

Universidade de São Paulo

Instituto de Física



Observação Óptica Direta de Estados de Minibanda em Super-redes GaAs/AlGaAs

Ricardo Faveron de Oliveira

Orientador:

Prof. Dr.: André Bohomoletz Henriques (IFUSP)

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Prof. Dr.: André Bohomoletz Henriques (IFUSP)

Prof. Dr.: Helena Maria Petrilli (IFUSP)

Prof. Dr.: Hercílio Rodolfo Rechenberg (IFUSP)

Prof. Dr.: José Alzamir Pereira da Costa (UFRN)

Prof. Dr.: Flávio Orlando Plentz Filho (UFMG)

São Paulo

2005

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

SBI-IFUSP



305M810T4308

def. 09/10/05

530.4
0480
D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Oliveira, Ricardo Faveron de

Observação Óptica Direta de Estados de Minibanda em
Super-redes GaAs/AlGaAs.
São Paulo - 2005 .

Tese (Doutoramento) - Universidade de São Paulo
Orientador: Prof. Dr. André Bohomoletz Henriques

Instituto de Física - Departamento de Física dos
Materiais e Mecânica.

Área de Concentração: Física

Unitermos

1. Física da Matéria Condensada – propriedade dos sólidos;
2. Física do Estado Sólido – fotoluminescência;
3. Estrutura dos Sólidos – super redes dopadas;
4. Estrutura dos Sólidos – estados estendidos de minibandas.

USP/IF/SBI-033/2005

A sementeira é livre mas a colheita é obrigatória

Dedico à minha esposa Lilian;
aos meus pais João Carlos e Maria Claudete;
aos meus avós maternos Américo e Laura(em memória);
aos meus avós paternos Alfredo(em memória) e Adelina(em memória);
às minhas irmãs Tatiane e Giovana;
aos meus sobrinhos Júlia e Arthur.

Agradecimentos

Inicialmente gostaria de agradecer a Deus e a minha família, pois sem o apoio e amor deles, eu não estaria presenciando este momento;

Ao Prof. Dr. André B. Henriques, pela paciência na orientação deste trabalho;

Ao Prof. Dr. Alain A. Quivy e ao Dr. Tomas E. Lamas pelo fornecimento de amostras e discussões técnicas;

Ao Prof. Dr. Nei F. Oliveira Jr. pela disponibilidade do laboratório para as medidas de baixas temperaturas e altos campos magnéticos;

Ao Prof. Dr. Eduardo Abramof pelas medidas de raios-x no LAS do INPE, e pelas discussões técnicas;

Aos Srs. Carlos A. Barioni, Cássio B. dos Santos, Cecília Maia, Eronides A. de Almeida, Fábio H. Grossi, Iran M. Amorin, João de Oliveira, José A. dos Santos, José T. da Silva, Marcelo S. Lancarote, Marco A. Meira, Marcos A. R. Firmino, Olímpio R. F. Neto, Paulo J. de Lima, Paulo S. Martins, Renato Cohen, Rui F. Oliveira, Vagner A. Braghin e Walter S. de Lima, funcionários do IFUSP, pelos diversos auxílios e amizade;

Aos colegas Dra. Luciana K. Hanamoto, Dr. John C. Mantilla Ochoa, Dr. Alessandro Carneiro e Dr. Alcione R. Jurelo pela convivência na sala 112 do Edifício Mario Schenberg do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica;

À Sra. Nazaré V. dos Santos(Lea) e ao Sr. José S. de Lima Filho, funcionários da biblioteca, por sempre estarem prestativos e serem compreensivos na retirada/devolução de livros;

Aos meus colegas de graduação e pós-graduação;

Aos meus tios, tias, primos e primas;

À aqueles que se imaginavam nestes agradecimentos, eu agradeço duas vezes;

Ao Instituto de Física da USP pela oportunidade de realizar meu trabalho de pesquisa;

À FAPESP pelo suporte financeiro.

Resumo

Super-redes semicondutoras consistem de materiais semicondutores de gaps diferentes arranjados periodicamente. Os elétrons das camadas de gap mais estreito acoplam-se por tunelamento através das camadas de gap mais largo formando faixas energéticas, denominadas minibandas. A largura de uma minibanda é definida pela diferença entre seus dois limiares, o fundo e o topo. Uma singularidade de Van Hove é associada a cada limiar da minibanda. A detecção direta de uma minibanda exige técnicas experimentais que sejam sensíveis a estas singularidades. Um exemplo de técnica deste tipo, e que é frequentemente utilizada, é o efeito Shubnikov-de Haas (SdH). Outra técnica é a espectroscopia de absorção associada a transições entre a faixa de valência e a faixa de condução. Neste caso, são observados picos excitônicos associados às duas singularidades na densidade de estados. Porém, a separação em energia entre os picos de absorção não é uma medida direta da largura da minibanda: para estimar a largura da minibanda seria necessário conhecer com precisão as energias de ligação dos dois tipos de éxcitons, sendo que a diferença entre estes valores é da mesma ordem de grandeza que a largura da minibanda. A formação de estados excitônicos pode ser evitada através da dopagem, que introduz a blindagem de Coulomb e o preenchimento do espaço de fase. Entretanto, em super-redes dopadas convencionalmente, a fotoluminescência (PL) é inteiramente dominada por transições entre estados de Tamm, impedindo novamente a detecção de transições interbandas associadas aos estados de minibanda. Neste trabalho investigamos a possibilidade de evitarmos tanto a formação de estados excitônicos quanto a formação de estados de Tamm em super-redes com dopagem modulada, a fim de detectarmos diretamente transições interbandas associadas aos estados estendidos de minibanda por medidas de PL.

A partir da solução numérica das equações de Schrödinger e Poisson foi verificado que o perfil de dopagem modulada que evita a formação de estados de Tamm consiste numa super-rede dopada planarmente no centro das camadas de gap mais largo, e também nas camadas externas, sendo o valor da dopagem nas camadas externas igual à metade do valor da dopagem nas camadas internas. Investigamos no laboratório este tipo de super-rede e confirmamos, através de medidas do efeito SdH em ângulos oblíquos, que efetivamente os estados de Tamm não estão presentes em estruturas com este perfil de dopagem. O espectro de PL é caracterizado por uma banda cuja largura é aproximadamente igual à energia de Fermi, e é situado em energias superiores ao gap da camada de confinamento. Estas características são indicativas de que o espectro observado é devido a transições associadas aos estados de minibanda. A fim de comprovarmos esta interpretação detectamos e analisamos o espectro de PL em função do campo magnético. Para analisar o espectro de PL desenvolvemos um modelo teórico para a forma de linha da PL em função do campo magnético. Utilizando o modelo teórico desenvolvido foi possível realizar um levantamento completo das características da super-rede extraindo valores para a largura energética da minibanda, a massa reduzida do par elétron-buraco e a energia do gap renormalizada. Este último parâmetro não era acessível pelas técnicas mencionadas anteriormente e foi medido pela primeira vez neste trabalho. O acesso a ele abre uma nova perspectiva para o estudo de efeitos de muitos corpos em estruturas onde a dimensionalidade do sistema eletrônico pode ser controlada artificialmente. Esta perspectiva é explorada neste trabalho.

Abstract

Semiconductor superlattices consist of semiconductor materials with different gaps, arranged periodically. The electrons of the narrow gap layer, coupled by tunneling through the wider gap layer, form an energy miniband. The width of a miniband is equal to the difference in energy between its two edges, the bottom and the top. A Van Hove singularity is associated with each edge of the miniband. The direct detection of a miniband demands experimental techniques sensitive to these singularities. One example of such a technique is the Shubnikov-de Haas effect (SdH). Another technique is the absorption spectroscopy associated with transitions between the valence and the conduction bands. In this case, excitonic peaks associated with the two singularities in the density of states are observed. However, to estimate the miniband width from the absorption excitonic spectrum, it would be necessary to know accurately the binding energies of both excitons involved, the difference between which values is of the same order of magnitude as the miniband energy width. It should be possible to avoid the formation of excitons by doping the superlattice, however, in superlattices doped conventionally, the photoluminescence (PL) is completely dominated by transitions between Tamm states, which precludes the observation of extended miniband states. In this work we investigate the possibility of avoiding both the formation of excitonic states, as well as the formation of Tamm states, by tailoring the modulation doping profile, and of detecting directly the interband transitions associated to extended miniband states by PL measurements.

By solving the Schrödinger and Poisson equations numerically, it was verified that a modulation doping profile that avoids the formation of Tamm states consists in a superlattice doped at the center of the wider gap layer, and also doped in the external layers, whereby the concentration of doping atoms in the external layers is equal to half of the value used in the internal ones. Such superlattices were investigated experimentally, and it was confirmed, from SdH measurements at oblique angles, that Tamm states were not present in the structures. The PL spectrum is characterized by an emission band whose width is approximately equal to the Fermi energy. The PL band is situated at photon energies greater than the energy bandgap of the confining layer. These characteristics suggest that the observed spectrum is associated to extended electronic miniband states. To confirm this interpretation, we detected and analysed the PL spectrum in an external magnetic field. A theoretical model for the lineshape of the PL as function of the magnetic field intensity was developed. Using this model, it was possible to estimate all characteristic parameters for the superlattice: the energy width of the miniband, the reduced mass of the electron-hole pair, and the renormalized energy gap. The latter parameter is not accessible by the experimental techniques used previously, and it was measured for the first time in this work. The access to this parameter opens a new perspective for the study of many body effects in structures, in which the dimensionality of the electronic system can be controlled artificially. This perspective is explored in this work.

Conteúdo

1	Introdução	8
2	Fundamentos	13
2.1	Super-redes	13
2.2	Faixas de Energia nos Semicondutores	14
2.3	Teoria da Massa Efetiva	21
2.4	Faixas de Energia em Heteroestruturas	24
2.4.1	Faixa de Condução	25
2.4.2	Faixa de Valência	27
2.5	Princípio de Onsager	29
2.6	Superfície de Fermi para uma Super-rede Degenerada	31
2.6.1	Efeito Shubnikov-de Haas na Super-rede, e Obtenção da Largura da Minibanda, da Energia de Fermi e da Densidade de Portadores	34
2.7	Evidência da Formação de Minibandas - Efeito Shubnikov-de Haas em Ângulos Oblíquos	38
2.8	Projeto de Super-redes	47
3	Procedimento Experimental	51
3.1	Experimento de Shubnikov-de Haas	51
3.1.1	Porta-amostra Giratório	51
3.2	Experimento de Fotoluminescência	59
3.2.1	Porta-amostra Óptico	60
4	Resultados	68
4.1	Estruturas Investigadas	68
4.2	Medidas do Efeito Shubnikov-de Haas	71
4.2.1	Super-rede com Dopagem nas Camadas de Barreira Internas	71
4.2.2	Super-redes com Dopagem nas Camadas de Barreira Internas e Externas	77
4.3	Medidas de Fotoluminescência	85
4.3.1	Super-rede com Dopagem nas Camadas de Barreira Internas e Externas	85
4.3.2	Modelo para a Fotoluminescência	93
4.3.3	Análise da Fotoluminescência	97
4.3.4	Renormalização da Energia do Gap (BGR)	109

<i>CONTEÚDO</i>	7
5 Conclusões	115
Apêndice A Estados de Tamm	116
Apêndice B Refletividade de Raios-x	118
Apêndice C Efeito Shubnikov-de Haas em Função da Temperatura	120
Apêndice D Regra de Seleção	124
Apêndice E Trabalhos Publicados	127

Capítulo 1

Introdução

As super-redes semicondutoras foram inicialmente propostas por L. Esaki e R. Tsu [1] em 1970 e desde então tornaram-se sistemas estudados intensamente. Em termos de aplicações, super-redes dopadas tem sido utilizadas na optoeletrônica, permitindo a construção de fotodetectores sensíveis a luz infravermelha no intervalo 8-14 μm [2, 3]. Além de que, super-redes semicondutoras são utilizadas na fabricação de *quantum cascade lasers* [4, 5, 6, 7], que emitem fótons em comprimentos de onda entre o infravermelho e a região de comprimento de onda de 100 μm . Esta região do espectro não é facilmente acessível com lasers de diodo. Do ponto de vista fundamental, super-redes formam uma plataforma quase ideal, do ponto de vista de pureza e perfeição estrutural, para a investigação dos efeitos de desordem [8], estados de superfície [9], efeitos de muitos corpos [10], e para a investigação das propriedades ópticas e eletrônicas de um sistema de baixa dimensionalidade.

Numa super-rede os elétrons das camadas de gap mais estreito acoplam-se por tunelamento através das camadas de gap mais largo formando faixas energéticas denominadas de minibandas. As minibandas, geralmente aumentam de largura quando diminui-se a espessura das barreiras (materiais de gap mais largo). Alternativamente, uma super-rede pode ser descrita pela densidade de estados dos portadores, que apresenta duas singularidades: M_0 e M_1 , nas energias correspondentes ao fundo e ao topo de cada minibanda, respectivamente [11].

As propriedades ópticas e elétricas de uma super-rede são determinadas fundamentalmente pelo espectro de minibandas. Para se fazer um levantamento do espectro de minibandas de uma amostra dada, necessita-se de técnicas experimentais que sejam sensíveis às singularidades da densidade de estados eletrônica. Em super-redes dopadas, pelo menos a uma destas singularidades (a singularidade no fundo da minibanda) está associada uma órbita ciclotron extremal na mini-superfície de Fermi, que pode ser detectada através de efeitos magneto-oscilatórios, tal como o efeito Shubnikov-de Haas (SdH) [12, 13]. Em amostras nas quais a dopagem é alta o suficiente para preencher inteiramente uma minibanda, o nível de Fermi ficará posicionado acima da segunda singularidade na densidade de estados. Neste caso o espectro Shubnikov-de Haas é caracterizado por um dubleto de frequências de oscilação, cuja separação é uma medida direta e precisa da largura da minibanda eletrônica [14, 15].

A caracterização das minibandas pode ser também efetuada utilizando-se medidas de espectroscopia óptica ([11], seção 2.2.2). O espectro de absorção inter-minibanda, na região do infra-vermelho

(comprimento de onda da faixa de $10 \mu\text{m}$), é caracterizado por dois picos, cuja separação está associada a largura da minibanda[16]. Entretanto, os espectros de pseudo-absorção interbanda (luminescência de excitação - PLE (*photoluminescence excitation*), ou fotocondutividade - PC), na região de energias próximas ao gap do semiconductor, não oferecem uma medida precisa do espectro de minibandas. Isto ocorre por vários motivos. Os espectros de PLE de uma super-rede são dominados por linhas de absorção excitônicas associadas a diversas minibandas de buracos e a minibanda eletrônica. Estas linhas apresentam réplicas de fônons [17, 18], e como resultado os espectros de PLE e PC são muito complexos, apresentando um grande número de linhas [19]. Mesmo que ignoremos esta complexidade e suponhamos possível identificar as linhas excitônicas associadas a transições entre a minibanda de buracos de menor energia e a minibanda de condução, ainda assim não seria possível estimar com precisão a largura da minibanda eletrônica a partir do espectro de pseudo-absorção. Teoricamente, no espectro de absorção haveria dois picos excitônicos, um associado ao fundo, e outro associado ao topo da minibanda eletrônica, separados pela largura da minibanda, a menos da diferença entre a energia de ligação que caracteriza os dois éxcitons(ver esquema na figura 1.1).

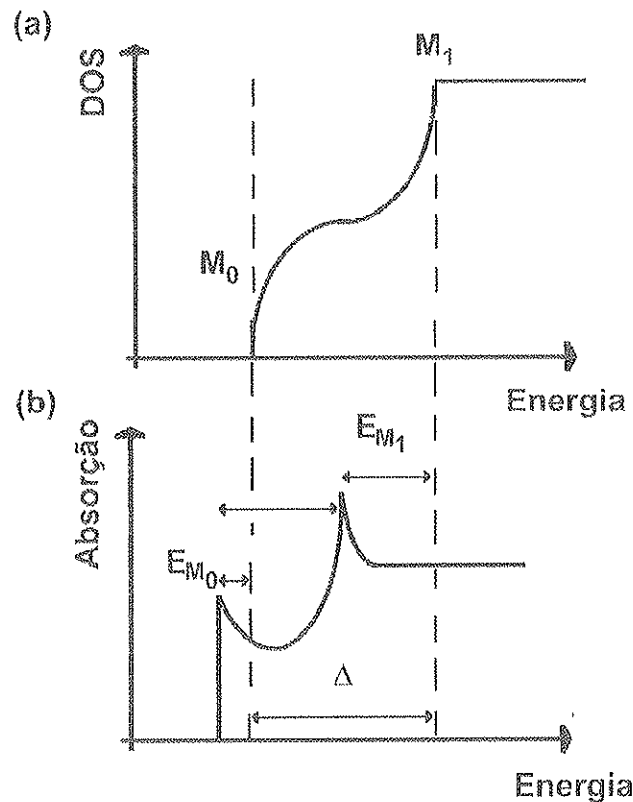


Figura 1.1: Desenho esquemático da (a)densidade de estados de uma super-rede em função da energia, onde M_0 e M_1 são as singularidades de van Hove. (b)absorção em função da energia, E_{M_0} e E_{M_1} são as energias de ligação do éxcitons associados à M_0 e M_1 respectivamente.

Porém, a massa efetiva dos elétrons junto ao topo da minibanda, que determina a inércia eletrônica

para movimento perpendicular às camadas epitaxiais, é negativa, tornando a energia de ligação dos éxcitons formados por estes elétrons maior que a energia de ligação dos éxcitons formados por elétrons do fundo da minibanda, que apresentam massa efetiva positiva[20]. A diferença entre as energias de ligação pode atingir um valor comparável à própria largura da minibanda. A isto, soma-se a pequena força de oscilador da transição óptica associada aos éxcitons do topo da minibanda, o que introduz uma incerteza ainda maior na posição do pico excitônico associado. Estes dois efeitos impossibilitam uma medida *direta* da largura da minibanda eletrônica em amostras não-dopadas. A diferença entre a energia de ligação excitônicas para o fundo e para o topo da minibanda eletrônica pode ser facilmente compreendida pelo seguinte argumento: os elétrons do fundo da minibanda ($k_z = 0$) são descritos por uma função de onda envelope que não se anula no meio das camadas de barreira, enquanto que para os elétrons do topo da minibanda ($k_z = \frac{\pi}{d}$), ali a função de onda envelope se anula. Por estarem mais comprimidos na região onde estão situados os buracos, a energia de ligação dos éxcitons associados ao topo da minibanda será maior do que aos associados ao fundo da mesma. No trabalho [20], foi estimado que a diferença entre estas energias, para uma amostra dada, era de 9 meV, que é da mesma ordem de grandeza que a largura de uma minibanda típica.

Além de não fornecer informação precisa sobre a estrutura de banda da super-rede, os espectros de pseudo-absorção, como já descrevemos acima, são dominados por éxcitons e réplicas de fônons, isto é, transições que representam evidência apenas indireta do espectro de minibandas de uma super-rede.

Neste trabalho investigamos a possibilidade de se detectar diretamente os estados de minibandas num espectro de fotoluminescência de super-redes dopadas. Nossa motivação está no fato de que em super-redes dopadas a formação de éxcitons é suprimida, eliminando a dificuldade descrita acima. Neste tipo de amostra, porém, absorção só é possível envolvendo estados acima do nível de Fermi (E_F) (deslocamento de Moss-Burstein), impossibilitando a obtenção de informação sobre a minibanda situada abaixo de E_F . A fotoluminescência, por outro lado, advém da recombinação de elétrons com energia inferior a E_F , e em tese poderia conter informação sobre a minibanda caso esta esteja completamente contida abaixo de E_F .

Entretanto, em super-redes dopadas de forma convencional (dopagem uniforme, ou delta-doping), é bem conhecido que a luminescência é dominada pela recombinação entre elétrons e buracos em estados de Tamm¹[21] - elétrons e buracos aprisionados numa camada bidimensional, no poço de potencial da extremidade da cadeia que constitui a super-rede, a denominada *superfície interna*. Os estados de Tamm[22] formam-se devido ao forte campo elétrico que surge na superfície interna, em virtude da separação espacial de cargas positivas (doadores ionizados) e negativas (elétrons doados para os estados abaixo do nível de Fermi).

Para atingir nosso objetivo - detectar por fotoluminescência a recombinação entre elétrons de uma minibanda eletrônica e buracos da faixa de valência, em amostras dopadas - foi necessário projetar amostras com um perfil de dopagem que evitasse a formação de estados de Tamm. Para este fim, investigamos a solução numérica autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson em função da distribuição espacial dos doadores. Procuramos uma distribuição e densidade que compensasse

¹O apêndice A apresenta mais informações sobre os Estados de Tamm.

o campo elétrico junto à superfície interna, e que ao mesmo tempo oferecesse o máximo tempo de meia vida dos estados de uma partícula, para que as singularidades na densidade de estado não fossem eliminadas pelo alargamento energético dos estados eletrônicos. Verificamos que, para uma certa faixa de densidade de portadores, a melhor solução é a dopagem das duas camadas externas à super-rede, cada uma com uma carga de doadores igual à metade da carga de doadores utilizada em cada período da super-rede.

As amostras foram crescidas de acordo com o projeto, e investigadas por efeito Shubnikov-de Haas e fotoluminescência em campos magnéticos. As medidas de Shubnikov-de Haas comprovaram que, efetivamente, estados de Tamm foram eliminados, enquanto que as minibandas eletrônicas estavam presentes e populadas. O espectro de luminescência das amostras apresentou uma banda de emissão larga, em energia acima do gap e de largura próxima à energia de Fermi estimada pelas medidas de Shubnikov-de Haas. O espectro de fotoluminescência desenvolveu uma estrutura muito fraca em campo magnético, indicativo da presença de uma complexidade de níveis de Landau esperada para uma super-rede. Em função do campo magnético, e uma energia de fóton fixa, a luminescência apresentou oscilações muito bem definidas. Desenvolvemos um modelo teórico para as oscilações da fotoluminescência de uma super-rede dopada, obtendo-se uma forma analítica, e confrontamos este modelo com os resultados experimentais. O ajuste das oscilações experimentais com a fórmula teórica permitiu-nos obter não apenas a largura da minibanda, que resultou estar em concordância com o resultado de Shubnikov-de Haas, mas também a massa reduzida para o par elétron-buraco, e a largura do gap de energia entre as faixas de valência e condução para a super-rede. Devido ao alto nível de dopagem, o valor deste gap é menor do que o gap para uma estrutura não-dopada, em virtude da blindagem do buraco e de efeitos de correlação. Uma comparação entre os valores de gap obtidos experimentalmente e os valores calculados para estruturas idênticas não-dopadas, através de um cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, permitiu-nos estimar a *renormalização do gap* - o valor absoluto de encolhimento do gap, para várias estruturas. Os resultados são comparados aos diversos modelos para a renormalização do *band gap* em sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade.

No capítulo 2 apresentaremos uma descrição de super-redes semicondutoras, os fundamentos teóricos: cálculo das faixas de energia em semicondutores através do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, a teoria de massa efetiva, e as faixas de energia em heteroestruturas. Apresentaremos o princípio de Onsager que demonstra que algumas grandezas físicas apresentam oscilações em função do inverso do campo magnético, e que as frequências destas oscilações caracterizam a topologia da superfície de Fermi, em seguida apresentaremos a superfície de Fermi para super-redes e como obtemos parâmetros da super-rede através do efeito Shubnikov-de Haas. Na seqüência, apresentamos a evidência da formação de minibandas através de medidas do efeito Shubnikov-de Haas em ângulos oblíquos. Apresentamos, por fim, o projeto das super-redes utilizadas neste trabalho.

No capítulo 3 iremos apresentar os porta-amostras que foram especialmente construídos para realizarmos as medidas apresentadas nesta tese de doutorado. Apresentaremos também a montagem experimental utilizada.

No capítulo 4 serão mostrados os resultados obtidos e o modelo desenvolvido para analisarmos

os espectros de fotoluminescência.

No capítulo 5 apresentamos nossas conclusões.

