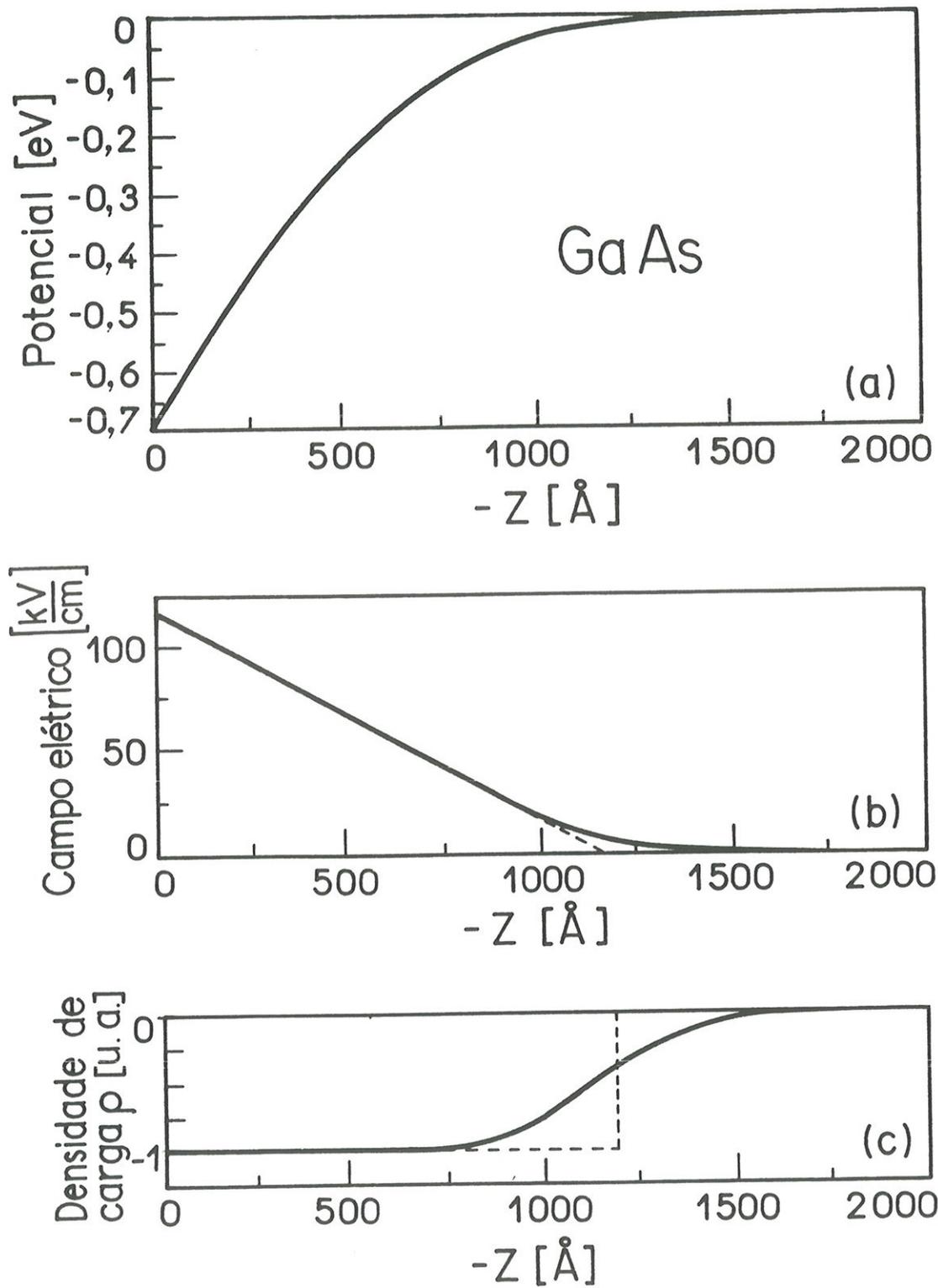


Figura 2.1. Perfis do potencial (a), do campo elétrico (b), e da densidade de carga (c) no interior da homoeestrutura tipo GaAs "bulk" (concentração eletrônica  $n_{\infty} = 6,7 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ ) em comparação com resultados obtidos na aproximação de Schottky (linhas pontilhadas nas partes (b) e (c)).

### 2.3.2. Perfis do potencial e do campo elétrico para heteroestruturas

Visto que o maior objetivo deste trabalho é a elaboração do método de cálculo do potencial e do campo elétrico, é importante demonstrar como é que este método se aplica no caso de heteroestruturas. O caso típico de heteroestrutura simples é a liga de (GaAl)As sobre um substrato de GaAs. Porém, este sistema pode apresentar uma ampla variedade de características no seu comportamento eletrônico, visto que podem mudar as concentrações de dopantes dentro de cada material e a espessura da camada de (GaAl)As. Como será visto em seguida, estes parâmetros podem alterar completamente os perfis do potencial e do campo elétrico no interior da amostra.

#### *a) Estudo da forma do potencial e do perfil do campo em função da espessura da camada epitaxial*

Antes de apresentar e discutir os resultados, vamos comentar a escolha dos parâmetros nas simulações. Para fazer a região de depleção comparável às espessuras típicas de camadas epitaxiais, as menores concentrações elétricas são desejáveis. Deste modo, assumimos a concentração eletrônica no interior do substrato  $n_{\infty} = 4,5 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  e a dopagem da camada epitaxial  $N_{\text{D(GaAl)As}} = 100N_{\text{Dsub}}$  ( $E_{\text{B}} = 5,84 \text{meV}$ ). Isto porque para as maiores concentrações de dopagem, como será visto em seguida, a região de depleção fica menor do que  $1000 \text{\AA}$ . A composição da liga foi escolhida de 30% de Al e 70% de Ga. Deste modo, usando a regra 60% - 40% para as descontinuidades nas bandas de condução e de valência [24], a descontinuidade da banda de

condução fica dada por  $\Delta E_c = 0,25\text{eV}$ . Tendo feito estes comentários, podemos iniciar a análise dos resultados dos cálculos.

Nas Figuras 2.2(a), 2.3(a), e 2.4(a) são apresentados os perfis do potencial calculados para espessuras 1500Å, 2000Å, e 3000Å, respectivamente, da camada de liga. As Figuras 2.2(b), 2.3(b), e 2.4(b) contêm os perfis correspondentes do campo elétrico. O valor do potencial na superfície foi escolhido  $V_s = - 0,7\text{eV}$  em relação ao fundo da banda de condução do substrato. Podemos observar que a espessura da região de depleção em todos estes casos é maior do que a espessura da camada. Isto faz com que o campo elétrico de superfície cresça conforme aumenta a espessura da camada. Como pode ser concluído da Figura 2.1(b), o aumento da espessura não causará este efeito se as bandas de energia já atingiram a condição de bandas planas dentro da camada.

Dentro da camada de  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  o potencial cresce atingindo valores positivos. Isto é decorrente justamente da descontinuidade da banda de condução  $\Delta E_c = 0,25\text{eV}$ . A curvatura do perfil do potencial é determinada pelo campo elétrico. Como é esperado, para maiores valores do campo elétrico na superfície, o máximo do potencial se desloca para valores mais altos. Na interface, a segunda derivada do perfil do potencial muda de sinal. O mesmo faz a primeira derivada do perfil do campo elétrico. É importante ressaltar que este tipo de comportamento é obtido mesmo sem levar em conta a presença dos estados interfaciais. O campo elétrico oriundo da interface sofre depleção até se anular no interior do substrato.

Aumentando as concentrações de dopantes, a condição de bandas planas dentro da camada de liga pode ser atingida devido à diminuição da região de depleção. Para demonstrar este efeito, a espessura da camada de  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  foi mantida igual a 3000Å. Mas, neste caso, a concentração

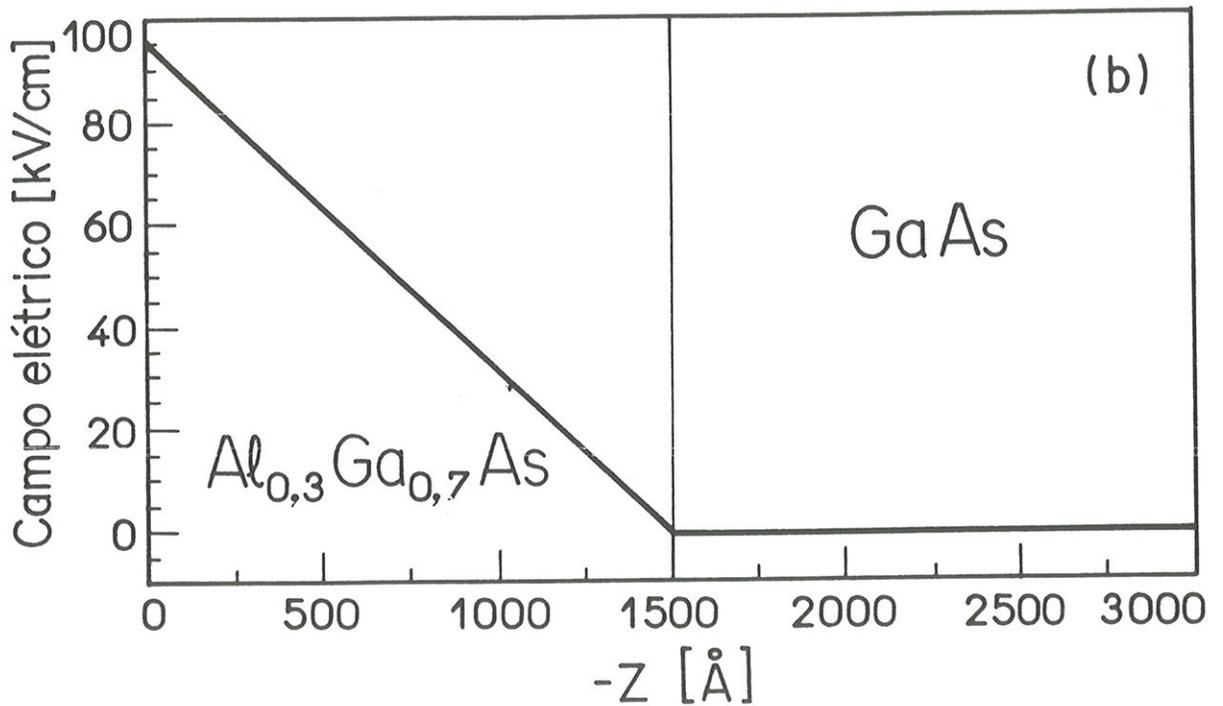
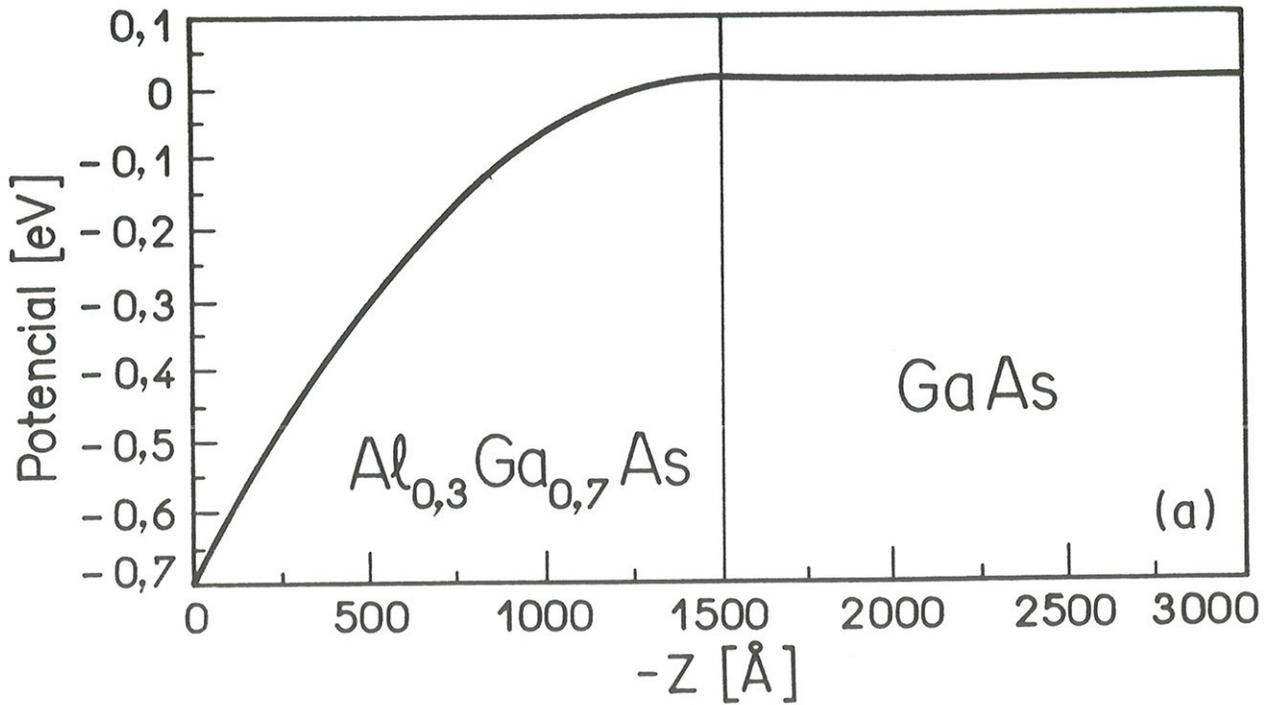


Figura 2.2. Perfis do potencial (a) e do campo elétrico (b) no interior da heteroestrutura Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As(1500Å)/GaAs(substrato), para  $n_{\infty} = 4,5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  e  $N_D(\text{AlGa})_{\text{As}} = 100N_{D \text{ sub}}$ .

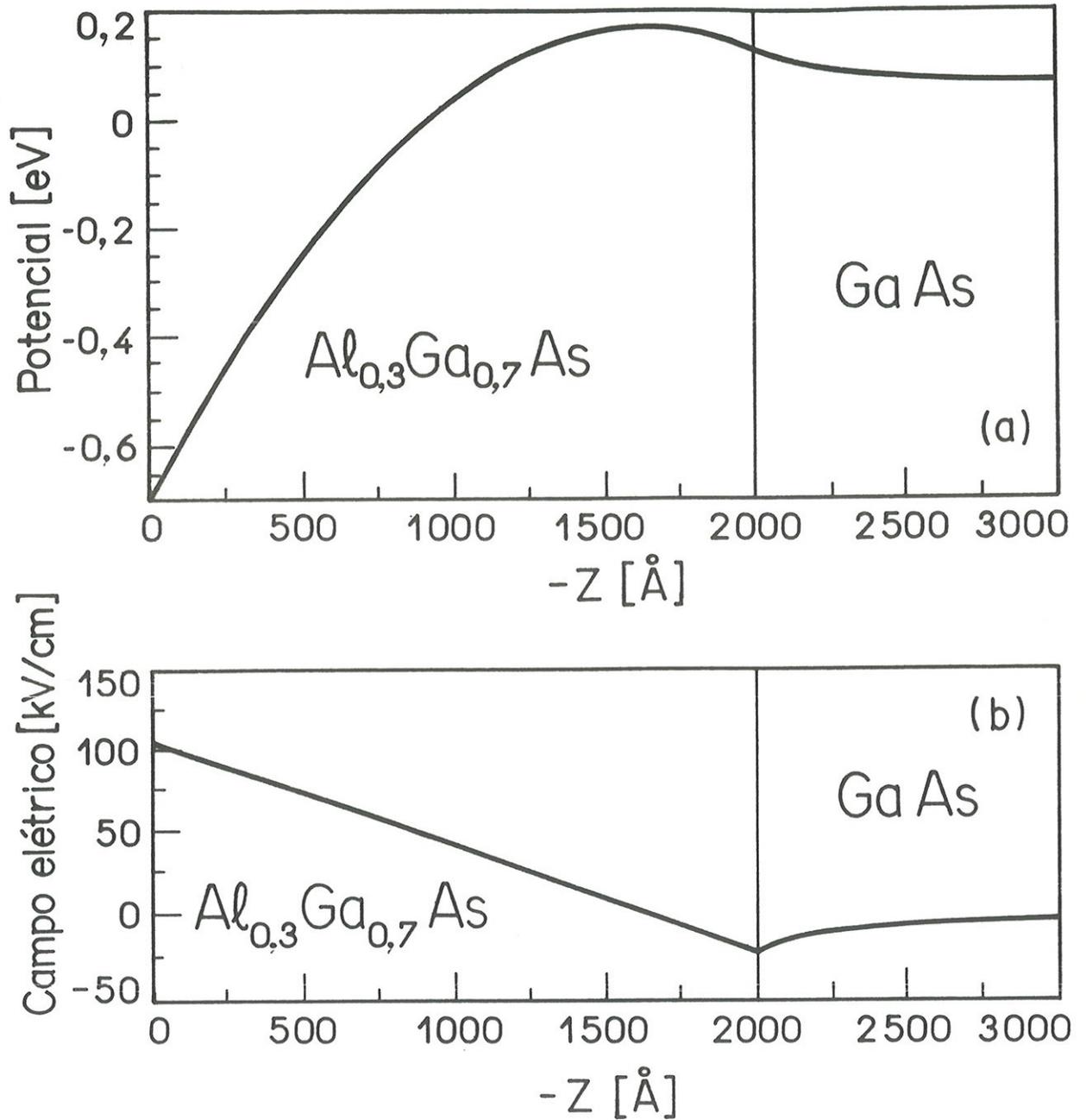


Figura 2.3. Perfis do potencial (a) e do campo elétrico (b) no interior da heteroestrutura  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}(2000\text{Å})/\text{GaAs}(\text{substrato})$ , para  $n_{\infty} = 4,5 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  e  $N_{\text{D}(\text{AlGa})\text{As}} = 100N_{\text{D sub}}$ .

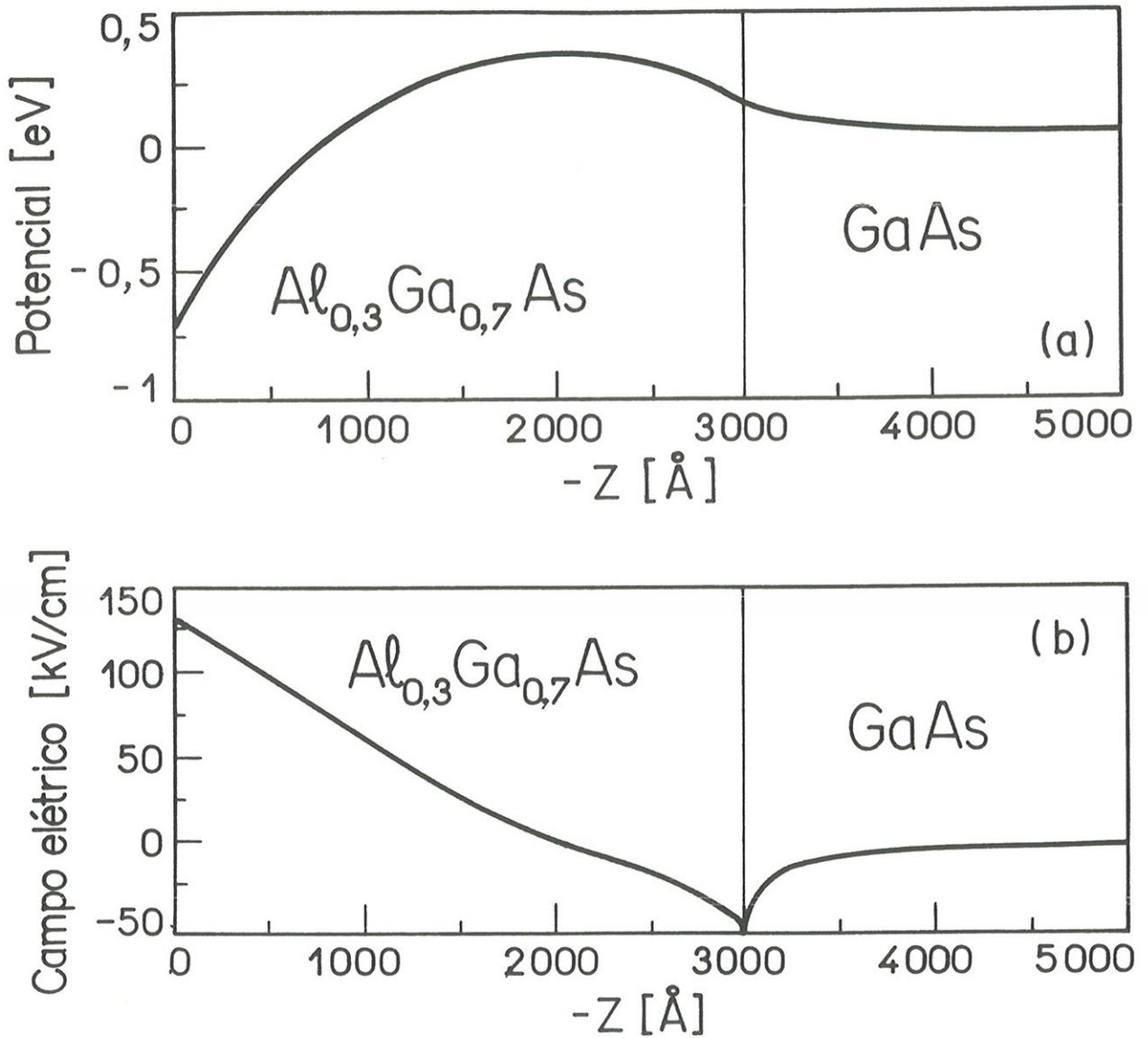


Figura 2.4. Perfis do potencial (a) e do campo el\u00e9trico (b) no interior da heteroestrutura  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}(3000\text{\AA})/\text{GaAs}(\text{substrato})$ , para  $n_{\infty} = 4,5 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  e  $N_{\text{D}(\text{AlGa})\text{As}} = 100N_{\text{D sub}}$ .

eletrônica no substrato foi tomada igual a  $n_{\infty} = 3,3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  ( $N_{\text{D}(\text{GaAl})\text{As}} = 1000N_{\text{Dsub}}$ ,  $E_{\text{B}} = 5,84 \text{meV}$ ) e o valor do potencial na superfície  $V_s = - 0,6 \text{eV}$  em relação ao fundo da banda de condução do substrato. As Figuras 2.5(a) e 2.5(b) ilustram esta situação apresentando os perfis calculados do potencial e do campo elétrico, respectivamente. O fato de que a curva do potencial dentro da camada epitaxial atinge valores maiores do que  $\Delta E_c = 0,25 \text{eV}$  está de acordo com a nossa previsão. Tal comportamento deve-se ao fato de que o aumento da dopagem na liga faz com que o nível de Fermi na mesma fique mais próximo ao fundo da banda de condução, em comparação com a posição do nível de Fermi em relação ao fundo da banda de condução do substrato, tomado como o zero para a energia.

A condição de bandas planas, ainda dentro da camada epitaxial, pode ser atingida também com o aumento da espessura dessa camada para concentrações eletrônicas bem menores. Para ressaltar este efeito, as concentrações de dopagem foram diminuídas:  $n_{\infty} = 1,4 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  ( $N_{\text{D}(\text{GaAl})\text{As}} = 100N_{\text{Dsub}}$ ,  $E_{\text{B}} = 5,84 \text{meV}$ ). O valor do potencial na superfície foi tomado ainda maior:  $V_s = - 0,9 \text{eV}$  (em relação ao fundo da banda de condução do substrato). As Figuras 2.6(a) e 2.6(b) apresentam os perfis calculados do potencial e do campo elétrico, respectivamente, para a espessura da camada epitaxial de  $10000 \text{Å}$ . Observando-se as escalas diferentes do eixo  $z$  (na Figura 2.5 e na Figura 2.6) nota-se, porém, que a forma dos perfis do potencial e do campo qualitativamente é a mesma em relação à forma daqueles da Figura 2.5.

Os exemplos numéricos apresentados acima demonstram o poderil desta abordagem a qual, a partir dos parâmetros da amostra nos dá a possibilidade de calcular a distribuição do campo elétrico interno para

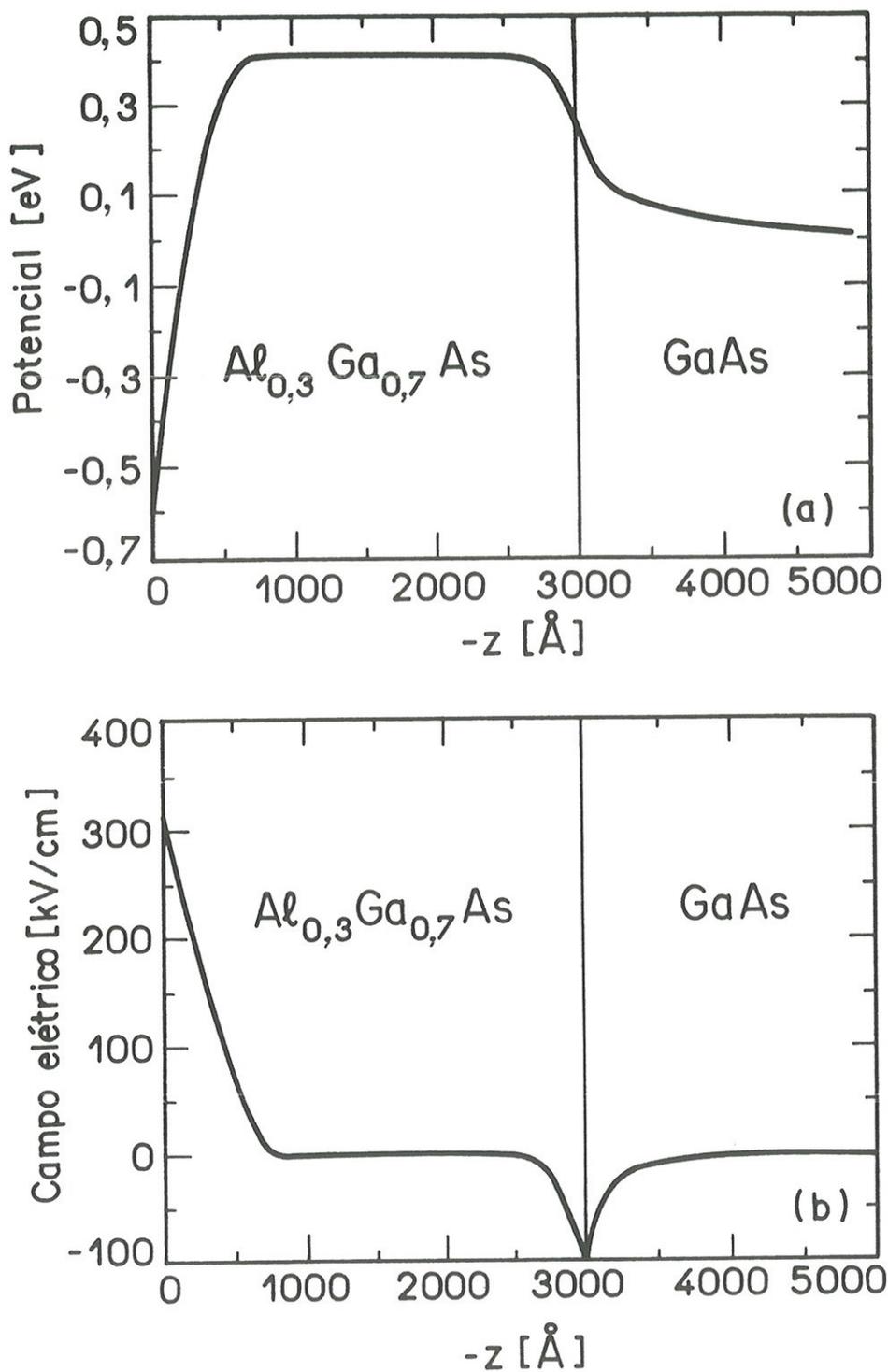


Figura 2.5. Perfis do potencial (a) e do campo elétrico (b) no interior da heteroestrutura  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}(3000\text{Å})/\text{GaAs}(\text{substrato})$ , para  $n_{\infty} = 3,3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  e  $N_{\text{D}(\text{AlGa})\text{As}} = 1000N_{\text{D sub}}$ .

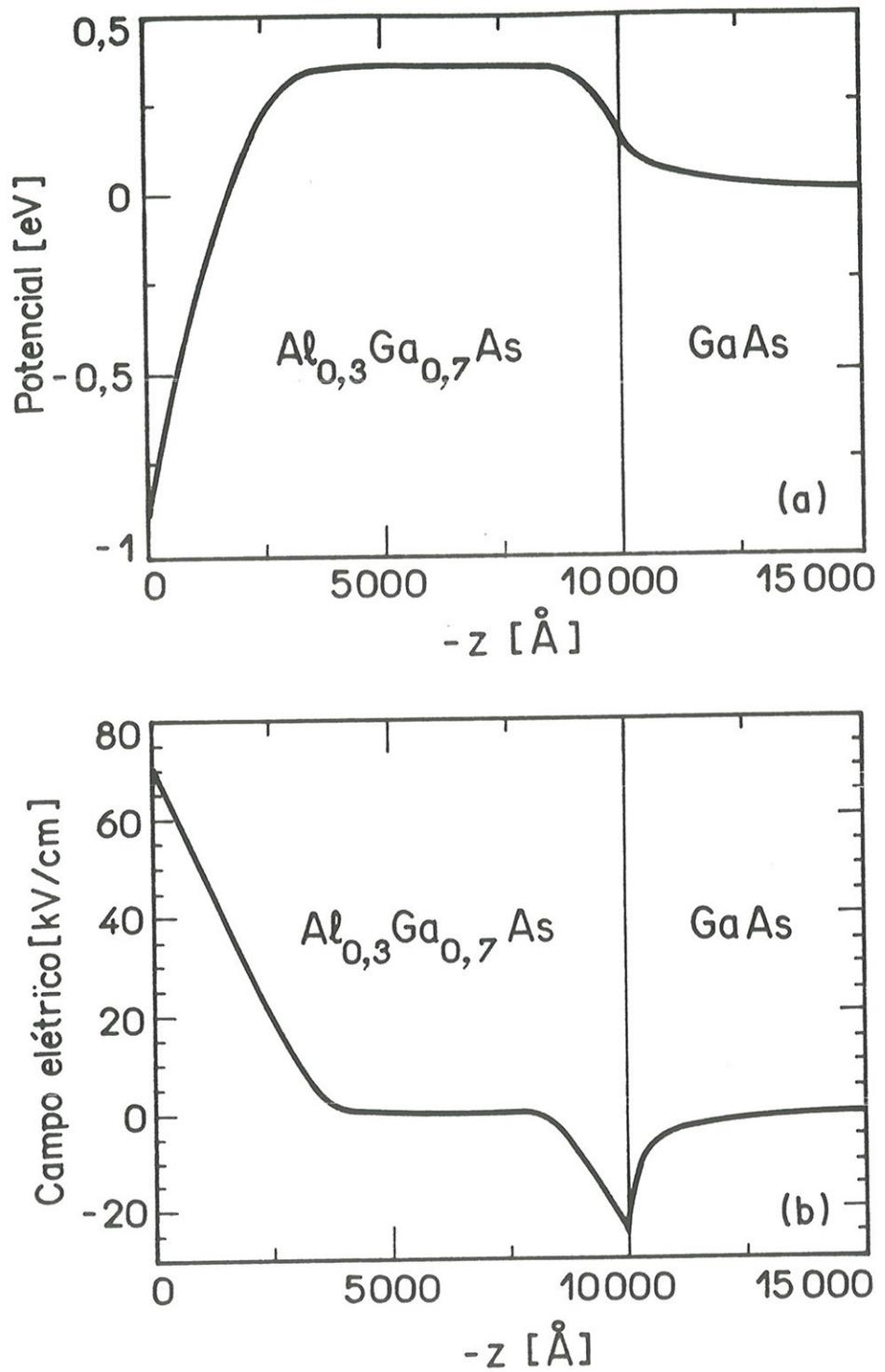


Figura 2.6. Perfis do potencial (a) e do campo elétrico (b) no interior da heteroestrutura  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}(10000\text{Å})/\text{GaAs}(\text{substrato})$ , para  $n_{\infty} = 1,4 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  e  $N_{D(\text{AlGaAs})} = 100N_{D \text{ sub}}$ .



qualquer tipo de heteroestrutura. A única limitação é o tempo de computação que cresce conforme aumenta a espessura da heteroestrutura em questão.

### *b) Modulação óptica do perfil do campo elétrico interno*

O conhecimento da distribuição espacial do campo elétrico no interior da amostra, sujeita à iluminação por um feixe de laser, é indispensável no cálculo dos espectros de fotorefletância. Um exemplo numérico demonstrando a modulação do potencial eletrostático e do campo elétrico será apresentado em seguida.

A heteroestrutura investigada é composta por uma camada de  $\text{Ga}_{0,73}\text{Al}_{0,27}\text{As}$  com espessura de  $35000\text{\AA}$  sobre substrato de GaAs. A concentração eletrônica no substrato foi tomada igual a  $n_{\infty} = 3,3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$ . A concentração de dopantes na liga  $N_{\text{D}(\text{GaAl})\text{As}} = 1100N_{\text{Dsub}}$  foi escolhida de acordo com a dopagem intencional desta amostra crescida no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores ( $E_{\text{B}} = 5,84 \text{meV}$ ). O valor da barreira da superfície foi assumido igual a  $V_{\text{s}} = -0,6 \text{eV}$ , em relação ao fundo da banda de condução do substrato. Tal escolha permitiu reproduzir o espectro de fotorefletância na região próxima à faixa proibida da liga, usando-se o perfil do campo elétrico obtido através da solução numérica da equação (2.13) com estes parâmetros.

Efetuada o cálculo do potencial eletrostático, assumimos que a modificação da barreira de potencial na superfície é o efeito principal da luz do laser sobre a amostra [112]. Na Figura 2.7, são apresentados os perfis calculados do campo elétrico e do potencial na ausência e na presença da modulação do laser. Como pode ser notado, o cálculo apresenta a condição

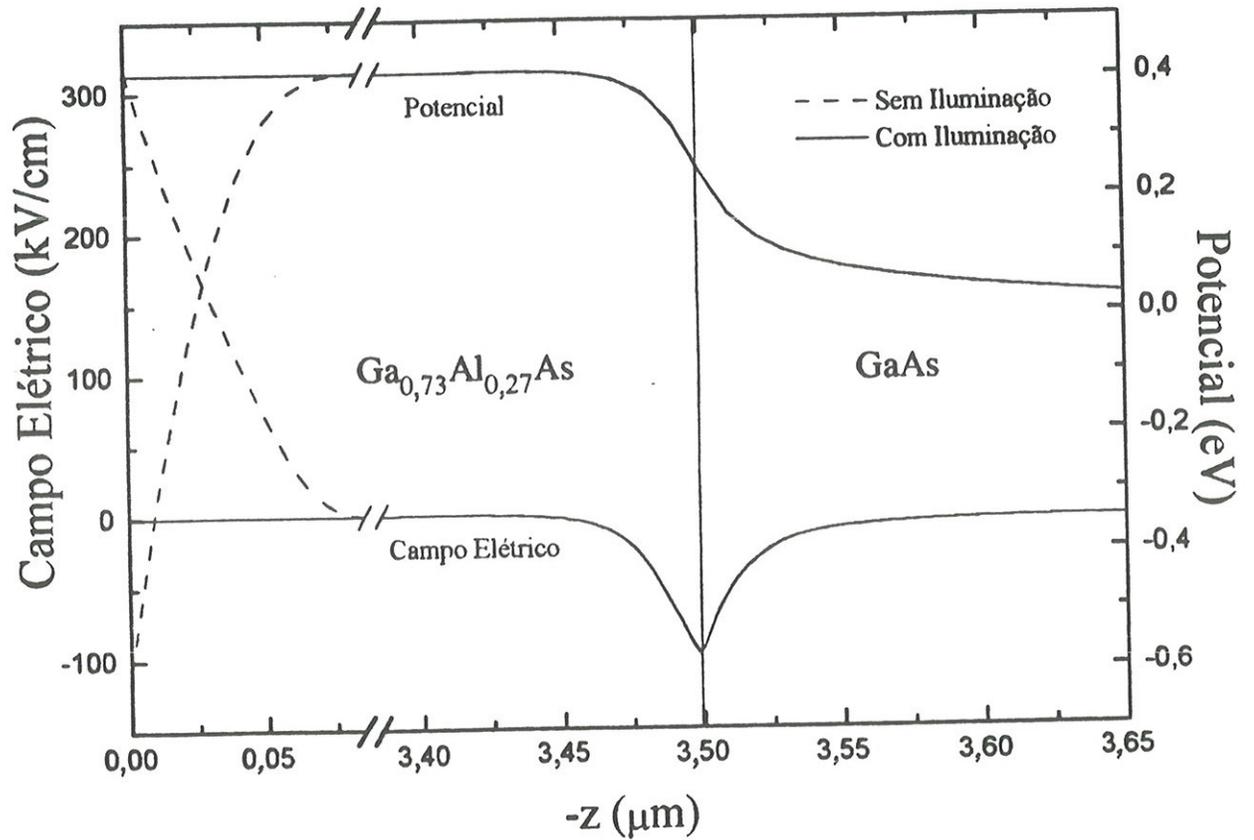


Figura 2.7. Perfis modulados e não modulados do potencial e do campo elétrico no interior da heteroestrutura  $\text{Al}_{0.27}\text{Ga}_{0.73}\text{As}(3,5\mu\text{m})/\text{GaAs}(\text{substrato})$ , para  $n_{\infty} = 3,3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  e  $N_{\text{D}}(\text{AlGa})_{\text{As}} = 1100N_{\text{D sub}}$ .

de bandas planas na superfície, ou seja, o valor da barreira de potencial, na amostra exposta à luz, é zero em relação ao fundo da banda de condução da liga. A justificativa de tal escolha também foi comprovada quando da comparação de espectros de fotorefletância simulados teoricamente com os experimentais obtidos no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores.

A Figura 2.7 indica que a modulação do potencial na superfície não modifica o perfil do campo elétrico na região interfacial. Esta conclusão é importante pois, a intensidade da luz que penetra até a interface é da ordem de  $10^{-5}$  em relação à intensidade da luz na superfície e, portanto, a modulação da interface devido a ela pode ser negligenciada [110]. Devemos ressaltar que não levamos em conta os efeitos ligados à difusão de portadores de carga. Entretanto, não espera-se uma forte contribuição destes efeitos à distâncias da ordem de  $30000\text{Å}$  [112].

Este exemplo numérico demonstra como pode ser investigado o efeito da modulação óptica em heteroestruturas usando nossa abordagem. A conclusão de que não existe a modulação interfacial neste caso, entretanto, não é uma conclusão geral. Por exemplo, nos casos de espessuras pequenas das camadas epitaxiais e/ou nos casos de grandes espessuras das regiões de depleção, a presença de tal modulação é esperada. Nestes casos, irá se tornar importante a dependência da concentração de portadores fotogerados com a distância da superfície, e portanto, estes efeitos devem ser levados em conta.

## 2.4. COMENTÁRIOS FINAIS

Para finalizar este capítulo, ressaltamos que os espectros das técnicas de modulação óptica provenientes de heteroestruturas semicondutoras são essencialmente determinados pelos perfis, modulados e não modulados, do potencial e do campo elétrico. Portanto, os métodos de cálculo de tais perfis são altamente desejáveis. O Capítulo 2 fornece tais métodos e dá exemplos de sua aplicação para a análise de amostras homogêneas e compostas por materiais diferentes na ausência e na presença da iluminação.

Cabe notar que, ao iniciarmos o estudo dos espectros de fotorefletância no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores, não achamos a sua solução de imediato. Deste modo, abordagens fenomenológicas foram também utilizadas na interpretação de dados de fotorefletância [54] (vide Apêndice A). Com a abordagem desenvolvida e apresentada neste capítulo, a extração de parâmetros das amostras, no caso de técnicas de modulação óptica, ganha mais confiança e precisão. Assim, podemos dizer que o nosso método leva a análise da fotorefletância de dispositivos semicondutores a um novo patamar, permitindo calcular a partir dos primeiros princípios os perfis do potencial eletrostático e do campo elétrico interno.

O método que permite simular os espectros de fotorefletância, sendo conhecida a distribuição de campos elétricos internos, é apresentado no Capítulo 3.

## CAPÍTULO 3

# TEORIA DA FOTOREFLETÂNCIA EM HETEROESTRUTURAS COMPOSTAS POR CAMADAS INOMOGÊNEAS

### 3.1. INTRODUÇÃO

#### 3.1.1. Fotorefletância como espectroscopia de modulação

O uso das técnicas de espectroscopia de modulação na caracterização de materiais semicondutores começou a partir da proposição da técnica de eletrorefletância em 1964 [113]. No final dos anos sessenta e início dos setenta surgiram várias outras técnicas de modulação [42], tais como refletância diferencial [114-116], termorefletância [117], magnetorefletância [118,119] e fotorefletância [110,120], entre outras. Estas técnicas de espectroscopia de modulação eram e continuam ser bastante empregadas na caracterização de materiais tipo "bulk" [121].

Com o avanço das técnicas de crescimento epitaxial, especialmente a de Epitaxia por Feixe Molecular (MBE), tornou-se possível obter novas estruturas semicondutoras de alta qualidade, tais como poços quânticos, planos de dopagem delta, super-redes, etc. Com o surgimento dessas novas estruturas, novos fenômenos físicos interessantes, tais como confinamento bidimensional, acoplamento entre os poços quânticos etc., começaram a ser

investigados. Isto deu um novo impulso à utilização das técnicas de modulação para a caracterização destas estruturas [122-124].

Entre as técnicas de modulação, a fotorefletância destaca-se devido à utilização de feixes de luz para a modulação do campo elétrico interno. Isto torna a fotorefletância uma técnica não destrutiva, contrariamente, por exemplo, ao que ocorre com a eletrorefletância. A ausência de contatos elétricos na amostra é uma grande vantagem da fotorefletância. Além disso, esta técnica não requer nenhuma preparação especial da amostra e pode ser realizada facilmente sob várias condições (temperatura, pressão, etc.) e nos vários meios (gases, líquidos), desde que sejam transparentes à luz utilizada.

Nas técnicas de espectroscopia óptica de modulação, as variações relativas da refletividade  $\Delta R/R$  são geralmente obtidas em função da energia do fóton. Os espectros observados mostram normalmente linhas bem resolvidas com larguras espectrais bem menores que outros métodos convencionais. Isto porque em lugar de medidas diretas do espectro óptico são feitas as medidas de carácter derivativo com relação a algum parâmetro.

A natureza derivativa dos espectros de modulação permite eliminar efeitos não interessantes ligados à características do equipamento (dispersão em sensibilidade, ruído, etc.) e enfatizar o estudo de estruturas localizadas na região de energia correspondente à transições entre bandas e entre sub-bandas eletrônicas. Por causa dessa natureza derivativa, a sensibilidade espectral da fotorefletância é elevada permitindo observar um grande número de detalhes espectrais finos mesmo à temperatura ambiente.

No entanto, as técnicas de espectroscopia de modulação fornecem espectros bastante complexos, com muitas informações sobrepostas em um único espectro. Por exemplo, para as amostras tipo "bulk", as informações que se obtêm com a fotorefletância são: o campo elétrico máximo interno à

amostra, a energia da faixa proibida do material, e o parâmetro de alargamento. Quando se estuda microestruturas complexas, diversos fenômenos físicos contribuem ao espectro de fotorefletância, tornando sua interpretação uma tarefa trabalhosa.

### 3.1.2. Fotorefletância aplicada à heteroestruturas

A primeira comunicação sobre a aplicação da fotorefletância para o estudo de heteroestruturas surgiu em 1985 [125]. A partir daí um grande número de trabalhos foram publicados sobre esse assunto. O aumento do interesse prático e teórico em fotorefletância, assim como em espectroscopia de modulação em geral, foi causado por um grande progresso recente na fabricação de novos materiais semicondutores. Assim, hoje a técnica da fotorefletância vem sendo amplamente utilizada na investigação de várias microestruturas: super-redes, filmes finos, heteroestruturas, materiais contendo dopagem planar, etc.. [10,11,41,126-129].

A análise dos espectros de espectroscopia de modulação com portadores de carga não confinados é baseada normalmente na teoria de oscilações Franz-Keldysh [42]. A primeira tentativa de levar em consideração a influência da não homogeneidade espacial do campo elétrico interno na forma dos espectros de refletância de modulação foi feita em 1969 [130]. Este método integral desenvolvido por Aspnes e Frova foi aplicado na época à análise do comportamento de espectros de modulação para materiais tipo "bulk" [130,131]. Recentemente, este método foi utilizado na investigação de espectros, provenientes de amostras contendo camada epitaxial e substrato do mesmo tipo de material [132], demonstrando boa concordância com os

medidas experimentais [133]. Em seguida ele foi readaptado para estruturas com dopagem planar [54,134] e para regiões fortemente dopadas degeneradas no interior da amostra [134].

Porém, não existia nenhuma tentativa de generalizar este método simples e eficaz para o caso de heteroestruturas. Recentemente, esta lacuna também foi preenchida utilizando-se um Método de Derivadas Parciais no Cálculo da Refletividade Relativa, proposto em [135]. Entretanto, a sua realização computacional não foi empreendida devido à criação do método mais preciso e rigoroso que será apresentado abaixo.

Devido à ausência de um método completo de cálculo do espectro, a aplicação da fotorefletância para o estudo de heteroestruturas vinha gerando diversas discussões e controvérsias entre diversos grupos de pesquisa atuando nessa área. Recentemente, apareceram algumas abordagens as quais levam em consideração os efeitos interferenciais da luz refletida por camadas semicondutoras diferentes [46,136,137]. O desenvolvimento desses métodos foi incentivado pela existência de várias dificuldades na interpretação da forma de espectros de modulação. Mas até o momento, a explicação de diversos detalhes espectrais continua não esclarecida [127,137-140].

Algumas estruturas observadas nos espectros de fotorefletância, a partir dos modelos mencionados acima, não possuíram explicação adequada quanto à sua origem. Esta situação é devida ao fato de que a importância de efeitos interferenciais, causados pelas perturbações espaciais da função dielétrica, não foi levada em consideração [141,142], embora os mecanismos físicos da absorção da luz por tais estruturas encontravam-se bem compreendidos [143]. A primeira discussão sobre os efeitos interferenciais apareceu quatro anos depois da primeira aplicação prática da técnica da fotorefletância em heteroestruturas [136]. Ao mesmo tempo, outros efeitos

causados por essas perturbações não uniformes da função dielétrica, tais como mistura das partes real e imaginária, separação de detalhes espectrais devidos à distribuição de campos elétricos fortes e fracos, etc., foram discutidos [46,144]. Portanto, para uma análise mais completa da forma de linha do espectro no caso de heteroestruturas existia a necessidade do desenvolvimento de um método que de uma maneira simples e concisa permitisse a consideração de todos os efeitos provenientes das perturbações não uniformes da função dielétrica.

Por exemplo, no caso de heteroestruturas podemos mencionar dois mecanismos diferentes, devidos a efeitos da óptica clássica, os quais causam as mudanças da forma de linha do espectro de fotorefletância. Primeiro: a diferença da fase óptica relacionada à distância entre superfície e uma outra camada dentro da amostra, a qual causa a "rotação" do espectro em torno do eixo das energias. Segundo: a interferência entre os feixes de luz, refletidos por interfaces diferentes (incluindo a interface semiconductor/meio ambiente). Isto resulta em distorções da forma de linha do espectro. O campo elétrico também contribui para as modificações na forma de linha do espectro através da sua inhomogeneidade espacial. Mesmo assim, vários autores procuravam interpretar a refletância de estruturas as quais contêm múltiplas camadas sem levar em conta os efeitos interferenciais e assumindo o campo elétrico como uniforme [141,142].

Os recentes modelos que levam em consideração os efeitos interferenciais e a inhomogeneidade do campo elétrico são usualmente baseados num método conhecido na óptica tradicional: o método da matriz de transferência, o qual permite calcular o coeficiente de reflexão de uma estrutura inhomogênea dividindo-a em múltiplas camadas cada uma das quais podendo ser considerada como homogênea [49]. O método integral

desenvolvido por Aspnes e Frova [130], é geralmente aplicado para materiais tipo "bulk", assumindo que os valores das perturbações são muito menores em comparação com o valor médio da função dielétrica. Isto não é válido para heteroestruturas semicondutoras, para as quais a constante dielétrica e o valor da faixa proibida do material podem mudar significativamente para as várias camadas dos materiais diferentes. Este é o motivo principal pelo qual vem sendo aplicado o método da matriz de transferência para as heteroestruturas.

Este método se mostra apropriado quando a dispersão em energia e a inomogeneidade espacial das constantes ópticas são fracas. Entretanto, vários problemas aparecem quando estas condições não são satisfeitas [46,47]. Além das dificuldades numéricas, esta abordagem tem suas imperfeições conceituais no sentido de que as inomogeneidades fortes entre as camadas diferentes, devidas às diferenças entre materiais, e as inomogeneidades fracas no interior de cada camada, provenientes da inomogeneidade espacial do campo elétrico, são tratadas de uma única maneira.

Analisando as vantagens e desvantagens do método da matriz de transferência [49] e do método integral [130] surgiu a idéia de compor um novo método, combinando facilidades de cada um destes.

### 3.1.3. Objetivos do trabalho

Neste capítulo, vamos resolver o problema de cálculo do espectro de foto- ou elétrorrefletância para heteroestruturas compostas por camadas contendo inomogeneidades na função dielétrica. O método apresentado abaixo representa uma combinação de duas abordagens anteriores: do método

da matriz de transferência [49] e do tratamento de inhomogeneidades fracas, interiores às camadas, em termos da teoria de perturbações. Nosso método será aplicado ao estudo de várias heteroestruturas compostas por ligas tipo (GaAl)As. Trata-se de camadas epitaxiais tipo "bulk", para as quais a resposta espectral é descrita em termos da teoria do efeito Franz-Keldysh, e de poços quânticos não dopados, cuja resposta espectral é determinada através do efeito Stark. Como será demonstrado, devido à sua precisão e eficiência, nosso método é capaz de ser usado para simulações de espectros de fotorefletância tipo "on-line".

Neste capítulo, vamos demonstrar que é possível tratar cada tipo de inhomogeneidade (uma, interna às camadas, e outra, devida à mudança do material nas interfaces) usando para cada tipo de inhomogeneidade sua abordagem apropriada. Será demonstrado que uma camada levemente inhomogênea pode ser caracterizada pela matriz de transferência que inclui a inhomogeneidade da camada segundo a metodologia do método integral. Cabe mencionar que, o método integral desenvolvido para semi-espço [130] foi generalizado para situações de espessura finita da camada semicondutora, de forma a ser empregado juntamente com o método da matriz de transferência. Descrevendo as inhomogeneidades de uma camada com uma só matriz, não há mais necessidade de dividir cada camada em múltiplos filmes finos que podem ser tratados como homogêneos. Isto faz com que o volume de cálculos numéricos seja reduzido drasticamente, em comparação com os cálculos efetuados nas referências [46-48], já que precisamos somente de uma única matriz por camada.