Apresentarei também em apêndices: (A) uma descrição dos estados de Tamm; (B) a medida de refletividade de raios-x, que foi realizada para verificarmos o período das amostras crescidas; (C) as medidas e a análise do efeito Shubnikov-de Haas em função da temperatura para uma das amostras investigadas neste trabalho; (D) a regra de seleção para transições diretas entre as bandas de condução e valência; (E) os trabalhos publicados resultantes da pesquisa envolvida nesta tese de Doutorado.

Capítulo 2

Fundamentos

Iremos subdividir este capítulo em seções que serviram para alicerçar o feitiço desta tese de doutoramento.

2.1 Super-redes

Numa super-rede um potencial artificial periódico unidimensional é superposto ao potencial periódico cristalino. O potencial periódico artificial pode ser introduzido por dopagem ou por modulação composicional, isto é, existem dois tipos de super-redes, as super-redes dopadas crescidas com camadas alternadas com dopagem diferente e super-redes composicionais crescidas com dois tipos de semicondutores alternadamente como uma série de heterojunções arranjadas periodicamente, que são subdivididas em tipo I e tipo II que diferenciam-se pelo alinhamento das bandas de condução e valência [11, 23]. As super-redes investigadas neste trabalho são super-redes composicionais tipo I dopadas planarmente no centro das barreiras.

O crescimento epitaxial de um material semiconductor permite a fabricação de super-redes de camadas estreitas. A técnica de crescimento epitaxial, conhecida como crescimento epitaxial por feixe molecular (*MBE - Molecular Beam Epitaxy*), foi utilizada nos crescimento das super-redes investigadas neste trabalho.

A diferença entre os gaps de energia dos poços quânticos e das barreiras, é chamada de *bandgap offset*, e têm origem na diferença entre as eletro-afinidades das camadas. A eletro-afinidade é definida como a energia necessária para levar um elétron do fundo da banda de condução ao estado de repouso no vácuo. Na fronteira entre duas camadas de diferente composição química, em semicondutores intrínsecos (sem inclusão de impurezas), o posicionamento relativo entre as bandas ocorre no referencial do nível do vácuo, surgindo as diferenças de energia entre os fundos e os topos das bandas. As super-redes estudadas neste trabalho, GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As possuem *bandgap offset* na proporção $\Delta E_C : \Delta E_V = 60 : 40$ [24, 25].

2.2 Faixas de Energia nos Semicondutores

Para compreendermos as propriedades de um semicondutor faz-se necessário entendermos sua estrutura eletrônica, incluindo suas bandas de energia e suas respectivas funções de onda. O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é um método sistemático semi-empírico de obtermos expressões analíticas para a dispersão de uma banda de energia. Este método consiste essencialmente de uma teoria de perturbação que explora as propriedades das bandas de energias em pontos de simetria da rede no espaço \mathbf{k} [26, 27].

A equação de Schrödinger para os estados eletrônicos é:

$$\underbrace{\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_{per}(\mathbf{r}) \right]}_{H_0} \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde V_{per} é o potencial periódico cristalino.

Segundo o Teorema de Bloch:

$$\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.2)$$

$$E = E_n(\mathbf{k})$$

Onde $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ é uma função periódica em \mathbf{r} , isto é, $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ e $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ onde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são vetores da rede, e n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros.

Substituindo $\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ (2.2) na equação de Schrödinger (2.1) obtemos a equação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$:

$$\underbrace{\left[H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right]}_{H_{kp}} u_{n,k}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n,k}(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre.

Para encontrar o espectro de faixas de energia, faremos primeiro a expansão de $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ na base completa $\{u_m(0, \mathbf{r})\}$ [[28]pág. 79]:

$$u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_m C_m(\mathbf{k}) u_m(0, \mathbf{r}) \quad (2.4)$$

Substituindo(2.4) na equação (2.3), tomando o produto com $\int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_n^*(0, \mathbf{r})$, obtêm-se:

$$\sum_m [H_{nm}(\mathbf{k}) - E] C_m(\mathbf{k}) = 0$$

onde,

$$H_{nm} = \left(E_m + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nm} \quad (2.5)$$

e

$$\mathbf{p}_{nm} = \int u_n^*(0, \mathbf{r}) \mathbf{p} u_m(0, \mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}$$

e, E_m vêm de:

$$H_0 u_m(0, \mathbf{r}) = E_m u_m(0, \mathbf{r})$$

No modelo de Kane, para um cristal de simetria cúbica, admite-se que a faixa de condução seja constituída por orbitais atômicos $s = |S\rangle$, e a faixa de valência por orbitais atômicos $p_x = |X\rangle$, $p_y = |Y\rangle$ e $p_z = |Z\rangle$. Levando-se em conta a interação spin-órbita, devemos acoplar os momentos angulares orbital e de spin, formando os estados $|jj_z\rangle$. Isto afeta apenas os orbitais atômicos que dão origem às faixas de valência, formando estados $j = \frac{3}{2}$ e $j = \frac{1}{2}$. Nos materiais III-V, o quadrupletto $j = \frac{3}{2}$ apresenta energia maior do que o dubleto $j = \frac{1}{2}$.

Substituiremos $\{u_m(0, \mathbf{r})\}$ pelas funções de onda apresentadas na tabela 1[29, 30]:

Tabela 1: Base restrita

faixas de condução	$u_m(0, \mathbf{r})$ $i S \uparrow\rangle$ e $i S \downarrow\rangle$	energia E_m
faixas de valência originadas de $j = \frac{3}{2}$	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle + \left \frac{X+iY}{\sqrt{6}} \downarrow \right\rangle$ $ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle = \left \frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle$ $ \frac{3}{2} -\frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle - \left \frac{X-iY}{\sqrt{6}} \uparrow \right\rangle$ $ \frac{3}{2} -\frac{3}{2}\rangle = \left \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle$	E_c E_v
faixas de valência originadas de $j = \frac{1}{2}$	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow\rangle + \left \frac{X+iY}{\sqrt{3}} \downarrow \right\rangle$ $ \frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow\rangle + \left \frac{X-iY}{\sqrt{3}} \uparrow \right\rangle$	$E_v - \Delta_{so}$

Nesta base restrita, para $k_x = k_y = 0$ e $k_z = k$, a matriz H_{nm} (2.5) fica dada por:

Matriz 1: Matriz de Kane 8 x 8

$$\begin{array}{cccccccc}
 i|S \uparrow\rangle & |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle & |\frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle & i|S \downarrow\rangle & |\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle & |\frac{3}{2} - \frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle \\
 \left[\begin{array}{cccccccc}
 E_c + \varepsilon_0(k) & -\sqrt{\frac{2}{3}}Pk & 0 & \frac{Pk}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & E_v + \varepsilon_0(k) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & E_v + \varepsilon_0(k) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & E_v - \Delta_{SO} + \varepsilon_0(k) & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & E_c + \varepsilon_0(k) & -\sqrt{\frac{2}{3}}Pk & 0 & \frac{Pk}{\sqrt{3}} \\
 & & & & & E_v + \varepsilon_0(k) & 0 & 0 \\
 & & & & & & E_v + \varepsilon_0(k) & 0 \\
 & & & & & & & E_v - \Delta_{SO} + \varepsilon_0(k)
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

onde,

$$P = \frac{\hbar}{im_0} \langle S|p_z|Z \rangle$$

e

$$\varepsilon_0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

As faixas de energia são determinadas pelo determinante de:

$$|H_{nm} - E| = 0$$

obtendo-se:

$$(E_v - E') \left[(E' - E_c) (E' - E_v) (E' - E_v - \Delta_{SO}) - k^2 P^2 \left(E' - E_v + \frac{2}{3} \Delta_{SO} \right) \right] = 0 \quad (2.6)$$

onde,

$$E' = E - \varepsilon_0(k)$$

As raízes $E'_i(k)$, sendo $(i = 1, 2, 3, 4)$, do polinômio (2.6) fornecem as faixas de energia $E_i(k) = E'_i(k) + \varepsilon_0(k)$.

A primeira raiz vêm de $E_v = E'$, isto é:

$$E_{hh}(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \quad (2.7)$$

que corresponde à banda de valência de buracos pesados. Onde, $m_{hh} = -m_0$ é a massa efetiva do buraco pesado no topo da banda de valência.

As demais soluções podem ser encontradas em torno de $k = 0$. Para pequenos valores de k , deve valer a aproximação de banda parabólica. Substituindo $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ em (2.6), e omitindo as potências em k superiores a 2, obtemos a faixa de condução:

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{P^2 k^2}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_{SO}} \right) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (2.8)$$

onde m_e é a massa efetiva do elétron no fundo da banda de condução, Δ_{SO} é a energia de *split-off*, e

$$\frac{m_0}{m_e} = 1 + \frac{2E_P}{3E_g} + \frac{E_P}{3(E_g + \Delta_{SO})}$$

onde $E_P = \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2}$ e $E_g = E_c - E_v$.

Analogamente, as substituições $E = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}}$ e $E = E_v - \Delta_{SO} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}}$ fornecem as demais soluções, para a banda de valência de buracos leves, e a banda de valência *split-off*, respectivamente, obtendo-se:

$$E_{lh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2P^2 k^2}{3E_g} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \quad (2.9)$$

onde,

$$\frac{m_0}{m_{lh}} = 1 - \frac{2E_P}{3E_g}$$

e,

$$E_{so}(k) = -\Delta_{so} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{P^2 k^2}{3(E_g + \Delta_{SO})} = -\Delta_{so} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}} \quad (2.10)$$

onde,

$$\frac{m_0}{m_{so}} = 1 - \frac{E_P}{3(E_g + \Delta_{SO})}$$

onde m_{lh} é a massa efetiva do buraco leve no topo da banda de valência e m_{so} é a massa efetiva do buraco *split-off*.

Ao nos afastarmos de $k \simeq 0$, a banda de condução sofre um desvio crescente da aproximação de bandas parabólicas. A expansão de $E_c(k)$, com a manutenção de potências até k^4 , fornece a correção de não-parabolicidade, α , isto é:

$$E_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\alpha}{E_g} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right)^2$$

onde

$$\alpha = - \left(1 - \frac{m_e}{m_0} \right)^2 \frac{1 + \left(\frac{\Delta_{SO}}{E_g} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta_{SO}}{E_g} \right)^2}{1 + \frac{4}{3} \left(\frac{\Delta_{SO}}{E_g} \right) + \frac{4}{9} \left(\frac{\Delta_{SO}}{E_g} \right)^2}$$

é o coeficiente de não-parabolicidade[31].

Um gráfico das bandas de energia obtidas das equações (2.7), (2.8), (2.9) e (2.10) é apresentado na figura (2.1) para o GaAs. Foram utilizados os seguintes valores: $E_g = 1.519\text{eV}$, $E_P = 25.7\text{eV}$ e $\Delta_{SO} = 0.343\text{eV}$ [32]. O modelo desenvolvido resulta em bandas de energia com simetria esférica, com massas (em unidades de m_0) $m_{hh} = -1.0$, $m_e = 0.059$, $m_{lh} = 0.097$ e $m_{so} = 0.278$. Este resultado pode ser comparado ao resultado experimental: faixa de condução com simetria esférica e massa efetiva $m_e = 0.067$, e faixas de valência com simetria cúbica, sendo as massas efetivas ao longo da direção [100] e [111] dadas por: $m_{hh}[100] = 0.33$, $m_{hh}[111] = 0.75$ (média $m_{hh}^* = 0.54$), $m_{lh}[100] = 0.094$, $m_{lh}[111] = 0.082$ (média $m_{lh}^* = 0.088$) e $m_{so}[100] = 0.17$ ([32], apêndice K).

O modelo apresentado descreve bastante bem as faixas de energia reais, ainda que os valores de massa efetiva não sejam muito precisos. A principal falha está na curvatura da faixa de buracos pesados, caracterizada por uma massa negativa.

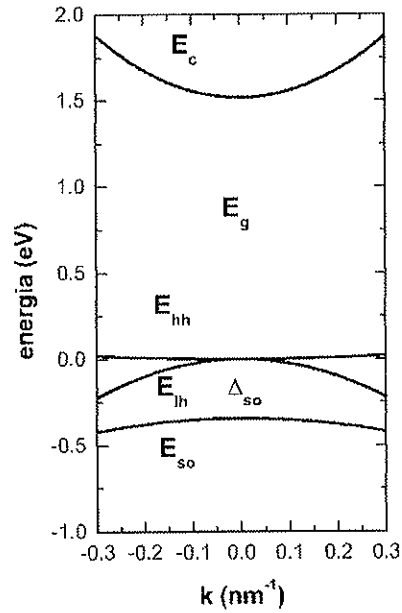


Figura 2.1: Bandas de energia provenientes da solução da matriz $k \cdot p$ utilizando o modelo de Kane de 8 bandas, para o *bulk*.

As diferenças entre o resultado do modelo e os valores experimentais é atribuída à existência de outras bandas (bandas *remotas*), não incluídas na base restrita de Kane. Ao invés de aumentar a ordem da matriz, a inclusão de bandas remotas é efetuada através da adição de termos à matriz 8×8 . A inclusão de bandas remotas utiliza o procedimento de renormalização de Löwdin[27, 33, 34]. Neste procedimento a matriz é dividida em duas partes: uma parte onde as funções de onda e suas interações mútuas são resolvidas exatamente, estas funções de onda são mostradas na tabela 1; e outra parte onde são resolvidas, utilizando a teoria de perturbação, as interações das funções de onda das bandas de condução e valências com as funções de onda das bandas remotas. O resultado final é, para $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$:

Matriz 2: Matriz de Kane com a Inclusão de Bandas Remotas

$$\begin{bmatrix}
 E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{m_0} \left(F + \frac{1}{2}\right) & -\sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & P k_{\pm} & -\frac{H_{12}}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{H_{13}^*}{\sqrt{3}} & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} H_{13}^* \\
 & E_v - \frac{\hbar^2 \gamma_- (k_x^2 + k_y^2)}{2m_0} & \frac{2\sqrt{6}\hbar^2 \gamma_3 k_x k_y}{2m_0} & \frac{\hbar^2 \gamma_2 \sqrt{2}}{2m_0} & (2k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) & \frac{H_{13}^*}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{\hbar^2 \sqrt{3} \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2)}{2m_0} + \frac{i\sqrt{3}\hbar^2 \gamma_3 k_x k_y}{m_0} & -\sqrt{\frac{3}{2}} H_{23}^* \\
 & \frac{\hbar^2 (\gamma_1 + 2\gamma_2) k_x^2}{2m_0} & E_v - \frac{\hbar^2 \gamma_+ (k_x^2 + k_y^2)}{2m_0} & -\frac{H_{23}^*}{\sqrt{2}} & 0 & -H_{27} & 0 & -\sqrt{2} H_{27} \\
 & & \frac{\hbar^2 (\gamma_1 - 2\gamma_2) k_x^2}{2m_0} & E_v - \frac{\hbar^2 k_x^2 \gamma_1}{2m_0} & -\Delta_{SO} & \sqrt{\frac{2}{3}} H_{13}^* & \sqrt{\frac{3}{2}} H_{23}^* & \sqrt{2} H_{27} & 0 \\
 & & & & & H_{11}^* & H_{12}^* & H_{13}^* & -\frac{H_{12}^*}{\sqrt{2}} \\
 & & & & & & H_{22}^* & H_{23}^* & H_{24}^* \\
 & & & & & & & H_{33}^* & -\frac{H_{23}^*}{\sqrt{2}} \\
 & & & & & & & & H_{44}^*
 \end{bmatrix}$$

onde,

$$F = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{m_c} - \left(1 + \frac{2}{3} \frac{E_P}{E_g} + \frac{1}{3} \frac{E_C}{E_g + \Delta_{SO}} \right) \right]$$

$$k_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (k_x \pm i k_y)$$

$$\gamma_{\pm} = \gamma_1 \pm \gamma_2$$

$$\gamma_1 = \gamma_{1L} - \frac{1}{3} \frac{E_P}{E_g}$$

$$\gamma_2 = \gamma_{2L} - \frac{1}{6} \frac{E_P}{E_g}$$

$$\gamma_3 = \gamma_{3L} - \frac{1}{3} \frac{E_P}{E_g}$$

onde γ_{1L} , γ_{2L} e γ_{3L} são chamados de *true Luttinger parameters*, e γ_1 , γ_2 e γ_3 são chamados de *modified Luttinger parameters*. Os valores de γ_{1L} , γ_{2L} e γ_{3L} são escolhidos de forma a satisfazer os valores experimentais de massa efetiva. Escolhendo [32]: $\gamma_{1L} = 6.8$, $\gamma_{2L} = 1.9$ e $\gamma_{3L} = 2.73$ obtemos:

$$m_{hh}[100] = (\gamma_{1L} - 2\gamma_{2L})^{-1}$$

$$m_{hh}[111] = (\gamma_{1L} - 2\gamma_{3L})^{-1}$$

$$m_{lh}[100] = (\gamma_{1L} + 2\gamma_{2L})^{-1}$$

$$m_{lh}[111] = (\gamma_{1L} + 2\gamma_{3L})^{-1}$$

$$m_{so}[100] = \left[\gamma_{1L} - \frac{E_P}{3E_g} \left(1 - \frac{E_g}{E_g + \Delta} \right) \right]^{-1},$$

que resulta em massas efetivas em concordância com o experimento.

2.3 Teoria da Massa Efetiva

A teoria da massa efetiva é de fundamental importância para o entendimento das propriedades ópticas e de transporte de elétrons em semicondutores pois transforma um problema de um elétron, de massa m_0 , em uma banda de energia, sob influência de um potencial periódico externo em um problema de um elétron, de massa efetiva m^* , onde o potencial periódico é eliminado.

Segundo o Teorema de Bloch, num potencial periódico as funções de onda de um elétron podem ser catalogadas segundo um número quântico \mathbf{k} , cujo valor está determinado pela relação

$$T_{\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.11)$$

onde $\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}$ são os vetores da rede cristalina. Esta relação mostra que os valores de \mathbf{k} e $\mathbf{k} + \mathbf{G}$, onde \mathbf{G} é um vetor da rede recíproca definida por $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}} = \text{inteiro} \times 2\pi$, são degenerados, portanto estão associados ao mesmo valor de energia, isto é, $E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E_n(\mathbf{k})$. A periodicidade de $E_n(\mathbf{k})$ possibilita a expansão de $E_n(\mathbf{k})$ em série de Fourier:

$$E_n(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{pqr}} C_n(\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}) e^{i\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}} \cdot \mathbf{k}}$$

Consideremos o operador:

$$\begin{aligned} E_n \left(\frac{\nabla}{i} \right) &= \sum_{\mathbf{pqr}} C_n(\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}) e^{\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}} \cdot \nabla} \\ &= \sum_{\mathbf{pqr}} C_n(\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}) \left[1 + \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}} \cdot \nabla + \frac{1}{2!} (\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}} \cdot \nabla)^2 + \dots \right] \end{aligned}$$

então,

$$E_n \left(\frac{\nabla}{i} \right) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{pqr}} C_n(\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}) \underbrace{[\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}} \cdot \nabla \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \dots]}_{\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}})}$$

e utilizando (2.11), temos que:

$$E_n \left(\frac{\nabla}{i} \right) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{pqr}} C_n(\mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{pqr}}} = E_n(\mathbf{k}) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.12)$$

Logo, o operador $E_n \left(\frac{\nabla}{i} \right)$ representa a hamiltoniana efetiva para os elétrons pertencentes à faixa de energia $E_n(\mathbf{k})$. Isto permanece válido quando o semiconductor for submetido a uma perturbação (impurezas, campo elétrico externo), desde que o estado perturbado possa ser descrito por um pacote

de onda cujos componentes estão limitadas a uma única faixa de energia, como veremos a seguir. A hamiltoniana neste caso é dada por:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m_0}}_{H_0} + V_{per}(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}),$$

onde V_{ext} é um potencial perturbativo externo.

Fazemos a expansão aproximada para os autoestados de H :

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} a_n(\mathbf{k}) \Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

então, usando (2.12), obtemos[[28], pág. 381]:

$$\left[E_n \left(\frac{\nabla}{i} \right) + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) = H \phi(\mathbf{r})$$

Isto é, a hamiltoniana H pode ser substituída por $E_n \left(\frac{\nabla}{i} \right) + V_{ext}(\mathbf{r})$. Esta é a Aproximação da Massa Efetiva. Nesta aproximação, para investigar os efeitos de campos elétricos externos e a não idealidade do cristal, é *suficiente conhecer a estrutura de bandas do material*, calculada como por exemplo na seção anterior.

O tratamento dos efeitos de um campo magnético externo sob os estados eletrônicos no cristal exige considerações adicionais. Na presença de um campo magnético, a hamiltoniana clássica de um elétron fica dada por:

$$H = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m_0}$$

onde \mathbf{p} é o momento generalizado e \mathbf{A} o potencial vetor. A energia (cinética) do elétron deve ser invariante sob uma transformada de calibre $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f$. Entretanto, nesta transformação a Hamiltoniana quântica muda de $H = \frac{(\frac{\hbar}{i}\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_0}$ para $H' = \frac{(\frac{\hbar}{i}\nabla + e\mathbf{A}')^2}{2m_0}$, fazendo com que a função de onda mude de Ψ para $\Psi' = e^{-\frac{i}{\hbar}e\mathbf{r}\cdot\nabla f}\Psi$, como pode ser verificado por substituição na equação $H'\Psi' = E\Psi'$, onde E vem da condição $H\Psi = E\Psi$.

Na aproximação semi-clássica, a função de onda de um elétron movendo-se num potencial escalar (campo magnético $\mathbf{B} = 0$) é dada por $\Psi = e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{r}}$ onde $\mathbf{k}(\mathbf{r})$ é o número de onda local. A energia deste estado é $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$. Na presença de um campo magnético, numa transformação de calibre, segundo vimos acima, esta função de onda é levada a $\Psi' = e^{-\frac{i}{\hbar}e\mathbf{r}\cdot\nabla f} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{r}}$. Isto, formalmente, equivale a uma transformação no vetor de onda $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar}\nabla f$. Porém, a energia do elétron tem de permanecer invariante, logo sua dependência em \mathbf{k} não pode ser dada pela mesma forma anterior. É evidente que a grandeza $\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}$ é invariante numa transformação de calibre, isto é, $\mathbf{k}' + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}' = \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}$. Logo para que a energia do elétron seja invariante, ela deverá ser dada por $E\left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right)$, em substituição à relação obtida para $\mathbf{B} = 0$.

Combinando este resultado com a teoria de massa efetiva, descrita anteriormente, podemos concluir que a energia do elétron pertencente à n -ésima faixa de energia de um semiconductor, na presença do campo magnético será dada pela hamiltoniana efetiva:

$$H = E_n \left(\frac{\nabla}{i} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)$$

Para uma banda esférica e parabólica, $E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}$, esta Hamiltoniana indica que o espectro contínuo de energias, característico de $B = 0$, é substituído por outro, não-contínuo, que apresenta singularidades, denominadas *níveis de Landau*, nas energias $(N + \frac{1}{2})\hbar\omega_n$, onde $\omega_n = \frac{eB}{m_n}$, e $N = 0, 1, \dots$

2.4 Faixas de Energia em Heteroestruturas

Consideraremos estruturas de camadas planares semicondutoras depositadas umas sobre as outras ao longo da direção z .