Podemos ressaltar que o método de cálculo do coeficiente de reflexão para uma camada inhomogênea, apresentado neste trabalho, não se restringe às técnicas de modulação óptica, mas representa um avanço conceitual na óptica

em geral, em comparação com os métodos semelhantes, apresentados nas referências [49,130,145].

Este capítulo chama-se "Teoria da Fotorefletância em Heteroestruturas Compostas por Camadas Inomogêneas". Qualquer tipo de heteroestrutura real é composta por camadas com inomogeneidades na função dielétrica. Tais inomogeneidades podem ser introduzidas propositadamente (dopagem modulada, dopagem tipo delta, etc.) ou existirem devido à existência de campos elétricos internos [42]. Portanto, cresce a importância da abordagem que será apresentada em seguida, já que esta é a primeira tentativa de se calcular os espectros da fotorefletância explicitamente a partir dos primeiros princípios, ao invés de procurar interpretar alguns detalhes espectrais. Esta tarefa exige o conhecimento preciso do perfil do campo elétrico através da heteroestrutura, o qual temos agora a possibilidade de calcular de acordo com o método apresentado no capítulo 2.

A demonstração analítica e os exemplos numéricos serão apresentados para demonstrar a equivalência de nosso método no caso de semi-espaço inomogêneo e do método integral de Aspnes e Frova [130]. Pela primeira vez, são feitas as simulações teóricas dos espectros de fotorefletância para as camadas epitaxiais tipo "bulk" de (GaAl)As sobre o substrato de GaAs. Os resultados dos cálculos demonstrarão a utilidade de nosso método no caso de poços quânticos, em geral. Uma boa concordância entre resultados teóricos e experimentais ilustra o poder e a precisão da abordagem desenvolvida.

## 3.2. NOVO MÉTODO DE CÁLCULO DO COEFICIENTE DE REFLEXÃO EM HETEROESTRUTURAS COMPOSTAS POR CAMADAS INOMOGÊNEAS

### 3.2.1. Formulação do problema

Do ponto de vista da propagação da luz, uma heteroestrutura semicondutora pode ser representada por um conjunto de camadas situadas entre dois semi-espacos infinitos. Um destes semi-espacos é preenchido com material do substrato, e outro com vácuo. Vamos escolher como eixo  $z$  de nosso sistema Cartesiano, um eixo que é normal às camadas e é direcionado para o lado do vácuo. Vamos numerar as camadas usando um índice inteiro  $n$ . Neste caso, a camada que está em contato com o vácuo receberá o número  $n=1$ , e a camada que está em contato com o substrato um número  $N \geq 1$ . Deste modo, a camada com número  $n$  é estendida entre  $z = z_{n-1}$  e  $z = z_n$ , e sua espessura  $d_n$  é igual a  $z_n - z_{n-1}$ . O zero do eixo  $z$  é escolhido na interface heteroestrutura/vácuo. Portanto,  $z_0 = 0$ . Cada camada da heteroestrutura é composta por um determinado material semicondutor, caracterizado pela sua função dielétrica. O símbolo  $\epsilon^n(\omega)$  será usado para designar a função dielétrica do material da  $n$ -ésima camada, na ausência de perturbação. O campo elétrico inhomogêneo vai modificar  $\epsilon^n(\omega)$  de uma pequena quantidade dependente de  $z$ , a qual será designada  $\Delta\epsilon^n(\omega, z)$ . Com isso, a função dielétrica total da  $n$ -ésima camada se tornará uma função que irá variar suavemente com  $z$ :

$$\varepsilon^n(\omega, z) = \varepsilon^n(\omega) + \Delta\varepsilon^n(\omega, z). \quad (3.1)$$

Desta maneira, a função dielétrica de toda a heteroestrutura é dada por:

$$\varepsilon(\omega, z) = \varepsilon^n(\omega, z) \quad \text{para } z_{n-1} > z > z_n. \quad (3.2)$$

Esta função exhibe mudanças abruptas quando  $z$  atravessa interfaces, e apresenta modificações suaves no interior de uma determinada camada. A função dielétrica do semi-espaço preenchido com vácuo é 1, e a função dielétrica do semi-espaço preenchido com material do substrato é  $\varepsilon^{\text{sub}}(\omega)$ .

A heteroestrutura é exposta à luz monocromática polarizada linearmente na direção  $x$ , a qual incide no lado do vácuo ao longo do eixo  $z$ . Neste caso, o campo elétrico no vácuo  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$  pode ser escrito como

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = (E(z), 0, 0)\exp(-i\omega t) \quad (3.3)$$

com

$$E(z) = E_0\exp(-ik_0z) + E_R\exp(ik_0z), \quad z > 0. \quad (3.4)$$

Aqui,  $k_0 = \omega/c$  designa o número de onda, e  $E_0$  e  $E_R$  representam as amplitudes do campo elétrico associadas às ondas incidente e refletida, respectivamente. No interior da heteroestrutura, a propagação da radiação eletromagnética é descrita pela seguinte equação:

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + \varepsilon(z)k_0^2 \right] E(z) = 0, \quad 0 > z > z_N. \quad (3.5)$$

Na superfície,  $z_0 = 0$ , e em todas as interfaces  $z_n$  a função  $E(z)$  e sua primeira derivada  $E'(z)$  devem ser contínuas. Portanto, a equação (3.5) deve ser resolvida com as seguintes condições de contorno:

$$E(z_n - 0) = E(z_n + 0) \quad (3.6)$$

e

$$E'(z_n - 0) = E'(z_n + 0) \quad (3.7)$$

No semi-espço preenchido com material do substrato, a propagação da onda eletromagnética se descreve da seguinte maneira:

$$E(z) = E_T \exp(-ik_{\text{sub}}z), \quad z < z_N \quad (3.8)$$

onde  $E_T$  e  $k_{\text{sub}}$  designam a amplitude do campo elétrico associado à onda transmitida e o número de onda nesta região, respectivamente.

Resolvendo a equação (3.5) com as condições de contorno (3.6) e (3.7), podemos obter as amplitudes das ondas refletida e transmitida,  $E_R$  e  $E_T$ , ainda não conhecidas, como funções da amplitude  $E_0$  da onda incidente. Isto permitirá calcular o coeficiente de reflexão, dado por:

$$R = \frac{|E_R|^2}{|E_0|^2}. \quad (3.9)$$

### 3.2.2. Solução da equação de onda pelo método da matriz de transferência

Vamos considerar dois planos  $z = z_{n-1}$  e  $z = z_n$ , os quais correspondem as duas interfaces da  $n$ -ésima camada, e vamos designar por  $E_+(z)$  e  $E_-(z)$  as duas soluções linearmente independentes da equação de onda (3.5), as quais satisfazem as seguintes condições de contorno:

$$E_+(z_{n-1}) = 1, \quad E_+'(z_{n-1}) = 0, \quad (3.10)$$

$$E_-(z_{n-1}) = 0, \quad E_-'(z_{n-1}) = 1. \quad (3.11)$$

No caso em que a função  $E(z)$  e a sua primeira derivada  $E'(z)$  na interface, com  $z = z_{n-1}$ , têm valores  $E(z_{n-1})$  e  $E'(z_{n-1})$ , respectivamente, a solução  $E(z)$  da equação de onda (3.5) e a sua primeira derivada  $E'(z)$  na interface, com  $z = z_n$ , podem ser determinadas através da seguinte equação vetorial:

$$\begin{pmatrix} E(z_n) \\ E'(z_n) \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} E(z_{n-1}) \\ E'(z_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Normalmente, esta relação é derivada para regiões espaciais onde a função dielétrica é constante, mas ela é, também, igualmente válida quando a função dielétrica é uma função inomogênea, ou seja, variável no espaço. Neste caso, porém, fica mais difícil de se obter as duas soluções linearmente independentes  $E_+(z)$  e  $E_-(z)$ , através das quais se obtém a matriz de transferência  $M_n$ :

$$M_n = \begin{pmatrix} E_+(z_n) & E_-(z_n) \\ E'_+(z_n) & E'_-(z_n) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

A relação (3.12), com  $M_n$  determinada pela expressão acima, é válida para qualquer camada com número  $n = 1, 2, \dots, N$ . Utilizando as condições de contorno em todas as interfaces e na superfície, podemos começar nosso tratamento com a camada  $n = N$ , e substituir numa equação análoga à (3.12) o vetor  $(E(z_{N-1}), E'(z_{N-1}))$  por  $M_{N-1}(E(z_{N-2}), E'(z_{N-2}))$  no lado direito, e assim por diante. O resultado final deste procedimento será:

$$\begin{pmatrix} E(z_N) \\ E'(z_N) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E(0) \\ E'(0) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

com a matriz de transferência  $M$  dada pelo produto de matrizes:

$$M = M_N \cdot M_{N-1} \cdot \dots \cdot M_1. \quad (3.15)$$

Isto significa que a solução  $(E(z_N), E'(z_N))$  pode ser gerada a partir do vetor na superfície  $(E(0), E'(0))$ , usando o método da matriz de transferência. Este método aplicado à camadas homogêneas é apresentado na referência [49]. Entretanto, no caso da existência de inhomogeneidade da função dielétrica, a determinação da matriz de transferência torna-se um problema bastante não trivial. É exatamente isto que representa a novidade e essência do novo método que vem sendo descrito neste capítulo.

### 3.2.3. Determinação da matriz de transferência

Vamos novamente considerar a camada número  $n$ , no interior da qual  $z$  varia entre  $z_{n-1}$  e  $z_n$ . Substituindo a função dielétrica na forma (3.1) na equação de onda (3.5) podemos obter:

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + k_n^2 + \Delta \varepsilon^n(z) k_0^2 \right] E(z) = 0, \quad (3.16)$$

onde  $k_n^2 = \varepsilon^n k_0^2$  designa o quadrado do vetor de onda no material não perturbado da camada número  $n$ . Podemos escolher as duas soluções linearmente independentes na forma geral:

$$E_{\pm}(z) = E_{0\pm} \exp(i\varphi_{\pm}(z)) \quad (3.17)$$

com

$$\varphi_{\pm}(z) = \mp k_n (z - z_{n-1}) + \phi_{\pm}(z). \quad (3.18)$$

Aqui  $\phi_{\pm}(z)$  representa a mudança da fase óptica devida a  $\Delta \varepsilon^n(z)$ . Neste caso, da equação de onda (3.16) podemos obter a seguinte equação para  $\phi_{\pm}(z)$ :

$$i\phi_{\pm}''(z) \pm 2k_n \phi_{\pm}'(z) - [\phi_{\pm}'(z)]^2 + \Delta \varepsilon^n(z) k_0^2 = 0. \quad (3.19)$$

Esta equação é uma equação tipo Riccati e não tem uma solução analítica exata [145]. Mas, usando a condição  $\Delta \varepsilon^n(z)/\varepsilon^n \ll 1$ , podemos aplicar o método de aproximações sucessivas para a resolução desse problema. Como é conhecido dos estudos teóricos e experimentais, no caso em que as

perturbações na função dielétrica são causadas pelo campo elétrico, é válida a relação  $\Delta\varepsilon^n(z)/\varepsilon^n \leq 10^{-3}$ . Portanto, restringiremo-nos à aproximação de primeira ordem.

A primeira derivada da correção de fase óptica  $\phi_{\pm}'(z)$  tem a ordem de grandeza  $k_n\Delta\varepsilon^n(z)$ , e a segunda,  $k_n\Delta\varepsilon^{n'}(z)$ . Já que a função  $\Delta\varepsilon^n(z)$  pode mudar fortemente ao longo de uma distância comparável com o comprimento de onda da luz, o primeiro termo pode ter a ordem de grandeza  $k_n^2\Delta\varepsilon^n(z)$ , a qual é comparável com as magnitudes dos segundo e quarto termos. Portanto, o primeiro termo não pode ser desprezado. Porém, é possível se desprezar o termo  $[\phi_{\pm}'(z)]^2$ , já que sua ordem de grandeza é  $[k_n\Delta\varepsilon^n(z)]^2$ , e  $\Delta\varepsilon^n(z)$  é pequeno quando comparado com 1. O mesmo já foi feito por Aspnes e Frova no tratamento do semi-espaco [130].

A aproximação feita aqui corresponde à expansão de  $\phi_{\pm}(z)$ , segundo a metodologia da teoria de perturbações, com relação à  $\Delta\varepsilon^n(z)$ , mantendo somente os termos lineares. Esta abordagem se opõe à aproximação do tipo WKB [47,49], normalmente usada no cálculo do coeficiente de reflexão de múltiplos filmes finos. Esta aproximação faz negligenciar a segunda derivada da correção de fase óptica, e não o quadrado da primeira, e pode ser usada somente no caso em que a espessura total da heteroestrutura é pequena em comparação com o comprimento de onda da luz [49].

Gostaríamos de ressaltar ainda que, o uso do termo "WKB" nesta área é bem confuso. Por exemplo, na referência [49] é usada a abordagem do tipo WKB, sem, entretanto, o termo ser mencionado. Tratando o problema da fotorefletância do semi-espaco inomogêneo dentro da teoria de perturbação, Aspnes e Frova [130] usaram o termo "WKB", mas não para qualificar o método em si, mas chamando a solução geral da equação de onda tipo (3.17) como solução tipo WKB. E finalmente, na referência [47] o método similar

ao de Aspnes e Frova foi chamado de WKB, causando dificuldades conceituais na compreensão da física e da matemática do problema para os interessados.

Tendo feito estes comentários, importantes do nosso ponto de vista, podemos escrever a equação aproximada para  $\phi_{\pm}(z)$ :

$$i\phi_{\pm}''(z) \pm 2k_n\phi_{\pm}'(z) + \Delta\varepsilon^n(z)k_0^2 = 0. \quad (3.20)$$

A solução analítica desta equação, obedecendo às condições de contorno  $\phi_{\pm}(z_{n-1}) = \phi_{\pm}'(z_{n-1}) = 0$ , pode ser escrita na forma:

$$\phi_{\pm}(z) = \pm \frac{1}{2} k_n \int_{z_{n-1}}^z dz' [e^{\pm 2ik_n(z-z')} - 1] \frac{\Delta\varepsilon^n(z')}{\varepsilon^n} \quad (3.21)$$

Usando a expressão acima, podemos escrever as duas soluções para as funções  $E_{\pm}(z)$  as quais satisfazem as condições de contorno (3.10) e (3.11):

$$E_+(z_n) = \frac{1}{2} [e^{i\varphi_+(z_n)} + e^{i\varphi_-(z_n)}] \quad (3.22a)$$

e

$$E_-(z_n) = \frac{1}{2ik_n} [e^{i\varphi_+(z_n)} - e^{i\varphi_-(z_n)}] \quad (3.22b)$$

com a fase óptica  $\varphi_{\pm}(z_n)$  determinada através da equação (3.18) com a correção de fase  $\phi_{\pm}(z_n)$  obtida da expressão (3.21). As condições de contorno

são satisfeitas já que  $\phi_{\pm}(z_{n-1}) = 0$  e  $\phi'_{\pm}(z_{n-1}) = 0$ , uma vez que isto resulta em  $\varphi_{\pm}(z_{n-1}) = 0$  e  $\varphi'_{\pm}(z_{n-1}) = \mp k_n$ . Finalmente, podemos escrever a matriz de transferência  $M_n$  explicitamente. Ela é dada por:

$$M_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}[e^{i\varphi_+(z_n)} + e^{i\varphi_-(z_n)}] & \frac{i}{2k_n}[e^{i\varphi_+(z_n)} - e^{i\varphi_-(z_n)}] \\ \frac{i}{2}[\varphi'_+(z_n)e^{i\varphi_+(z_n)} + \varphi'_-(z_n)e^{i\varphi_-(z_n)}] & -\frac{1}{2k_n}[\varphi'_+(z_n)e^{i\varphi_+(z_n)} - \varphi'_-(z_n)e^{i\varphi_-(z_n)}] \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

### 3.2.4. Determinação do coeficiente de reflexão

Para calcular o coeficiente de reflexão partiremos da equação (3.14) substituindo, de acordo com a expressão (3.4), o vetor  $(E(0), E'(0))$  pelo vetor  $(E_0 + E_R, -ik_0(E_0 - E_R))$ . O vetor  $(E(z_N), E'(z_N))$  da equação (3.14) substituiremos, de acordo com a expressão (3.8), pelo vetor  $(E_T, -ik_{\text{sub}}E_T)$ . Assim, podemos reescrever a equação (3.14) da seguinte maneira:

$$\begin{pmatrix} E_T \\ -ik_{\text{sub}}E_T \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_0 + E_R \\ -ik_0(E_0 - E_R) \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Introduzindo os vetores

$$\mathbf{e}_0 = (1, -ik_0), \quad \mathbf{e}_R = (-ik_{\text{sub}}, 1), \quad \mathbf{e}_T = (1, -ik_{\text{sub}}) \quad (3.25)$$

podemos escrever a equação (3.24) na forma mais compacta:

$$E_T \mathbf{e}_T - E_R M \mathbf{e}_R^* = E_0 M \mathbf{e}_0 . \quad (3.26)$$

Multiplicando esta equação pelo vetor  $\mathbf{e}_R$  à esquerda e, observando a ortogonalidade entre os vetores  $\mathbf{e}_R$  e  $\mathbf{e}_T$  ( $(\mathbf{e}_R | \mathbf{e}_T) = 0$ ), podemos obter para a amplitude da luz refletida a seguinte expressão:

$$E_R = - \frac{(\mathbf{e}_R | M | \mathbf{e}_0)}{(\mathbf{e}_R | M | \mathbf{e}_0^*)} E_0 \quad (3.27)$$

Substituindo este valor de  $E_R$  na fórmula (3.9), finalmente podemos obter a expressão para o coeficiente de reflexão  $R$ :

$$R = \frac{|(\mathbf{e}_R | M | \mathbf{e}_0)|^2}{|(\mathbf{e}_R | M | \mathbf{e}_0^*)|^2} \quad (3.28)$$

Tendo resolvido o problema de cálculo do coeficiente de reflexão da heteroestrutura, podemos aplicar esta abordagem para o cálculo do coeficiente de reflexão da heteroestrutura sujeita à modulação, e do coeficiente de reflexão da mesma não sujeita à modulação. Conseqüentemente, podemos achar a modificação da refletividade relativa  $\Delta R/R$ . No caso da fotorefletância, e outras técnicas de modulação óptica, esta grandeza, calculada em função da energia do fóton da luz incidente,  $\Delta R/R(\omega)$ ,

chama-se espectro de modulação. Os exemplos de tais cálculos serão apresentados nas seções 3.3 e 3.4.

Para finalizar a seção 3.2, dedicada à exposição do nosso método, faremos uma demonstração analítica de que, o método sendo mais geral em comparação com os anteriores, reproduz no caso do semi-espaço inhomogêneo o resultado obtido por Aspnes e Frova [130].

### 3.2.5. Aplicação para o semi-espaço

Em termos do método aqui desenvolvido, um semi-espaço infinito pode ser tratado como uma heteroestrutura com uma só camada. A espessura desta camada aproxima-se ao infinito, e seu material é o material do substrato. Portanto, nas passagens feitas em seguida não usaremos o índice  $n$ . Os vetores  $\mathbf{e}_0$  e  $\mathbf{e}_R$  da equação (3.28) podem ser expressos da seguinte maneira:

$$\mathbf{e}_0 = (1, -ik_0), \quad \mathbf{e}_R = (-ik, 1), \quad (3.29)$$

e a correção de fase  $\phi_{\pm}(z)$  (vide a equação 3.21) é dada por:

$$\phi_{\pm}(z) = \pm k \int_0^z dz' [\exp(\pm 2ik(z-z')) - 1] \frac{\Delta\epsilon(z')}{\epsilon}. \quad (3.30)$$

Aqui  $-z$  é a espessura da camada. Para os elementos de matriz da expressão (3.28) obtemos

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}_R | M | \mathbf{e}_0) = & i \exp[i\varphi_-(z)] \left\{ (k - k_0) + \frac{1}{2k} (k - k_0) \varphi'_-(z) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2k} (k + k_0) \exp[i(\varphi_+(z) - \varphi_-(z))] \phi'_+(z) \right\}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}_R | M | \mathbf{e}_0^*) = & i \exp[i\varphi_-(z)] \left\{ (k + k_0) + \frac{1}{2k} (k + k_0) \varphi'_-(z) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2k} (k - k_0) \exp[i(\varphi_+(z) - \varphi_-(z))] \phi'_+(z) \right\}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde

$$\phi'_\pm(z) = ik^2 \int_0^z dz' \exp[\pm 2ik(z - z')] \frac{\Delta \varepsilon(z')}{\varepsilon}. \quad (3.33)$$

Substituindo as expressões (3.32) e (3.33) na equação (3.28), o fator exponencial de fase  $i \exp[i\varphi_-(z)]$  é cancelado. Os termos restantes que dependem de  $z$  devem ser calculados no limite  $z \rightarrow -\infty$ . Obtemos

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \phi'_-(z) = 0, \quad (3.34)$$

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \exp[i(\varphi_+(z) - \varphi_-(z))] \phi'_+(z) = \delta k, \quad (3.35)$$

onde

$$\delta k = -ik^2 \int_{-\infty}^0 dz' \exp[-2ikz'] \frac{\Delta \varepsilon(z')}{\varepsilon}. \quad (3.36)$$

A expressão (3.36) representa a variação do vetor de onda devida à perturbação da função dielétrica  $\Delta\epsilon$ . Nós negligenciamos os termos de ordem superior à primeira ordem em  $\Delta\epsilon$ , oriundos do fator de fase  $i\exp[i(\varphi_+(z) - \varphi_-(z))]$  da expressão (3.35). Usando as expressões (3.31 - 3.36), a amplitude relativa da luz refletida  $E_R/E_0$  pode ser obtida da expressão (3.27):

$$\frac{E_R}{E_0} = \frac{k - k_0 + \frac{1}{2k}(k + k_0)\delta k}{k + k_0 + \frac{1}{2k}(k - k_0)\delta k} \quad (3.37)$$

Mantendo somente os termos de primeira ordem em  $\delta k$ , esta expressão pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{E_R}{E_0} = \frac{k - k_0}{k + k_0} + \frac{2k_0}{(k + k_0)^2} \delta k \quad (3.38)$$

O resultado de Aspnes e Frova para  $E_R/E_0$  [130] é dado por:

$$\frac{E_R}{E_0} = \frac{k - k_0 + \delta k}{k + k_0 + \delta k} \quad (3.39)$$

Desprezando-se termos não lineares em  $\delta k$ , este resultado coincide com a expressão (3.38). Isto significa que o resultado de Aspnes e Frova pode ser obtido, se nossa expressão geral (3.28) é aplicada para semi-espaco infinito.

Após esta demonstração passaremos aos exemplos numéricos.

### 3.3. ESPECTROS DE FOTOREFLETÂNCIA PROVENIENTES DE HOMO E HETERO- ESTRUTURAS INOMOGÊNEAS TIPO "BULK"

#### 3.3.1. Investigação do espectro de fotorefletância proveniente do semi-espaço inhomogêneo

##### a) *Influência do campo elétrico na função dielétrica*

No caso da aplicação da técnica de fotorefletância, o perfil do campo elétrico interno à amostra sofre modificações devidas à blindagem das cargas de superfície por potadores de carga fotogerados durante a injeção do laser. Assumindo que os resultados de fotorefletância provêm somente da modulação do campo elétrico, a modificação introduzida pelo campo elétrico na função dielétrica na proximidade do ponto crítico  $M_0$  pode ser expressa através da equação derivada por Aspnes [147], supondo que o efeito Franz-Keldysh [52,53] é o mecanismo principal que rege a absorção do material na presença do campo:

$$\Delta\varepsilon(\omega) = C(\pi\Theta^{1/2}/\omega^2) \{ [ Ai'(\eta)Bi'(\eta) - \eta Ai(\eta)Bi(\eta) ] + i[ Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta) ] + \eta^{1/2} \} \quad (3.40)$$

onde o argumento complexo  $\eta$  das funções de Airy é igual a  $\eta = (\omega_g - \omega - i\Gamma)/\Theta$  e a frequência eletro-óptica é  $\Theta = (e^2 F^2 / 2m_{cv}^* \hbar)^{1/3}$ . Aqui  $\omega_g$  designa a frequência correspondente à faixa proibida de energia do material

semicondutor ( $E_g = \hbar\omega_g$ ),  $\Gamma$  é um parâmetro de alargamento, relacionado ao tempo de vida finito dos portadores de carga,  $F$  representa o campo elétrico, e  $m_{cv}^*$  é a massa efetiva reduzida. O problema da determinação do coeficiente  $C$  será discutido em seguida.

Neste momento devemos chamar a atenção ao fato de que dentro do nosso método é necessário primeiramente calcular as duas matrizes de transferência diferentes  $M(F_1(z))$  e  $M(F_2(z))$ , para os dois perfis diferentes do campo elétrico  $F_1(z)$  e  $F_2(z)$ , um modulado e outro não modulado. Isto fornecerá o conhecimento de dois coeficientes de reflexão, um para cada perfil, e então podemos obter a modificação da refletividade relativa  $\Delta R/R$ . Mas, para calcular a matriz de transferência é importante conhecer não somente o valor preciso de  $\Delta\varepsilon(\omega, F(z))$ , mas também o valor absoluto da função dielétrica não perturbada  $\varepsilon$  (vide seção anterior). Isto faz com que seja necessário utilizarmos os valores experimentais de  $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ , para calcular a forma exata do espectro de fotorefletância com precisão. Aqui,  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  designam a parte real e imaginária da função dielétrica, respectivamente.