Para uma camada de GaAs, de 50\AA de espessura, entre duas camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, de 50\AA de espessura também, o limiar das faixas de condução e valência será, por exemplo:

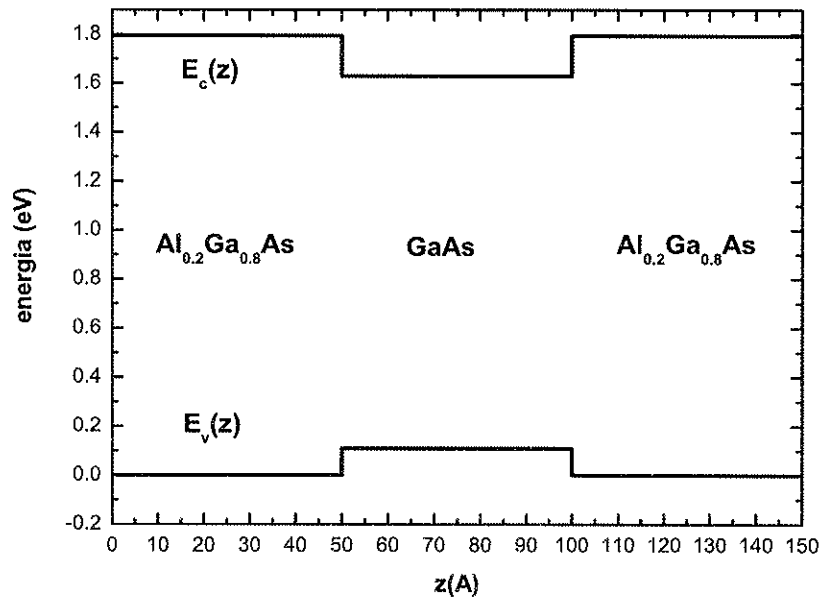


Figura 2.2: Limiar das faixas de condução e valência para um poço de potencial GaAs/ $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$.

2.4.1 Faixa de Condução

Por comparação com um semiconductor isotrópico, os elétrons da faixa de condução se movimentam num potencial $V(z) = E_c(z)$, onde $E_c(z)$ é a faixa de energia para o material que ocupa a região definida por z , calculada segundo os preceitos da seção 2.2. Na aproximação de massa efetiva, se ignorarmos a diferença na massa efetiva para os materiais, os estados do fundo da faixa de condução ($\mathbf{k} \approx 0$) serão determinados pela função de onda $\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \chi(z)$, associada à hamiltoniana:

$$H = E_c(k_x, k_y, \frac{1}{i} \frac{d}{dz}) + E_c(z)$$

onde $\chi(z)$ é a função de onda envelope para a faixa de condução. Na aproximação de bandas parabólicas obtemos:

$$H = -\frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_e} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} + E_c(z)$$

A variação da massa efetiva entre as camadas pode ser incorporada com a hamiltoniana de BenDaniel-Duke[35]:

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_e(z)}}_{H_\perp} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_e(z)} \frac{d}{dz}}_{H_z} + E_c(z)$$

que garante continuidade da função de onda envelope, e do fluxo de carga eletrônica através da interface entre os dois materiais, sendo H_z determinante dos limiares das sub-bandas de energia.

A dependência de H_\perp com z impede a separação de variáveis. Para separar variáveis, faz-se um tratamento perturbativo. Escrevemos:

$$H_\perp = \underbrace{-\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_\perp}}_{H_{\perp 0}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2} \left[\frac{1}{m_\perp} - \frac{1}{m_e(z)} \right]}_{H'_\perp}$$

Em ordem zero, obtemos:

$$H_0 = H_{\perp 0} + H_z$$

$$\Psi(r_\perp, z) = e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} \chi_\nu(z)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \varepsilon_{\nu}$$

onde ε_{ν} vêm de:

$$H_z \chi_{\nu}(z) = \varepsilon_{\nu} \chi_{\nu}(z)$$

O valor de m_{\perp} é obtido a partir da imposição de que a correção em ordem 1 para a energia, devido ao termo H'_{\perp} , seja igual a zero:

$$\int \chi_{\nu}^*(z) H'_{\perp} \chi_{\nu}(z) dz = 0$$

Substituindo H'_{\perp} obtemos:

$$\frac{1}{m_{\perp,\nu}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\chi_{\nu}(z)|^2}{m_e(z)} dz$$

Para que uma super-rede, de camadas A e B , e período d , segundo o Teorema de Bloch, teremos como solução:

$$\chi_{\nu}(z) \longrightarrow \chi_{\nu}(k_z, z)$$

e

$$\varepsilon_{\nu} \longrightarrow \varepsilon_{\nu}(k_z)$$

onde ε_{ν} é periódico, com período $\frac{2\pi}{d}$.

Na aproximação *tight-binding* de primeiros vizinhos, temos:

$$\varepsilon_{\nu}(k_z) = \frac{\Delta}{2} (1 - \cos k_z d) \quad (2.13)$$

onde Δ é a largura da minibanda.

2.4.2 Faixa de Valência

O tratamento das faixas de valência não pode ser efetuado da forma utilizada para a faixa de condução devido à degenerescência em $k = 0$, e à anisotropia da relação de dispersão.

Para tratar os estados da faixa de valência, faremos a expansão:

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_m(z) u_m(0, \mathbf{r})$$

onde $C_m(z)$ é a função envelope da m -ésima faixa de valência. A equação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (equação 2.3) é a mesma que a obtida anteriormente, exceto que, para tratar as faixas de valência utilizando o modelo de Kane, faremos as substituições[[29],pág. 69]:

$$k_z \rightarrow \frac{1}{i} \frac{d}{dz}$$

$$E_c \rightarrow E_c(z)$$

$$E_v \rightarrow E_v(z)$$

$$\Delta_{SO} \rightarrow \Delta_{SO}(z)$$

$$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \rightarrow \gamma_1(z), \gamma_2(z), \gamma_3(z)$$

$$P \rightarrow P(z)$$

$$f(z) k_z \rightarrow \frac{1}{2i} \left[f(z) \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} f(z) \right]$$

$$f(z) k_z^2 \rightarrow - \left[\frac{d}{dz} f(z) \frac{d}{dz} \right]$$

Nota-se que a matriz $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ torna-se uma matriz diferencial e as soluções passam a ser numéricas. Assim, a partir do cálculo da matriz $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para heteroestruturas[36, 37] construímos inicialmente, uma estrutura de bandas contendo as faixas de condução e de valência, para um poço de potencial GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As de 100Å/200Å de larguras conforme exemplo da referência [37]. Observamos uma completa igualdade entre as faixas de condução e de valência calculadas na referência e as calculadas através de nosso cálculo computacional, ver parte (a) da figura (2.3). Extraímos uma massa efetiva eletrônica de $m_e = 0.0716m_0$ que está em concordância com a massa efetiva eletrônica apresentada na referência [37].

Após confirmarmos a precisão de nosso cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ computacional, realizamos este cálculo para uma super-rede GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As de 50Å/50Å de larguras. Observamos as faixas de condução e de valência (parte (b) da figura 2.3). Neste caso, observa-se para k_{001} que a faixa de condução apresenta uma dispersão muito mais forte que a observada na faixa de valência. A largura na dispersão da faixa de condução observada é a largura da minibanda eletrônica ($\Delta = 16.7meV$). A largura observada da minibanda de valência($\Delta = 0.01meV$) pode ser desprezada. A faixa de valência apresenta um comportamento quase-bidimensional.

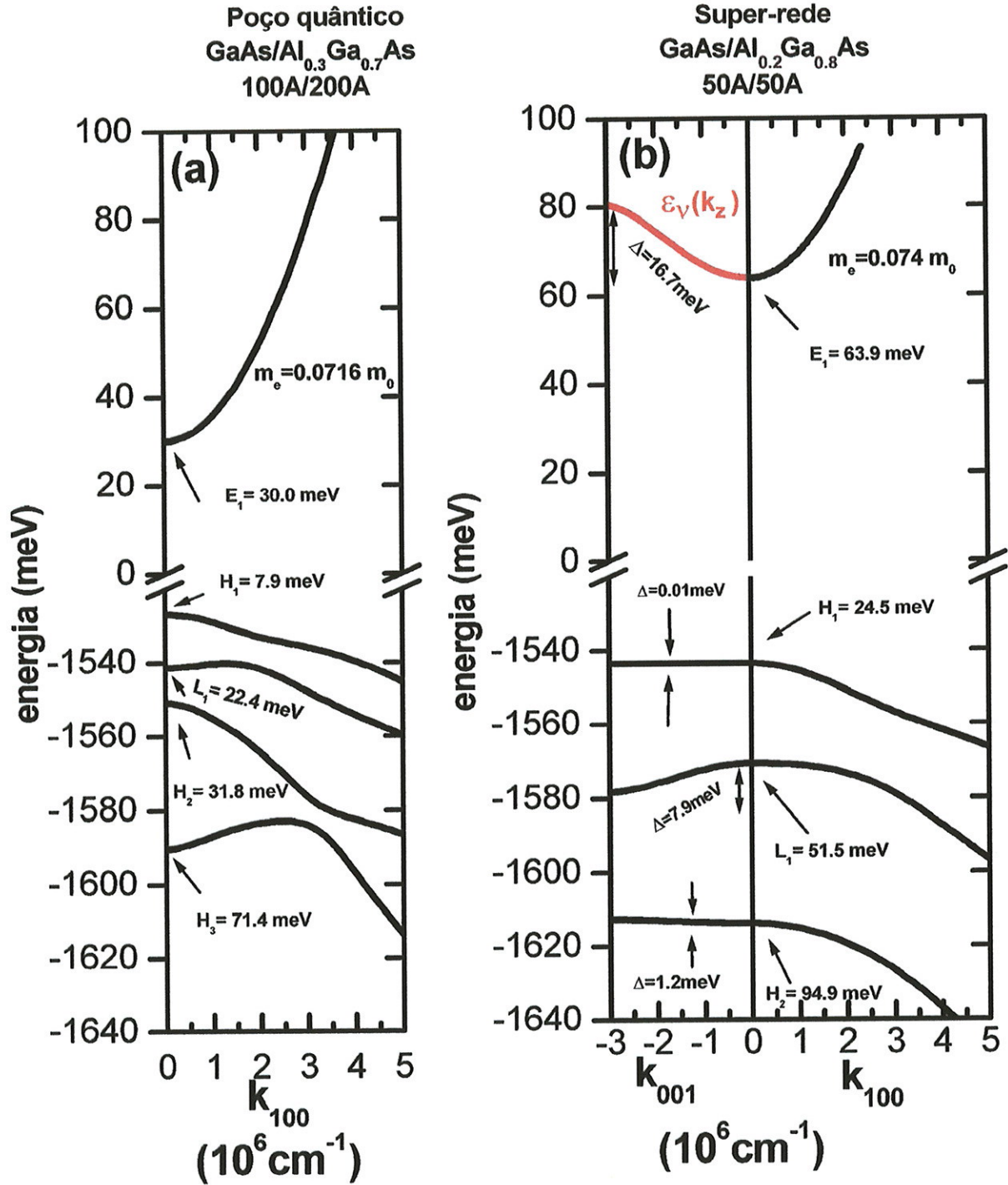


Figura 2.3: Bandas de energia provenientes da solução da matriz $k \cdot p$ utilizando o modelo de Kane de 8 bandas. Parte (a) para poço quântico; parte (b) para uma super-rede. A direção k_{100} está no plano de confinamento, enquanto que k_{001} é perpendicular a ele, onde $\epsilon_v(k_z)$ determina a minibanda energética da faixa de condução.

2.5 Princípio de Onsager

Em 1952, L.Onsager[38] mostrou que grandezas físicas tais como a susceptibilidade magnética apresentam um comportamento oscilatório regular quando plotada em função do inverso do campo magnético aplicado. Este comportamento oscilatório é também observado quando a grandeza física é a resistividade elétrica, efeito Shubnikov-de Haas.

Onsager indicou que em função de $\frac{1}{B}$, onde B é o campo magnético, as grandezas físicas oscilam com períodos, $\Delta\left(\frac{1}{B}\right)$, determinados pela relação:

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar} \frac{1}{A_{extremal}}, \quad (2.14)$$

onde $A_{extremal}$ é qualquer área de uma seção extremal da superfície de Fermi em um plano normal ao campo magnético aplicado. Denomina-se área da seção extremal qualquer área que satisfaz a condição $\frac{dA}{dk} = 0$, onde A é uma área da seção da superfície de Fermi e k é a componente do vetor \mathbf{k} na direção do campo magnético aplicado. Pode ser mínima ou máxima(ver figura 2.4).

Observando uma superfície de Fermi hipotética dada pela figura (2.4), temos que: considerando um campo magnético aplicado ao longo do eixo k_z , as áreas das seções extremais desta superfície de Fermi são dadas pelas áreas em vermelho. Temos uma área da seção extremal mínima e duas áreas de seções extremais máximas. A esta superfície de Fermi estarão associadas duas frequências de oscilação quando um campo magnético for aplicado na direção k_z (as áreas das seções extremais máximas desta superfície são iguais). É possível também identificar nesta figura (em preto), outras áreas de seções não-extremais na superfície de Fermi.

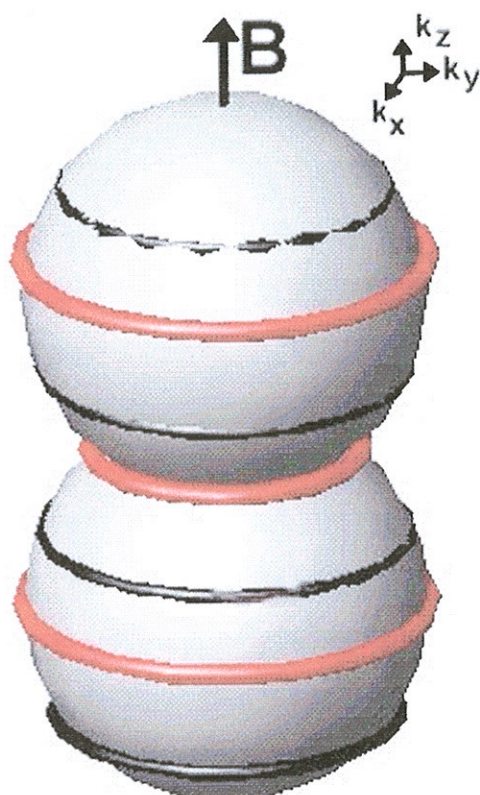


Figura 2.4: Ilustração de uma superfície de Fermi, o campo magnético está aplicado na direção do eixo k_z .

2.6 Superfície de Fermi para uma Super-rede Degenerada

Para uma super-rede, a relação de dispersão pode ser escrita da seguinte forma:

$$E(k_{\perp}, k_z) = E_{\perp}(k_{\perp}) + \varepsilon_{\nu}(k_z)$$

onde $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Os valores de k_{\perp} que definem a superfície de Fermi de uma super-rede degenerada e altamente dopada são dados por:

$$E_{\perp}(k_{\perp F}) + \varepsilon_{\nu}(k_z) = E_F, \quad (2.15)$$

onde E_F é a energia de Fermi. A figura (2.5) representa uma superfície de Fermi para uma super-rede.

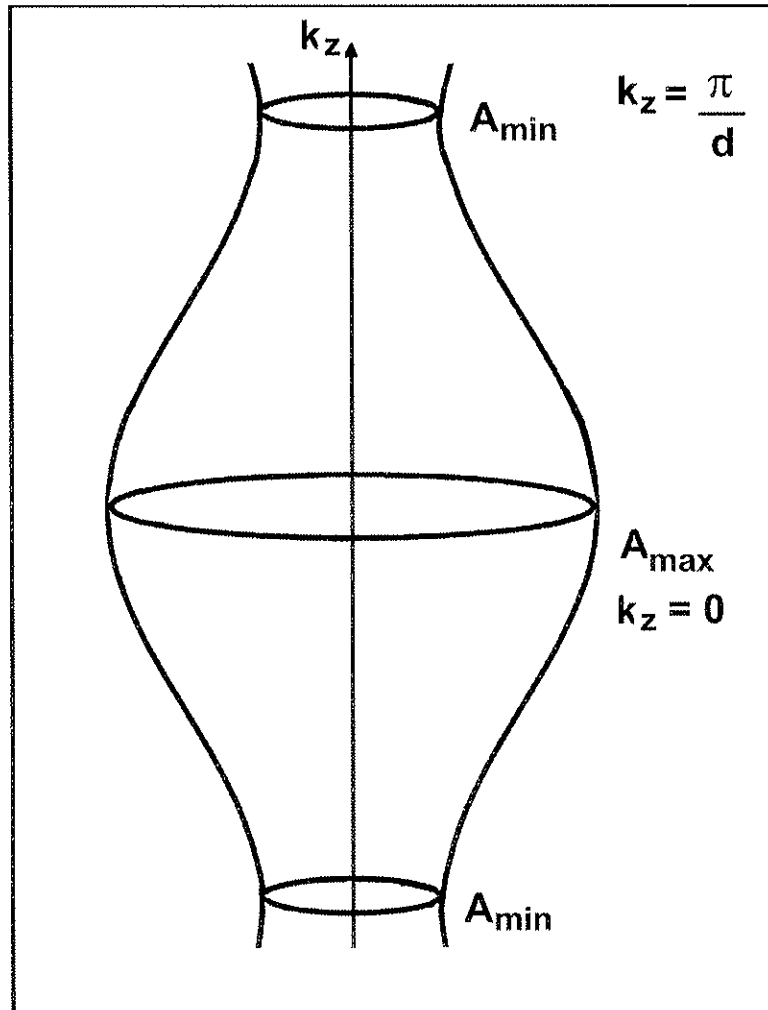


Figura 2.5: Superfície de Fermi para uma super-rede degenerada e dopada.

Considerando o caso parabólico, temos:

$$E_{\perp}(k_{\perp F}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp F}^2}{2m_e}$$

assim,

$$k_{\perp F} = \left\{ \frac{2m_e}{\hbar^2} [E_F - \varepsilon_{\nu}(k_z)] \right\}^{\frac{1}{2}}$$

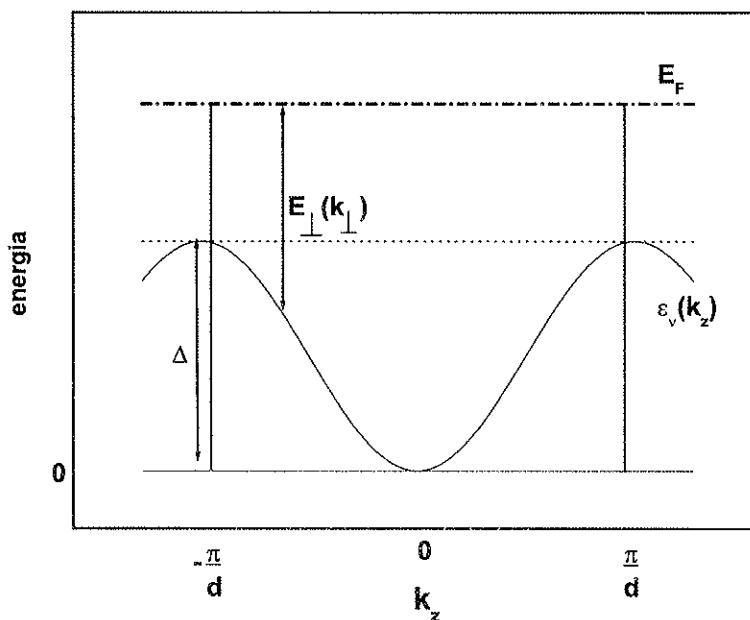


Figura 2.6: Relação de dispersão para uma super-rede, onde a energia de Fermi está localizada acima da minibanda de energia. Δ é a largura da minibanda e d é o período da super-rede.

As áreas das seções perpendiculares à direção k_z são dadas por:

$$A = \pi k_{\perp F}^2 = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} [E_F - \varepsilon_{\nu}(k_z)]$$

e as áreas das seções extremas, mínimas e máximas, desta superfície de Fermi são, respectivamente (ver figura 2.6):

$$A_{pesc} = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} \left[E_F - \varepsilon_{\nu} \left(\frac{\pi}{d} \right) \right] \quad (2.16)$$

$$A_{cint} = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} [E_F - \varepsilon_\nu(0)] \quad (2.17)$$

Definindo, $\phi = E_F - \varepsilon_\nu(0)$, sendo ϕ a energia de Fermi a partir do fundo da minibanda, podemos escrever:

$$A_{pesc} = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} [\phi - \Delta] \quad (2.18)$$

$$A_{cint} = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} \phi \quad (2.19)$$

As áreas das seções extremas A_{cint} e A_{pesc} estão associadas ao fundo ($k_z = 0$) e topo ($k_z = \frac{\pi}{d}$) da relação de dispersão da minibanda, e são chamadas de área da seção extremal de cintura e de pescoço, respectivamente. Nestes pontos da mini-zona de Brillouin a derivada de $\varepsilon_\nu(k_z)$ é zero, originando as singularidades de van Hove M_0 e M_1 .

2.6.1 Efeito Shubnikov-de Haas na Super-rede, e Obtenção da Largura da Minibanda, da Energia de Fermi e da Densidade de Portadores

Vimos que a partir do princípio de Onsager, obtemos as frequências de oscilação uma vez conhecidas as áreas das seções extremas da superfície de Fermi. Portanto, para uma super-rede obtemos as seguintes frequências de oscilação, para as frequências de pescoço e cintura que denotamos por B_{Fp} e B_{Fc} , respectivamente:

$$B_{Fp} = \left[\Delta \left(\frac{1}{B} \right)_{pesc} \right]^{-1} = \frac{\hbar}{2\pi e} A_{pesc} = \frac{m_e}{e\hbar} (\phi - \Delta)$$

$$B_{Fc} = \left[\Delta \left(\frac{1}{B} \right)_{cint} \right]^{-1} = \frac{\hbar}{2\pi e} A_{cint} = \frac{m_e}{e\hbar} \phi$$

onde utilizamos as relações (2.18) e (2.19). A partir destas frequências de oscilação é possível determinar a largura da minibanda:

$$\Delta = \frac{e\hbar}{m_e} (B_{Fc} - B_{Fp}) \quad (2.20)$$

e também a energia de Fermi:

$$\phi = \frac{e\hbar}{m_e} B_{Fc} \quad (2.21)$$

Além da largura energética da minibanda e a energia de Fermi é possível também extrairmos a densidade de portadores a partir das frequências de oscilação da super-rede. Para isso, inicialmente é necessário calcularmos o volume dentro da superfície de Fermi (Ω_k). Temos que:

$$\Omega_k = 2 \int_0^{\frac{\pi}{d}} dk_z \pi k_{\perp}^2(k_z) = 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{d}} dk_z \frac{2m_e}{\hbar^2} [E_F - \varepsilon_{\nu}(k_z)]$$

Considerando (2.13):

$$\varepsilon_{\nu}(k_z) = \frac{\Delta}{2} (1 - \cos k_z d)$$

e resolvendo a integral, temos que:

$$\Omega_k = \frac{4\pi^2 m_e}{\hbar^2 d} \left(\phi - \frac{\Delta}{2} \right)$$

Precisamos também calcular a degenerescência do espaço k . Para isso, utilizaremos as condições de contorno de Born-von Karman[39]: $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{L})$, onde $L = (L_x, 0, 0), (0, L_y, 0), (0, 0, L_z)$, sendo $(\mathbf{L} = N_i \mathbf{a}_i$ onde $i = x, y, z$ e \mathbf{a}_i são vetores da rede direta) e $\Psi(\mathbf{r})$ são as funções de onda eletrônicas que são funções de Bloch:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

impondo as condições de Born-von Karman, temos:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{L})} \underbrace{u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{L})}_{u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}} = 1$$

Por exemplo, sendo $\mathbf{L} = \hat{x}L_x$ temos:

$$k_x L_x = 2\pi n_x \Rightarrow k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}$$

onde, n_x é um número inteiro. Conseqüentemente:

$$k_y L_y = 2\pi n_y \Rightarrow k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}$$

$$k_z L_z = 2\pi n_z \Rightarrow k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}$$

onde, n_y e n_z são números inteiros(ver figura 2.7).

Portanto,

$$\mathbf{k} = 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right)$$

Estas condições quantizam o espaço k . Temos que um volume $\frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y} \frac{2\pi}{L_z}$ contém 2 elétrons (spin) portanto, o volume Ω_k deverá conter: $\frac{2\Omega_k V}{(2\pi)^3}$ elétrons.

O volume por período da super-rede é dado por: $V = A_{\perp} d$, onde d é o período da super-rede e A_{\perp} é a área da seção da superfície perpendicular à direção k_z . O número de elétrons num período da super-rede (N) é dado por:

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \Omega_k = \frac{2A_{\perp} d}{(2\pi)^3} \Omega_k$$

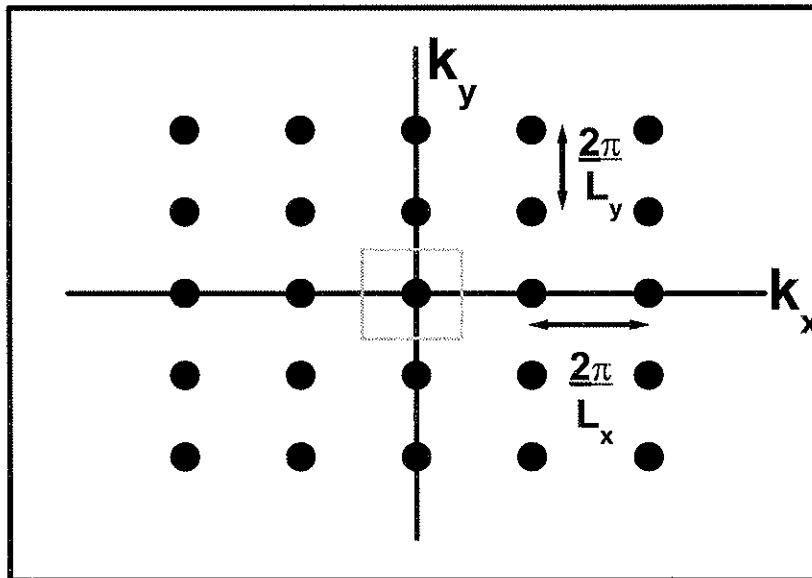


Figura 2.7: Pontos no espaço k bidimensional. A área por ponto é $(\frac{2\pi}{L})^2$ (área dentro do quadrado). Em q dimensões o volume por ponto é $(\frac{2\pi}{L})^q$.

A densidade superficial de elétrons (número de elétrons por unidade de área da seção da superfície por período da super-rede) n_{sdH} é encontrada fazendo:

$$n_{sdH} = \frac{N}{A_{\perp}} = \frac{2d}{(2\pi)^3} \Omega_k = \frac{m_e}{\pi \hbar^2} \left(\phi - \frac{\Delta}{2} \right)$$

utilizando (2.20) e (2.21) obtemos:

$$n_{sdH} = \frac{e}{h} (B_{Fc} + B_{Fp}) \quad (2.22)$$

Portanto, mostramos como extrair os parâmetros largura energética da minibanda, energia de Fermi e densidade de elétrons, a partir do espectro do efeito Shubnikov-de Haas para uma super-rede.

Em resumo, feita a medida experimental das oscilações da resistividade em função do campo magnético (efeito Shubnikov-de Haas), faz-se uma análise da curva, por análise de Fourier por exemplo, a fim de determinar as duas frequências de oscilação (cintura e pescoço, B_{Fc} e B_{Fp} , respectivamente). A partir destas frequências, a largura da minibanda, Δ , a energia de Fermi medida a partir do fundo da minibanda, ϕ , e a densidade de portadores, por unidade de área da seção da superfície e período da super-rede, n_{sdH} , são obtidas a partir das relações (2.20), (2.21) e (2.22), respectivamente.

2.7 Evidência da Formação de Minibandas - Efeito Shubnikov-de Haas em Ângulos Oblíquos

Podemos observar na figura (2.8) a superfície de Fermi para uma super-rede com uma minibanda completamente preenchida. O campo magnético está aplicado na direção k'_z que está inclinado em relação ao eixo k_z em um ângulo θ . Destacamos nesta figura as áreas das seções extremas mínimas e máximas da superfície de Fermi. Esta superfície de Fermi é dada pela fórmula: $\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_e} + \varepsilon_{\nu}(k_z) = \phi$.

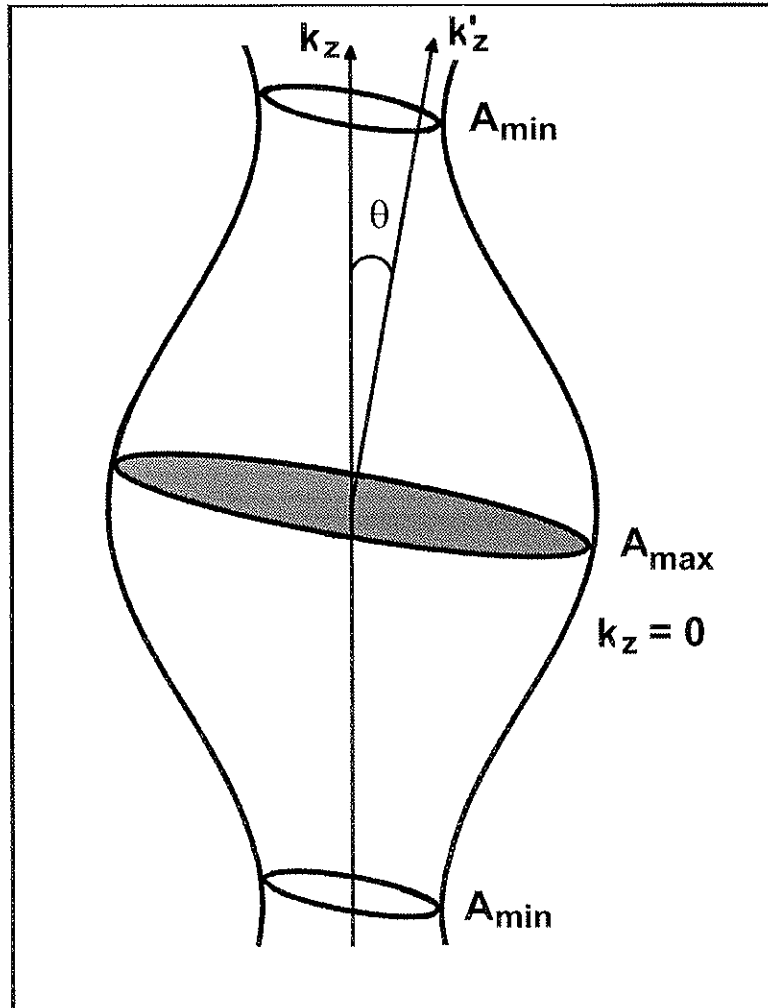


Figura 2.8: Superfície de Fermi para a super-rede. O campo magnético está aplicado na direção do eixo k'_z , que encontra-se inclinado em relação ao eixo k_z em um ângulo θ .

Para encontrarmos a área da seção da órbita de cintura (A_{max}) em campo oblíquo, fazemos uma mudança de variáveis (figura 2.9). Sendo o ponto P no espaço k , distanciada de a da origem, podemos escrever:

$$k_{y0} = a \cos \varphi \quad (2.23)$$

$$k_{z0} = a \sin \varphi \tag{2.24}$$

$$k'_{y0} = a \cos \varphi' \tag{2.25}$$

$$k'_{z0} = a \sin \varphi' \tag{2.26}$$

$$\varphi' = \varphi + \theta \longrightarrow \varphi = \varphi' - \theta \tag{2.27}$$

Que podem ser identificados na figura (2.9).

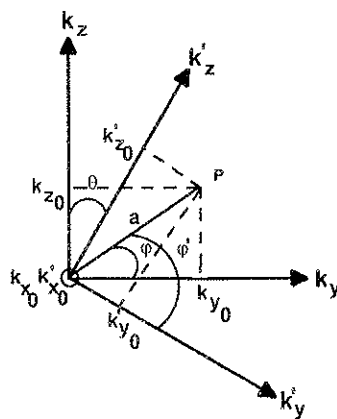


Figura 2.9: Mudança de variáveis.

Considerando que $k'_{x0} = k_{x0}$, e substituindo (2.27) em (2.23) e (2.24), e considerando (2.25) e (2.26). Ficamos com as seguintes coordenadas:

$$k_{y0} = a \cos (\varphi' - \theta) = a \cos \varphi' \cos \theta + a \sin \varphi' \sin \theta = k'_{y0} \cos \theta + k'_{z0} \sin \theta \tag{2.28}$$

$$k_{z0} = a \sin(\varphi' - \theta) = a \sin \varphi' \cos \theta + a \cos \varphi' \sin \theta = k'_{z0} \cos \theta - k'_{y0} \sin \theta \quad (2.29)$$

$$k_{x0} = k'_{x0} \quad (2.30)$$

Substituindo estas novas coordenadas (2.28), (2.29) e (2.30) na equação que define a superfície de Fermi temos:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[k_x'^2 + (k_y' \cos \theta + k_z' \sin \theta)^2 \right] + \varepsilon_\nu (k_z' \cos \theta - k_y' \sin \theta) = \phi$$

A área da seção extremal para a frequência de cintura ($k_z' = 0$) é encontrada a partir de:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[k_x'^2 + k_y'^2 \cos^2 \theta \right] + \varepsilon_\nu (k_y' \sin \theta) = \phi \quad (2.31)$$

Isolando k_x' temos:

$$k_x' = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\phi - \varepsilon_\nu (k_y' \sin \theta) - \frac{\hbar^2}{2m_e} k_y'^2 \cos^2 \theta \right]} \quad (2.32)$$

Analisando a equação (2.32) para $\theta = 0$ temos:

$$k_x' = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\phi - \frac{\hbar^2}{2m_e} k_y'^2 \right]} \quad (2.33)$$

que denota um círculo. Analisando a equação (2.32) para $\theta > 0$, temos que k_x' para $k_y' = 0$ não muda e que k_y' para $k_x' = 0$ é obtido a partir da equação transcendental abaixo:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} k_y'^2 \cos^2 \theta = \phi - \varepsilon_\nu (k_y' \sin \theta) \quad (2.34)$$

que denota uma elipse. O gráfico das equações (2.33) e (2.34) podem ser vistos na figura (2.10).

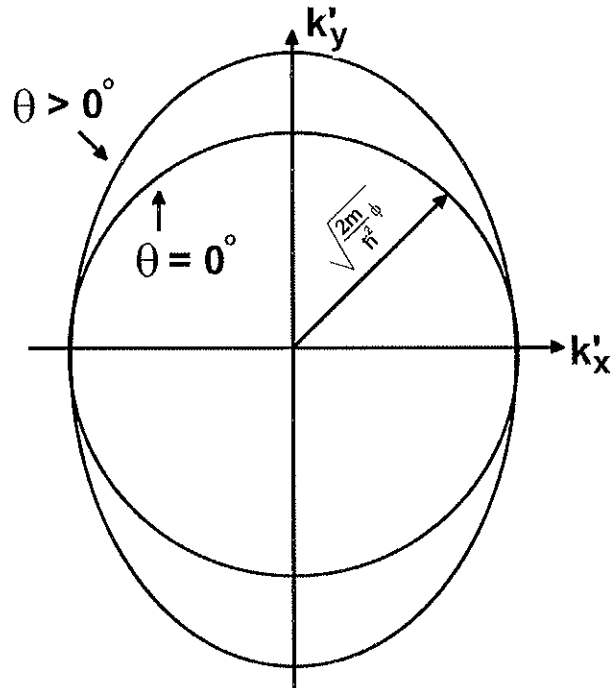


Figura 2.10: Áreas das seções extremas da órbita de cintura.

Para encontrarmos a área da seção da órbita de pescoço (A_{min}), fazemos a mesma mudança de variáveis identificadas na figura (2.9), porém inicialmente deslocamos nosso novo eixo de $\frac{\pi}{d}$, ver figura (2.11).

Assim, temos:

$$k''_z = k_z - \frac{\pi}{d}$$

$$k''_y = k_y$$

$$k''_x = k_x$$

Agora, mudando as coordenadas em virtude da inclinação temos:

$$k''_z = k'''_z \cos \theta - k'''_y \sin \theta$$

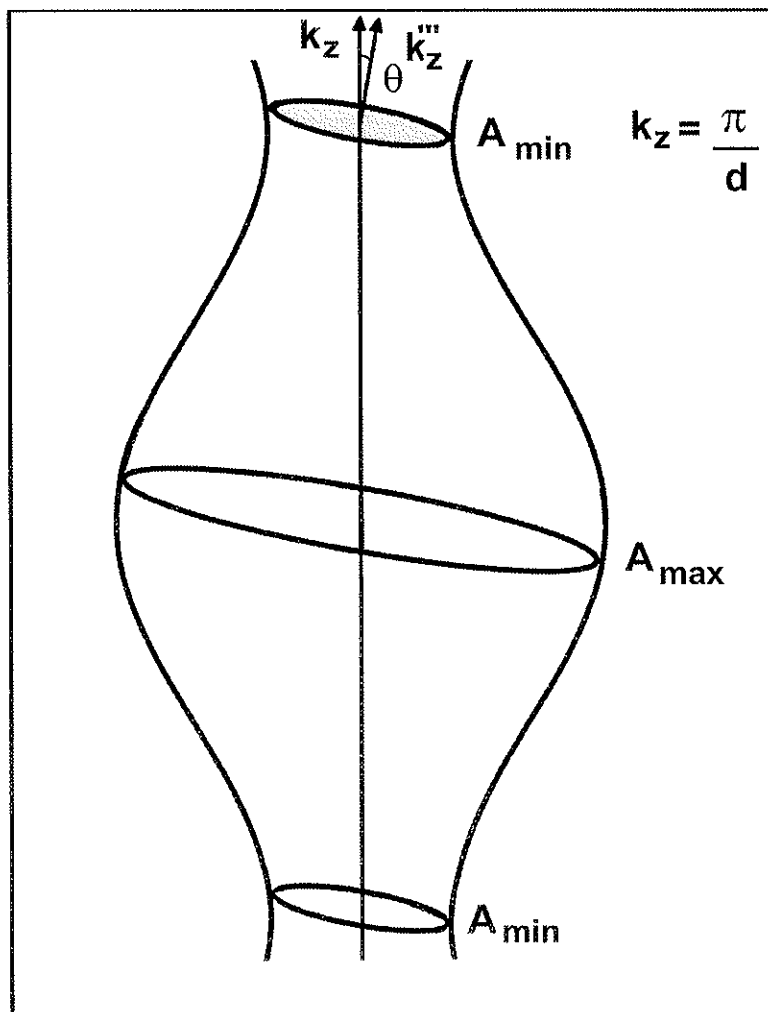


Figura 2.11: Superfície de Fermi para a super-rede. O campo magnético está aplicado na direção do eixo k_z''' , que encontra-se inclinado em relação ao eixo k_z em um ângulo θ .

$$k_y'' = k_y''' \cos \theta + k_z''' \sin \theta$$

$$k_x'' = k_x'''$$

Novamente, substituindo estas coordenadas na equação da superfície de Fermi, temos:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[k_x'''^2 + (k_y''' \cos \theta + k_z''' \sin \theta)^2 \right] + \varepsilon_\nu \left(k_z''' \cos \theta - k_y''' \sin \theta + \frac{\pi}{d} \right) = \phi \quad (2.35)$$

A área da seção extremal para a frequência de pescoço é encontrada considerando $k_z''' = 0$ na equação (2.35). Ficamos com:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[k_x'''^2 + k_y'''^2 \cos^2 \theta \right] + \varepsilon_\nu \left(k_y''' \sin \theta - \frac{\pi}{d} \right) = \phi \quad (2.36)$$

Analisando a equação (2.36) para $\theta = 0$ temos:

$$k_x''' = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\phi - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_e} k_y'''^2 \right]} \quad (2.37)$$

onde $\Delta = \varepsilon_\nu \left(-\frac{\pi}{d} \right) = \varepsilon_\nu \left(\frac{\pi}{d} \right)$ e que denota um círculo. Analisando a equação (2.36) para $\theta > 0$, temos que k_x''' para $k_y''' = 0$ não muda e k_y''' para $k_x''' = 0$ é obtido a partir da equação transcendental abaixo:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} k_y'''^2 \cos^2 \theta = \phi - \varepsilon_\nu \left(k_y''' \sin \theta - \frac{\pi}{d} \right) \quad (2.38)$$

que denota uma elipse. O gráfico das equações (2.37) e (2.38) podem ser vistos na figura (2.12).

Em geral, as áreas das seções extremas, são dadas por:

$$A_{cint.} = 4 \int_0^{k_{y,\max}'} k_x'(k_y') dk_y'$$

$$A_{pesc.} = 4 \int_0^{k_{y,\max}'''} k_x'''(k_y''') dk_y'''$$

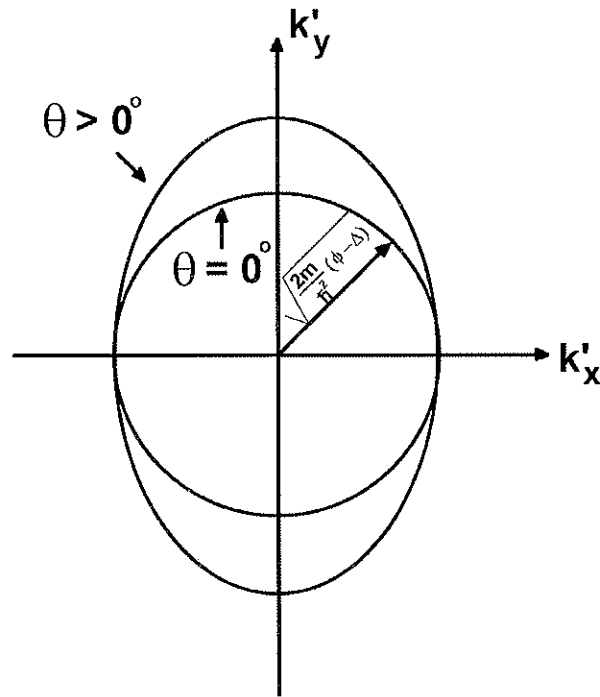


Figura 2.12: Áreas das seções extremais da órbita de pescoço.

Estas áreas das seções podem ser determinadas através de um cálculo numérico, no qual utiliza-se a relação de dispersão $\varepsilon_\nu(k_z)$. Um exemplo é dado pela figura (2.13).

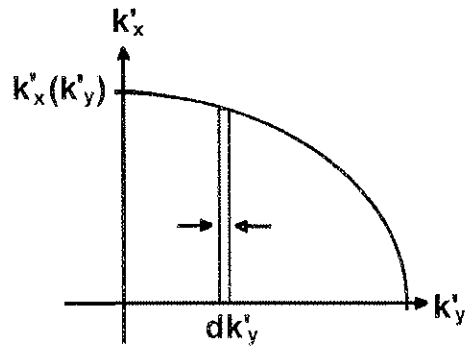


Figura 2.13: Cálculo da área da elipse.

Observamos que as áreas das seções extremais das órbitas de cintura e pescoço são dadas pelas equações (2.31) e (2.36), respectivamente.

Vamos analisar o caso limite, em que os poços estão desacoplados, e $\varepsilon_\nu(k_z) = \varepsilon_{\nu 0}$. A equação genérica que descreve a área da seção extremal é dada por:

$$k_x'^2 + k_y'^2 \cos^2 \theta = (\phi - \varepsilon_{\nu 0}) \frac{2m_e}{\hbar^2}$$

denotando $\varkappa'_y = k'_y \cos \theta$ temos:

$$k_x'^2 + \varkappa_y'^2 = (\phi - \varepsilon_{\nu 0}) \frac{2m_e}{\hbar^2}$$

que denota um círculo de raio $\sqrt{(\phi - \varepsilon_{\nu 0}) \frac{2m_e}{\hbar^2}}$. A área dentro deste círculo é encontrada fazendo:

$$A' = \pi \frac{2m_e}{\hbar^2} (\phi - \varepsilon_{\nu 0})$$

sendo $dA = dk'_x dk'_y = dk'_x \frac{d\varkappa'_y}{\cos \theta} = \frac{dA'}{\cos \theta}$. Portanto a área da seção extremal, em função do ângulo θ , é dada por:

$$A_{2D}(\theta) = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} (\phi - \varepsilon_{\nu 0}) \frac{1}{\cos \theta}$$

Na figura (2.14) podemos observar a evolução das frequências de cintura e pescoço em função do ângulo de inclinação do campo magnético aplicado para uma super-rede GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As de período 100 Å (largura do poço igual à largura da barreira), com densidade de portadores $n = 1.42 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. O entrelaçamento observado entre as órbitas de cintura e pescoço é uma impressão digital da relação de dispersão da super-rede e apresenta um comportamento característico de sistemas quase-bidimensionais. A linha pontilhada indica um sistema bidimensional, onde $B_{2D} = \frac{B_{Fc}(\theta=0^\circ) + B_{Fp}(\theta=0^\circ)}{2} \frac{1}{\cos \theta}$.

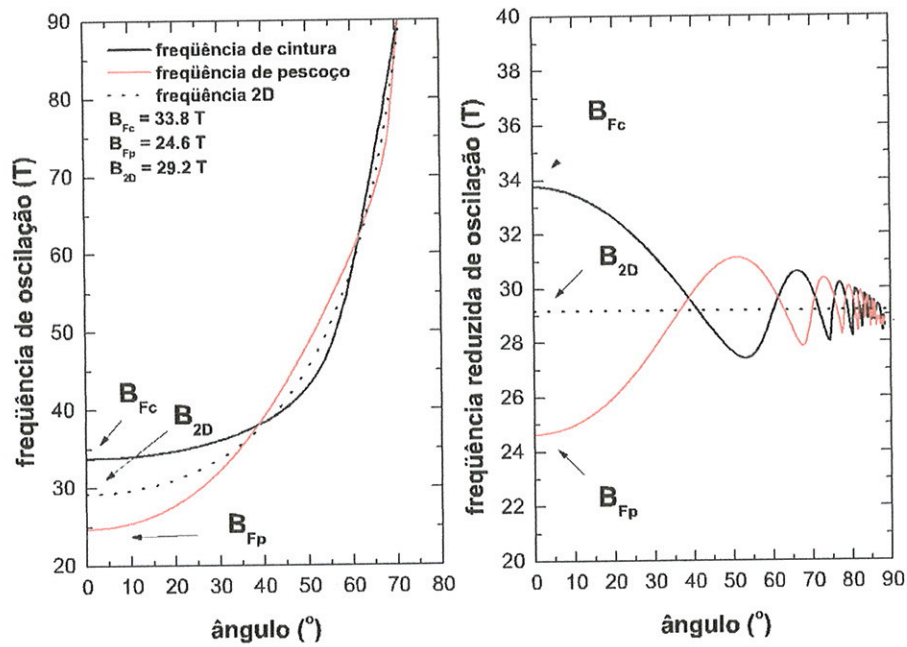


Figura 2.14: Frequências de cintura e pescoço em função do ângulo de inclinação do campo magnético aplicado. Do lado esquerdo observa-se estas frequências de cintura(preto), pescoço(vermelho) e a frequência bidimensional(tracejada) em função do ângulo. Do lado direito observa-se as frequências reduzidas, ou seja, frequências $\times \cos(\text{ângulo})$ em função do ângulo de inclinação.

2.8 Projeto de Super-redes

Na seção anterior verificamos que, teoricamente, o experimento de Shubnikov-de Haas pode servir para evidenciar a formação de minibandas em uma amostra de super-rede. Entretanto, na análise efetuada, não foram levados em consideração os efeitos dos processos de espalhamento. Os processos de espalhamento limitam o tempo de meia vida dos estados estacionários, τ_Q , por consequência causam uma incerteza, $\gamma \sim \frac{\hbar}{\tau_Q}$, nas energias destes estados. Se esta incerteza se tornar maior do que a largura da minibanda, $\gamma > \Delta$, então as singularidades de van Hove M_0 e M_1 não poderão ser distinguidas, pois na prática a densidade de estados será a convolução da densidade de estados para a super-rede ideal com uma função de alargamento com largura superior a Δ . Conseqüentemente, não será possível distinguir experimentalmente as duas freqüências B_{Fc} e B_{Fp} no experimento Shubnikov-de Haas. Uma análise quantitativa do alargamento dos níveis de energia sobre o espectro Shubnikov-de Haas pode ser encontrada na referência [40].

Portanto, para observar-se as duas freqüências B_{Fc} e B_{Fp} no espectro Shubnikov-de Haas é necessário satisfazer:

$$\gamma < \Delta \quad (2.39)$$

A resolução destas duas freqüências será tão melhor quanto menor for γ .