Os valores experimentais de  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  para GaAs e  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  foram extraídos da referência [148]. Nesta referência foram investigados, à temperatura ambiente, as propriedades de GaAs e das ligas tipo (GaAl)As crescidos pela técnica de MBE. O valor típico do parâmetro de alargamento nessas estruturas é da ordem de 0,01eV. Para cada tipo de material, a curva experimental  $\varepsilon_2(\omega)$  foi ajustada pela expressão teórica [147]:

$$\varepsilon_2(\omega) = C(\pi/\omega^2) \left\{ \frac{1}{2} [ -(\omega_g - \omega) + ((\omega_g - \omega)^2 + \Gamma^2)^{1/2} ] \right\}^{1/2} \quad (3.41)$$

que representa a parte imaginária da função dielétrica na ausência do campo elétrico. Este ajuste mostrou-se adequado na região entre  $E_g$  e  $E_g + 0,2\text{eV}$ . Os valores do coeficiente  $C$  extraídos numericamente deste procedimento no caso do GaAs e no caso do  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ , foram usados na expressão (3.40). Para valores maiores do que  $E_g + 0,2\text{eV}$ , outras aproximações polinomiais foram usadas para que a curva teórica passasse pelos pontos experimentais, apresentados em [148]. Na Figura 3.1 são apresentadas as curvas  $\varepsilon_2(\omega)$  para GaAs e  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ , as quais foram usadas nas simulações computacionais.

As curvas da parte real da função dielétrica  $\varepsilon_1(\omega)$  foram construídas com os mesmos valores do coeficiente  $C$  usando a expressão teórica [147]:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_1(\omega_g) - C(\pi/\omega^2) \left\{ \frac{1}{2} [(\omega_g - \omega) + ((\omega_g - \omega)^2 + \Gamma^2)^{1/2}] \right\}^{1/2}, \quad (3.42)$$

demonstrando uma boa concordância com os dados experimentais [148] para toda a faixa de energias menores do que  $E_g$  do material. Na região de energias acima da faixa proibida do material foram utilizadas as expressões polinomiais apropriadas para cada um dos materiais. Na Figura 3.2 são apresentados os espectros da parte real da função dielétrica para GaAs e  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ .

Munidos desta informação, nós temos a possibilidade de calcular corretamente as respostas espectrais provenientes das camadas de GaAs, bem como de  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ . O conhecimento dos valores do coeficiente  $C$  nos dá a possibilidade de obter com precisão a forma da linha, bem como a amplitude do sinal da fotorefletância, já que fornecem os valores absolutos das grandezas  $\varepsilon(\omega)$ ,  $\Delta\varepsilon(\omega, F_1(z))$  e  $\Delta\varepsilon(\omega, F_2(z))$ .

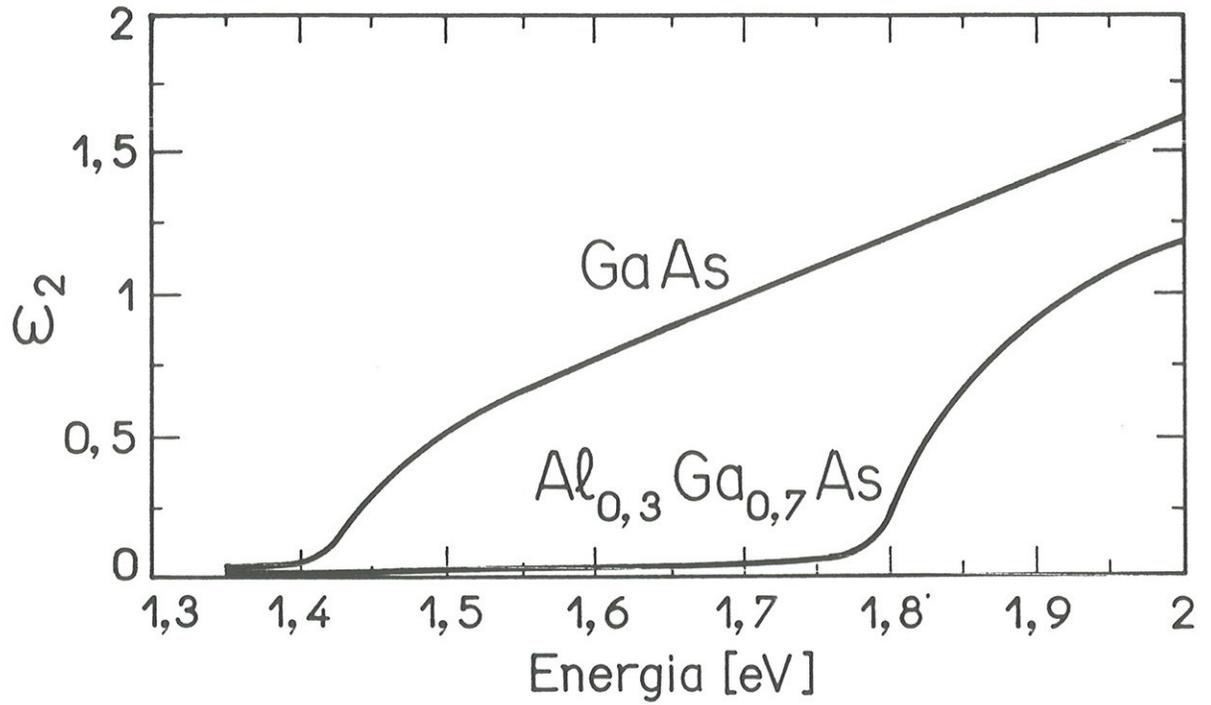


Figura 3.1. Espectro da parte imaginária da função dielétrica para GaAs e  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  ( $\Gamma = 10\text{meV}$ ).

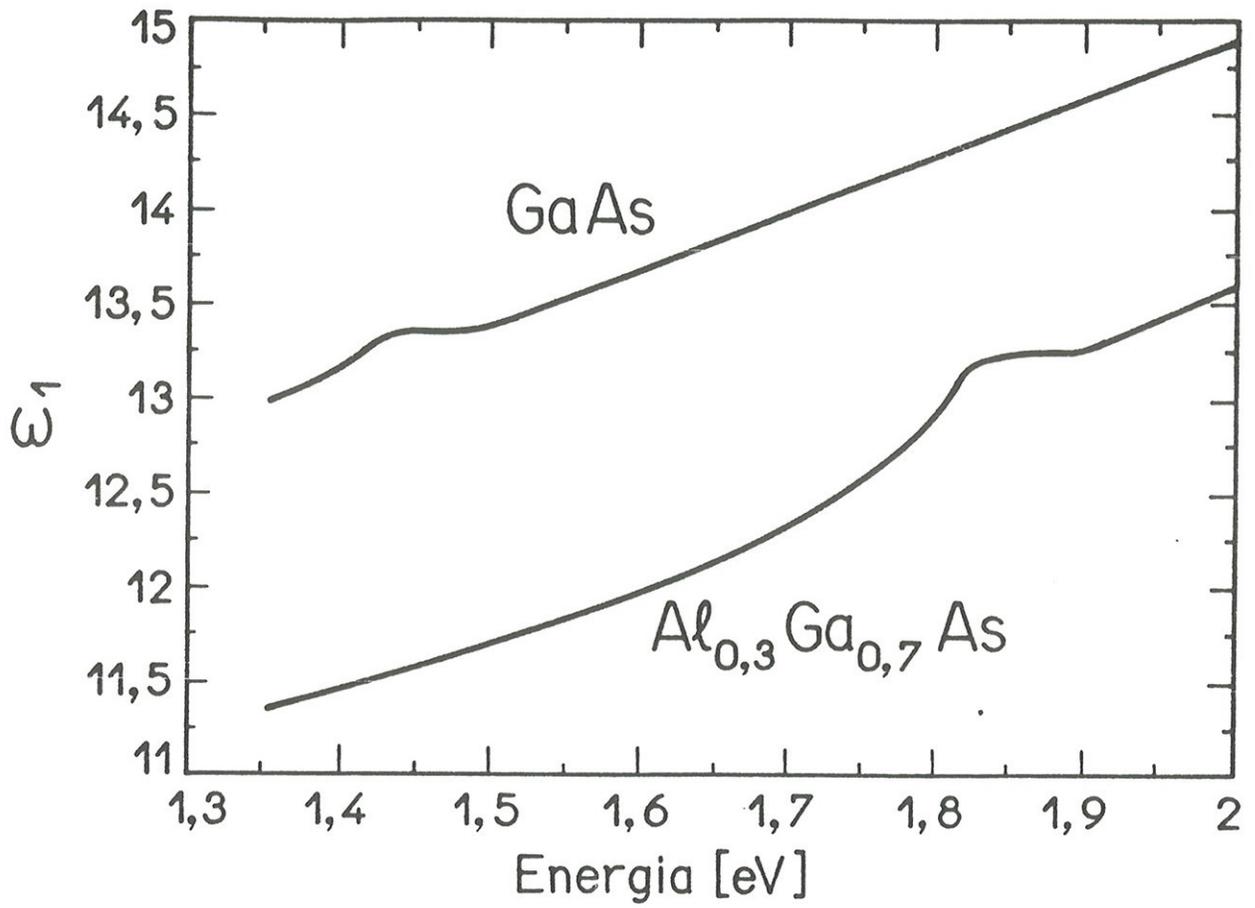


Figura 3.2. Espectro da parte real da função dielétrica para GaAs e  $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$  ( $\Gamma = 10meV$ ).

Passaremos, agora, à discussão das aplicações do nosso método para semi-espaço inomogêneo infinito.

*b) Espectros de modulação provenientes do material tipo "bulk"*

Uma amostra tipo "bulk", do ponto de vista da investigação pela técnica de fotorefletância, pode ser representada por um semi-espaço infinito, preenchido com material da amostra, o qual possui um campo elétrico interno proveniente das cargas de superfície. Na aproximação de Schottky, este campo tem um perfil linear, decaindo com a distância à superfície. A região onde o campo elétrico interno é diferente de zero, costuma ser chamada de "região de depleção". Nesta seção, vamos investigar a forma de linha dos espectros de fotorefletância em função do gradiente do campo elétrico, ou seja, em função da espessura da região de depleção  $w$ , para um valor fixo do campo elétrico na superfície. O estudo do espectro de fotorefletância em função da concentração de dopantes, alterando não somente  $w$ , mas o valor do campo na superfície, pode ser encontrado na referência [149].

O semi-espaço infinito de GaAs, com inomogeneidades introduzidas pelo campo elétrico, dentro de nossa abordagem foi representado por uma camada de GaAs com espessura igual à espessura da região de depleção e um semi-espaço infinito de GaAs homogêneo. No cálculo do espectro foi considerado que, a refletividade óptica no caso de fotorefletância sofre modificações somente devidas à modulação das perturbações introduzidas na função dielétrica pelo campo elétrico interno. Por simplicidade, foi assumido ainda que a perturbação externa, ou seja, a injeção do laser, faz com que a

condição de bandas planas na superfície seja atingida e, conseqüentemente, o campo elétrico de superfície é nulo. Isto corresponde à modulação de 100%.

A influência do gradiente do campo elétrico na forma de linha dos espectros de fotorefletância é ilustrada na Figura 3.3. O espectro (a) corresponde ao gradiente mais fraco. A forma da linha é praticamente idêntica à forma da função elétro-óptica  $G$ , como é previsto no caso do semi-espaço homogêneo de GaAs [131,150]. Com o aumento do gradiente do campo elétrico, as oscilações subsidiárias nos espectros (b),(c), e (d) ficam cada vez mais amortecidas. O espectro (b) exhibe estruturas, parecidas com o batimento de ondas, causadas pela interferência entre ondas eletromagnéticas refletidas por partes diferentes do semi-espaço inhomogêneo. Podemos dizer que a região de depleção atua como uma "interface contínua", composta por inhomogeneidades induzidas pelo campo elétrico. Já que a espessura da região de depleção é maior do que o comprimento de onda da luz incidente, os efeitos de interferência construtiva e destrutiva começam a ser pronunciados. O amortecimento devido ao gradiente do campo elétrico ainda é fraco para que as oscilações subsidiárias desapareçam. O aumento do amortecimento das oscilações subsidiárias com aumento do gradiente do campo elétrico, foi previsto por vários autores [42,130,131], e está em concordância completa com mudanças da forma de linha apresentadas nos espectros (c) e (d) da Figura 3.3.

Para fins de comparação, simulações dos quatro espectros de fotorefletância para semi-espaço inhomogêneo com os mesmos parâmetros foram realizadas usando o método desenvolvido por Aspnes e Froya [130]. Os resultados são idênticos àqueles da Figura 3.3, como é esperado lembrando a demonstração analítica feita na seção 3.2.5. Este teste, mais uma vez comprova a equivalência das duas abordagens no caso do cálculo dos

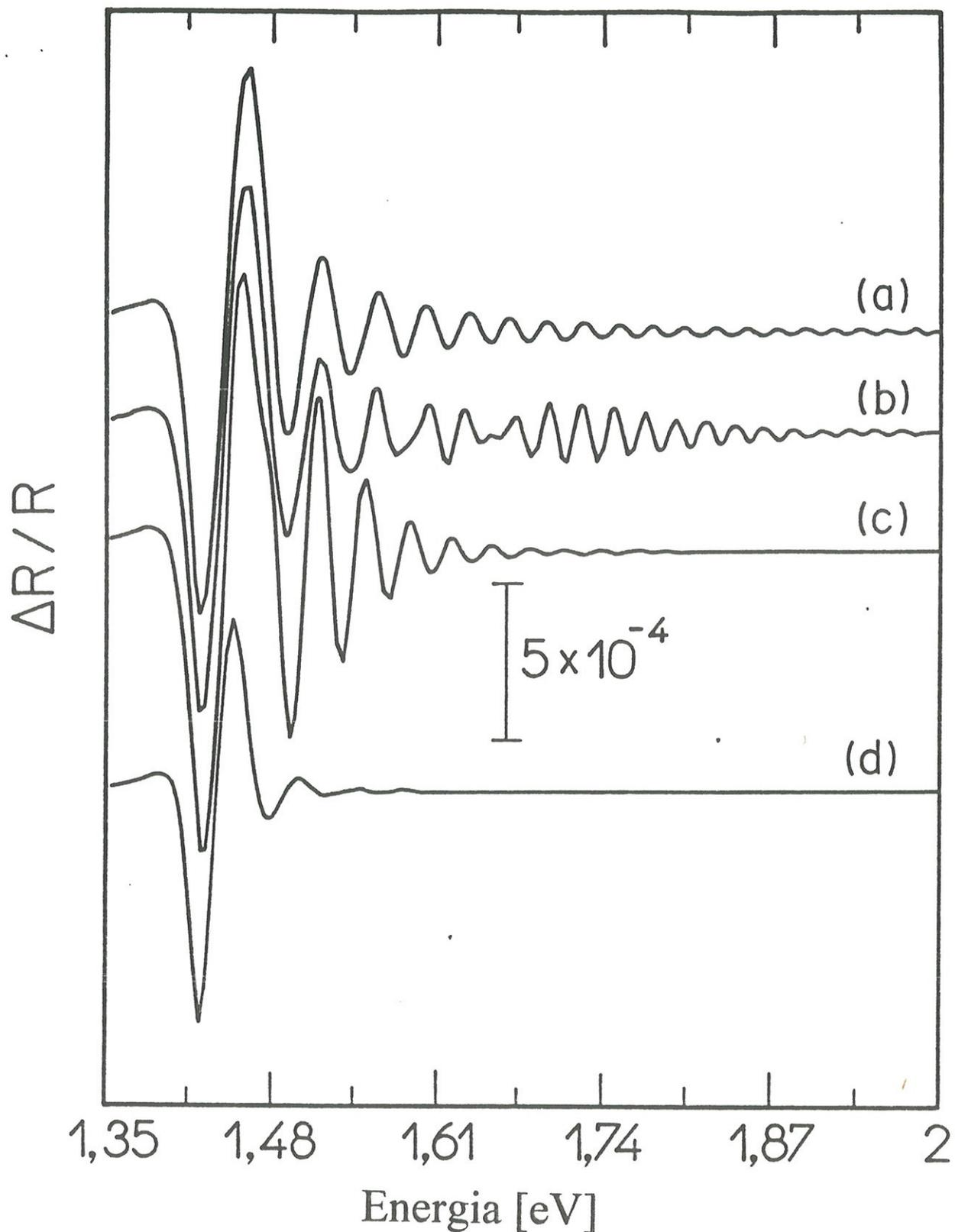


Figura 3.3. Espectros de fotorefletância calculados para GaAs tipo "bulk" com campo elétrico  $F(z) = F_0(1 - |z|/w)$  anulando-se na região de depleção com espessura  $w$ .  $F_0 = 60\text{kV/cm}$ ;  $\Gamma = 10\text{meV}$ . (a)  $w = 3\mu\text{m}$ ; (b)  $w = 1\mu\text{m}$ ; (c)  $w = 0,3\mu\text{m}$ ; (d)  $w = 0,05\mu\text{m}$ .

espectros de fotorefletância provenientes de amostras tipo "bulk". Porém, além do método aqui desenvolvido ser mais geral, ele também pode ser aplicado para qualquer tipo de heteroestrutura. Alguns exemplos de tais aplicações serão discutidos em seguida.

### 3.3.2. Aplicação do método para heteroestruturas com camadas tipo "bulk"

#### *a) Heteroestrutura com região interfacial não modulada*

Aqui foi empreendido o estudo do espectro de fotorefletância proveniente da heteroestrutura  $\text{Al}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{As}(3,5\mu\text{m})/\text{GaAs}(\text{substrato})$ , discutida no item 2.3.2(b). Como pode ser visto na Figura 2.7, não há praticamente nenhuma modulação do campo elétrico na região interfacial entre a liga e o GaAs. Portanto, não é esperado o aparecimento de estruturas espectrais na região próxima ao valor de energia da faixa proibida do GaAs, devidas à modificações da função dielétrica do GaAs induzidas pelas mudanças do campo no GaAs. Porém, estruturas espectrais de origens diferentes podem aparecer devido à mudanças introduzidas na função dielétrica da liga. Evidentemente, estas mudanças não podem ser explicadas em termos do efeito Franz-Keldysh, já que a faixa proibida do GaAs é bem menor do que a da liga. O mecanismo de modulação, conhecido como eficiente nesta faixa de frequências de fótons, é a modificação da faixa proibida do material devida ao efeito piezo-elétrico.

Pela primeira vez, simulamos o espectro da fotorefletância adotando o efeito piezo-elétrico como mecanismo de modulação da função dielétrica. Utilizando nos cálculos os perfis do campo elétrico apresentados na Figura 2.7, obtemos o espectro apresentado na Figura 3.4. As estruturas observadas na região entre as energias das faixas proibidas da liga ( $\sim 1,8\text{eV}$ ) e do GaAs ( $\sim 1,42\text{eV}$ ) são devidas à oscilações tipo Fabry-Perrot da heteroestrutura. O período destas oscilações é modulado pelas modificações introduzidas, pela modulação do campo elétrico, na função dielétrica da liga. Daí, provém o sinal da fotorefletância, cuja forma é dada pela primeira derivada do espectro do coeficiente de reflexão tipo Fabry-Perrot na ausência de modulação. O período das oscilações no espectro de fotorefletância calculado (vide Figura 3.4) está em boa concordância com o período das oscilações no espectro obtido experimentalmente [126] e apresentado na Figura 3.5.

A interpretação do espectro experimental da Figura 3.5 em termos do efeito Franz-Keldysh em GaAs, levando em conta os efeitos interferenciais, já foi apresentada na referência [46]. Porém, neste trabalho para obter o período das oscilações no espectro simulado que estivesse em concordância com o do espectro experimental, foi assumido que a camada epitaxial de  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}$  tivesse uma espessura de  $2,5\mu\text{m}$ , enquanto em [126] consta que a camada de  $\text{Al}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{As}$  tem a espessura de  $3,5\mu\text{m}$ .

Este exemplo demonstra um novo grau de compreensão da natureza da forma de linha do espectro e dos mecanismos de modulação da função dielétrica, além de fornecer um novo patamar no entendimento do problema em geral, o qual foi atingido graças à precisão do novo método de cálculo do coeficiente de reflexão.

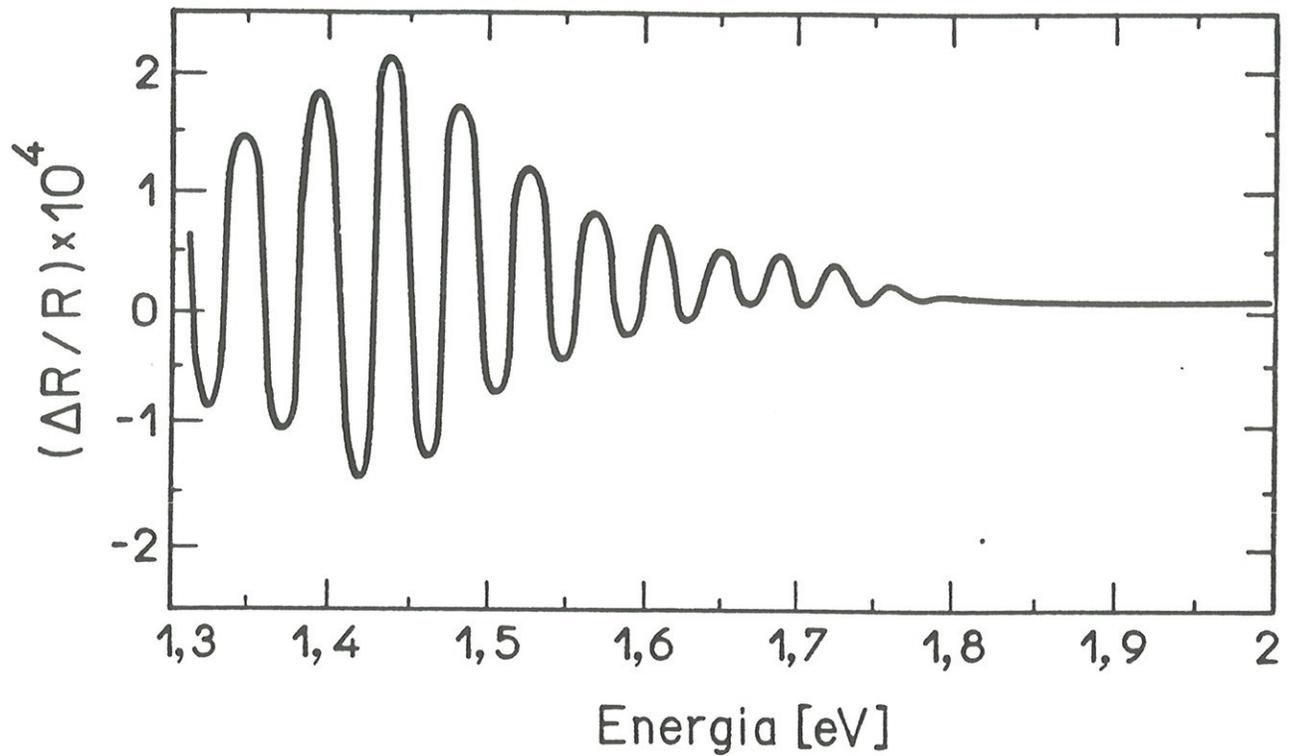


Figura 3.4. Espectro de fotorefletância para a heteroestrutura  $\text{Al}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{As}(3,5\mu\text{m})/\text{GaAs}$ , calculado usando os perfis do campo elétrico apresentados na Figura 2.7. A resposta espectral tipo Franz-Keldysh da liga não é incluída.  $\Gamma = 30\text{meV}$  para a liga, e  $\Gamma = 10\text{meV}$  para GaAs.

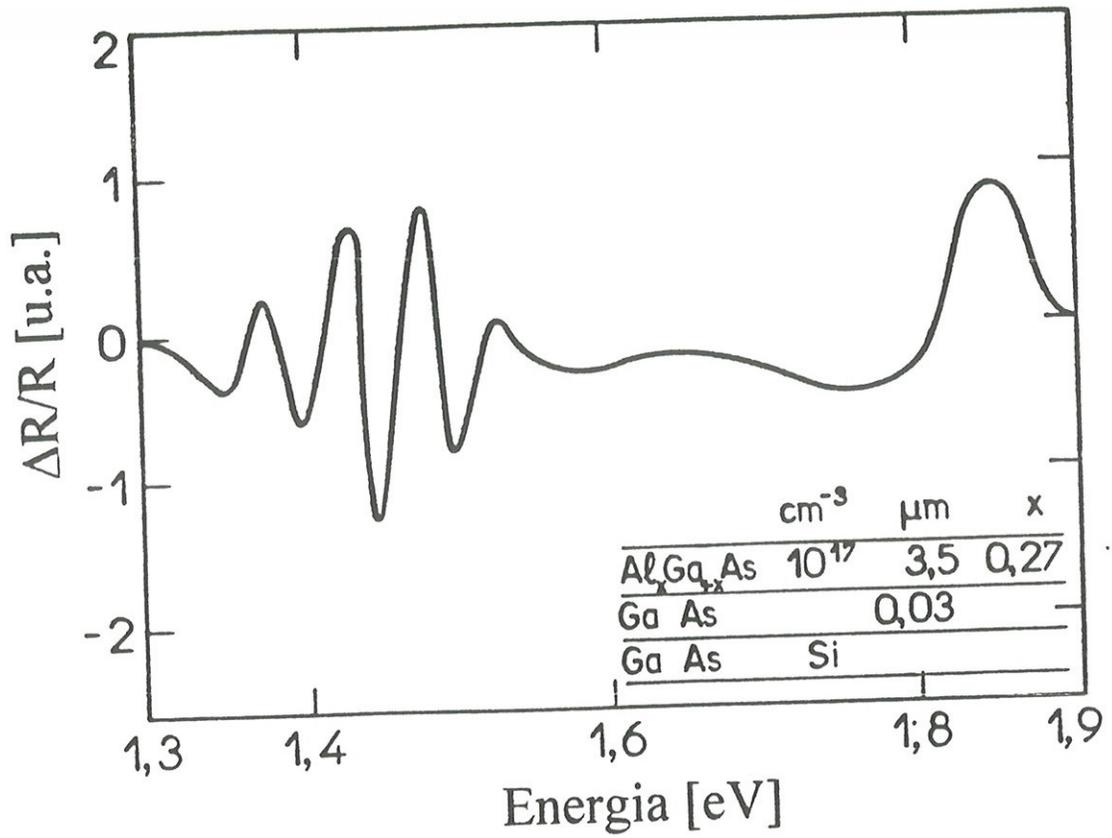


Figura 3.5. Espectro experimental de fotorefletância para a heteroestrutura  $Al_{0,27}Ga_{0,73}As(3,5\mu m) / GaAs(0,03\mu m) / GaAs(\text{substrato})$ , de acordo com a referência [126].