Nas super-redes dopadas, o principal mecanismo de espalhamento é a interação Coulombiana entre os elétrons da minibanda e os centros doadores ionizados[41, 42]. Neste trabalho, estudamos amostras nas quais as impurezas doadoras estão situadas no meio das barreiras que separam os poços. Para minorar o alargamento dos níveis de energia, é então necessário aumentar a largura das barreiras, a fim de afastar os elétrons dos centros doadores, e diminuir a densidade de doadores a fim de reduzir a intensidade da interação Coulombiana entre elétrons e doadores ionizados.

Entretanto, o aumento da largura das barreiras reduz a probabilidade de tunelamento através das mesmas, e isto ocasiona uma redução da largura da minibanda Δ , tornando mais difícil satisfazer (2.39).

Por outro lado, a redução da densidade de impurezas ocasiona uma redução das freqüências teóricas $B_{Fc} = \frac{m_e}{e\hbar} \phi$ e $B_{Fp} = \frac{m_e}{e\hbar} (\phi - \Delta)$; na prática quanto mais altas forem estas freqüências, mais fácil será detectá-las experimentalmente, pois se tornarão melhor distinguíveis do espectro de baixa freqüência associado ao fundo magneto-resistivo não-oscilatório.

Portanto, é necessário encontrar um compromisso entre todos estes fatores, se desejarmos observar experimentalmente a manifestação das duas singularidades de van Hove, M_0 e M_1 . Necessitamos uma amostra com a maior densidade de portadores possível, a máxima largura da minibanda possível (mínima largura de barreira possível) e mínimo alargamento dos níveis de energia. Isto pode ser formulado da seguinte forma:

- (a) Para resolução das duas freqüências de oscilação:

$$\Delta > \gamma \quad (2.40)$$

(b) Para frequências de Fourier bem afastadas do espectro de fundo: ϕ e $\phi - \Delta$ máximos; vamos exigir que, pelo menos:

$$\phi - \Delta > \gamma \quad (2.41)$$

A relação (2.41) pode ser reformulada em termos de B_{Fp} , usando a relação $B_{Fp} = \frac{m_e}{e\hbar} (\phi - \Delta)$ e introduzindo a *mobilidade quântica*, $\mu_Q = \frac{e}{m_e} \frac{\hbar}{2\gamma}$:

$$B_{Fp}\mu_Q > 1 \quad (2.42)$$

A relação (2.40) poder ser reformulada em termos de $\Delta B = B_{Fc} - B_{Fp} = \frac{m_e}{e\hbar} \Delta$, para obtermos:

$$\Delta B\mu_Q > 1 \quad (2.43)$$

Escolhemos, como grandeza a ser maximizada, o produto $B_{Fp}\mu_Q \times \Delta B\mu_Q$. Na realidade, dado que μ_Q pode variar dentro da minibanda, utilizaremos $\eta = B_{Fp}\Delta B < \mu_Q >^2$ como figura de mérito. Procuraremos os parâmetros da super-rede que resultam em η máximo.

A figura (2.15) apresenta os gráficos de η em função da largura da barreira, L_B , para uma super-rede GaAs/Al_xGa_{1-x}As, a largura de cada poço é mantida igual a L_B , também. As super-redes possuem 20 períodos de $2 \times L_B$. No gráfico (a) observam-se as diversas curvas de η correspondentes a valores diferentes de concentração de portadores, admitindo que todos os doadores ionizados doam seus elétrons para a faixa de condução, para uma super-rede GaAs/Al_{0.21}Ga_{0.79}As, para uma largura a meia altura da gaussiana que determina a distribuição de dopantes de Si de 5Å. No gráfico (b) observa-se a mesma super-rede de (a) mas com a largura a meia altura da gaussiana que determina a distribuição de dopantes de Si de 30Å. No gráfico (c) observa-se as curvas de η para uma super-rede GaAs/Al_{0.23}Ga_{0.77}As e para uma largura a meia altura da gaussiana que determina a distribuição de dopantes de Si de 5Å.

As curvas apresentadas são limitadas para os valores de parâmetros que resultam em somente uma minibanda ocupada por elétrons. Observa-se que a região de máximos valores de η corresponde a L_B no intervalo entre 25Å e 50Å.

¹Os valores de μ_Q foram calculados de acordo com a referência [43].

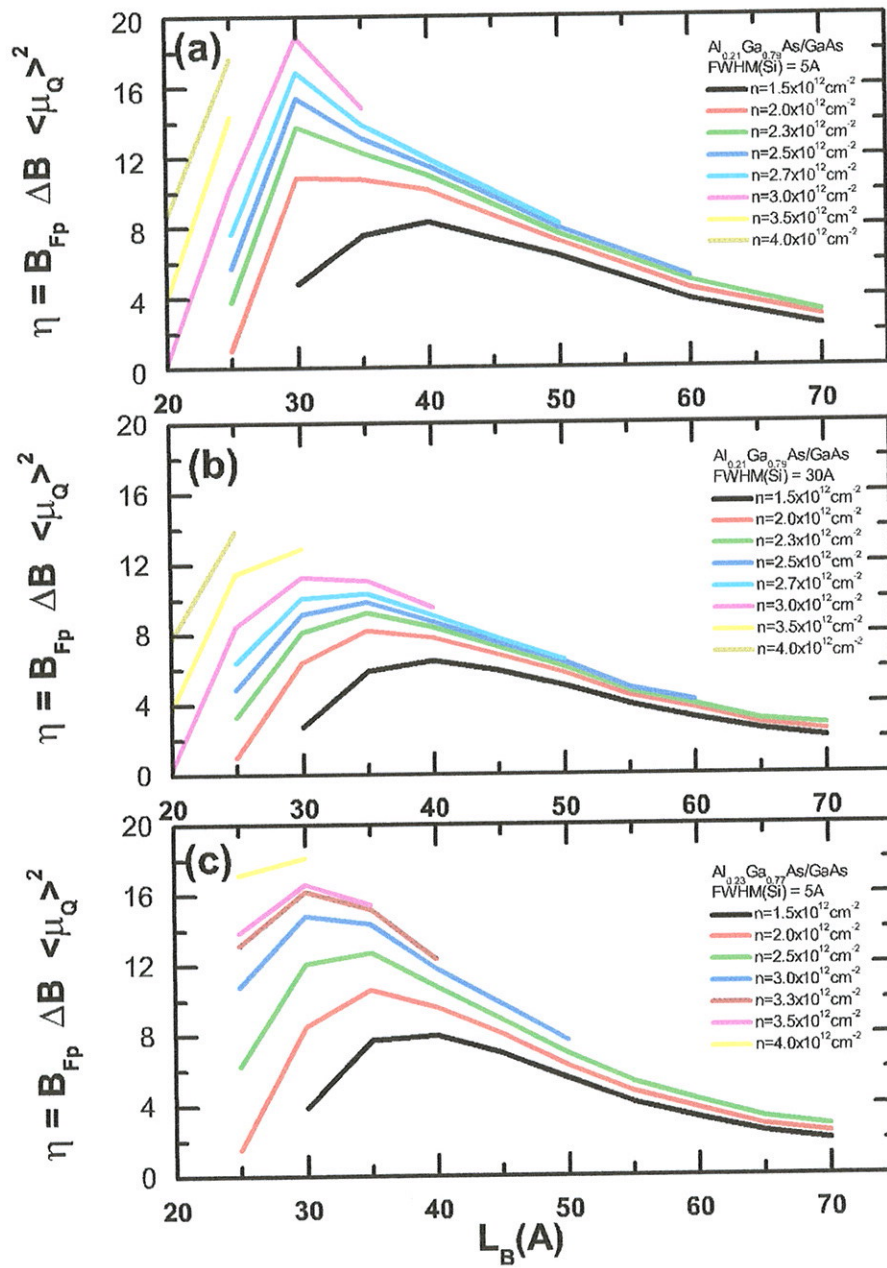


Figura 2.15: Simulação computacional das mobilidades e das frequências das super-redes.

Foram escolhidas para o crescimento as amostras GaAs/Al_{0.21}Ga_{0.79}As com dopagem de silício de $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ nas barreiras internas. A tabela abaixo mostra os parâmetros nominais e as características teóricas das amostras selecionadas para serem crescidas.

Tabela 2: Parâmetros nominais e características teóricas das amostras selecionadas para serem crescidas, onde L_B é a largura dos poços e barreiras, ΔB é a diferença entre B_{Fc} e B_{Fp} , onde B_{Fc} é a frequência de cintura e B_{Fp} é a frequência de pescoço, $\mu_Q^{(c)}$ é a mobilidade quântica teórica para a órbita de cintura, $\mu_Q^{(p)}$ é a mobilidade quântica teórica para a órbita de pescoço, e

$$\eta = B_{Fp} \Delta B < \mu_Q >^2.$$

Amostra	L_B (Å)	$\Delta B(T)$	$B_{Fc}(T)$	$B_{Fp}(T)$	$\mu_Q^{(c)}(T^{-1})$	$\mu_Q^{(p)}(T^{-1})$	η
A	60	4.6	53.8	49.2	0.12	0.14	3.8
B	55	6.2	54.8	48.6	0.12	0.14	5.1
C	45	13.0	57.8	44.8	0.11	0.12	7.7
D	40	18.6	60.5	41.9	0.10	0.10	7.8
E	35	28.7	64.6	35.9	0.10	0.10	10.3
F	30	43.5	71.1	27.6	0.09	0.09	9.7

Considerando μ_Q como sendo o valor médio de $\mu_Q^{(c)}$ e $\mu_Q^{(p)}$, observa-se que teoricamente todas as amostras (de A à F) satisfazem a relação (2.42). Verifica-se também que apenas as amostras A e B não satisfazem a relação (2.43). Os valores teóricos da figura de mérito η estão incluídos na tabela 2. Para a investigação experimental, foram crescidas amostras com parâmetros nominais semelhantes aos parâmetros das estruturas contidas na tabela 2.

Capítulo 3

Procedimento Experimental

Neste capítulo iremos descrever as montagens experimentais utilizadas neste trabalho. Foram efetuadas medidas de fotoluminescência em baixas temperaturas e altos campos magnéticos, e medidas do efeito Shubnikov-de Haas.

3.1 Experimento de Shubnikov-de Haas

No desenho esquemático da figura (3.1) podemos observar a montagem experimental utilizada para realizarmos as medidas do efeito Shubnikov-de Haas. Observa-se: um criostato e a bobina supercondutora da *Cryogenic* que fornecem campos magnéticos de até 17 T, que está ligada à fonte de alimentação da bobina (*Cryogenic Magnet Power Supply*) que controla o campo magnético da bobina supercondutora; o porta-amostra giratório que está inserido no criostato; uma fonte de corrente que alimenta as super-redes com correntes da ordem de centenas de micro-ampères através de contatos elétricos; um controlador(scanner-K 7001) *switch system* que permite configurar as entradas de corrente e a leitura da voltagem nos quatro contatos na super-rede, a este controlador estão ligados a fonte de corrente(K 220) e um voltímetro(K 182) que mede as voltagens das super-redes; um multímetro(K 2000) que lê e converte a corrente da bobina supercondutora em unidades do campo magnético; além de um controlador de temperatura (Lakeshore 340) que permite ler e controlar a temperatura na amostra; e finalmente um microcomputador que gerencia os equipamentos, controla o ângulo em que a medida será realizada através do motor de passo que está posicionado na parte superior do porta-amostra giratório, e faz a aquisição de dados através da porta GPIB. Desta forma temos uma completa automatização das medidas do efeito Shubnikov-se Haas.

3.1.1 Porta-amostra Giratório

Para efetuar as medidas em função do ângulo entre a normal a superfície (eixo da super-rede) e a direção do campo magnético (ângulo θ na figura 3.2) foi necessário o desenvolvimento de um porta-amostra especial, denominado aqui como *porta-amostra giratório*. Todo o material utilizado na construção do porta-amostra foi não-magnético.

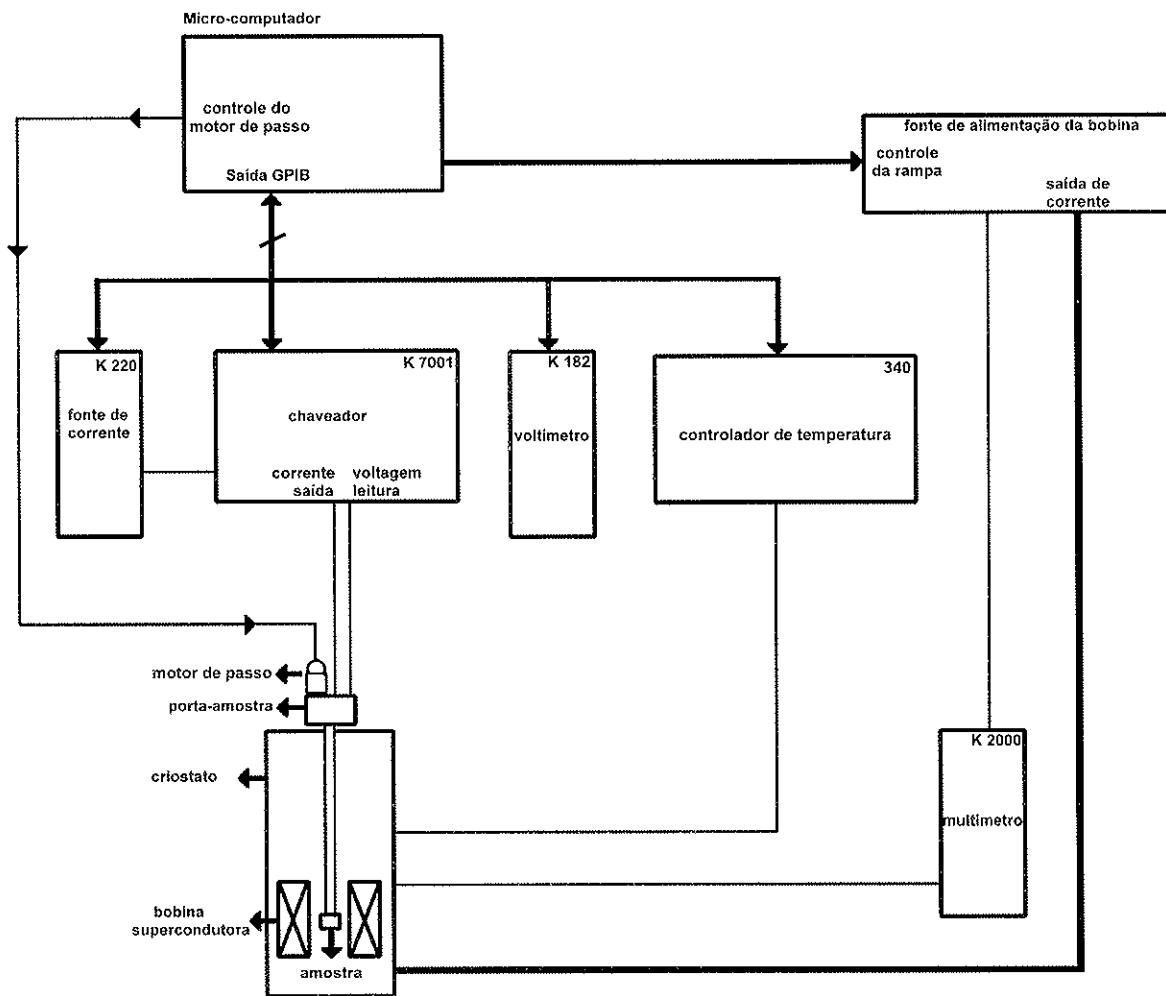


Figura 3.1: Desenho esquemático da montagem experimental para efetuarmos a medida do efeito Shubnikov-de Haas.

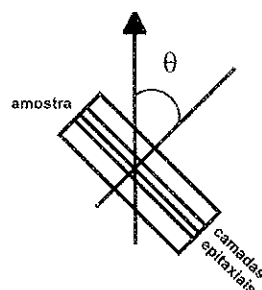


Figura 3.2: Desenho esquemático da inclinação da amostra.

Na figura (3.3) podemos observar detalhes do porta-amostra giratório. Neste porta-amostra foi incluído o uso de um motor de passo para fixar com precisão o ângulo de inclinação entre a normal à superfície da amostra e o campo magnético aplicado. A precisão do goniômetro utilizado é de 0.1° . A rotação da amostra é feita através de uma haste presa na parte superior do porta-amostra. O motor de passo faz girar as engrenagens (pinho e coroa) da parte inferior do porta-amostra que conseqüentemente gira a amostra. Os fios utilizados para contatos elétricos passam pelo interior do tubo do porta-amostra, na parte inferior, estes fios passam por dentro de um tubo fino e são soldados na base do porta-amostra. Na figura (3.4) observamos o porta-amostra giratório em um ângulo onde é possível observar também a amostra localizada na parte inferior do porta-amostra.

O porta-amostra é inserido em um criostato e o anel de posicionamento sustenta o porta-amostra e faz com que a amostra fique localizada no ponto de campo magnético mais intenso no interior da bobina supercondutora do criostato. O criostato fornece-nos condições de realizarmos medidas em temperaturas em torno de 2 Kelvin e campos magnéticos de até 17 Tesla.

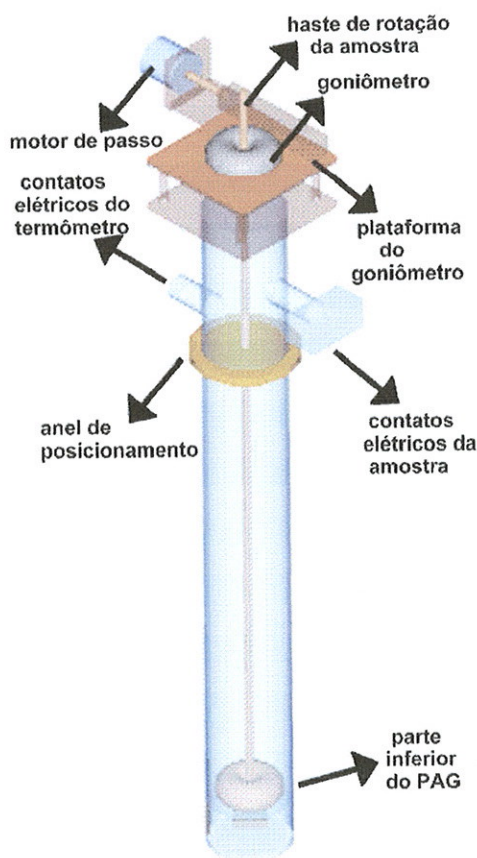


Figura 3.3: Esquema do porta-amostra giratório.

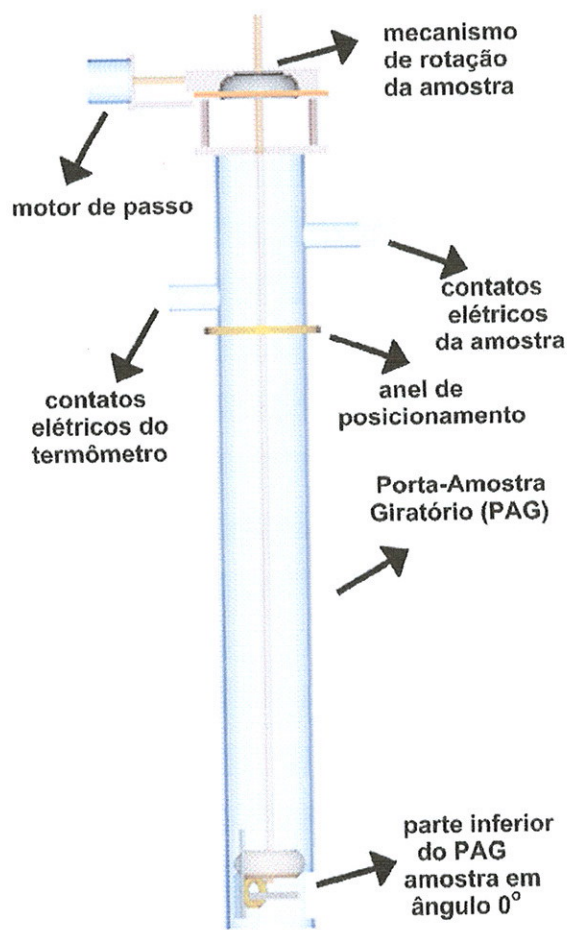


Figura 3.4: Esquema do porta-amostra giratório. Visão lateral.

Nas figuras (3.5) e (3.6) observamos o final da haste que faz girar as engrenagens do porta-amostra giratório. Na figura (3.5) observamos as engrenagens que, quando acionadas pelo motor de passo, fazem girar as amostras e o tubo pelo qual passam os fios para os contatos elétricos. Na figura (3.6) observamos a amostra em um ângulo oblíquo.

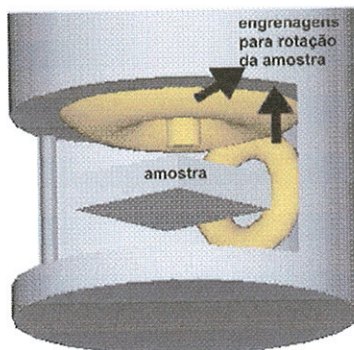


Figura 3.5: Esquema do porta-amostra giratório. Visão em ângulo das engrenagens de rotação da amostra.

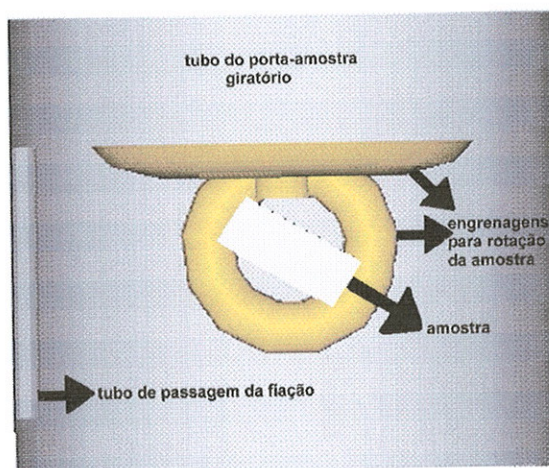


Figura 3.6: Esquema do porta-amostra giratório. Visão horizontal da parte inferior, a amostra está em um ângulo oblíquo em relação à direção do campo magnético.

Na figura (3.7) observamos com mais detalhes a parte superior do porta-amostra giratório.

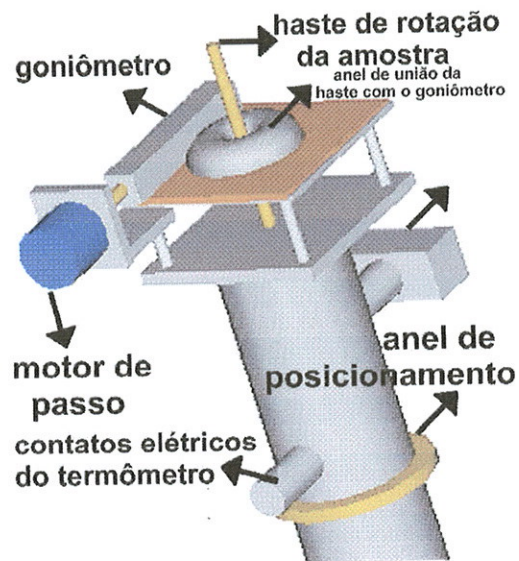


Figura 3.7: Esquema do porta-amostra giratório. Visão inclinada da parte superior.

Uma visão mais real do porta-amostra giratório pode ser mostrada através das fotos. Na foto da figura (3.8) observa-se uma visão por inteiro do porta-amostra giratório. Os detalhes das parte inferior e superior serão mostradas na seqüência.

Nas figuras (3.9) e (3.10) observa-se detalhes da parte inferior do porta-amostra giratório.

Nas figuras (3.11) e (3.12) observa-se detalhes da parte superior do porta-amostra giratório.

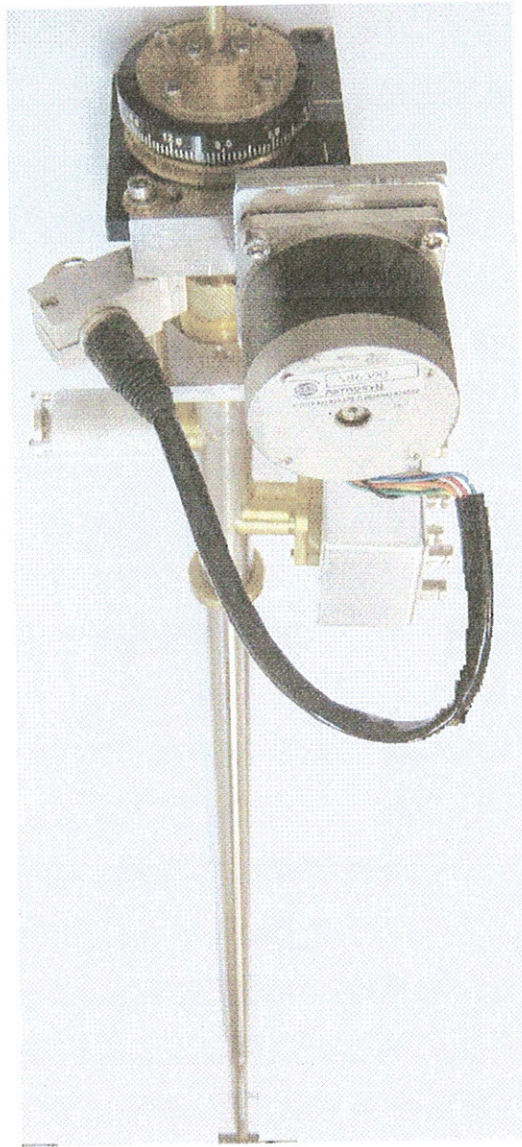


Figura 3.8: Foto do porta-amostra giratório. Visão por inteiro.

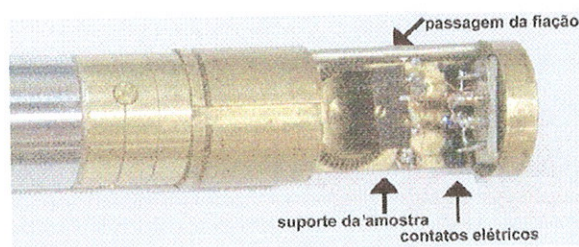


Figura 3.9: Foto da parte inferior do porta-amostra giratório. Visão lateral.

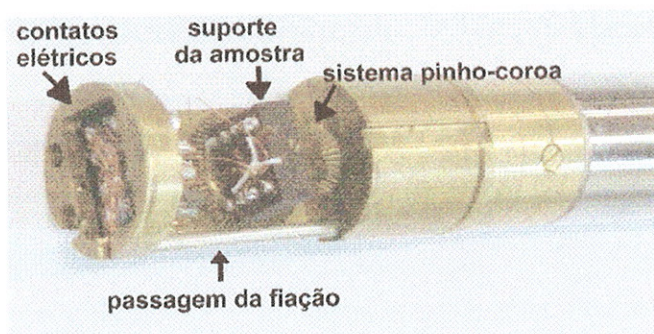


Figura 3.10: Foto da parte inferior do porta-amostra giratório. Visão por baixo.

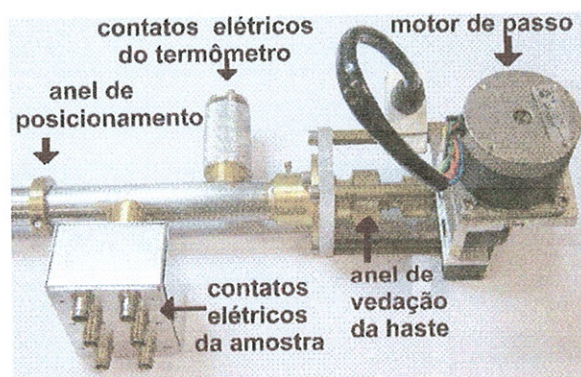


Figura 3.11: Foto da parte superior do porta-amostra giratório.

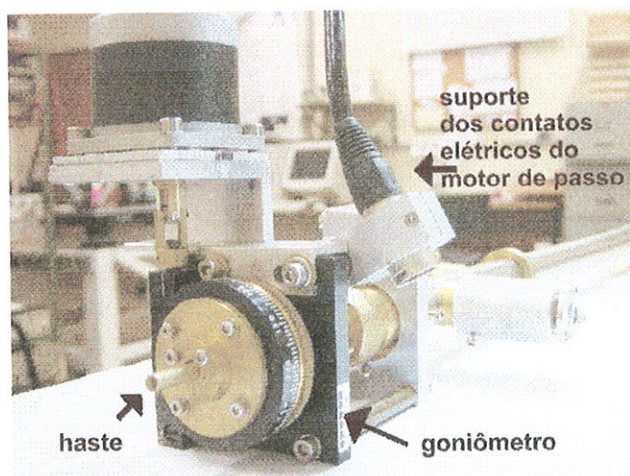


Figura 3.12: Foto da parte superior do porta-amostra giratório.

3.2 Experimento de Fotoluminescência

A figura (3.13) apresenta um desenho esquemático da montagem experimental utilizada.

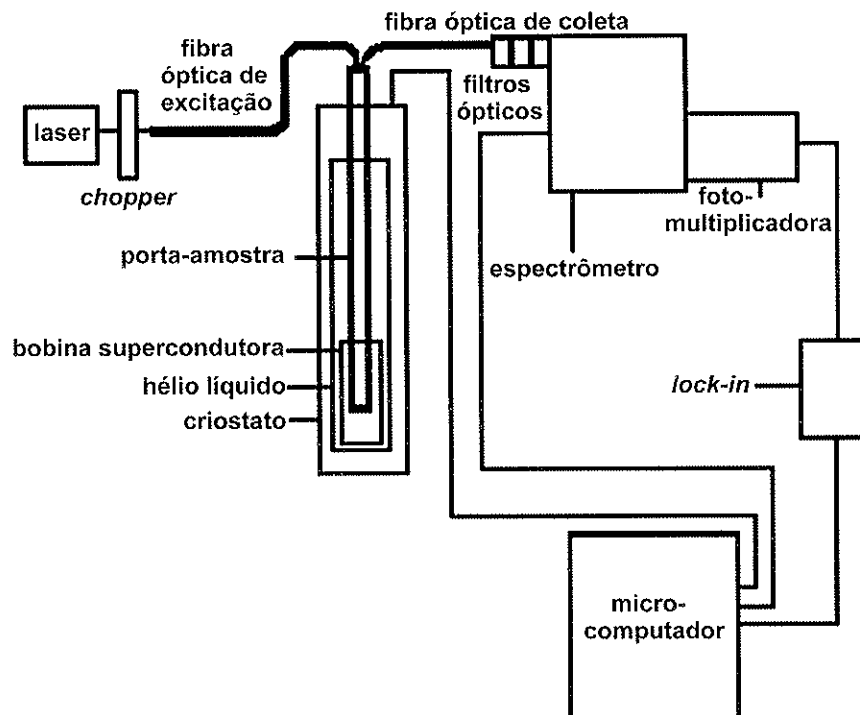


Figura 3.13: Desenho esquemático da montagem experimental para efetuarmos a medida da fotoluminescência.

Na figura (3.13) podemos observar um esquema de como realizamos a experiência de fotoluminescência. A luz que incide sobre a amostra é proveniente de um laser e modulada por um *chopper* antes de ser injetada na fibra óptica de excitação (deslocada do centro) que é levada ao porta-amostra inserido no criostato. A luminescência emitida pela amostra é colimada por uma lente bola de volta a uma fibra óptica de coleta (centrada), ver figura (3.14). Esta luminescência atravessa filtros ópticos a fim de bloquear os comprimentos de onda curtos do laser e permitir apenas a detecção para análise da luminescência da amostra. Para varrer o espectro de emissão da luminescência de nossas amostras utilizamos um monocromador (espectrômetro) SPEX 270M. A abertura da fenda foi mantida em menos de 0.3 mm, que corresponde a uma resolução espectral melhor do que 1.9 nm, para a rede de difração de 600 raias/mm utilizada. A luz proveniente da luminescência foi detectada por uma fotomultiplicadora. Finalmente, o *lock in* permite amplificar e filtrar o sinal, rejeitando o ruído indesejável, permitindo uma leitura das medidas por um microcomputador, que gerencia os equipamentos deste esquema e faz a aquisição de dados.

Nas medidas que serão apresentadas no próximo capítulo usamos um laser de comprimento de onda 635nm e potência de 15mW à 60 mW, e fendas de 0.25 mm e 0.30 mm. A rede de difração possui uma dispersão espectral é de 6nm/mm, o que resulta em uma banda passante de 1.5 nm(para fendas de 0.25 mm) e de 1.8 nm(para fendas de 0.3 mm).

3.2.1 Porta-amostra Óptico

Para efetuar as medidas da fotoluminescência em baixas temperaturas e altos campos magnéticos foi necessário o desenvolvimento de um porta-amostra especial, denominado aqui como *porta-amostra óptico*.

Foram desenvolvidos no laboratório dois tipos de porta-amostra ópticos: um porta-amostra onde uma fibra óptica é utilizada para conduzir a luz laser até a amostra (fibra óptica de excitação), cuja luminescência é colimada por uma lente de coleta para uma outra fibra óptica (fibra óptica de coleta). No segundo porta-amostra utiliza-se uma única lente para conduzir a luz das duas fibras ópticas esférica (*lente bola*), com a vantagem de ser posicionada mais perto da amostra, o que permite uma maior eficiência na coleta da luminescência emitida da amostra.

Para efetuar as medidas de fotoluminescência utilizamos o porta-amostra que contém uma lente bola para colimar a luminescência das amostras. Na figura (3.14) podemos observar o comportamento dos raios de luz na lente bola. A fibra óptica de excitação (núcleo de $550 \mu\text{m}$) localizada no plano focal da lente bola, conduz a luz incidente. Na saída da fibra, os feixes de luz são emitidos com uma abertura numérica de 0.22 (amarela) até a lente bola que colima esta luz na amostra, posicionada no plano focal abaixo da lente. A luminescência da amostra, identificada na figura em vermelho, incide sobre a fibra óptica de coleta (núcleo de $550 \mu\text{m}$), que está posicionada no plano focal acima da lente bola. A lente bola é feita do material *BK7* e possui um índice de refração de 1.51.

Para encontrarmos a distância focal da lente bola a fim de posicionarmos corretamente tanto as fibras ópticas quanto a amostra fazemos o seguinte desenvolvimento tendo em vista a figura (3.15). Desta figura obtemos:

$$\tan(\theta'_r - \omega) = \frac{s}{l} \Rightarrow l = \frac{s}{\tan(\theta'_r - \omega)} \quad (3.1)$$

Da primeira refração temos que:

$$\sin \theta_i = n \sin \theta_r \quad (3.2)$$

Da segunda refração temos que:

$$n \sin \theta_r = \sin \theta'_r \Rightarrow \theta'_r = \theta_i \quad (3.3)$$

Substituindo (3.3) na equação (3.1) temos:

$$l = \frac{s}{\tan(\theta_i - \omega)} \quad (3.4)$$

Da figura (3.15) temos ainda que:

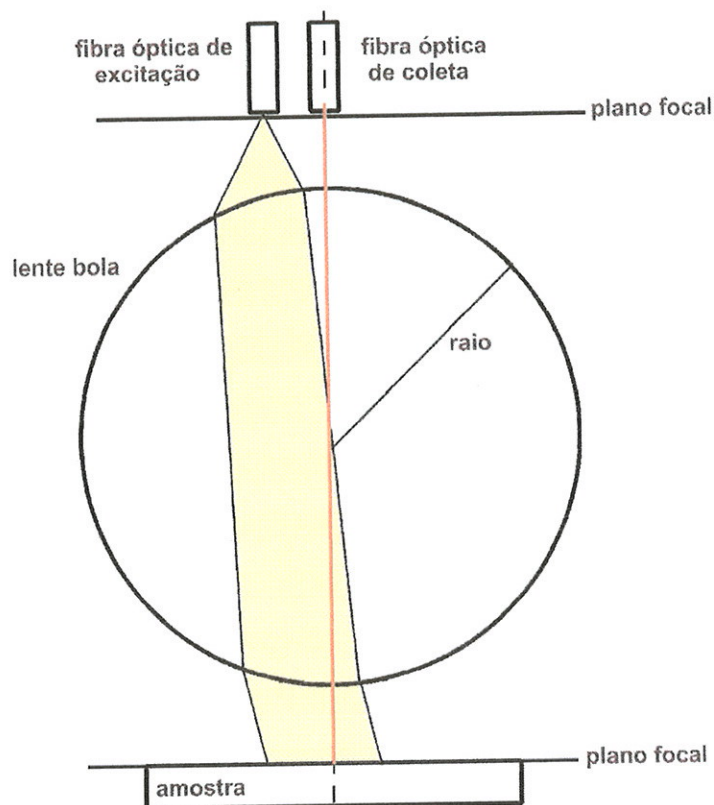


Figura 3.14: Esquema da lente bola.

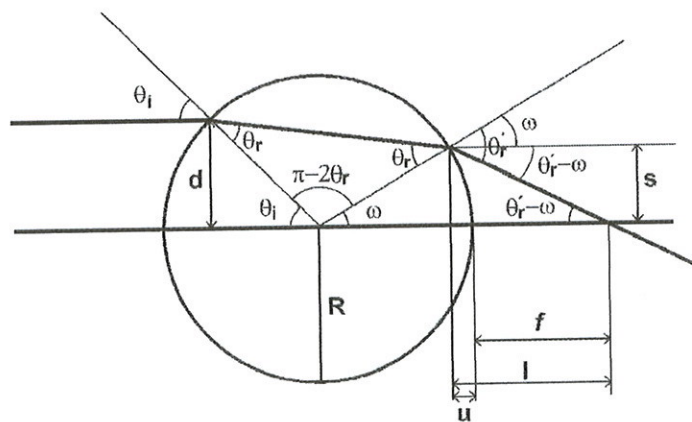


Figura 3.15: Esquema da lente bola.

$$\sin \omega = \frac{s}{R} \Rightarrow s = R \sin \omega \quad (3.5)$$

Substituindo (3.5) em (3.4) temos que:

$$l = \frac{R \sin(\omega)}{\tan(\theta_i - \omega)} \quad (3.6)$$

Da figura (3.15) temos ainda que:

$$\theta_i + \pi - 2\theta_r + \omega = \pi \Rightarrow \omega = 2\theta_r - \theta_i \quad (3.7)$$

Novamente, substituindo (3.7) em (3.6) temos que:

$$l = \frac{R \sin(2\theta_r - \theta_i)}{\tan[2(\theta_i - \theta_r)]} \quad (3.8)$$

A distância focal é obtida de:

$$f = l - u \quad (3.9)$$

sendo:

$$u = R - R \cos \theta_r = R[1 - \cos \theta_r] \quad (3.10)$$

Substituindo as equações (3.8) e (3.10) na equação (3.9) encontramos:

$$f = \frac{R \sin(2\theta_r - \theta_i)}{\tan[2(\theta_i - \theta_r)]} - R[1 - \cos \theta_r] \quad (3.11)$$

Temos ainda que:

$$\sin \theta_i = \frac{d}{R} \Rightarrow \theta_i = \arcsin\left(\frac{d}{R}\right) \quad (3.12)$$

e

$$\sin \theta_i = n \sin \theta_r \Rightarrow \theta_r = \arcsin\left(\frac{d}{nR}\right) \quad (3.13)$$

Considerando $d \rightarrow 0$ (raio paraxial) que é a situação real encontrada no porta-amostra, pois as fibras

ópticas de excitação e coleta estão posicionadas a uma distância $d = 1.5$ mm, e considerando também $\theta_i \simeq \frac{d}{R}$ e $\theta_r \simeq \frac{d}{nR}$ temos que:

$$f = R \frac{\frac{2d}{nR} - \frac{d}{R}}{2 \left(\frac{d}{R} - \frac{d}{nR} \right)} = R \frac{\frac{2}{n} - 1}{2 \left(1 - \frac{1}{n} \right)}$$

Rearranjando os termos:

$$f = \frac{R 2 - n}{2 n - 1} \quad (3.14)$$

Na figura (3.16) temos uma visão por inteiro do porta-amostra óptico, onde observamos: as fibras ópticas que são conectadas na parte superior do porta-amostra para conduzir a luz da fonte laser para a amostra; um cilindro onde realizamos os contatos elétricos do termômetro que está localizado próximo a amostra; o anel de posicionamento do porta-amostra que faz com que a amostra seja posicionada no ponto de campo magnético mais intenso dentro do criostato; e a parte inferior do porta-amostra que será detalhado na figura (3.18), esta parte inferior é rosqueada no tubo do porta-amostra.

Na figura (3.17) observamos uma visão lateral do porta-amostra óptico.

Na figura (3.18) observamos as fibras ópticas de excitação (localizada à direita do eixo da lente esférica) e de coleta (localizada no eixo da lente esférica); o anel de sustentação destas fibras que está localizado acima e no foco da lente esférica; a lente esférica; a parte inferior rosqueada que irá fechar a base do porta-amostra; e o cilindro onde a amostra é posicionada, este cilindro é também rosqueado na parte inferior de forma que a amostra seja localizada no foco da lente esférica e assim obtemos o sinal mais forte da luminescência emitida pela amostra.

Uma visão mais real do porta-amostra óptico pode ser mostrada através das fotos. Na foto da figura (3.19) observa-se uma visão por inteiro do porta-amostra óptico. Os detalhes das parte inferior e superior serão mostradas na seqüência.

Nas figuras (3.20), (3.21), (3.22), (3.23) observa-se detalhes da parte inferior do porta-amostra óptico.

Na figura (3.24) observa-se detalhes da parte superior do porta-amostra óptico.

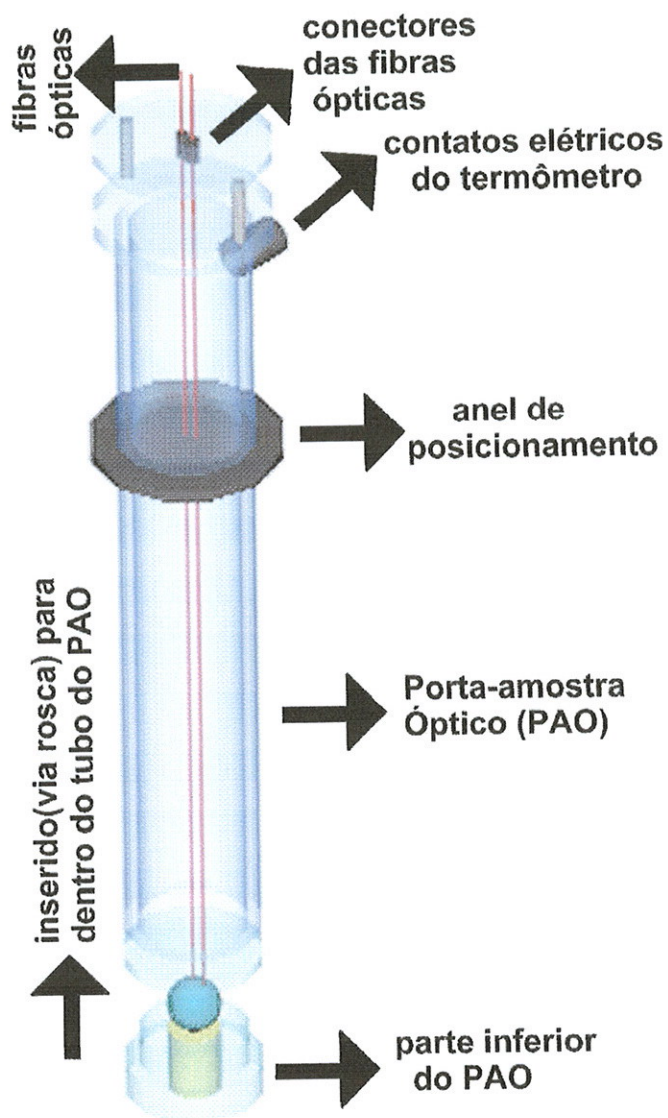


Figura 3.16: Esquema do porta-amostra óptico (PAO).

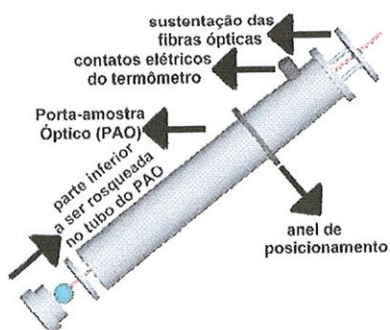


Figura 3.17: Esquema do porta-amostra óptico (PAO). Visão lateral.

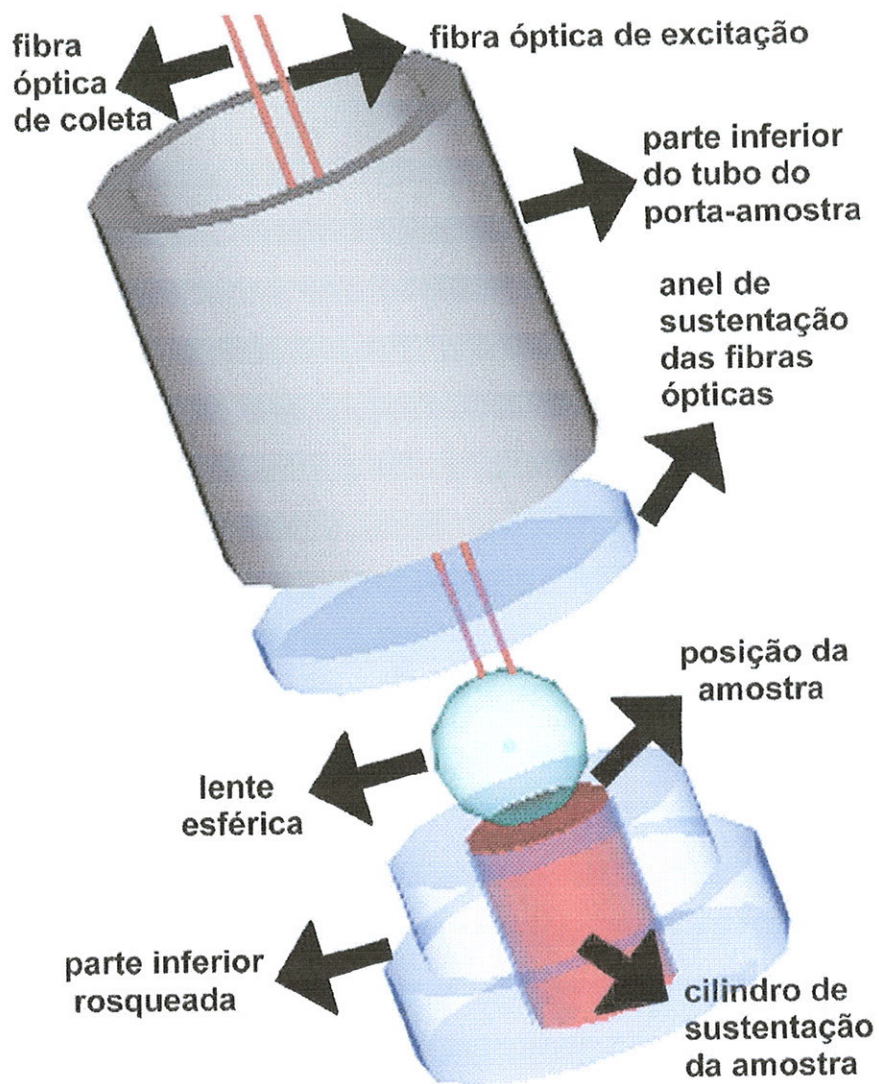


Figura 3.18: Esquema da parte inferior do porta-amostra óptico (PAO).