*b) Heteroestrutura com região interfacial sujeita à modulação*

Apresentaremos a seguir, em detalhes, o estudo teórico da forma de linha do espectro de fotorefletância, proveniente de uma heteroestrutura produzida no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores. Vamos considerar uma camada de  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}$  com a espessura de  $10000\text{Å}$ , crescida sobre uma camada de GaAs com a espessura de  $300\text{Å}$ , crescida sobre substrato semi-isolante de GaAs.

Neste caso, é esperado que o efeito Franz-Keldysh seja o mecanismo principal que descreve a absorção de fótons na presença do campo elétrico interno. Espera-se que o espectro contenha estruturas diferentes nas regiões próximas à faixa proibida do GaAs e àquela da liga. A forma do espectro na região acima da faixa proibida de  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}$  deveria ser uma série de oscilações Franz-Keldysh, já que a camada de liga é uma camada epitaxial e os efeitos interferenciais neste caso não são bem pronunciados. A resposta espectral do GaAs será uma superposição de oscilações Franz-Keldysh e de Fabry-Perrot, visto que a profundidade de GaAs em relação à superfície é  $10000\text{Å}$ .

Portanto, antes de simular o espectro de fotorefletância  $\Delta R/R(\omega)$  foi feito o estudo da refletividade da amostra  $R(\omega)$  para comparar as posições de picos das oscilações Fabry-Perrot obtidas através do cálculo com aquelas na curva da refletividade, obtida no laboratório. Nas Figuras 3.6(a) e 3.6(b) são apresentadas a refletividade da amostra, calculada através de nosso método, e a refletividade, medida experimentalmente, no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores por J.A.N.T.Souares [133]. O uso dos valores exatos da função dielétrica  $\epsilon(\omega)$  para GaAs e para liga, forneceu uma boa correspondência entre o período das oscilações tipo Fabry-Perrot nas curvas

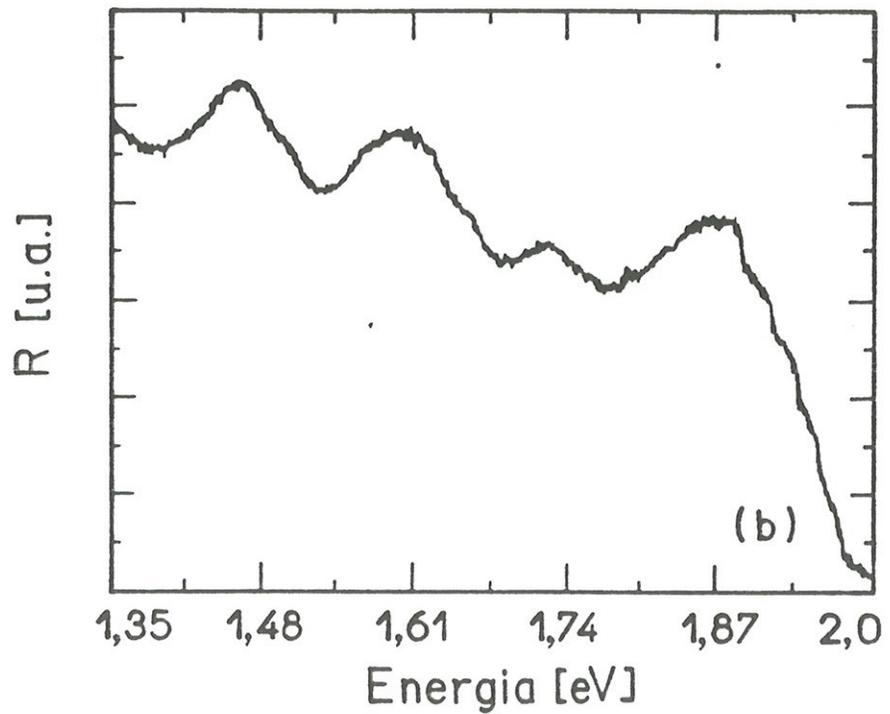
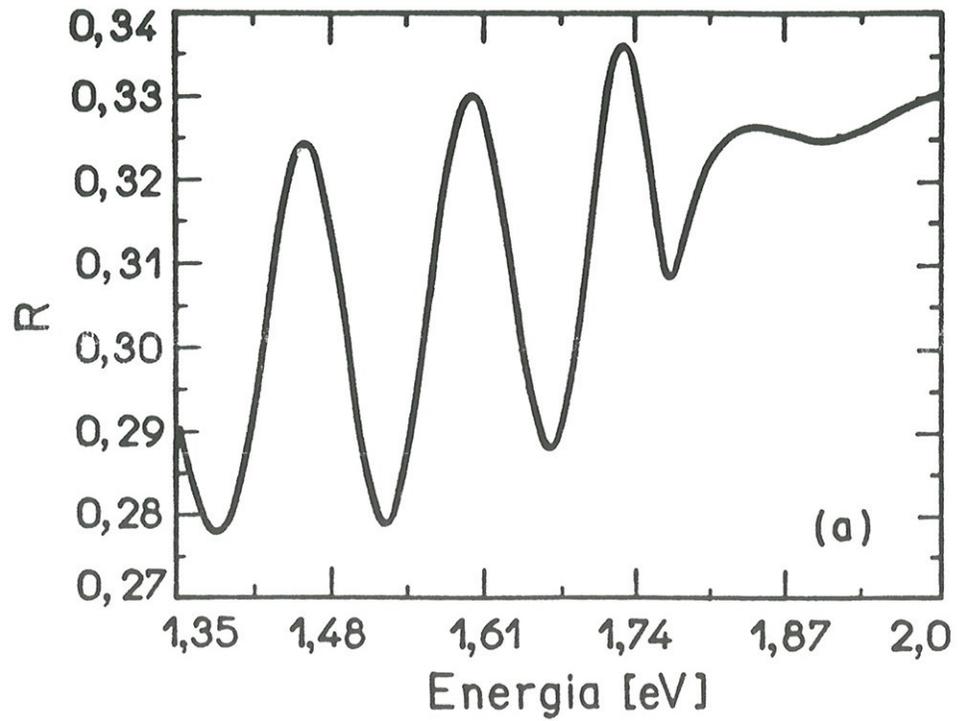


Figura 3.6. Espectros da refletividade, teórico (a) e experimental (b), para a heteroestrutura  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}(1\mu\text{m}) / \text{GaAs}(0,03\mu\text{m}) / \text{GaAs}$  (substrato), apresentando as oscilações tipo Fabry-Perrot.

teórica e experimental. Aqui, é importante ressaltar que a separação entre os picos destas oscilações não é a mesma para energias mais altas e mais baixas. Este comportamento também é esperado já que o coeficiente de reflexão nestes gráficos é apresentado não em função da espessura da camada epitaxial, como é feito normalmente na óptica clássica [49], mas em função da energia do fóton como é usual na espectroscopia de modulação. As discrepâncias entre o comportamento das curvas são devidas aos padrões do equipamento e ao uso de filtros ópticos na região de energias mais altas. Tudo isso altera a amplitude absoluta da refletividade medida, e serve como uma explicação demonstrativa de vantagens das técnicas diferenciais em relação às medidas diretas. A comparação entre os espectros de fotorefletância  $\Delta R/R(\omega)$ , teórico e experimental, será feita em seguida.

Conhecendo a concentração de Si ( $E_B = 5,84\text{meV}$ ) na liga  $N_D = 4,0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ , foram feitas simulações computacionais, baseadas no método apresentado no Capítulo 2, para determinar o perfil do campo elétrico. O resultado destas simulações é apresentado na Figura 3.7.

Na Figura 3.8 é apresentado o espectro de fotorefletância, obtido experimentalmente no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores [110] (curva (a)), e o espectro de fotorefletância, calculado teoricamente (curva (b)). A curva teórica foi obtida supondo-se que a modulação do campo na superfície é de 100% e na interface de 5%. Uma concordância bastante boa entre os espectros teórico e experimental indica fortemente que as oscilações abaixo da faixa proibida da liga são provenientes do efeito Franz-Keldysh regido pelo campo elétrico oriundo da interface entre a camada de GaAs, crescida pela técnica de MBE (camada "buffer"), e o substrato de GaAs.

Esta conclusão é contrária à suposição feita na referência [46], onde as oscilações do mesmo tipo são atribuídas à interface  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}/\text{GaAs}$ .

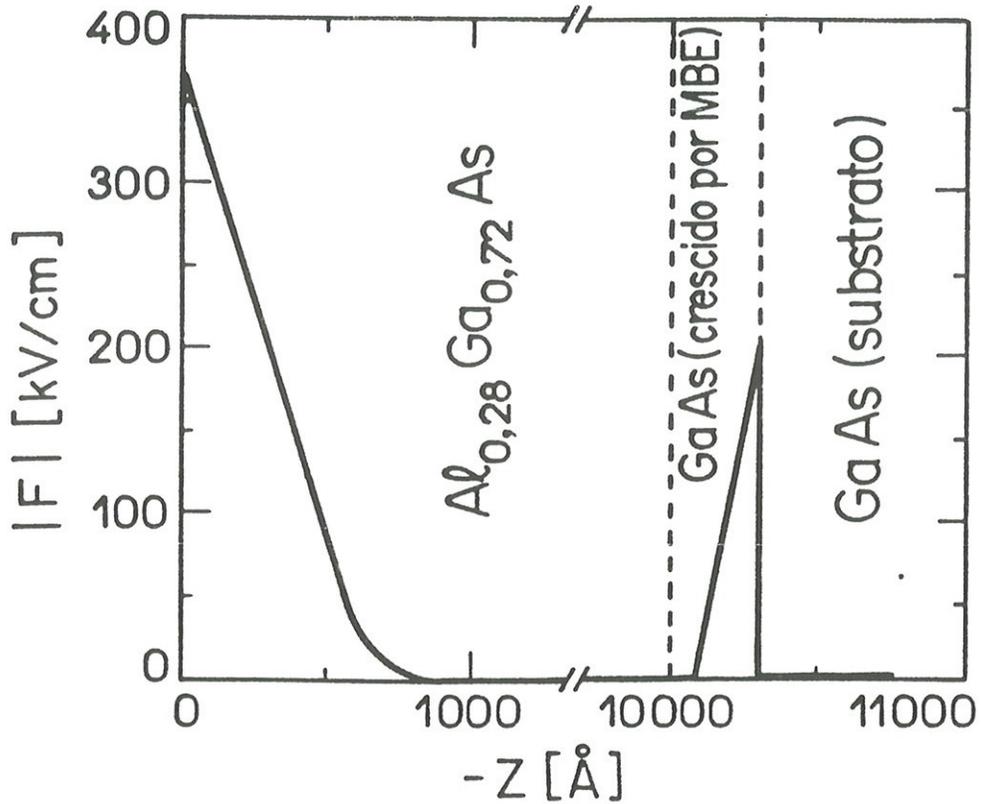


Figura 3.7. Perfil do campo elétrico no interior da heteroestrutura  $Al_{0,28}Ga_{0,72}As(1\mu m) / GaAs(0,03\mu m) / GaAs$  (substrato). O perfil do campo elétrico na região superficial foi obtido através da abordagem apresentada no Capítulo 2. O perfil na região interfacial foi calculado na aproximação de Schottky.

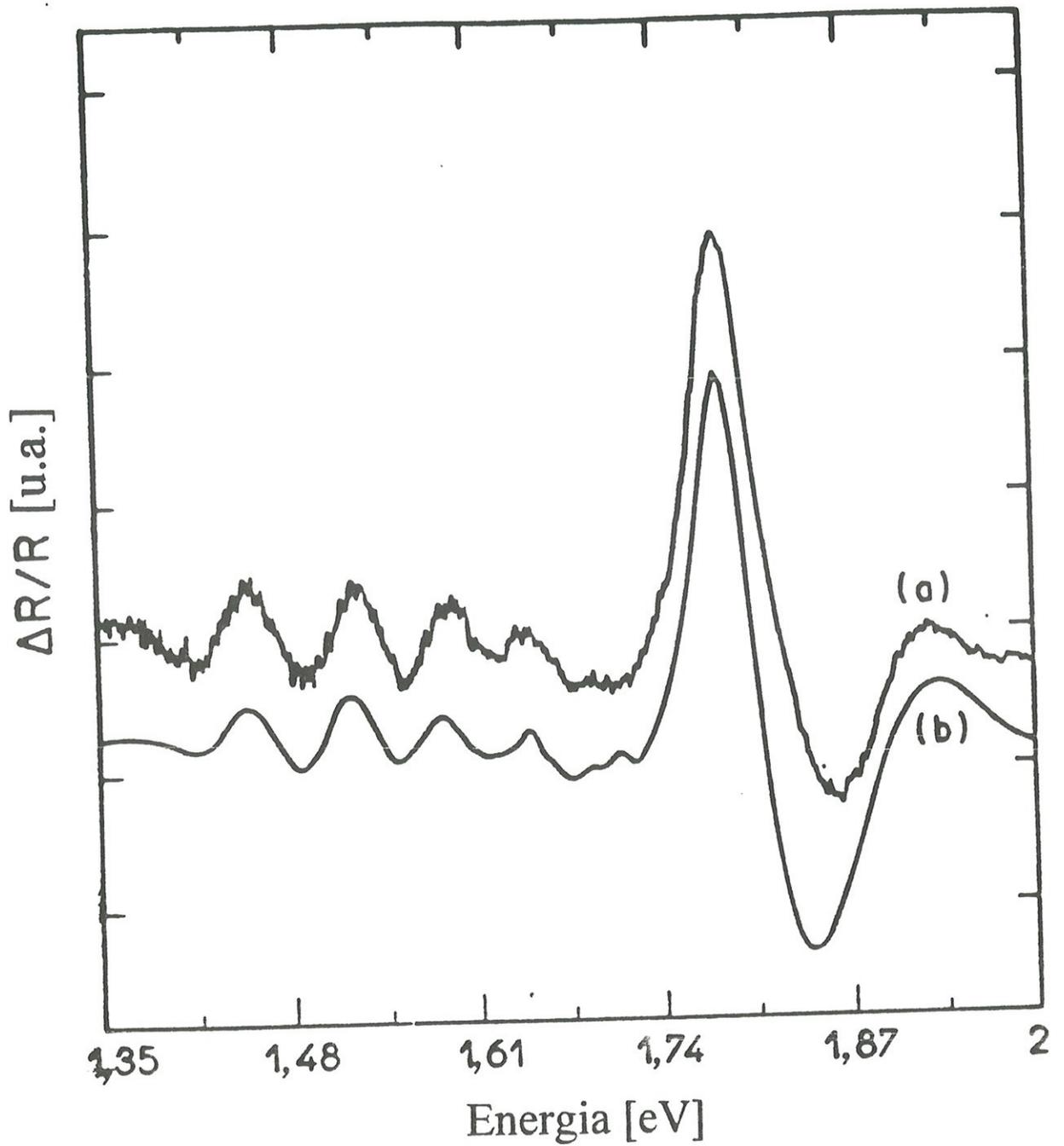


Figura 3.8. Espectros de fotorefletância experimental (a) e teórico (b) para a heteroestrutura  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}(1\mu\text{m}) / \text{GaAs}(0,03\mu\text{m}) / \text{GaAs}$  (substrato).

Nenhuma tentativa de reproduzir o espectro usando o perfil do campo elétrico na camada "buffer" de GaAs, decaindo em direção ao substrato, forneceu o comportamento similar ao apresentado na Figura 3.8. Para verificar a validade de nossa conclusão, uma outra amostra nas mesmas condições e com os mesmos parâmetros (temperatura de células, concentração de dopantes, etc.) foi crescida em nosso laboratório sobre o substrato tipo n, e investigada por meio de fotorefletância. As oscilações abaixo da faixa proibida da liga não foram observadas. Mas, se elas fossem realmente provenientes da interface  $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}/\text{GaAs}$ , como sugerem os autores em [46], elas deveriam ser observadas. Desta maneira, experimentalmente foi comprovada nossa conclusão teórica de que a origem das oscilações abaixo da faixa proibida da liga, apresentadas na Figura 3.8, é o campo elétrico proveniente da interface entre GaAs crescido por MBE e o substrato.

Temos que ressaltar a exatidão e a precisão de nosso método, que permitiu chegar a esta conclusão a partir do ponto de vista teórico, enquanto na literatura, até o momento, existem somente suposições sobre as origens das estruturas espectrais observadas nos espectros experimentais provenientes de heteroestruturas. A eficiência computacional do método nos permitiu executar várias simulações para podermos estimar a percentagem de modulação na região interfacial no interior da heteroestrutura. Por outro lado, este exemplo demonstra a utilidade do método também nas simulações tipo "on-line".

## 3.4. ESPECTROS DE FOTOREFLETÂNCIA PROVENIENTES DE POÇOS QUÂNTICOS

### 3.4.1. Discussão do problema

A maior razão de acreditar que os sinais de fotorefletância, no caso de poços quânticos são provenientes da modulação óptica do campo elétrico interno é o efeito de alteração dos estados eletrônicos por estes campos [151]. No caso de materiais tipo "bulk" a modulação está bem compreendida em termos do efeito Franz-Keldysh [52,53]. Porém, a forma de linha nos espectros de fotorefletância provenientes de poços quânticos é bastante diferente em relação àquela dos materiais tipo "bulk", demonstrando o carácter de primeira derivada ao invés de terceira [125,142,152]. Esta diferença é devida aos mecanismos diferentes de modulação no caso de poços quânticos [15].

Quando um campo elétrico, perpendicular à camada fina formando um poço quântico, é aplicado a um gás de portadores quase bidimensional, os portadores confinados não podem ser acelerados, já que a sua massa na direção do campo, formalmente falando, aproxima-se ao infinito [153]. Portanto, o efeito Franz-Keldysh não pode ter um papel importante no caso de poços quânticos. Como foi demonstrado na referência [153], neste caso, o efeito Stark, que altera a faixa proibida efetiva da camada formando o poço, é o mecanismo mais importante de modulação eletro-óptica no interior destas heteroestruturas. Este trabalho revelou os mecanismos físicos que regem os processos de absorção da luz nos poços quânticos não dopados.

Porém, a ausência de uma abordagem adequada dificultou o estudo do espectro de modulação proveniente dessas estruturas, devido ao fato que os efeitos interferenciais não foram levados em consideração [15,141,142,153]. Como veremos a seguir, estes efeitos podem causar mudanças drásticas na forma de linha, bem como na amplitude do sinal de fotorefletância. Nesta seção, vamos aplicar o método aqui desenvolvido ao cálculo do coeficiente de reflexão para simular a forma de linha dos espectros provenientes de heteroestruturas quase bidimensionais.

### 3.4.2. Estudo do espectro de fotorefletância em função da distância entre poço quântico e superfície da heteroestrutura

O poço quântico pode ser representado por uma camada de GaAs crescida entre duas camadas de liga  $\text{Al}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{As}$ . Resolvendo a equação de Schroedinger no poço de altura finita [15], foram calculadas as energias de transição,  $E_n$ , entre os níveis fundamentais de elétron e de buraco para os poços com espessura de 50 e 250Å, sendo  $E_n = 1,515\text{eV}$  e  $E_n = 1,432\text{eV}$ , respectivamente. De acordo com as referências [15,153], podemos escrever para a variação da função dielétrica introduzida pelo campo elétrico interno a seguinte expressão:

$$\Delta\varepsilon(\omega) = CF^2 \frac{\hbar\omega - E_n - i\Gamma}{(\hbar\omega - E_n)^2 + \Gamma^2} \quad (3.43)$$

onde  $F$  designa o valor do campo elétrico atuando perpendicularmente ao poço, e  $\Gamma$  é o parâmetro de alargamento. O coeficiente  $C$  depende das características do material e é determinado pelo elemento de matriz da transição entre os estados fundamentais de elétron e buraco. Porém, o fator  $CF^2$  pode assumir valores diferentes, os quais dependem do valor do campo elétrico que por sua vez depende da concentração de dopantes na estrutura. Portanto, com a finalidade de estudar a mudança na forma de linha do espectro, podemos assumir  $CF^2 = \Gamma/1000$ , o que fornece as amplitudes típicas do sinal de fotorefletância proveniente de poços quânticos. Para ressaltar a mudança de forma de detalhes espectrais provenientes do poço, nossas simulações não incluem o efeito Franz-Keldysh na liga.

Nas Figuras 3.9 e 3.10, para poços de largura de 50 e 250Å, respectivamente, são apresentados os resultados dos cálculos mostrando as modificações do espectro de fotorefletância com a distância entre a superfície e o poço quântico,  $d$ . Em ambos os casos, a distância é variada entre 500 e 10000Å. Comparando os espectros das Figuras 3.9 e 3.10 para  $d = 500, 1000, 2500\text{Å}$ , em ambos os casos pode ser notada a rotação do espectro devida à mudança do valor da fase óptica com afastamento do poço da superfície. O espectro é determinado pela forma funcional de primeira derivada [15,153]. Isto explica a semelhança entre os espectros para  $d = 500, 1000, 2500\text{Å}$  para larguras de poço diferentes. A única diferença visível é que estruturas espectrais similares tomam posições energéticas diferentes devido à diferença nas energias de transição  $E_n$ .

A rotação do espectro, mencionada acima, é um tipo de efeito interferencial que apenas faz o espectro girar em torno do eixo de energia. Porém, tal rotação é inomogênea, já que a cada valor da energia do fóton corresponde seu próprio comprimento de onda dentro do material, fazendo

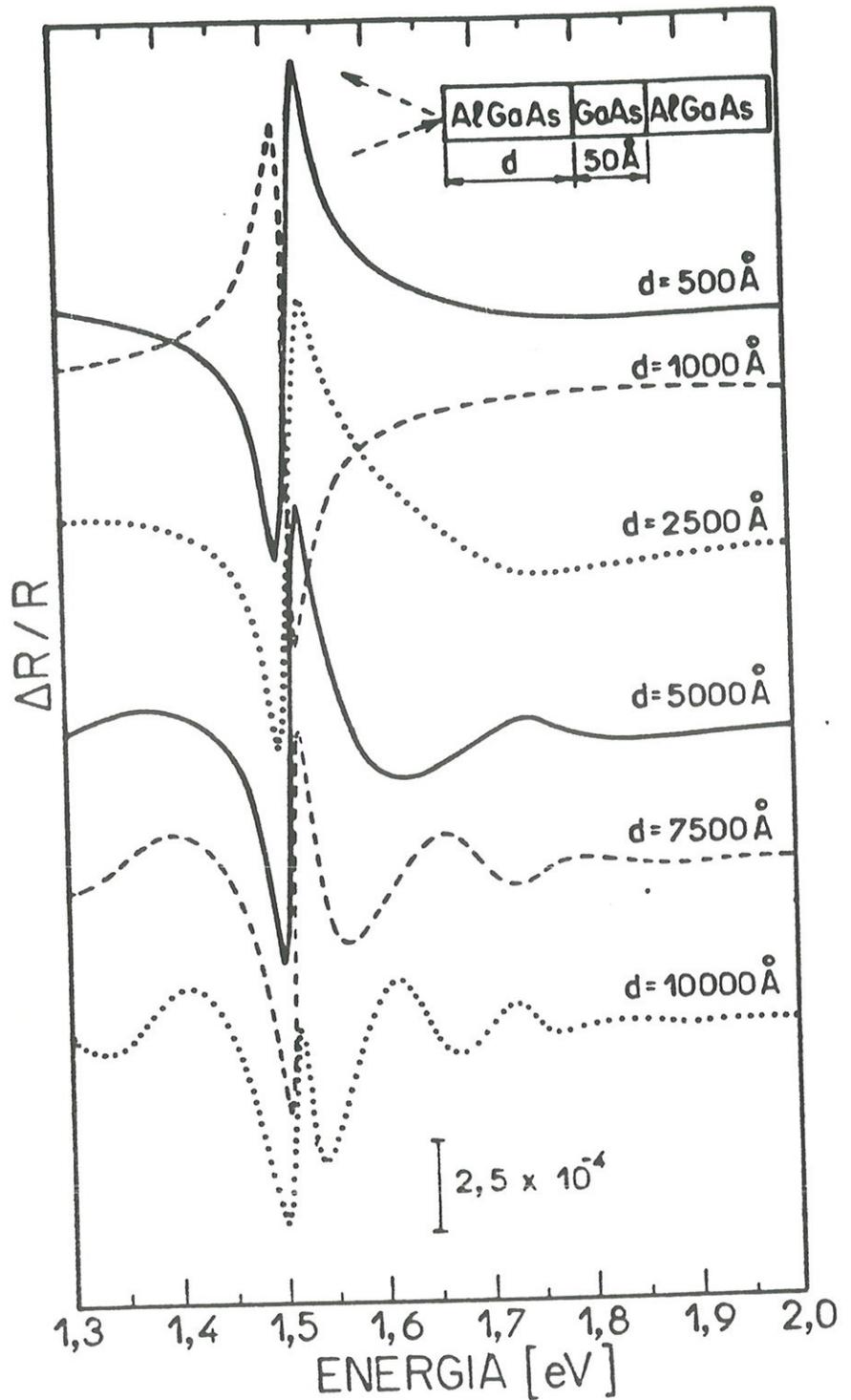


Figura 3.9. Espectros teóricos de fotorefletância para a heteroestrutura contendo um poço não dopado de GaAs com largura de 50Å no meio da liga de  $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$  para distâncias  $d$  diferentes entre a superfície e o poço. A resposta espectral tipo Franz-Keldysh da liga não é incluída.