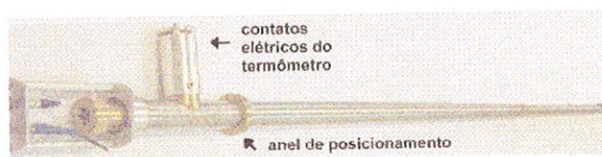


Figura 3.19: Foto do porta-amostra óptico. Visão por inteiro.



Figura 3.20: Foto das peças da parte inferior porta-amostra óptico.



Figura 3.21: Foto do encaixe das fibras ópticas nas peças da parte inferior porta-amostra óptico.



Figura 3.22: Foto da parte inferior do porta-amostra óptico. Detalhe da posição da lente bola.



Figura 3.23: Foto da parte inferior do porta-amostra óptico. Detalhe dos furos para a entrada de hélio líquido.

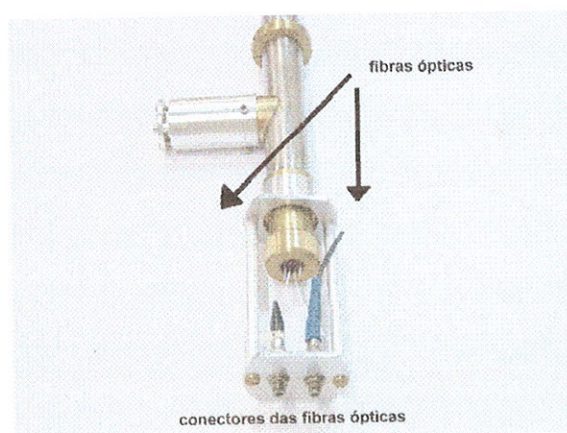


Figura 3.24: Foto da parte superior do porta-amostra óptico. Detalhe das fibras ópticas.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Estruturas Investigadas

As amostras investigadas neste trabalho foram crescidas pela técnica MBE em substratos GaAs(001). Esta técnica apresenta materiais com um alto índice de pureza e permite o crescimento de hetero-junções (poços quânticos e super-redes) com alta qualidade. A arquitetura da super-rede foi a seguinte:

- um substrato de GaAs com orientação cristalográfica (100);
- um *buffer* de GaAs de 1000 Å de espessura que evita contaminantes provenientes do substrato e melhora a qualidade da superfície;
- uma super-rede de 10 períodos $(\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_{10}$ (5 monocamadas de AlAs e 10 monocamadas de GaAs), esta super-rede também tem a finalidade de evitar a migração de discordâncias (*dislocations*) do substrato para a camada epitaxial;
- outro *buffer* de GaAs de 2000 Å de espessura, que possui a finalidade de alisamento da superfície;
- outro *buffer* de $\text{Al}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$ de 1000 Å de espessura, que possui a finalidade de criar uma barreira de potencial entre a estrutura de interesse e o *buffer* de GaAs;
- a super-rede dopada de interesse;
- uma segunda barreira de 1000 Å de espessura de $\text{Al}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$, que possui a finalidade de criar uma barreira de potencial entre a estrutura de interesse e a superfície da amostra;
- um *cap layer* de GaAs de 100 Å de espessura que evita a oxidação da camada de $\text{Al}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$.

Foram crescidos dois tipos de super-redes: com dopagem apenas nas barreiras internas, e com dopagem nas barreiras internas e externas, sendo que as barreiras externas possuem a metade do valor da dopagem das barreiras internas. A super-rede geral dopada é constituída de 20 camadas de GaAs de espessura L_B separadas uma a uma por uma camada de $\text{Al}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$ de igual espessura. O centro de cada camada de $\text{Al}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$ foi dopado com Si, utilizando a técnica de dopagem planar (δ -doping). A concentração nominal de Si foi de $1.9 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ em cada plano, exceto nas barreiras das extremidades que a concentração foi de metade deste valor (esta concentração nominal foi para uma das amostras, para uma outra amostra utilizamos uma concentração nominal de Si de $2.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ em cada plano interno). Toda a estrutura foi crescida à 580°C exceto a estrutura da

super-rede dopada que foi crescida à $550^{\circ}C$ para evitar a difusão do Si nos poços de GaAs. Uma interrupção de 15 s no crescimento foi realizada a cada deposição de camada de GaAs para produzir uma interface plana. A taxa de crescimento dos materiais foi determinada por uma medida RHEED (*reflection high-energy electron diffraction*) *in situ* e foi de 0.91, 0.74 e 0.17 ML/s para AlGaAs, GaAs and AlAs respectivamente. Uma outra característica do crescimento foi a pressão equivalente do fluxo de As_4 (BEP - *beam-equivalent pressure*) que foi de 7.2×10^{-6} Torr, que foi previamente otimizada para resultar camadas de boa qualidade.

A figura (4.1) mostra um esquema de uma das amostras.

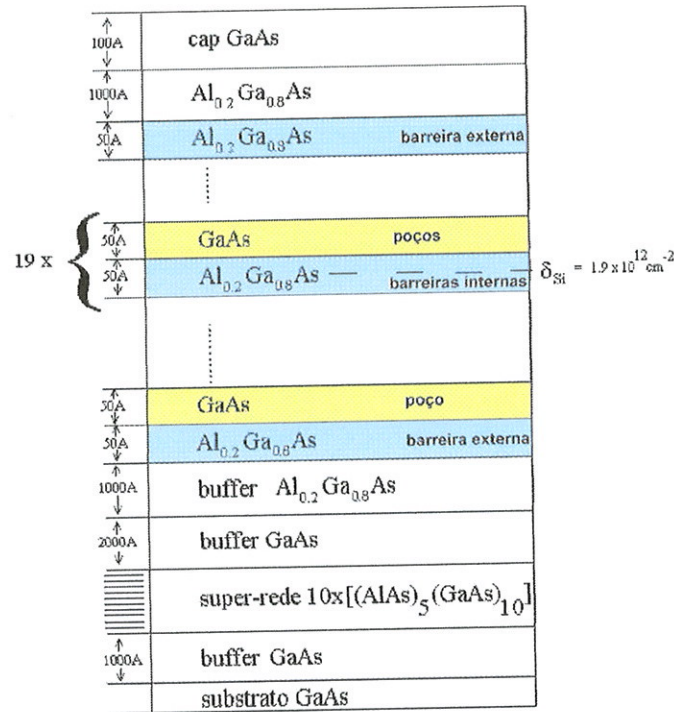


Figura 4.1: Diagrama da estrutura das amostras de super-rede crescidas. Em azul estão as barreiras quânticas e em amarelo os poços quânticos.

Uma das formas de evidenciar a ordem periódica que caracteriza uma super-rede é realizando medidas de refletividade de raios-x desta amostra. Este procedimento foi utilizado para verificarmos a qualidade de nossas super-redes. Foi realizada a simulação computacional de um espectro de refletividade de raios-x, para comparação com o espectro experimental, e a dedução do período da estrutura. Os resultados da simulação computacional são comparados com os resultados da medida no apêndice B. Na tabela 3 mostramos a comparação entre as larguras nominais e as estimadas pela medida de refletividade de raios-x para duas amostras investigadas neste trabalho.

Tabela 3: Comparação entre as larguras nominais e as larguras estimadas pela medida de refletividade de raios-x para as amostras 2268 e 2434. Nesta tabela: L_B^N é a largura nominal das barreiras, L_P^N é a largura nominal dos poços, L_B^{RX} é a largura das barreiras estimada pela medida de refletividade de raios-x e L_P^{RX} é a largura dos poços estimada pela medida de refletividade de raios-x.

Amostra	$L_B^N = L_P^N$ (Å)	$L_B^{RX} = L_P^{RX}$ (Å)
2268	50	47.9
2434	50	47.1

Observa-se que os valores estimados para as larguras dos poços e barreiras pela medida de refletividade de raios-x são abaixo dos valores nominais para ambas as amostras, entretanto tais valores encontram-se dentro da região de interesse deste nosso estudo (ver figura 2.15 do capítulo 2).

A medida e simulação de refletividade de raios-x indicam também que as amostras investigadas possuem uma periodicidade muito bem definida¹.

¹Os gráficos das medidas e simulações das amostras investigadas podem ser vistos no apêndice B.

4.2 Medidas do Efeito Shubnikov-de Haas

4.2.1 Super-rede com Dopagem nas Camadas de Barreira Internas

Foi investigada uma super-rede GaAs/Al_{0,21}Ga_{0,79}As contendo 20 poços quânticos e 21 barreiras, sendo 19 barreiras internas dopadas no centro e 2 barreiras externas não-dopadas (amostra 2434). As barreiras internas foram dopadas em seu centro com Si, em uma concentração nominal de $1.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. A largura dos poços e das barreiras foram fixados em 50 \AA .

A figura (4.2) apresenta um desenho esquemático de uma extremidade da super-rede investigada. Observa-se que apenas as camadas de Al_{0,21}Ga_{0,79}As internas são dopadas nesta amostra.

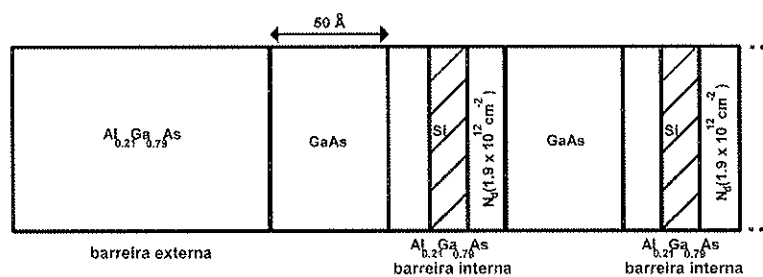


Figura 4.2: Desenho esquemático de uma extremidade de uma amostra com dopagem apenas nas camadas de barreira internas.

Medidas do efeito Hall resultam em uma concentração de portadores de $n_H = 3.80 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ e mobilidade quântica de $\mu_H = 2998 \text{ cm}^2/Vs$. Para compararmos este resultado ($n_H = 3.80 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) com a densidade nominal de átomos de Si na amostra, desenvolvemos o seguinte raciocínio. Na figura (4.3) observamos a estrutura física de uma amostra com dopagem interna, e a sua distribuição de dopantes. As setas indicam a termalização dos elétrons para os estados de menor energia, isto é, para o interior dos poços quânticos. Conseqüentemente, a densidade de elétrons por poço esperada será de $n_{2d} = \frac{1.90 \times 10^{12} \times 19}{20} = 1.81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para uma densidade planar total de $1.90 \times 10^{12} \times 19 = 3.61 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Dado que a densidade de Hall n_H é uma medida da densidade planar total, verificamos uma boa concordância entre n_H e o número total de impurezas doadoras contidas na amostra.

Na figura (4.4) observamos o resultado das medidas para vários ângulos do efeito Shubnikov-de Haas para a amostra 2434. Na parte (a) da figura observamos a frequência de oscilação em função do ângulo de inclinação da amostra. Na parte (b) da figura observamos a frequência reduzida (frequência $\times \cos\theta$) de oscilação em função do ângulo de inclinação da amostra. Observa-se o entrelaçamento de duas frequências, característicos de estados de super-rede, conforme a descrição na seção 2.7. Na figura (4.4) também podemos observar as curvas teóricas das frequências de oscilação para a amostra 2434 em função do ângulo de inclinação, em vermelho a frequência de oscilação para a órbita de

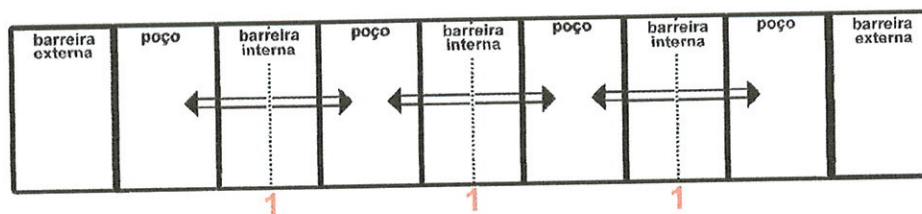


Figura 4.3: Desenho esquemático da estrutura física de uma amostra com dopagem apenas nas camadas de barreira internas. Esta estrutura possui 4 poços e 5 barreiras, sendo 3 internas e 2 externas.

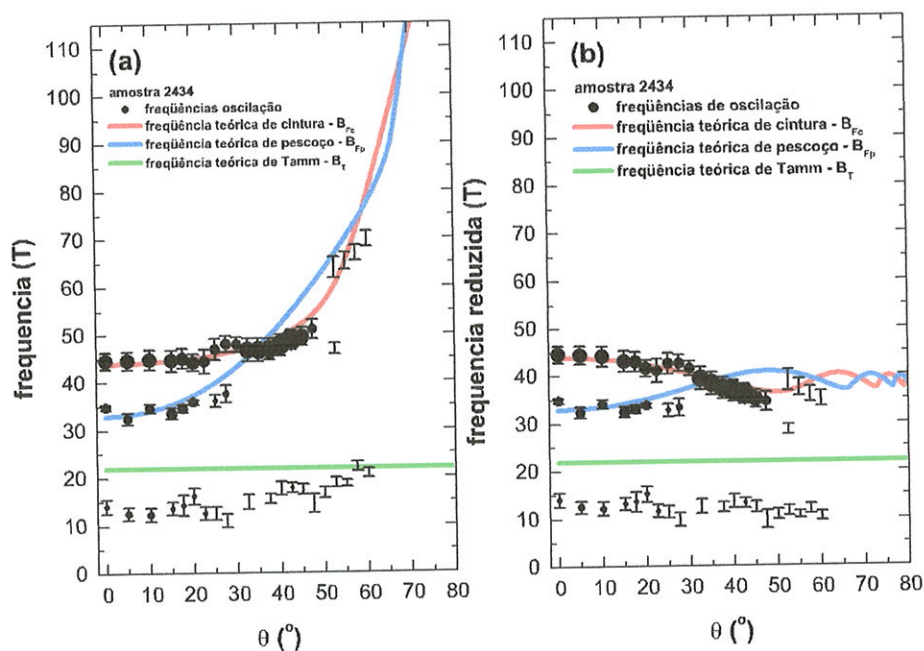


Figura 4.4: (a) Frequências de oscilação para a amostra 2434. Estes resultados são provenientes da análise de Fourier das medidas do efeito Shubnikov-de Haas em vários ângulos de inclinação. Observa-se os pontos experimentais e as curvas teóricas. A área de cada ponto é proporcional à intensidade do pico do espectro de Fourier. (b) idem (a) mas para frequências reduzidas.

cintura, em azul a frequência de oscilação para a órbita de pescoço. Estas curvas teóricas estão em boa concordância com os pontos experimentais. A barra de erros foi estimada para cada um destes pontos, a incerteza foi tomada como metade da largura do pico da transformada de Fourier a $\frac{1}{8}$ da intensidade máxima de cada pico de cada curva experimental.

Ademais, na figura (4.4), observa-se uma terceira componente de oscilação. Esta componente é sensível apenas ao campo magnético normal à superfície da amostra, conforme mostra a parte (b) da figura (4.4). Este comportamento é característico de um gás eletrônico bidimensional. A justificativa é a presença de um gás de elétrons aprisionado nos poços situados nas extremidades da super-rede (estados de Tamm[46]). Observa-se, em verde, a frequência de oscilação teórica para a órbita de Tamm. Para a frequência de Tamm há uma discrepância entre os valores experimentais e teóricos que pode ser devido a uma menor população do estado de Tamm nesta amostra em particular.

A formação dos estados de Tamm nas amostras com dopagem nas barreiras internas pode ser compreendida se analisarmos a distribuição espacial da carga elétrica na amostra.

A figura (4.5) apresenta a densidade de cargas para uma amostra contendo 4 poços e 3 barreiras internas dopadas. Ainda que um número tão pequeno de poços não caracterize uma super-rede, a estrutura de 3 poços nos servirá como modelo para obtermos a distribuição de carga elétrica e potencial eletrostático nas super-redes investigadas neste trabalho. A densidade de cargas eletrônica na figura (4.5) está em unidades do montante de cargas em cada barreira interna.

Conforme explicado acima, os elétrons doados pelas impurezas irão termalizar para o interior dos poços de potencial, resultando na distribuição de carga elétrica com na figura (4.5). O potencial eletrostático devido a esta carga pode ser deduzido a partir de uma análise utilizando-se a Lei de Gauss.

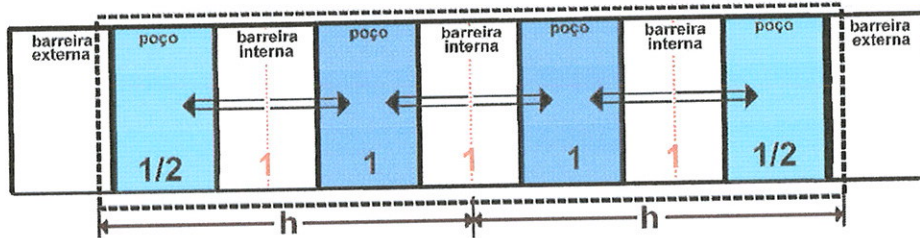


Figura 4.5: Desenho esquemático da distribuição de cargas de uma amostra com dopagem apenas nas camadas de barreira internas. Esta estrutura possui 4 poços e 5 barreiras, sendo 3 internas e 2 externas. Uma superfície de Gauss está indicada pela linha tracejada. Em azul escuro estão indicados os poços com densidade de carga negativa igual a 1, e em azul claro estão indicados os poços com densidade de carga negativa igual a $\frac{1}{2}$, e em vermelho as barreiras com densidade de carga positiva igual a 1.

Os poços da extremidade ficam submetidos a um campo elétrico calculado utilizando a Lei da

Gauss(a linha tracejada da figura (4.5) indica uma superfície de Gauss):

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{A} = 2EA = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} (3 - 2) eN_d A = \frac{eN_d A}{\epsilon\epsilon_0}$$

$$E = \frac{eN_d}{2\epsilon\epsilon_0}$$

onde A é a área da superfície de Gauss, e N_d é a densidade superficial de cargas.

Para obtermos a energia potencial eletrostática característica de um elétron ao longo da estrutura, vamos admitir que a carga eletrônica esteja distribuída uniformemente em quantidade nos poços, como na figura (4.5), e que as impurezas ionizadas ocupem um plano no centro das barreiras internas. Devido à simetria da distribuição de cargas, o campo elétrico apresenta simetria de reflexão no plano central de impurezas. Utilizando uma superfície de Gauss como na figura (4.5), porém com h variável, podemos obter o campo elétrico e a energia potencial eletrostática de um elétron ao longo de toda estrutura, obtendo-se o resultado representado na parte (a) da figura (4.6).

O potencial total será a soma do potencial de confinamento (parte (a) da figura (4.6)) com o potencial eletrostático, resultando no potencial visto na parte (c) da figura (4.6). A parte (c) da figura (4.6) mostra que (dois) poços internos estão em ressonância, enquanto que os poços da extremidade da cadeia de poços (isto é, a região denominada de *superfície interna*) estão deslocados para cima em energia. Por estarem fora de ressonância com os poços internos, os elétrons dos estados de Tamm ficam confinados nos seus respectivos poços de potencial. Numa estrutura com N poços, a mesma situação irá ocorrer, $N-2$ poços darão origem a uma minibanda de energia, e os poços da extremidade darão origem a estados de Tamm.

Para obtermos uma descrição teórica mais precisa do que esta, e obtermos as frequências de oscilação esperadas no espectro de Shubnikov-de Haas para comparar com os resultados experimentais, resolvemos auto-consistentemente as equações de Schrödinger e Poisson para as nossas estruturas. A densidade de dopantes em cada camada utilizada foi de $1.87 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, e foi admitindo que a ativação das impurezas doadoras era de 100%. O resultado teórico, para as frequências de Shubnikov-de Haas em função do ângulo está em boa concordância com as frequências experimentais, como mostra a figura (4.4).

O perfil de potencial de confinamento auto-consistente e a densidade de estados para a estrutura 2434 estão apresentados na figura (4.7). Podemos observar a energia dos estados de Tamm na curva de potencial e na curva da densidade de estados. É interessante destacar que os cálculos feitos indicam que a frequência teórica de Shubnikov-de Haas associada aos estados de Tamm é sempre aproximadamente metade da frequência para a órbita de cintura [47], quaisquer que sejam os parâmetros da super-rede.

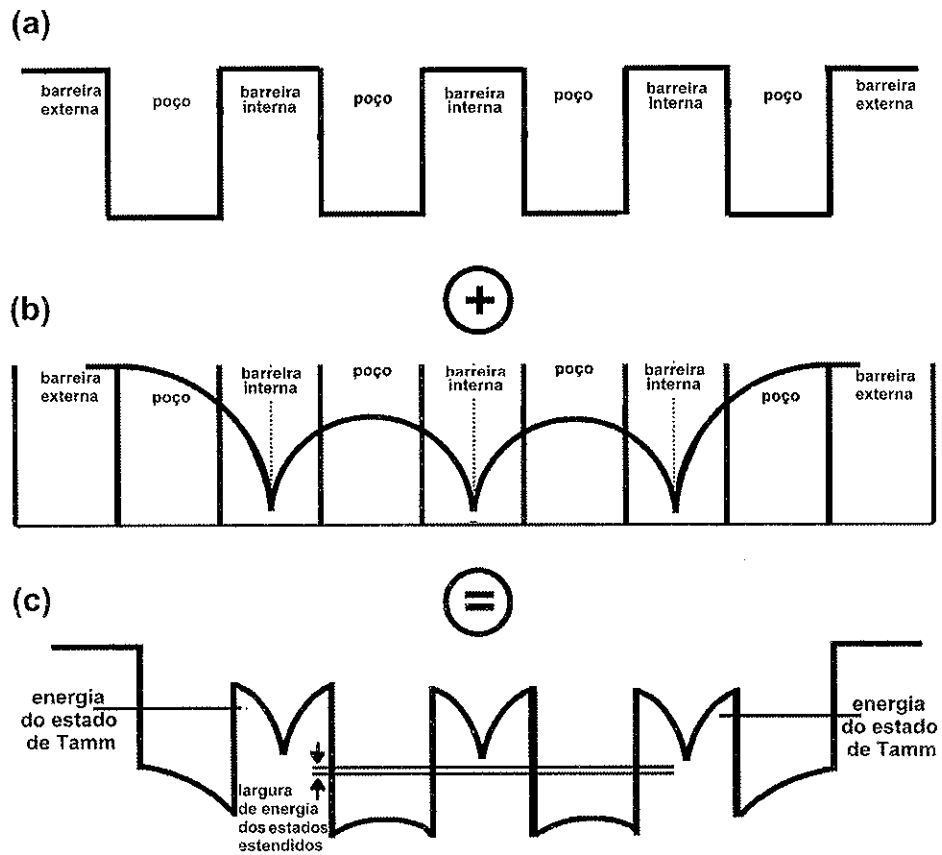


Figura 4.6: Desenho esquemático do (a) potencial de confinamento; (b) do potencial eletrostático; e (c) da energia potencial total que é a soma do potencial de confinamento com o potencial eletrostático.