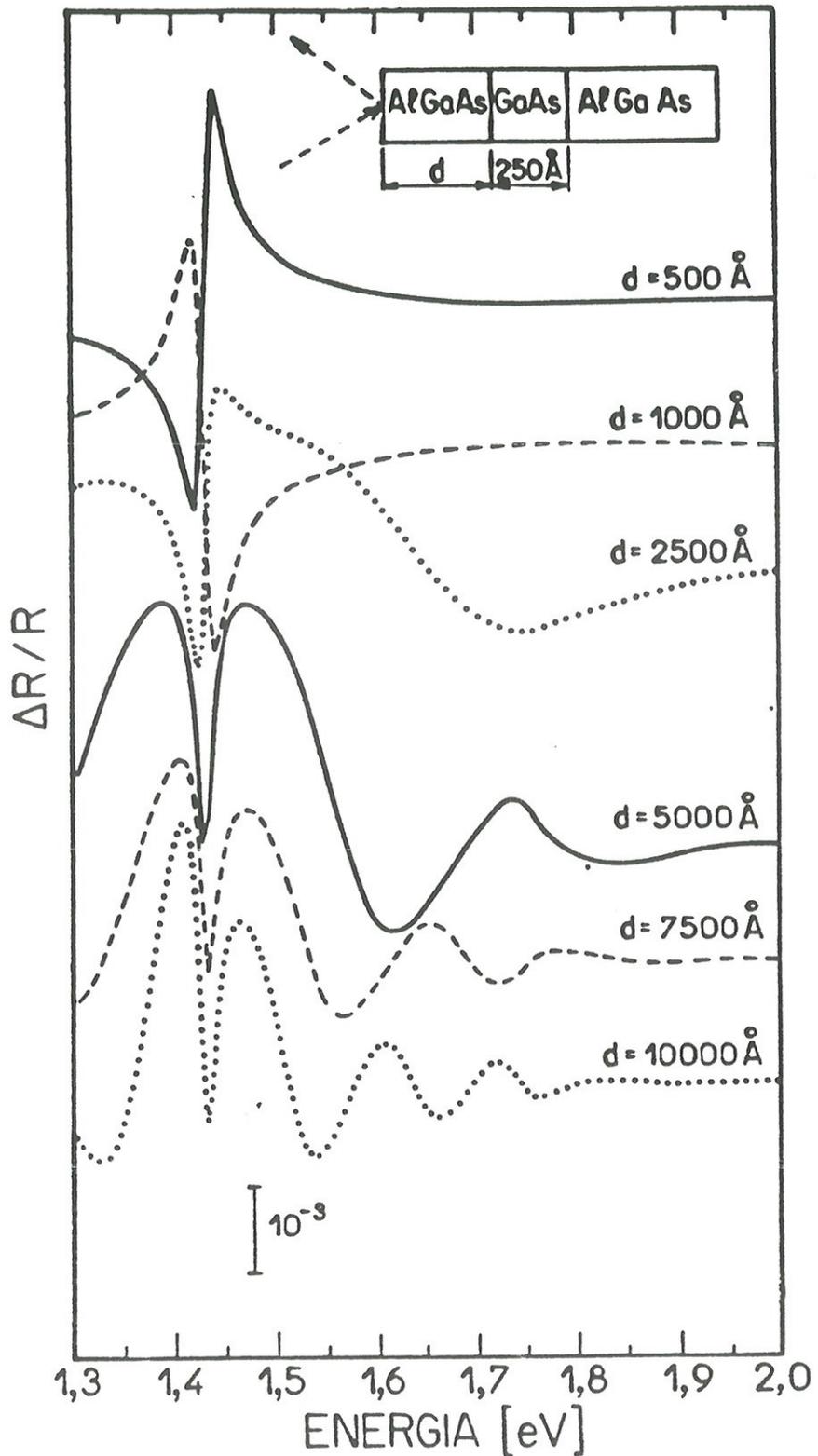


Figura 3.10. Espectros teóricos de fotorefletância para a heteroestrutura contendo um poço não dopado de GaAs com largura de 250Å no meio da liga de  $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$  para distâncias  $d$  diferentes entre a superfície e o poço. A resposta espectral tipo Franz-Keldysh da liga não é incluída.

com que a diferença de fase óptica varie ao longo do eixo de energia. Isto faz com que cada parte do espectro gire de um valor igual ao seu próprio ângulo, determinado por esta diferença de fase óptica. Como foi mencionado no parágrafo acima, para  $d \leq 2500\text{Å}$  a inomogeneidade da rotação é pouco pronunciada. Porém para  $d \geq 2500\text{Å}$ , este efeito resulta no comportamento qualitativamente diferente da forma de linha nos espectros obtidos de poços com larguras diferentes, mesmo no caso de distâncias iguais entre a superfície e o poço (vide as Figuras 3.9 e 3.10). Além disso, a forma de linha se difere muito da bem conhecida forma funcional de primeira derivada.

Outro tipo de efeito interferencial é a interferência da luz refletida pela superfície e pelas interfaces de poço. Este efeito resulta no aparecimento de oscilações tipo Fabry-Perrot [49] abaixo da faixa proibida da liga, as quais começam a ficar notáveis para  $d \geq 2500\text{Å}$ . Estas oscilações não estão relacionadas à natureza quântica da heteroestrutura em questão. Elas são provenientes da diferença de fase óptica entre ondas eletromagnéticas com frequências diferentes, refletidas pela superfície e pelas interfaces de poço. Esta diferença aumenta conforme aumenta a profundidade do poço em relação à superfície. Portanto, a separação energética entre os picos dessas oscilações diminui com o aumento da distância (vide as Figuras 3.9 e 3.10)

Nesta seção, demonstramos que o mesmo mecanismo físico, o efeito de Stark nos poços de mesma largura, pode resultar em formas espectrais diferentes devidas aos efeitos interferenciais da óptica tradicional [49]. Portanto, foi mostrada a importância da compreensão dos efeitos interferenciais no tratamento de heteroestruturas contendo poços quânticos, os quais podem e devem ser levados em consideração adequadamente na interpretação dos espectros de fotorefletância delas provenientes.

### 3.5 COMENTÁRIOS FINAIS

Finalizando este capítulo, seria importante destacar que o método apresentado aqui e aplicado a estruturas diversas não se restringe somente à fotorefletância e eletrorefletância, mas pode ser usado no caso de qualquer técnica de modulação. Os exemplos numéricos demonstraram a eficácia do método no caso de mecanismos de modulação diferentes, como efeito de Franz-Keldysh, efeito piezo-elétrico, e efeito de Stark. Os perfis do campo elétrico calculados de acordo com o método apresentado no Capítulo 2, e utilizados na investigação da forma de linha, forneceram, pela primeira vez, a possibilidade de cálculo a partir de primeiros princípios (e não de simulação) do espectro de fotorefletância.

Uma outra característica importante de nosso método é a capacidade de levar em conta tantas camadas de heteroestrutura quantas realmente existem nela. Várias abordagens anteriores estiveram restritas apenas à duas camadas devido ao uso de fórmulas simples da óptica clássica [46,154,155].

O fato de que nossa abordagem permite reduzir drasticamente o volume de operações computacionais, a torna muito útil em simulações de espectros de modulação tipo "on-line", ou seja, quando os espectros teóricos estão sendo simulados durante a experiência. Isto é de grande valor pois, comparando os espectros teórico e experimental, existe a possibilidade de alterar imediatamente as condições da experiência para extração dos parâmetros necessários.

Além do seu uso na espectroscopia de modulação, este método poderia ser útil para cálculo da refletividade absoluta (um exemplo de tal cálculo foi

apresentado nas páginas anteriores), o que é necessário na óptica de filmes finos e na criação de filtros ópticos. Destaca-se, também, um avanço conceitual, que este método fornece na compreensão física do problema e na interpretação teórica dos dados experimentais.

## CONCLUSÕES

Neste trabalho foram efetuados estudos de propriedades eletrônicas de super-redes de deltas e de heteroestruturas epitaxiais semicondutoras. A importância dos métodos pioneiros apresentados aqui está na capacidade de se prever teóricamente os efeitos dos diversos fatores sobre propriedades físicas de novos materiais semicondutores. Esta capacidade de previsão teórica é essencial no projeto de novas estruturas e dispositivos, bem como na interpretação de dados de caracterização experimental das amostras.

Como primeiro passo, foi feito um estudo sistemático da estrutura eletrônica de super-redes de GaAs com dopagem planar de Si. Estas estruturas semicondutoras vão muito além da simples possibilidade de aumentar o nível efetivo de dopagem do material. Para estas super-redes o espaçamento entre planos de dopagem e a concentração de dopantes foram variados, e os efeitos destas variações sobre os estados de elétrons e de buracos foram investigados através de cálculos autoconsistentes.

Foi criada uma nova abordagem para levar em conta a simetria de translação na super-rede. Trata-se da aplicação pioneira do método celular para o cálculo da estrutura eletrônica da super-rede em uma dimensão. Isto permitiu levar em conta no cálculo autoconsistente as espessuras finitas das minibandas eletrônicas, alterando a forma do potencial devido aos efeitos de periodicidade da super-rede, bem como levar em consideração o efeito da mudança na forma do potencial do poço sobre a dispersão e a posição energética destas minibandas.

Baseando-se nesta abordagem, foram feitos cálculos com a finalidade de estudar a mudança de regime de poços isolados para super-rede. Foram

investigadas as condições para as quais ocorre tal transformação do comportamento eletrônico de bi- para tri-dimensional. O comportamento de elétrons e de buracos na super-rede foi estudado em função do período da mesma e em função da concentração de doadores em cada poço delta. Os resultados dos nossos cálculos forneceram uma indicação bastante clara do confinamento de buracos entre os planos de dopagem. Uma atenção especial foi dedicada ao estudo de ocupações de sub-bandas eletrônicas.

Nossos resultados teóricos foram comparados com as medidas de magneto-transporte e apresentaram uma boa concordância, comprovando a validade da abordagem utilizada no cálculo. O conhecimento exato da estrutura de sub-bandas de elétrons e de buracos permitiu o cálculo da energia de corte no espectro de fotoluminescência de excitação, a qual foi comparada com os valores experimentais obtidos por meio desta técnica. A concordância entre os dados teóricos e experimentais permitiu um avanço na compreensão dos mecanismos físicos que determinam as propriedades eletrônicas de super-redes de GaAs com dopagem planar de Si.

Como segunda etapa do estudo de super-redes foi feita a investigação teórica pioneira da estrutura eletrônica do sistema tipo multi delta de Sb em Si. A importância deste estudo reside principalmente no fato de que não existia até o momento nenhum estudo teórico das propriedades eletrônicas deste tipo de super-rede, embora vários dados experimentais já se encontravam na literatura. Neste sentido, nossos resultados foram inéditos e pioneiros, abrindo a possibilidade de aplicação dos esforços teóricos, como por exemplo no cálculo da condutividade na direção perpendicular ao plano de dopagem, e servindo como um guia para os experimentais da área.

A abordagem teórica usada para estes cálculos foi a mesma que no caso de super-redes de deltas de Si em GaAs. Porém, um novo método

computacional foi desenvolvido para poder levar em conta a anisotropia da massa efetiva do elétron na banda de condução do Si. Dois tipos de estados eletrônicos, relacionados às massas efetivas transversal e longitudinal, foram levados em conta simultaneamente no cálculo das ocupações de sub-bandas correspondentes e na solução autoconsistente das equações de Schroedinger e de Poisson.

A estrutura eletrônica da super-rede de deltas de Sb em Si, também, foi investigada em função da concentração planar de dopantes e em função do período da super-rede. Durante esta investigação sistemática observou-se a transição do comportamento eletrônico de bi- para tridimensional com a diminuição do espaçamento entre os poços delta e com o aumento das concentrações de dopantes. As conclusões obtidas através deste estudo estão em concordância com dados experimentais disponíveis na literatura. Foram considerados também em nosso estudo os efeitos do acoplamento de multi-vaies relacionados ao fundo da banda de condução do Si, devido às flutuações do potencial produzidas pelos dopantes no plano delta. Estes efeitos afetam principalmente os estados eletrônicos fundamentais, ou mais localizados, devendo portanto influir nas propriedades ópticas do sistema, sem porém afetar significativamente suas propriedades de transporte.

O estudo comparativo da mudança de regime de poços isolados para super-rede em GaAs e silício com dopagem planar tipo n forneceu informação inédita sobre as diferenças do comportamento eletrônico nestes sistemas. Demonstrou-se que a transição de regime bi- para tridimensional no caso de múltiplos poços deltas tipo n em Si ocorre para concentrações maiores e para espaçamentos menores do que em GaAs.

Como passo seguinte foi realizado o estudo dos perfis de potencial eletrostático e de campo elétrico no interior de heteroestruturas. Foi

investigada a influência da concentração de dopantes e da espessura de camadas sobre os valores dos campos elétricos de superfície e interfacial. A modulação dos perfis do potencial e do campo por um feixe de luz de laser foi estudada com a finalidade de simulação posterior de espectros de fotorefletância.

Foi desenvolvida uma abordagem que permite calcular os perfis do potencial e do campo através de uma equação integral, a qual engloba a equação de Poisson (uma equação diferencial de segunda ordem) do problema e duas condições de contorno. O potencial eletrostático aparece no lado esquerdo e no lado direito desta equação integral, a qual portanto foi resolvida de maneira autoconsistente. No método proposto não é necessário assumirmos a ionização total de dopantes, bem como a não-degenerescência do material das camadas da heteroestrutura.

Os exemplos numéricos demonstram a aplicação deste método para alguns tipos de estruturas semicondutoras. Os resultados dos cálculos estão de acordo com aqueles obtidos usando aproximação Schottky. O método apresentado neste trabalho é um método geral e pode ser usado no cálculo de qualquer tipo de heteroestrutura. Os perfis do potencial eletrostático e do campo elétrico interno podem ser usados, por exemplo, para avaliação da influência do campo elétrico sobre a estrutura eletrônica de poços delta, para cálculo de espectros de fotorefletância, etc.

Acreditamos que este método seja importante para futuras investigações de novos materiais semicondutores, possibilitando deste modo um entendimento mais completo do comportamento eletrônico e de propriedades elétrico-ópticas de super-redes de deltas e heteroestruturas epitaxiais semicondutoras.

No que se refere às propriedades eletro-ópticas, é apresentada neste trabalho a teoria da fotorefletância em heteroestruturas compostas por camadas contendo inhomogeneidades na função dielétrica. Conhecendo os perfis do campo elétrico interno, pela primeira vez é fornecida a oportunidade de se realizar cálculos de espectros de modulação a partir de primeiros princípios. Os exemplos numéricos, utilizando os perfis do campo elétrico obtidos de acordo com nossa abordagem, ilustram o procedimento completo do cálculo do espectro de fotorefletância.

Dentro do formalismo da teoria da fotorefletância apresentada neste trabalho, um dos aspectos mais importantes é a proposta de um novo método para o cálculo do coeficiente de reflexão de heteroestruturas. Este método se baseia numa abordagem em que cada camada de heteroestrutura é descrita por uma só matriz de transferência, enquanto esta matriz inclui inhomogeneidades dessa camada de um modo integral. Em comparação com métodos anteriores, o aqui desenvolvido representa um avanço conceitual no entendimento do problema, e fornece uma maior precisão e eficiência, reduzindo o número de operações computacionais. É importante observar que os métodos anteriores estão contidos no formalismo aqui apresentado como casos limites.

Com este método foram estudados os espectros de fotorefletância provenientes do semi-espço inhomogêneo. Os resultados demonstraram-se idênticos àqueles obtidos através da abordagem bem conhecida desenvolvida por Aspnes e Frova. O espectro calculado teóricamente para a heteroestrutura crescida no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores, está em uma excelente concordância com o experimental, demonstrando a consistência e a capacidade da teoria desenvolvida. Para o cálculo dos espectros provenientes destas estruturas foi usado o formalismo do efeito Franz-Keldysh, que

mostrou-se adequado na descrição da modificação da função dielétrica pelo campo elétrico nas heteroestruturas com camadas tipo "bulk". Pela primeira vez, o efeito piezo-elétrico é usado para descrever espectros de fotorefletância provenientes de heteroestruturas contendo região interfacial não modulada. A boa concordância obtida entre dados experimentais e teóricos demonstra a compreensão física da natureza da forma de linha do espectro de fotorefletância.

Simulações computacionais de espectros de fotorefletância provenientes de poços quânticos foram feitas objetivando a demonstração da aplicação do nosso método no caso em que a modulação da função dielétrica é descrita pelo efeito Stark. Foi feito um estudo sistemático da dependência da forma de linha do espectro em função da largura do poço e em função da distância entre o poço e a superfície da amostra. Os resultados destes cálculos ilustram a importância de efeitos interferenciais na interpretação de espectros de fotorefletância provenientes de heteroestruturas semicondutoras.

Diante destas conclusões, consideramos alcançado o objetivo a que nos propuzemos neste trabalho, tendo elaborado três novas abordagens e demonstrado em detalhes as aplicações dos métodos desenvolvidos na investigação da estrutura eletrônica e de propriedades eletro-ópticas de super-redes de deltas e heteroestruturas epitaxiais semicondutoras. Os resultados das simulações computacionais mostraram-se relevantes tanto na compreensão da física associada à estrutura estudada, como na elucidação do funcionamento dos métodos quando aplicados a dispositivos diferentes. Esperamos que o conteúdo deste trabalho seja de importância fundamental na caracterização atual de novos materiais semicondutores e nas melhorias dos dispositivos crescidos pela técnica de MBE.

## APÊNDICE A

# MODELO TEÓRICO FENOMENOLÓGICO PARA TRANSIÇÕES ÓPTICAS NOS ESPECTROS DE FOTOREFLETÂNCIA PROVENIENTES DAS AMOSTRAS COM DOPAGEM TIPO DELTA

Como já foi dito neste trabalho, a fotorefletância é uma técnica de espectroscopia bastante poderosa no estudo de propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras, tais como super-redes, poços quânticos e estruturas contendo dopagem tipo delta [10,16,17,19,41,156,157]. Os mecanismos de modulação e as formas de linha observados nos espectros obtidos em medidas de fotorefletância de poços quânticos isolados, são hoje compreendidos razoavelmente bem. Para estes sistemas, os sinais de fotorefletância são devidos ao deslocamento de níveis eletrônicos (efeito Stark), o que resulta na forma de linha do tipo primeira derivada [16,41]. O efeito Franz-Keldysh começa a ficar importante para super-redes com uma dispersão significativa de sub-bandas. Espectros do tipo terceira derivada são esperados nestes casos [16,41]. Para sistemas com dopagem delta, os espectros de fotorefletância, bem como os mecanismos físicos que determinam a forma destes espectros, ainda constituem uma questão bastante controversa [10,17,19,156,157].

Vários autores tentaram interpretar as estruturas observadas nos espectros de fotorefletância provenientes das amostras com dopagem tipo

delta baseando-se na análise de detalhes espectrais em termos do gás bidimensional de elétrons (buracos) para dopagem tipo n (tipo p). Daqui em diante, assumiremos dopagem tipo n. A análise para tipo p é análoga. Os estados confinados de elétrons, na direção perpendicular ao plano de dopagem, foram considerados como originários dos detalhes espectrais oriundos da região do plano de dopantes. Uma maneira usual de descrever a natureza do espectro de fotorefletância é a seguinte. Sob ação do campo elétrico, os estados confinados de elétrons são analisados em termos do efeito Stark, e os estados não confinados de buracos em termos do efeito Franz-Keldysh modificado de uma partícula [15,17]. O deslocamento energético de níveis eletrônicos descrito pelo efeito Stark, é interpretado como a causa de mudanças nas forças de oscilador das transições ópticas. O efeito Franz-Keldysh modificado, de uma partícula, é adotado já que é assumido que a luz incidente gera buracos nos estados do contínuo da banda de valência, enquanto os elétrons são gerados nos estados de sub-bandas bidimensionais da banda de condução. Mesmo que os detalhes observados nos espectros de fotorefletância possam estar relacionados ao gás bidimensional de elétrons, esta suposição não possui uma confirmação experimental satisfatória, e a explicação teórica dos detalhes espectrais em termos de gás bidimensional está muito longe de ser completa.

Os dados recentes de fotorefletância aplicada à estruturas com dopagem planar foram interpretados como oscilações Franz-Keldysh, oriundas do campo elétrico entre a camada de dopagem planar e a superfície da amostra [19,156,157]. De outro lado, detalhes oscilatórios similares foram preditos teoricamente assumindo o efeito de renormalização de bandas acima do nível de Fermi, e considerando cada período no espectro de fotorefletância como correspondente a um estado eletrônico quantizado no gás bidimensional

de elétrons [17]. A semelhança entre a estrutura eletrônica no poço delta e aquela de uma heterojunção causou a busca de características similares em ambos sistemas [10,17,19]. Considerando um mecanismo diferente, parecido mas não idêntico ao efeito comum Franz-Keldysh, os detalhes espectrais provenientes da região de dopagem planar foram preditos envolvendo as transições para os níveis eletrônicos abaixo e acima do nível de Fermi [11]. Porém, as condições experimentais apropriadas, como por exemplo uma maior razão sinal/ruído ( $>10^5$ ) devem ser atingidas para possibilitar a confirmação dessa teoria.

As estruturas com dopagem delta foram investigadas, recentemente, pela fotorefletância diferencial, a qual permite eliminar os efeitos devidos ao campo elétrico da superfície através do uso de dois lasers com comprimentos de onda diferentes [14]. Entretanto, a interpretação do espectro de fotorefletância diferencial permanece bastante obscura, já que não era exibida nenhuma evidência direta das contribuições de elétrons do gás bidimensional na forma de linha do espectro.

Neste Apêndice nós apresentamos uma nova abordagem para calcular e interpretar espectros de fotorefletância provenientes de sistemas com dopagem delta. Contrariamente aos trabalhos anteriores, utilizamos o modelo que se baseia somente no efeito Franz-Keldysh comum de duas partículas [42,158] (e não de uma partícula), e levamos em conta variações do campo elétrico e da faixa proibida efetiva na região do poço delta, devidas às variações espaciais da densidade eletrônica. De acordo com nosso conhecimento da literatura, a inomogeneidade espacial do campo elétrico, bem como a variação da faixa proibida efetiva na região do delta nunca foram levados em consideração para explicar formas de linha de fotorefletância.

Nós assumimos que praticamente todos os estados eletrônicos abaixo do nível de Fermi estão completamente ocupados, mesmo à temperatura ambiente, já que o nível de Fermi está bem acima do fundo da banda de condução no plano de dopagem. Os valores típicos da energia de Fermi para concentrações moderadas de dopantes variam entre 150 e 250 meV, como foi obtido dos cálculos autoconsistentes, enquanto  $kT = 25$  meV à temperatura ambiente [10,44]. Portanto, aproximando a distribuição de Fermi para elétrons pela função de Heaviside, podemos dizer que os elétrons fotoexcitados não devem apresentar características bidimensionais. Entretanto, os fótons causam transições eletrônicas dos estados tridimensionais do contínuo da banda de valência para os estados quase tridimensionais da banda de condução. Consideramos o elétron acima do nível de Fermi na região do poço delta como praticamente livre (não confinado), levando em conta que estes estados eletrônicos estão estendidos a uma distância maior que 500Å no caso de dopagem delta de Si em GaAs [10,44]. Isto corresponde ao comprimento de coerência de um elétron livre da banda de condução ( $\sim 1000\text{Å}$ ) [47,54]. Portanto, podemos tratar o problema de transições ópticas na região de dopagem delta em termos do caso mais simples do efeito Franz-Keldysh de duas partículas.

A Figura A.1 mostra esquematicamente, em um caso típico de dopagem planar de Si em GaAs, os perfis das bandas de valência e de condução na região delta e os estados eletrônicos correspondentes, juntamente com a curva de dependência da faixa efetiva proibida  $E_g$  com  $z$ , coordenada na direção perpendicular ao plano de dopagem. Aqui é assumido que são possíveis somente as transições eletrônicas para os estados acima do nível de Fermi. Cabe notar que mesmo para os estados eletrônicos abaixo do nível de Fermi, cujas energias ( $E_i$ ) são próximas à energia de Fermi ( $E_F - E_i \sim$

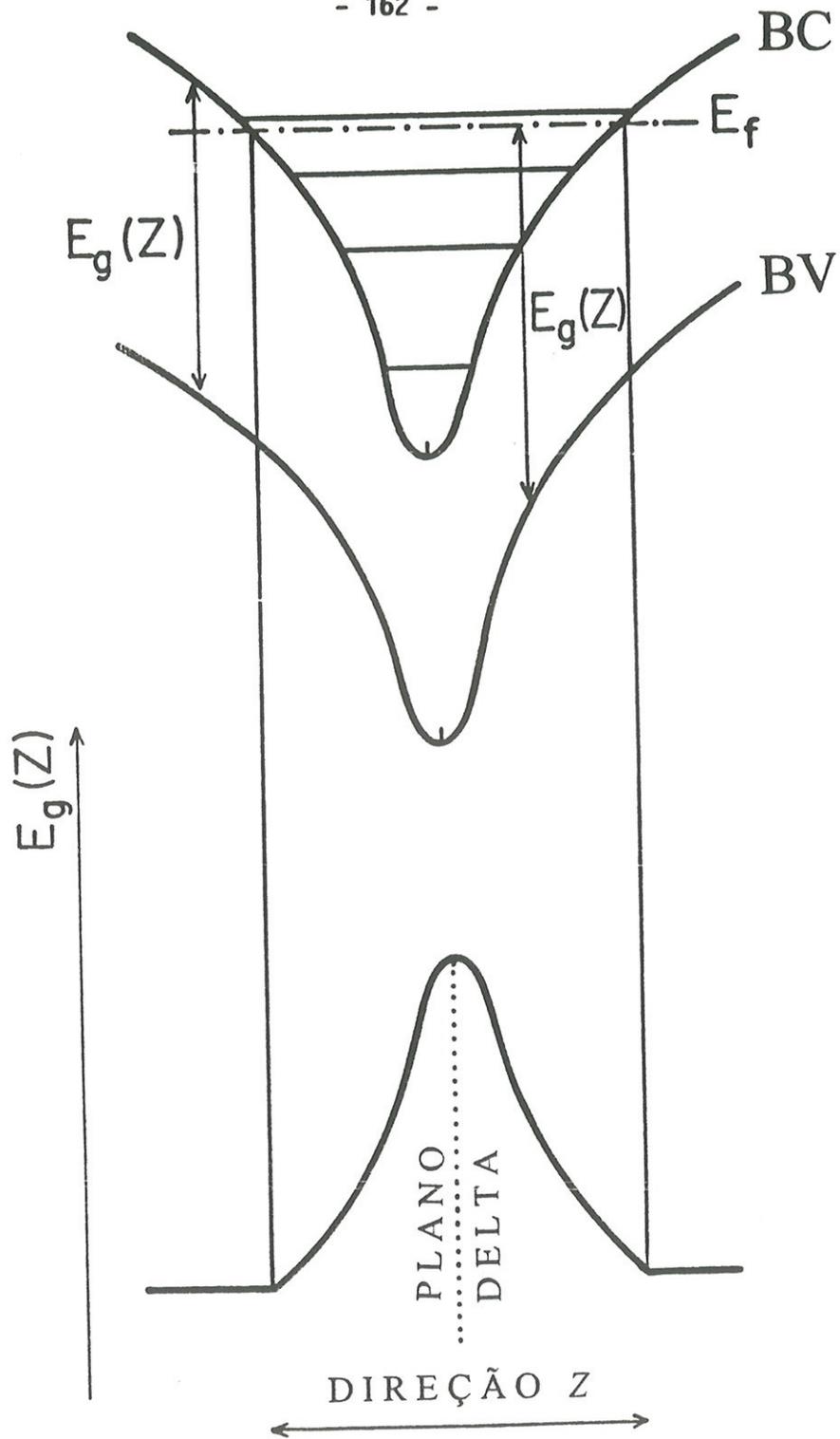


Figura A.1. Diagrama esquemático de bandas para GaAs com dopagem planar tipo n (acima) e o comportamento correspondente da faixa proibida efetiva  $E_g$  (abaixo).  $E_f$  corresponde ao nível de Fermi, e BC e BV indicam as bordas das bandas de condução e de valência, respectivamente.

$kT$ ), a função de onda do elétron pode ser considerada como delocalizada. Queremos ainda ressaltar que, a estrutura discreta de estados eletrônicos abaixo do nível de Fermi na região do delta, obtida de cálculos autoconsistentes na aproximação de um elétron, não representa o conjunto de estados finais envolvidos nas transições eletrônicas observadas nos espectros de fotorefletância.

Baseamos nossos cálculos no resultado bem conhecido para a perturbação efetiva na função dielétrica  $\langle \Delta \epsilon \rangle$  na presença de perturbações não-uniformes  $\Delta \epsilon(z)$ , derivado por Aspnes e Frova [130]:

$$\langle \Delta \epsilon \rangle = -2iK \exp(2iKz_s) \int_{-\infty}^{z_s} \Delta \epsilon(z) \exp(-2iKz) dz \quad (\text{A.1})$$

onde  $z_s$  é a coordenada da superfície,  $K$  é a constante de propagação, e o intervalo de integração inclui a região delta.

Pela primeira vez na literatura aplicamos a equação (A.1) no caso em que perturbações não-uniformes na função dielétrica  $\Delta \epsilon(z)$  são devidas não somente à inhomogeneidade espacial do campo elétrico ( $F(z)$ ), mas também às variações espaciais da faixa proibida efetiva do material ( $E_g(z) = \hbar \omega_g(z)$ ). Isto é

$$\Delta \epsilon(z) = \Delta \epsilon(F(z), \omega_g(z)). \quad (\text{A.2})$$

Esta expressão satisfaz a todas suposições feitas na referência [130].

Nossa abordagem assume que, em qualquer ponto na região delta, a perturbação  $\Delta \epsilon(z)$  é determinada pelo formalismo do efeito Franz-Keldysh

[42,54], usando os valores locais correspondentes do campo elétrico e da faixa proibida efetiva. Nós modificamos a expressão para  $\Delta\varepsilon$ , derivada por Aspnes [42] para as vizinhanças do ponto crítico tridimensional  $M_0$ , levando em conta as variações espaciais destes parâmetros:

$$\Delta\varepsilon(F(z),\omega_g(z)) = C(\pi\Theta^{1/2}/\omega^2) [(Ai'(\eta)Bi'(\eta) - \eta Ai(\eta)Bi(\eta)) + i(Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta)) + \eta^{1/2}] \quad (\text{A.3})$$

onde

$$\eta = (\omega_g(z) - \omega + i\Gamma)/\Theta \quad \text{e} \quad \Theta = (e^2 F^2(z)/2m_{cv}^* \hbar)^{1/3}. \quad (\text{A.4})$$

Aqui  $Ai$  e  $Bi$  são as funções de Airy regular e irregular, respectivamente,  $C$  é um coeficiente de normalização,  $\omega$  é a frequência da luz incidente,  $\Gamma$  é o parâmetro de alargamento, e  $m_{cv}^*$  é a massa efetiva reduzida.

A perturbação efetiva na função dielétrica  $\langle\Delta\varepsilon\rangle$  é relacionada diretamente à forma do espectro de fotorefletância através da seguinte expressão:

$$\Delta R/R = \alpha\langle\Delta\varepsilon_1\rangle + \beta\langle\Delta\varepsilon_2\rangle \quad (\text{A.5})$$

onde  $\langle\Delta\varepsilon_1\rangle$  e  $\langle\Delta\varepsilon_2\rangle$  são as perturbações efetivas nas partes real e imaginária da função dielétrica, respectivamente, e  $\alpha$  e  $\beta$  são os coeficientes de Seraphin [130,150]. Para GaAs,  $\beta \ll \alpha$  na vizinhança do ponto crítico  $M_0$  ( $\hbar\omega_g = 1,42\text{eV}$  para  $T = 300\text{K}$ ). Portanto, o segundo termo na expressão (A.5) pode ser desprezado [150].

O espectro de fotorefletância diferencial calculado para a estrutura contendo a dopagem tipo delta é apresentado na Figura A.2. Nas simulações

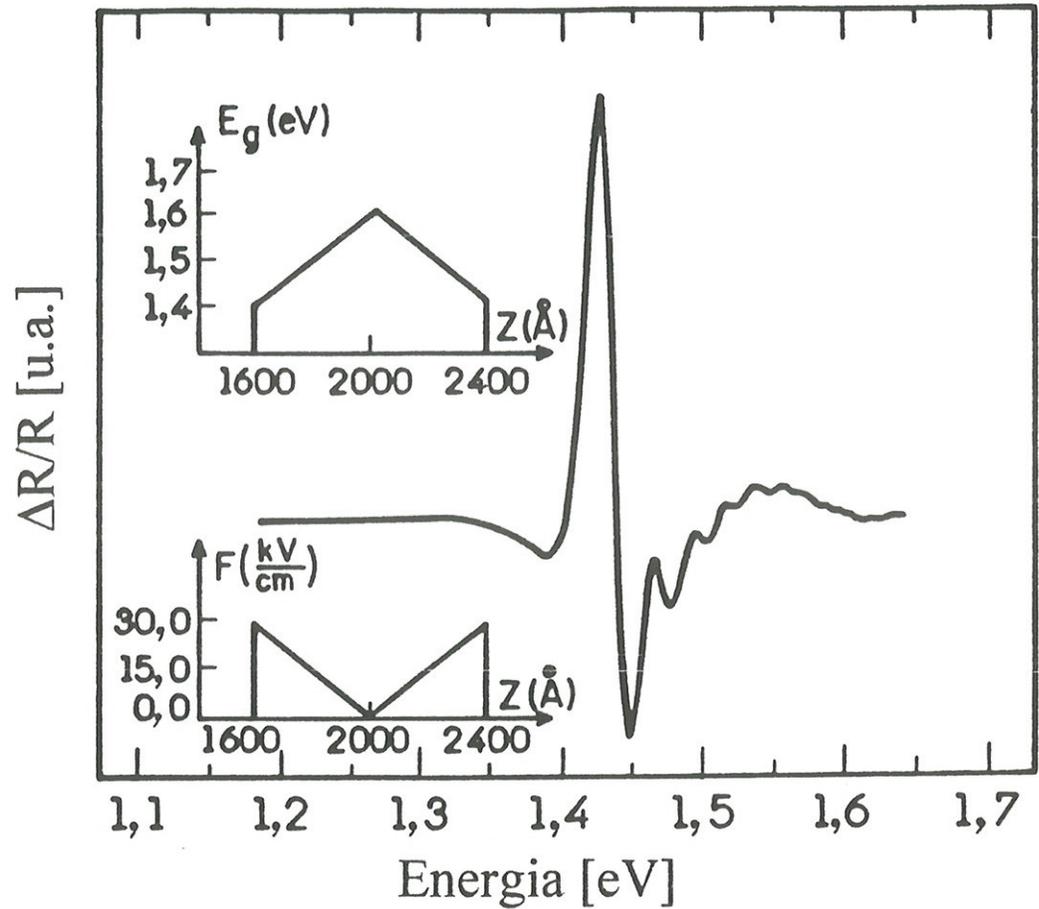


Figura A.2. Espectro de fotorefletância diferencial calculado para GaAs com dopagem planar tipo n. São mostradas também as dependências da faixa proibida efetiva,  $E_g$ , e do valor absoluto do campo elétrico,  $F$ , em função de  $z$  que foram usadas para as simulações.  $\Gamma = 0,01\text{eV}$ .

computacionais foi usado o valor da faixa proibida do GaAs tipo "bulk"  $E_g = 1,42\text{eV}$ , correspondente à temperatura ambiente. Os perfis do campo elétrico e da faixa proibida efetiva, também apresentados na Figura A.2, foram assumidos linearmente dependentes de  $z$ , por razões de simplicidade dos cálculos. Para o valor máximo do campo  $F$  na região delta, nós escolhemos o valor médio do campo elétrico no poço obtido nos cálculos autoconsistentes [10,44], e não o valor máximo absoluto, já que este último corresponde somente à uma região espacial muito estreita e, portanto, não contribuirá significativamente na forma de linha do espectro de fotorefletância (vide a equação A.1). Negligenciamos os efeitos devidos ao campo elétrico da superfície.

Ainda que a estrutura vista na Figura A.2 não apresente o comportamento usual das oscilações Franz-Keldysh, esta curva é oriunda da somatória (dada pela equação A.1) das oscilações canônicas Franz-Keldysh, as quais são deslocadas, uma em relação à outra, ao longo do eixo de energia. Este deslocamento é devido à variação da faixa proibida efetiva com  $z$ . Cada oscilação Franz-Keldysh é determinada pelo valor local do campo elétrico.

Na Figura A.3 é mostrado o espectro experimental de fotorefletância diferencial, obtido por Sydor et al, proveniente da amostra de GaAs com dopagem delta de Si [14]. A boa concordância qualitativa observada entre a curva teórica da Figura A.2 e entre a forma de linha experimental da Figura A.3, para energias acima da faixa proibida do GaAs ( $1,42\text{eV}$ ), leva à conclusão que o espectro proveniente da estrutura com a dopagem planar pode ser explicado em termos do efeito Franz-Keldysh de duas partículas, considerando as variações espaciais do campo elétrico e da faixa proibida efetiva dentro da região do delta. Isto contradiz a idéia de que as oscilações de período curto próximas à energia da faixa proibida do material tipo "bulk"

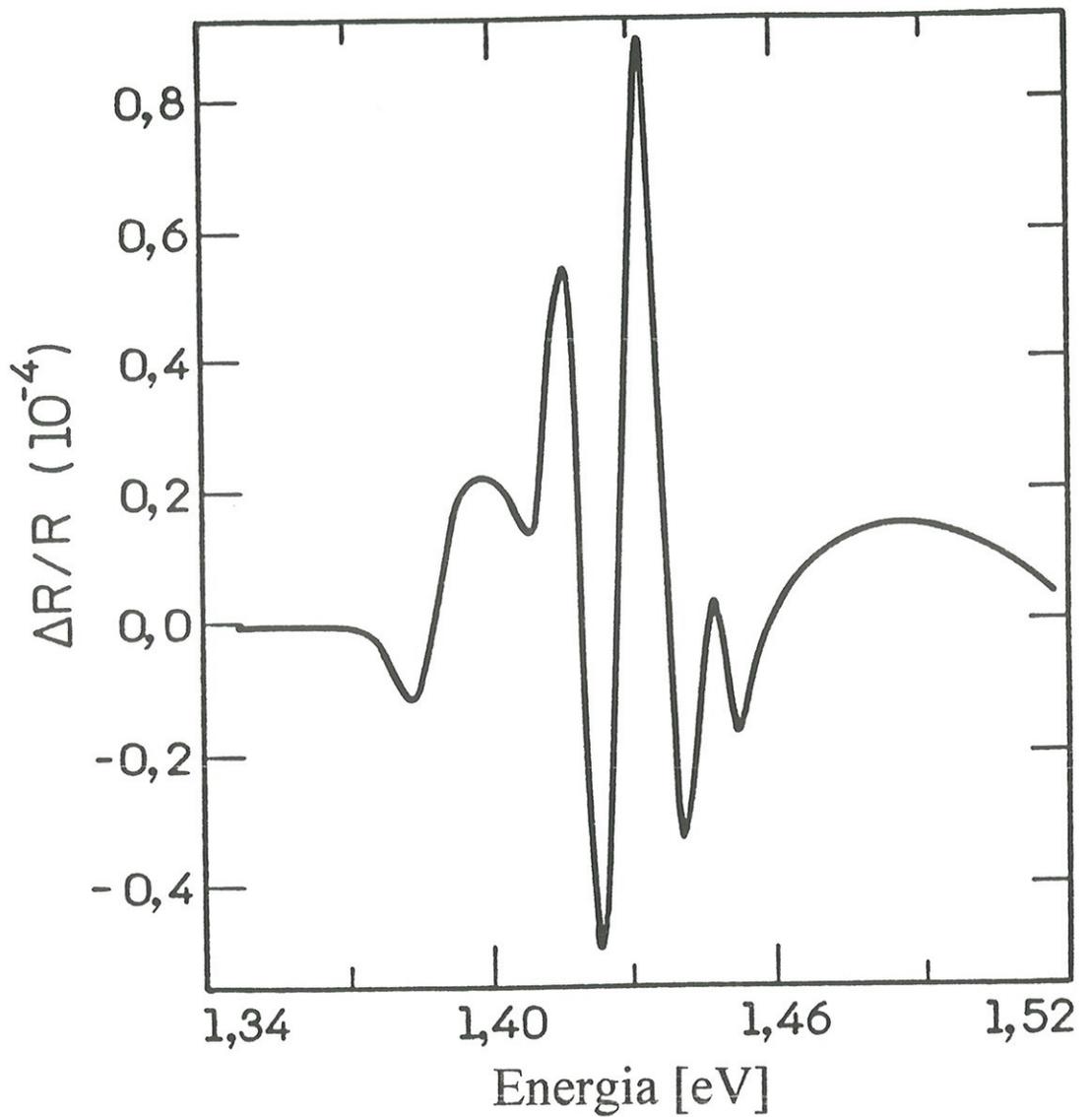


Figura A.3. Espectro de fotorefletância diferencial observado experimentalmente no caso de GaAs com dopagem planar de Si (conforme referência [14]).

( $\sim 1,42\text{eV}$ ) são oriundas dos níveis eletrônicos do gás bidimensional [14]. A estrutura larga vista para energias mais altas no espectro da Figura A.3 foi atribuída na referência [14] aos campos elétricos altos ( $>10^5\text{kV/cm}$ ). No modelo presente esta estrutura é relacionada diretamente ao aumento da faixa proibida efetiva que ocorre simultaneamente com a diminuição do campo elétrico ao aproximarmos ao plano delta. Além disso, a estrutura vista abaixo da faixa proibida do GaAs na Figura A.3 não provém da região delta, já que são esperadas somente transições eletrônicas para os estados acima do nível de Fermi. Podemos atribuir esta estrutura às reflexões provenientes da interface entre o semiconductor GaAs crescido pela técnica de MBE ("buffer") e o substrato de GaAs semi-isolante.

Mesmo que não tenhamos levado em consideração a dependência do parâmetro de alargamento  $\Gamma$  com  $z$ , devida às colisões eletrônicas causadas pela mudança da direção do campo elétrico no plano delta, a inclusão de tal dependência vai suavizar a estrutura larga no espectro da Figura A.2. Neste caso, esperamos uma concordância melhor entre a curva teórica e os dados experimentais.

Concluindo, podemos dizer que, foi demonstrado que a forma de linha do espectro de fotorefletância proveniente da amostra com dopagem planar pode ser calculada em termos do efeito Franz-Keldysh de duas partículas, levando-se em consideração as variações espaciais do campo elétrico e da faixa proibida efetiva na região do delta. O espectro experimental apresentado na Figura A.3 não está relacionado diretamente ao gás bidimensional de elétrons. Demonstramos que o sinal de fotorefletância pode ser atribuído às transições envolvendo os estados tridimensionais do contínuo da banda de valência e os do contínuo da banda de condução acima do nível de Fermi. O mesmo comportamento da forma de linha, apresentado na Figura

A.2, é esperado também no caso de interfaces entre um material não degenerado e o mesmo degenerado (dopado fortemente). Realmente, os dados experimentais obtidos de tais estruturas [14,144], comprovam esta conclusão. Já que o nível de Fermi fica acima do fundo da banda de condução, o aumento da faixa proibida efetiva deve se pronunciar ao cruzarmos a interface [134,159].

## APÊNDICE B

### DESDOBRAMENTO DOS NÍVEIS DE ENERGIA DEVIDO AO ACOPLAMENTO DE MULTI-VALES RELACIONADOS AO MÍNIMO DA BANDA DE CONDUÇÃO DO *Si* CAUSADO PELA FLUTUAÇÃO DO POTENCIAL NO PLANO DELTA PARA SUPER-REDES DE DELTAS TIPO *n* EM *Si*

Para calcular o desdobramento dos níveis de energia usaremos a equação para as funções envelope na sua forma geral, dada pela equação (1.23) do Capítulo 1. Esta equação pode ser simplificada usando a vantagem do fato de que as funções envelope  $F_n^j(\mathbf{k} - \mathbf{k}^j)$ , em ordem zero no potencial da perturbação  $\Delta V(\mathbf{x})$ , são essencialmente diferentes de zero somente para os valores de  $\mathbf{k}$  na vizinhança do centro do vale  $\mathbf{k}^j$ . Isto permite substituir o termo  $\langle \mathbf{k} | \Delta V | \mathbf{k}' \rangle$  da equação (1.23) pelo termo  $\langle \mathbf{k}^j | \Delta V | \mathbf{k}^{j'} \rangle$ , o qual não depende de  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{k}'$ . Assim, reescrevendo o último no espaço real, o termo do acoplamento fica dado por:

$$\Omega \delta(\mathbf{x}) \sum_{j'} \langle \mathbf{k}^j | \Delta V | \mathbf{k}^{j'} \rangle F_n^{j'}(\mathbf{x}) , \quad (\text{B.1})$$

onde  $\Omega$  designa o volume do cubo, em relação ao qual as ondas planas na representação de Fourier estão normalizadas. A forma da matriz de

acoplamento  $\langle \mathbf{k}^j | \Delta V | \mathbf{k}^{j'} \rangle$  é determinada pela simetria do sistema multi-delta. Esta última é dada pelo grupo pontual  $D_{2d}$ . Levando este fato em consideração, e usando a primeira ordem da teoria de perturbações, podemos obter o desdobramento do nível longitudinal bidegenerado  $E_{nl}$  em dois níveis de energia, os quais são obtidos pela diagonalização da matriz

$$\begin{pmatrix} 0 & a_n \\ a_n & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

com

$$a_n = \Omega \langle \mathbf{k}^z | \Delta V | \mathbf{k}^{-z} \rangle \left| F_n^l(0) \right|^2 . \quad (\text{B.3})$$

Os dois auto-valores  $E_{nl}^{1/2}$  provenientes deste procedimento e oriundos do nível  $E_{nl}$  podem ser expressos como:

$$E_{nl}^{1/2} = E_{nl} \pm |a_n| , \quad (\text{B.4})$$

Para um nível transversal  $E_{nt}$  quadridegenerado, a matriz de acoplamento fica dada por:

$$\begin{pmatrix} 0 & b_n & c_n & c_n \\ b_n & 0 & c_n & c_n \\ c_n & c_n & 0 & b_n \\ c_n & c_n & b_n & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

onde  $b_n$  e  $c_n$  são definidos da seguinte maneira:

$$b_n = \Omega \langle \mathbf{k}^x | \Delta V | \mathbf{k}^{-x} \rangle \left| F_n^t(0) \right|^2 . \quad (\text{B.6})$$

$$c_n = \Omega \langle \mathbf{k}^y | \Delta V | \mathbf{k}^{-y} \rangle \left| F_n^t(0) \right|^2 . \quad (\text{B.7})$$

A matriz de acoplamento (B.5) faz com que o nível transversal quadridegenerado  $E_{nt}$  seja desdobrado em três níveis: dois não-degenerados  $E_{nt}^{1/2}$ , e um bidegenerado  $E_{nt}^3$ , cujas energias são dadas por:

$$E_{nt}^{1/2} = E_{nt} + b_n \pm c_n , \quad (\text{B.8})$$

$$E_{nt}^{1/2} = E_{nt} - b_n . \quad (\text{B.9})$$

Na Figura B.1 é apresentado o esquema do desdobramento correspondente.

O mesmo esquema provém da análise de teoria de grupos (vide Tabela B.1). O grupo pontual  $D_{2d}$  da super-rede tem cinco representações irredutíveis: quatro unidimensionais, designadas por  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$ , e  $B_2$ , e uma bidimensional, designada por  $E$  [160]. As duas auto-funções do nível longitudinal se transformam como  $| z )$  e  $| -z )$ . A representação de  $D_{2d}$  em relação à base  $\{| z ), | -z )\}$  é redutível. Ela pode ser decomposta nas duas representações irredutíveis  $A_1$  e  $B_2$ . Para o nível transversal, as auto-funções se transformam como  $| x )$ ,  $| -x )$ ,  $| y )$ , e  $| -y )$ . A representação de  $D_{2d}$  em relação à esta base pode ser decomposta em  $A_2$ ,  $B_1$ , e  $E$ .

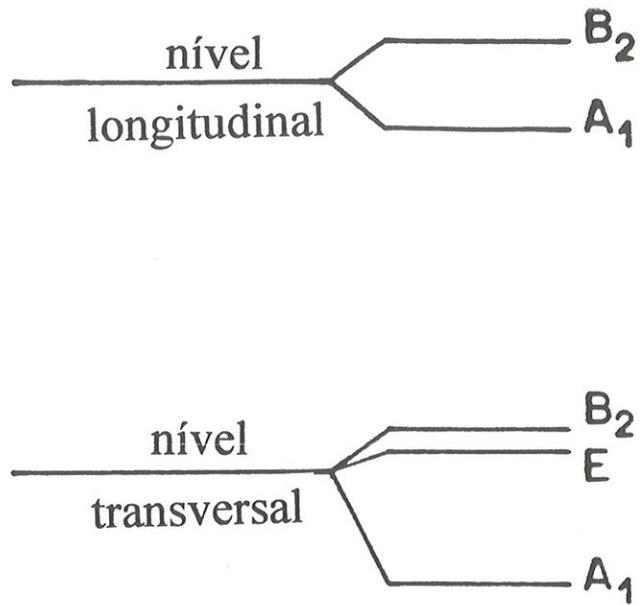


Figura B.1. Representação esquemática do desdobramento de níveis na super-rede de deltas tipo **n** devido ao acoplamento dos multi-  
vales da banda de condução do Si.

Tabela B.1. Desdobramento de níveis devido ao acoplamento de multi-vaies no caso de super-rede de deltas de Sb em Si.

Nível	Autofunções sem acoplamento dos multi-vaies	Representações irredutíveis	Autofunções com acoplamento dos multi-vaies
Longitudinal	$ z\rangle,  \bar{z}\rangle$	$A_1$ $B_2$	$(1/\sqrt{2})[ z\rangle +  \bar{z}\rangle]$ $(1/\sqrt{2})[ z\rangle -  \bar{z}\rangle]$
Transversal	$ x\rangle,  \bar{x}\rangle,  y\rangle,  \bar{y}\rangle$	$A_1$ $B_2$ $E$	$(1/2)[ x\rangle +  \bar{x}\rangle +  y\rangle +  \bar{y}\rangle]$ $(1/2)[ x\rangle -  \bar{x}\rangle +  y\rangle -  \bar{y}\rangle]$ $(1/\sqrt{2})\{ x\rangle -  \bar{x}\rangle,  y\rangle -  \bar{y}\rangle\}$

Como pode ser concluído das expressões (B.4), (B.6), e (B.7) os parâmetros do acoplamento  $a_n$ ,  $b_n$ , e  $c_n$  dependem da parte flutuante do potencial  $\Delta V(x)$  e do valor da função envelope  $F_n^j(0)$  no plano delta. Para o potencial flutuante adotamos o potencial Coulombiano não blindado [26,99]. Os valores das funções envelope foram extraídos dos cálculos autoconsistentes. Como já foi discutido no item 1.4.3, o desdobramento é mais pronunciado para os estados fundamentais longitudinal e transversal. Os valores dos parâmetros  $a_0$ ,  $b_0$ , e  $c_0$ , calculados nos casos limites de período das super-redes investigados ( $d_s = 50\text{\AA}$  e  $d_s = 300\text{\AA}$ ) para valores do vetor de onda na direção  $z$ ,  $k_z = 0$  e  $k_z = \pi/d_s$ , são apresentados na Tabela B.2. A variação com  $k_z$  é observada somente no caso  $d_s = 50\text{\AA}$ , sendo mesmo neste caso relativamente pequena. O aumento dos parâmetros de acoplamento com o aumento da concentração  $N_D$  é notável. A explicação é que a localização da função envelope nestes casos torna-se mais pronunciada. Usando os parâmetros da Tabela B.2 para  $d_s = 300\text{\AA}$  e  $N_D = 8,0 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  (caso se aproximando à condição de impurezas isoladas) o desdobramento obtido para o nível transversal fundamental é de 21,6meV. Este valor, como mencionado no item 1.4.3, esta em uma boa concordância com o de 21,15meV, obtido na referência [99] para o estado 1s do átomo isolado de Sb em Si.

Tabela B.2. Parâmetros de acoplamento (em meV) para níveis fundamentais longitudinal ( $a_0$ ) e transversal ( $b_0, c_0$ ) para super-redes de deltas de Sb em Si.

$N_D(\text{cm}^{-2})$	$k_z$	$d_s = 300 \text{ \AA}$			$d_s = 50 \text{ \AA}$		
		$-a_0$	$-b_0$	$-c_0$	$-a_0$	$-b_0$	$-c_0$
$8 \times 10^{12}$	0	5,2	2,6	5,2	5,0	2,1	4,2
	$\pi/d_s$	5,2	2,6	5,2	5,9	2,6	5,2
$1,3 \times 10^{13}$	0	6,1	3,1	6,2	5,7	2,4	4,8
	$\pi/d_s$	6,1	3,1	6,2	6,6	1,4	2,8
$6,5 \times 10^{13}$	0	10,3	5,4	10,8	9,9	4,5	9,0
	$\pi/d_s$	10,3	5,4	10,8	10,5	5,7	11,5

## REFERÊNCIAS

1. C.Weisbuch, *Semiconductors and Semimetals* **24**, 1 (1987).
2. E.H.Parker, "The Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy", Plenum Press, New York (1985).
3. M.A.Herman e H.Sitter, em Molecular Beam Epitaxy: Fundamentals and Current Status, Springer Series in Material Science **7** (1989).
4. E.F.Schubert e K.Ploog, *Jpn. J. Appl. Phys.* **24**, 1608 (1985).
5. E.F.Schubert, *Surface Science* **228**, 240 (1990).
6. R.Rodrigues, P.S.S.Guimarães, J.F.Sampaio, R.A.Nogueira, A.T.Oliveira Jr., I.F.L.Dias, J.F.Bezerra, A.G. de Oliveira, A.S.Chaves, e L.M.R.Scolfaro, *Solid State Commun.* **78**, 793 (1991).
7. R.J.Nicolas, em Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices, Plenum Press, New York (1987).
8. A.Zrenner, F.Koch, e K.Ploog, *Surface Science* **196**, 671 (1988).
9. N.Schwarz, F.Muller, F.Koch, e G.Weignmann, *Semicond. Sci. Technol.* **4**, 571 (1989).
10. L.M.R.Scolfaro, C.A.C.Mendonça, E.A.Meneses, J.M.V.Martins, e J.R.Leite, *Int. J. Quant. Chem.* **S24**, 447 (1990).
11. R.Enderlein, L.M.R Scolfaro, J.M.V.Martins, e J.R.Leite, *Superlattices and Microstructures* **12**, 175 (1992).
12. A.Bernussi, C.A.C.Mendonça, P.Motisuke, E.A.Meneses, F.Cerdeira, F.H.Pollak, P.Basmaji, e I.F.L.Dias, em "Proc. of the 20th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors", Thessaloniki, World Scientific, p.1065 (1990).

13. T.M.Hsu, Y.A.Chen, M.N.Chang, N.H.Lu, e W.C.Lee, *J. Appl. Phys.* **75**, 7489 (1994).
14. M.Sydor, A.Badakhshan, e J.R.Engholm, *Appl.Phys.Lett.* **59**, 677 (1991).
15. R.Enderlein, D.S.Jiang, e Y.S.Tang, *Phys. Status Solidi* **B145**, 165 (1988).
16. R.Enderlein, em "Proc. of the 20th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors", Thessaloniki, World Scientific, p.1089 (1990).
17. Y.S.Tang, *J. Appl. Phys.* **71**, 2392 (1992).
18. S.K.Brierley e D.S.Lehr, *J.Appl.Phys.* **67**, 3878 (1990).
19. A.A.Bernussi, F.Iakava, P.Motisuke, P.Basmaji, M.Siu Li, e O.Hipólito, *J.Appl.Phys.* **67**, 4149 (1990).
20. J.Wagner, A.Fischer, e K.Ploog, *Phys.Rev.B* **42**, 7280 (1990).
21. M. el Allali, C.B.Sorensen, e E.Veje, *Journal de Physique* **3**, 299 (1993).
22. I.F.L.Dias, comunicado particular.
23. C.A.C.Mendonça, F.Plentz, E.A.Meneses, L.M.R.Scolfaro, D.Beliaev, S.M.Shibli, e J.R.Leite, *Phys.Rev. B* **48**, 12316 (1993).
24. L.M.R.Scolfaro, J.R.Leite, C.A.C.Mendonça, D.Beliaev, S.M.Shibli, E.C.F.Silva, e E.A.Meneses. *Mater. Sci. Forum* **143-147**, 669 (1994).
25. A.M.Ceschin, A.A.Quivy, J.A.N.T.Souares, R.Enderlein, A.Tabata, L.M.R.Scolfaro, E.C.F. da Silva, J.R.Leite, J.B.B.Oliveira, e E.A.Meneses - aceito para publicação na *Superlattices and Microstructures* (1994).
26. L.M.R.Scolfaro, D.Beliaev, R.Enderlein, e J.R.Leite, *Phys.Rev. B* **50**, 8699 (1994).
27. L.Ioriatti, *Phys.Rev. B* **41**, 8340 (1990).

28. I.Eisele, Superlattices and Microstructures **6**, 123 (1989).
29. When-Chau Liu, Chung-Yih Sun, e Wen-Shiung Lour, Superlattices and Microstructures **10**, 1 (1991).
30. M.H.Degani, J.Appl.Phys. **70**, 4362 (1991).
31. L.Ioriatti, Phys.Rev. **B 43**, 14742 (1991).
32. G.Bastard, "Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures", Les Éditions de Physique, Courtaboeuf (1982).
33. E.Fermi, E.Phys. **48**, 73 (1928).
34. L.H.Thomas, Proc.Camb.Phil.Soc. **23**, 542 (1927).
35. J.M.Ziman, "Principles of the Theory of Solids", University Printing House, Cambridge (1965).
36. S.M.Shibli, L.M.R.Scolfaro, J.R.Leite, C.A.C.Mendonça, F.Plentz, e E.A.Meneses, Appl. Phys. Lett. **60**, 2895 (1992).
37. R.Enderlein, L.M.R.Scolfaro, e J.R.Leite, - aceito para publicação no Phys.Rev. **B** (1994).
38. R.Enderlein, L.M.R.Scolfaro, e J.R.Leite, trabalho apresentado na "7th Int. Conf. on Superlattices, Microstructures and Microdevices", Banff (1994).
39. N.F.Mott, "Metal-Insulator Transitions", Taylor & Francis Ltd., London (1990).
40. S.Trott, G.Paasch, G.Gobsch, e M.Trott, Phys.Rev. **B 39**, 10232 (1989).
41. F.H. Pollak, Superlattices and Microstructures **10**, 333 (1991).
42. D.E.Aspnes em "Handbook on Semiconductors", vol. 2, North Holland, New York (1980).

43. D.C.Look, K.R.Evans, e C.E.Stutz, IEEE Trans. Electron. Devices **38**, 1280 (1991).
44. L.M.R.Scolfaro, R.P.Camata, J.M.V.Martins, e J.R.Leite, Superlattices and Microstructures **12**, 203 (1992).
45. J.I.Pankove, "Optical Processes in Semiconductors", Prentice-Hall, Eglewood Cliffs (1982).
46. R.A.Batchelor e A.Hamnett, J.Appl.Phys. **71**, 2414 (1992).
47. P.L Jackson e E.G.Seebauer, J.Appl.Phys. **69**, 943 (1991).
48. U.Behn e H.Roppischer, J.Phys. **C21**, 5507 (1988).
49. M.Born e E.Wolf, "Principles of Optics", Pergamon Press, Oxford (1964).
50. J.P.Estera, W.M.Duncan, e R.Glosser, Phys.Rev. **B49**, 7281 (1994).
51. E.Wigner e F.Zeits, Phys.Rev. **43**, 804 (1933).
52. W.Franz, Naturforsch, **13a**, 484 (1958).
53. L.V.Keldysh, Soviet Physics - JETF **7**, 788 (1958).
54. D.Beliaev, L.M.R.Scolfaro, e J.R.Leite, Semicond.Sci.Technol. **8**, 1479 (1993)
55. G.Burns, em "Solid State Physics", Academic Press, Orlando (1985).
56. C.E.C.Wood, G.Metze, J.Berry, e L.F.Eastman, J.Appl.Phys. **51**, 383 (1979).
57. E.F.Schubert, J. Vac. Sci. Technol. **A8**, 2980 (1990).
58. F.Koch e A.Zrenner, Mat. Sci. and Engineering **B1**, 221 (1989).

59. C.A.C.Mendonça, L.M.R.Scolfaro, F.Plentz, E.A.Meneses, A.T.Oliveira Jr., R.Rodrigues, P.S.S.Guimarães, J.C.Bezerra, e I.F.L.Dias, A.G.Oliveira, *Solid State Commun.* **75**, 707 (1990).
60. L.Esaki e R.Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
61. P.Hohenberg e W.Kohn, *Phys. Rev.* **136**, 8863 (1964)
62. S.T.Pantelides, *Rev.Mod.Phys.* **98**, 915 (1978).
63. L.Hedin e X.Lundqvist, *J.Phys. C* **4**, 2064 (1971).
64. N.W.Ashcroft e N.D.Merlin, "Solid State Physics", W.B.Sauders Company, Orlando (1976).
65. M.Lannoo e J.Bourgoin, "Point Defects in Semiconductors", vol.1, Springer-verlag, Berlin (1981).
66. J.R.Leite, B.I.Bennett, e F.Herman, *Phys.Rev. B* **12**, 1466 (1975).
67. K.Ploog, A.Fischer, e H.Künzel, *J.Electrochem.Soc.* **128**, 400 (1981).
68. G.H.Döhler, H.Künzel, D.Olego, K.Ploog, P.Ruden, H.J.Stoltz, e G.Abstreiter, *Phys.Rev.Lett.* **47**, 864 (1981).
69. G.H.Döhler, H.Künzel, e K.Ploog, *Phys.Rev. B* **25**, 2616 (1981).
70. K.Ploog e G.H.Döhler, *Advances in Physics*, **32**, 285 (1983).
71. K.Ploog, M.Hauser, e A.Fisher, *Appl.Phys. A* **45**, 233 (1988).
72. Wen-Chau Liu, Chung-Yih Sun, Wen-Shiung Lour, e Der-Feng Guo, *J.Vac. Sci. Technol. B* **10**, 135, (1992).
73. G.H.Döhler e P.P.Ruden, *Phys.Rev. B* **30**, 5932 (1984).
74. B.Ullrich, C.Zhang, e K.v.Klitzing, *Appl.Phys.Lett.* **54**, 1133 (1989).

75. E.F.Schubert, T.D.Harris, J.E.Cunningham, e W.Jan, Phys.Rev. **B 39**, 11011 (1989).
76. A.B.Henriques e L.C.D.Gonçalves, Surf.Sci. **305**, 343 (1994).
77. A.C.Maciél, M.Tatham, J.F.Ryan, R.E.Nahory, J.P.Harbison, e L.T.Flores, Surface Sci. **228**, 251 (1990).
78. C.A.C.Mendonça, L.M.R.Scolfaro, A.B.Henriques, J.B.B.Oliveira, F.Plentz, S.M.Shibli, E.A.Meneses, e J.R.Leite, em "Proc. of 21st. Int. Conf. on the Physics of Semiconductors", Beijin, p.1084 (1992).
79. M.Ke, J.S.Rimmer, B.Hamilton, J.H.Evans, M.Missous, K.Singer, e P.Zalm, Phys.Rev. **B 45**, 14114 (1992).
80. M.Ke, J.S.Rimmer, B.Hamilton, M.Missous,B.Khmsehpour, J.H.Evans, K.E.Singer, e P.Zalm, Surface Sci. **267**, 65 (1992).
81. L.D.Landau e E.M.Lifschitz, "Mecânica Quântica", Mir, Moscou (1985).
82. Landolt-Börnstein, "Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology", Vol. 17, Springer-Verlag, Berlin (1982).
83. C.A.C.Mendonça, L.M.R.Scolfaro, J.B.B.Oliveira,F.Plentz, M.Micovic, J.R.Leite, e E.A.Meneses, Superlattices and Microstructures **12**, 257 (1992).
84. M.H.Degani, Phys.Rev. **B 44**, 5580 (1991).
85. R.Dingle, em Festkorperprobleme **XV**, 21 (1975).
86. C.A.C.Mendonça, "Estudo de propriedades ópticas e de transporte em estruturas semicondutoras com dopagem planar"(tese de doutorado), UNICAMP, Campinas (1993).
87. G.E.W.Bauer, Surface Sci. **229**, 374 (1990).
88. A.Gold, A.Ghazali, e J.Serra, Semicond.Sci.Technol. **7**, 972 (1992).

89. L.A.O.Nunes, L.Ioriatti, L.T.Florez, e J.P.Harbison, *Phys.Rev. B* **47**, 13011 (1993).
90. M.Santos, T.Sajoto, A.Zrenner, e M.Shayegan, *Appl.Phys.Lett.* **53**, 2504 (1988).
91. L.Chico, F.García-Moliner, e V.R.Velasco, *Phys.Rev. B* **48**, 11427 (1993).
92. H.Jorke, H.Kibbel, F.Schäffler, A.Casel, H.-J.Herzog, e E.Kasper, *Appl.Phys.Lett.* **54**, 819 (1989).
93. W.Kiunke, E.Hammerl, I.Eisele, D.Schulze, e G.Gobsch, *J.Appl.Phys.* **72**, 3602 (1992).
94. N.L Matthey, M.G.Dowsett, E.H.C.Parker, T.E.Whall, S.Taylor, e J.F.Zhang, *Appl.Phys.Lett.* **57**, 1648 (1990).
95. W.-X.Ni, G.V.Hansson, J.-E.Sundgren, L.Hultman, L.R.Wallenberg, J.-Y.Yao, L.C.Markert, e J.E. Greene, *Phys.Rev. B* **46**, 7551 (1992).
96. H.-J.Gossmann e F.C.Unterwald, *Phys.Rev. B* **47**, 12618 (1993).
97. N.L.Matthey, T.E.Whall, R.A.Kubiak, e M.J.Kearney, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 604 (1992).
98. H.P.Zeindl, T.Wegenhaupt, I.Eisele, H.Oppolzer, H.Reisinger, G.Tempel, e F.Koch, *Appl.Phys.Lett.* **50**, 1164 (1987).
99. A.Baldereschi, *Phys.Rev. B* **1**, 4673 (1970).
100. C.Kittel, "Introduction to Solid State Physics", John Wiley and Sons Inc., New York (1986).
101. F.A.Reboredo e C.R.Proetto, *Phys.Rev. B* **47**, 4655 (1993).

102. G.M.Sipahi, R.Enderlein, L.M.R.Scolfaro, e J.R.Leite, - aceito para publicação no "Proc. of 22nd Int. Conf. on the Physics of Semiconductors", Vancouver (1994).
103. J.M.Luttinger e W.Kohn, Phys.Rev. **97**, 869 (1955).
104. M.Yazawa, M.Koguchi, e K.Hiruma, Appl.Phys.Lett. **58**, 1080(1991).
105. W.Shockley, Phys.Rev **56**, 317 (1939).
106. W.E.Spicer, I.Lindau, P.Skeath, e C.Y.Su, J.Vac.Sci.Technol. **17**, 1019 (1980).
107. A.C.Ferraz e G.P.Srivastava, Surface Sci. **182**, 161 (1987).
108. R.P.Camata, "Estudo da influência de campos elétricos e da temperatura em GaAs com dopagem planar de Si" (dissertação de mestrado), USP, São Paulo (1992).
109. R.Enderlein e A.Schenk, "Grundlagen der Halbleiterphysik", Akademie Verlag, Berlin (1992).
110. D.Beliaev, R.Enderlein, J.A.N.T.Souares, L.M.R.Scolfaro, A.M.Ceschin, A.A.Quivy, e J.R.Leite - aceito para publicação na Superlattices and Microstructures (1994).
111. E.I.Wang, W.A.Albers, Jr. e C.E.Bleil, em "II-VI Semiconductor Compounds", Benjamin, NewYork (1967)
112. R.Enderlein, em "Proc. of 21st Int.Conf. on the Physics of Semiconductors", p.1076, Beijing (1992)
113. B.O Seraphin, em "Proceedings of 7th Int. Conf. on Physics of Semiconductors", p.165, Dunod, Paris (1964).
114. D.D.Sell, Appl.Opt. **9**, 1926 (1970).
115. K.L.Sharklee e J.E.Rowe, Appl.Opt. **9**, 627 (1970).

116. Y.R.Shen, *Surface Sci.* **37**, 718 (1973).
117. B.Batz, *Semiconductors and Semimetals* , **9**, p.315 (1972).
118. R.L.Aggarwal, em "Semiconductors and Semimetals", vol.9, p.151, Academic Press, New York (1972).
119. J.C.Hensel e K.Suzuki, *Phys.Rev.* **B 9**, 4219 (1974)
120. F.H.Pollak e H.Shen, *Superlattices and Microstructures* **6**, 203 (1989).
121. M.Sydor, J.R.Engholm, D.A.Dale, e T.J.Fergestad, *Phys.Rev.* **B 49**, 7306 (1994).
122. C.A.C.Mendonça, L.M.R.Scolfaro, J.M.V.Martins, E.A.Meneses, e J.R.Leite em "Proc. of Int. Conf. on Modulation Spectroscopy"(SPIE), p.188, São Diego (1990).
123. H.Shen, M.Dutta, L.Fotiadis, P.G.Newman, R.P.Moerkirk, W.H.Chang, e R.N.Sacks, *Appl.Phys.Lett.* **57**, 2118 (1990).
124. D.A.B.Miller, D.S.Chemla, e S.Schmitt-Rink, *Phys.Rev.* **B 33**, 6976 (1986).
125. O.J.Glembocki, B.N.Shanabrook, N.Bottka, W.T.Beardt, e J.Comas, *Appl.Phys.Lett.* **46**, 976 (1985).
126. M.Sydor, N.Jahren, W.V.Lampert, T.W.Haas, M.Y.Yen, S.M.Mudare, e D.H.Tomich, *J.Appl.Phys.* **67**, 7423 (1990).
127. N.Pan, X.L.Zheng, H.Hendriks, e J.Carter, *J.Appl.Phys.* **68**, 2355 (1990).
128. E.S.Snow, O.J.Glembocki, e B.N.Shanabrook, *Phys.Rev.* **B 38**, 12483 (1988).
129. M.Sydor e A.Badakhshan, *J.Appl.Phys.* **70**, 2322 (1991).

130. D.E.Aspnes e A.Frova, *Solid State Comm.* **10**, 155 (1969).
131. J.Grover, S.Koeppen, e P.Handler, *Phys.Rev.B* **4**, 2838 (1971).
132. D.Beliaev, "A Influência da Distribuição Espacial do Campo Elétrico na Forma de Espectros da Fotorefletância" (dissertação de mestrado), USP, São Paulo (1992).
133. J.A.N.T.Souares, "Fotorefletância de amostras semicondutoras de GaAs" (tese de doutorado em andamento), USP, São Paulo (1994).
134. D.Beliaev, L.M.R.Scolfaro, e J.R.Leite, *Brazilian Journal of Physics* **24**, 270 (1994).
135. D.Beliaev, Relatório de atividades, USP, São Paulo (1994).
136. X.L.Zheng, D.Heiman, B.Lax, e F.A.Chambers, *Appl.Phys.Lett.* **52**, 287 (1988).
137. Y.S.Huang, H.Qiang, F.H.Pollak, J.Lee, e B.Eلمان, *J.Appl.Phys.* **70**, 3808 (1991).
138. M.Gal, R.Shi, e J.Tann, *J.Appl.Phys.* **66**, 6196 (1989).
139. H.Shen, F.H.Pollak, e J.M.Woodal, *J.Vac.Sci.Technol.* **B 8**, 413 (1990).
140. M.Sydor, J.Angelo, J.J.Wilson, W.C.Mitchel, e M.Y.Yen, *Phys.Rev. B* **40**, 8473 (1989).
141. W.M.Theis, G.D.Sanders, C.E.Leak, e H.Morkos, *Phys.Rev. B* **37**, 3042 (1988).
142. O.J.Glembocki e B.N.Shanabrook, *Superlattices and Microstructures* **2**, 569 (1986).
143. Y.S.Tang, *J.Appl.Phys.* **69**, 8298 (1991).

144. M.Sydor, J.R.Engholm, M.O.Manasreh, K.R.Evans, C.E.Stutz, e W.C.Mitchel, Phys.Rev. **B 45**, 13796 (1992).

145. L.M.Brekhovskikh, "Waves in Layered Media", Academic Press, New York, 1960.

146. V.I.Ginzburg, "Propagation of Electro-Magnetic Waves in Plasma", Gordon and Beach, New York (1961).

147. D.E.Aspnes, Phys.Rev. **153**, 973 (1967).

148. D.E.Aspnes, S.M.Kelso, R.A.Logan, e R.Bhat, J.Appl.Phys. **50**, 754 (1986)

149. R.Enderlein, D.Beliaev, L.M.R.Scolfaro, e J.R.Leite, Phys.Rev. **B** - em preparação.

150. B.O.Seraphin e N.Bottka, Phys.Rev. **145**, 628 (1966).

151. J.L.Shay, Phys.Rev. **B 2**, 803 (1970).

152. Y.S.Tang, B.S.Wang, D.S.Jiang, e W.H.Zhuang, Solid State Commun. **63**, 793 (1987).

153. D.S.Jiang, Y.S.Tang, J.B.Xia, e R.Enderlein, Superlattices and Microstructures **6**, 387 (1989).

154. A.P.Thorn, A.J.Shields, P.C.Klipstein, N.Apsley, e T.M.Kerr, J.Phys. **C: Solid State Phys.** **28**, 4229 (1987).

155. A.Hamnett, R.L.Lane, P.R.Trevellick, e H.Denison, em "Comprehensive Chemical Kinetics", vol. **29**, 385, Elsevier, Amsterdam (1989).

156. T.M.Hsu, Y.C.Tien, N.H.Lu, S.P.Tsai, D.G.Liu, e C.P.Lee, J.Appl.Phys. **72**, 1065 (1992).

157. W.Zhou, C.H.Perry, L.Ma, K-S.Lee, J.M.Worlock, A.Zrenner, F.Koch, e K.Ploog, J.Appl.Phys.**69**, 4075 (1991).

158. D.E.Aspnes e A.A.Studna, Phys.Rev. **B 7**, 4605 (1973).

159. J.M.Gilman, R.Hutton, A.Hamnett, e L.M.Piter, Phys.Rev. **B 47**, 13453 (1993).

160. M.Thinkan, "Group Theory and Quantum Mechanics", McGraw-Hill, New York (1964).