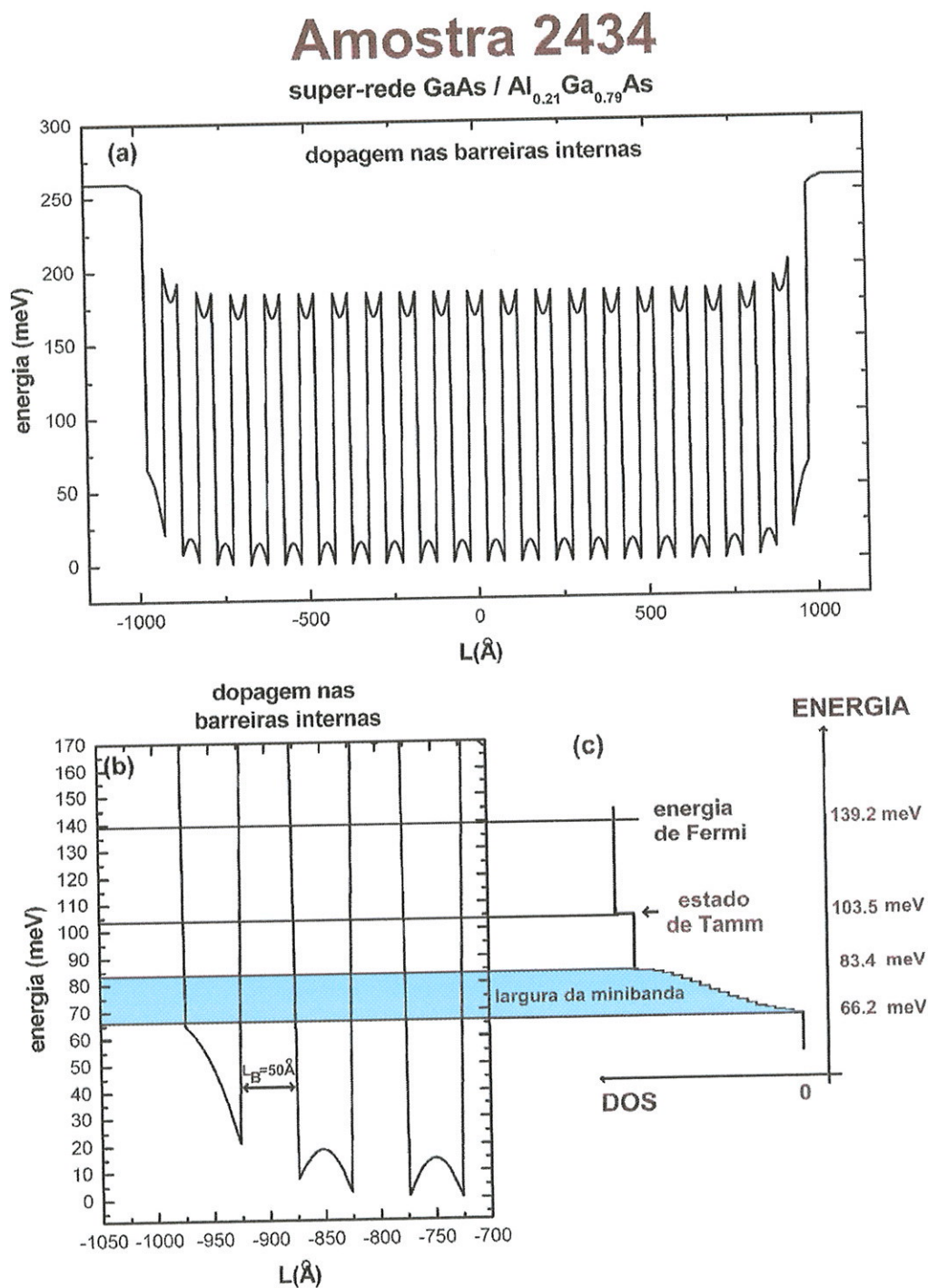


Figura 4.7: (a) Perfil da energia potencial de uma amostra com dopagem apenas nas camadas de barreira internas. Esta estrutura possui 20 poços e 21 barreiras, sendo 19 internas e 2 externas. (b) ampliação da extremidade esquerda do perfil de potencial de (a). (c) densidade de estados para a amostra 2434.

4.2.2 Super-redes com Dopagem nas Camadas de Barreira Internas e Externas

O campo elétrico responsável pela formação dos estados de Tamm advém da menor população de elétrons nos poços extremais. Para evitar este efeito dopamos as camadas de barreiras externas com metade da concentração da dopagem das camadas de barreiras internas.

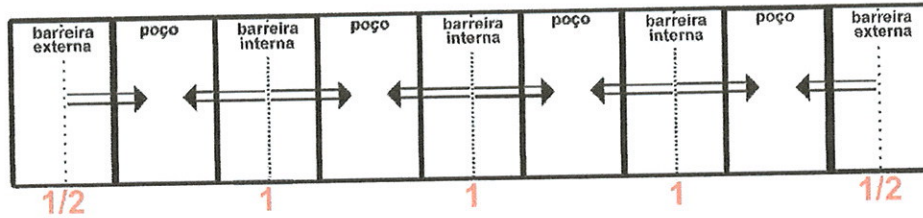


Figura 4.8: Desenho esquemático da estrutura física de uma amostra com dopagem nas camadas de barreira interna e externas. Esta estrutura possui 4 poços e 5 barreiras, sendo 3 internas e 2 externas.

A estrutura física de uma amostra com 5 barreiras e 4 poços quânticos com dopagem tanto nas camadas de barreiras internas quanto externas, sendo a dopagem das camadas de barreiras externas metade da dopagem das camadas de barreiras internas, é apresentada pela figura (4.8). As setas indicam a termalização dos elétrons para os estados de menor energia, isto é, para o interior dos poços quânticos.

A figura (4.9) apresenta a densidade de cargas para uma amostra com dopagem tanto nas camadas de barreira internas quanto nas camadas de barreira externas, mas com metade do valor da dopagem das camadas de barreira internas. A densidade de cargas eletrônica está em unidades do montante de cargas em cada barreira interna.

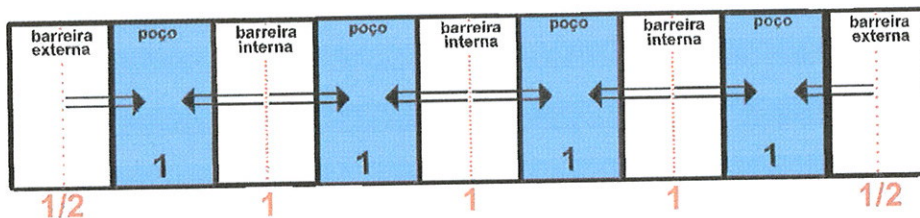


Figura 4.9: Desenho esquemático da distribuição de cargas de uma amostra com dopagem nas camadas de barreira internas e externas. Esta estrutura possui 4 poços e 5 barreiras, sendo 3 internas e 2 externas. Em azul escuro estão indicados os poços com densidade de carga negativa igual a 1, e em vermelho as barreiras com densidade de carga positiva iguais a $\frac{1}{2}$ e 1.

Procedendo como descrito na seção anterior, utilizando a Lei de Gauss, obtemos o potencial eletrostático e o potencial autoconsistente como na figura (4.10). Verificamos a ausência dos estados de Tamm neste caso.

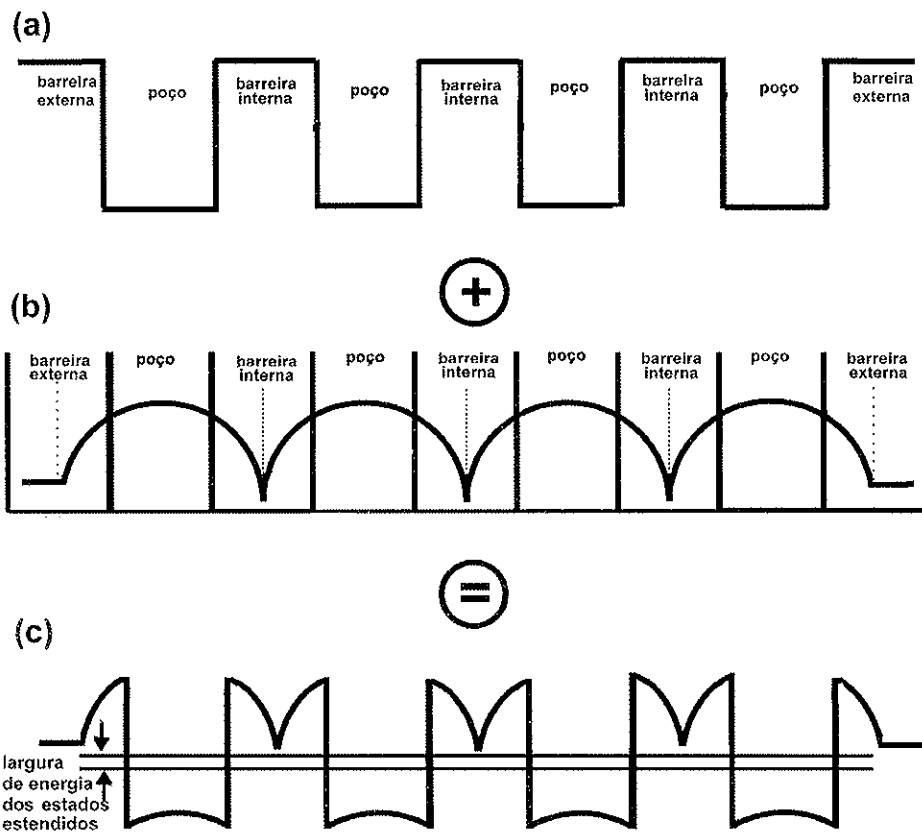


Figura 4.10: Desenho esquemático do (a) potencial de confinamento; (b) do potencial eletrostático; e (c) da energia potencial total que é a soma do potencial de confinamento com o potencial eletrostático.

Foi investigada uma super-rede GaAs/Al_{0.21}Ga_{0.79}As contendo 20 poços quânticos e 21 barreiras, sendo que as 19 barreiras internas dopadas com Si no centro possuem uma concentração nominal de $N_d = 1.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e as 2 barreiras externas também dopadas em seu centro com Si, mas com concentração nominal de metade da concentração das barreiras internas. A largura dos poços e das barreiras foram fixados em 50 Å (amostra 2268).

Medidas do efeito Hall resultam em uma concentração de portadores de $n_H = 3.78 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ e uma mobilidade quântica de $\mu_H = 2385 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Para compararmos este resultado ($n_H = 3.78 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) desenvolvemos o seguinte raciocínio. A densidade de elétrons por poço esperada será de $n_{2d} = \frac{N_d \times 19 + 2 \times \frac{N_d}{2}}{20} = N_d = 1.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para uma densidade planar total de $1.90 \times 10^{12} \times 19 + 1.90 \times 10^{12} = 3.80 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Dado que a densidade de Hall n_H é uma medida da densidade planar total, verificamos uma boa concordância entre n_H e o número total de impurezas doadoras, indicando uma ativação quase total das impurezas doadoras contidas na amostra.

Na figura (4.11) observamos na parte (a) o resultado para uma medida do efeito Shubnikov-de Haas em ângulo de 0° para a amostra 2268. Na parte (b) desta figura apresentamos a análise de Fourier para a medida apresentada na parte (a). Observam-se dois picos que mostram as duas frequências de oscilação desta amostra, em 23.6 T e 35.1 T, que são as frequências de pescoço e cintura, respectivamente.

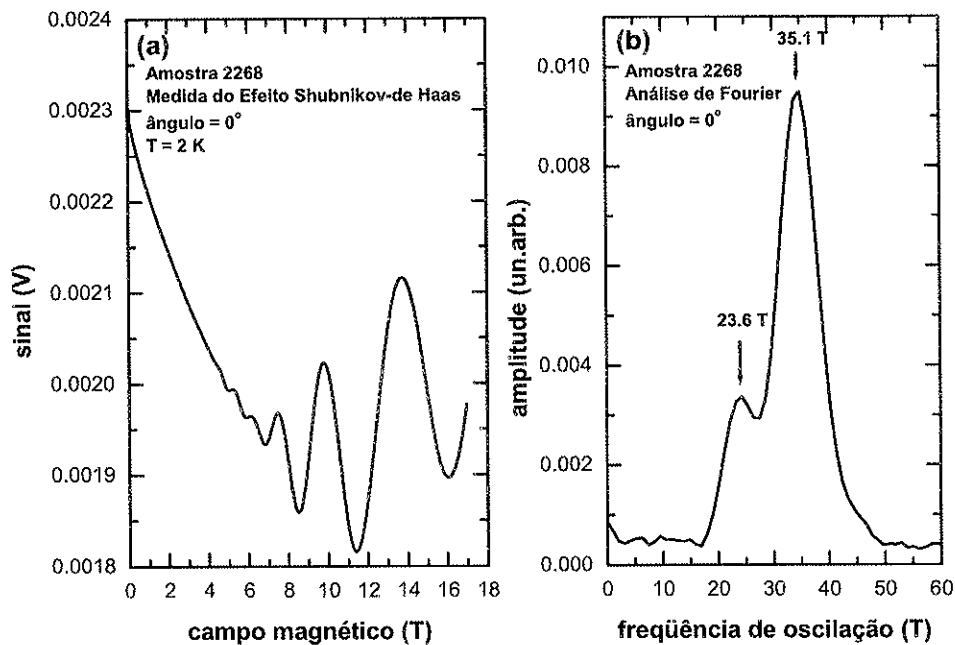


Figura 4.11: (a) Medida do efeito Shubnikov-de Haas para a amostra 2268. (b) Análise de Fourier da medida do efeito Shubnikov-de Haas para a amostra 2268.

Na figura (4.12) observamos o resultado das medidas para vários ângulos do efeito Shubnikov-de Haas para a amostra 2268. Na parte (a) da figura observamos a frequência de oscilação em

função do ângulo de inclinação da amostra. Na parte (b) da figura observamos a frequência reduzida (frequência $\times \cos\theta$) de oscilação em função do ângulo de inclinação da amostra. Juntamente com os pontos experimentais, incluímos as curvas teóricas para as frequências de cintura (vermelho) e para as frequências de pescoço (azul). O resultado teórico, para as frequências de Shubnikov-de Haas em função do ângulo está em boa concordância com as frequências experimentais, como mostra a figura (4.12). Observa-se o entrelaçamento de duas frequências, característicos de estados de super-rede, conforme a descrição na seção 2.7. Nota-se também a ausência da terceira frequência de oscilação devida ao estado de Tamm, que é sempre observada em super-redes com dopagem modulada, porém que não contém a dopagem nas camadas externas [46]. Novamente, a barra de erros foi estimada para cada um destes pontos, a incerteza foi tomada como metade da largura do pico da transformada de Fourier a $\frac{1}{8}$ da intensidade máxima de cada pico de cada curva experimental.

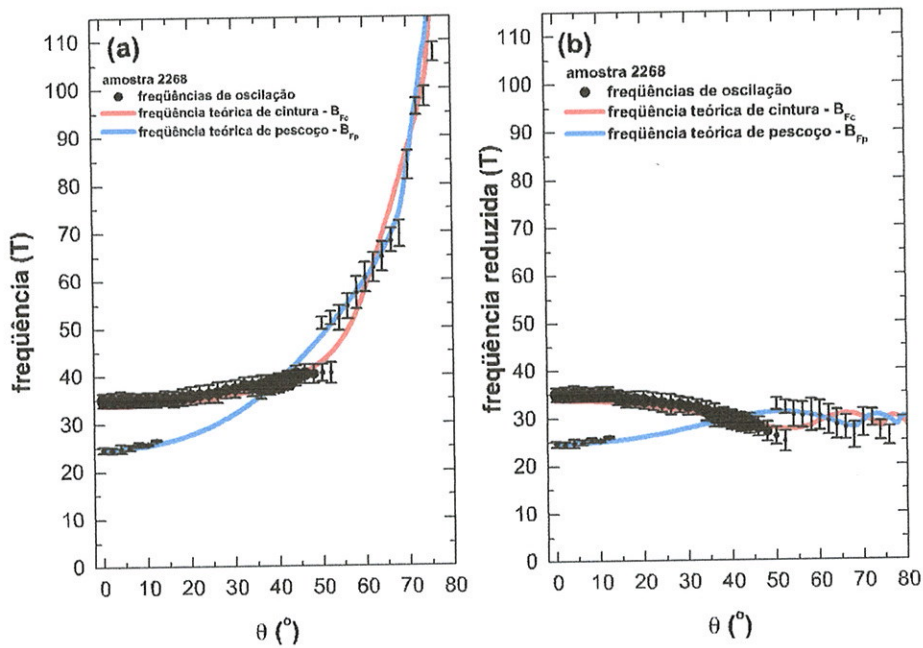


Figura 4.12: (a) Frequências de oscilação para a amostra 2268. Estes resultados são provenientes da análise de Fourier das medidas do efeito Shubnikov-de Haas em vários ângulos de inclinação. Observa-se os pontos experimentais e as curvas teóricas. A área de cada ponto é proporcional à intensidade do pico do espectro de Fourier. (b) idem (a) mas para frequências reduzidas.

Utilizando o mesmo procedimento da seção anterior, calculamos o perfil de potencial de confinamento auto-consistente e a densidade de estados para a estrutura 2268, que estão apresentados na figura (4.13). Observamos nesta figura algumas diferenças nos potenciais das amostras com dopagem interna e externa para as amostras com dopagem apenas interna (figura 4.7). No lado direito da figura (4.13) observamos o desenho esquemático da densidade de estados para a amostra 2268 e as associações da densidade de estados com o perfil de potencial.

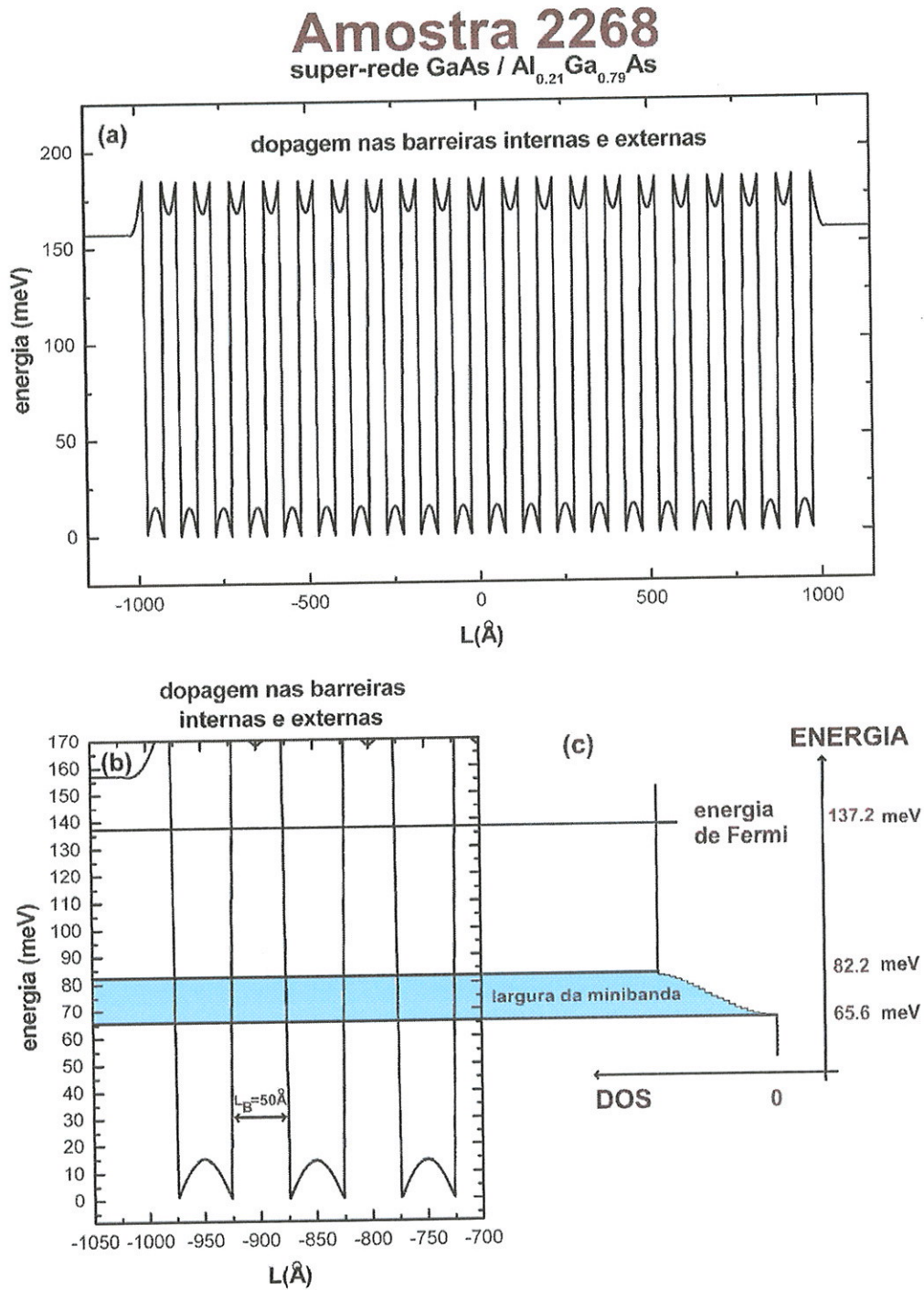


Figura 4.13: (a) Perfil da energia potencial de uma amostra com dopagem nas barreiras internas e nas camadas de barreira externas. Esta estrutura possui 20 poços e 21 barreiras, sendo 19 internas e 2 externas. (b) ampliação da extremidade esquerda do perfil de potencial de (a). (c) densidade de estados para a amostra 2268.

Na figura (4.14) plotamos as funções de onda dos estados da minibanda. Esta figura é uma ampliação da região da energia da minibanda observada na figura (4.13), contendo todas as funções de onda. Observa-se que as funções de onda são delocalizadas, isto é, se estendem por todo o espaço da super-rede.

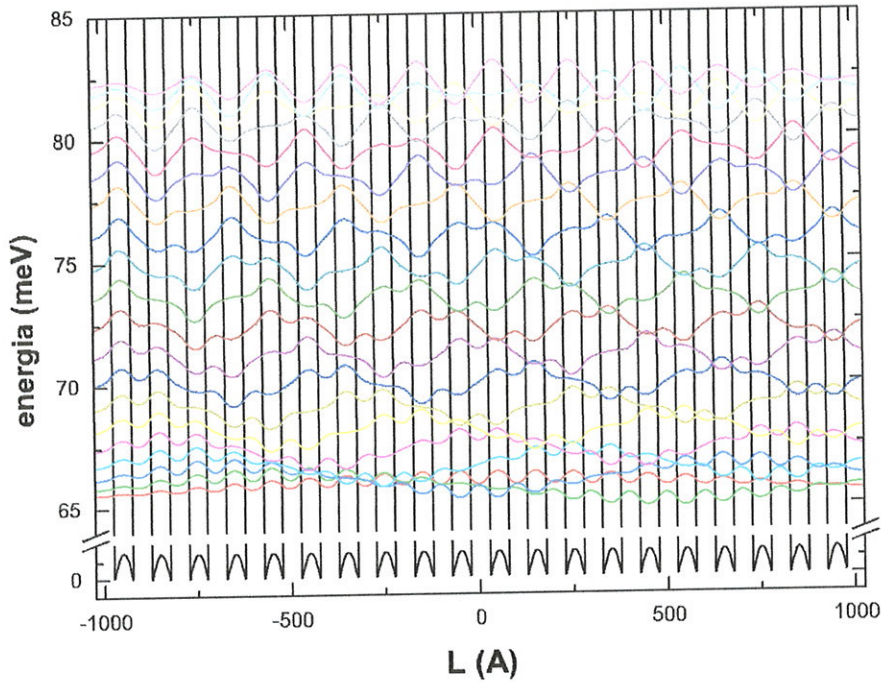


Figura 4.14: Ampliação do perfil da energia potencial da amostra 2268, observada na figura (4.13). Observamos as funções de onda associadas às energias da minibanda.

Realizamos medidas com outras amostras que continham dopagem nas barreiras internas e externas, onde variamos o período das super-redes, sendo que a largura das barreiras eram iguais a largura dos poços quânticos. Estas amostras também possuem 20 poços e 21 barreiras, sendo 19 barreiras dopadas com uma concentração nominal de $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e as duas barreiras externas dopadas com metade da concentração das barreiras internas. Estas amostras foram apresentadas na tabela 2 do capítulo 2. Medidas experimentais do efeito Hall e do efeito Shubnikov-de Haas resultaram nos dados mostrados na tabela 4, onde L_B que é a largura dos poços e barreiras, n_H que é a concentração de portadores Hall, μ_H que é a mobilidade quântica Hall, B_{Fc} e B_{Fp} que são as frequências de oscilação das órbitas de cintura e pescoço, respectivamente, obtidos das medidas de Shubnikov-de Haas, e n_{sAH} que é a concentração de portadores obtido da medida de Shubnikov-de Haas.

Tabela 4: Dados experimentais das amostras selecionadas para serem crescidas, onde L_B é a largura dos poços e barreiras, n_H é a concentração de portadores Hall, μ_H é a mobilidade quântica Hall, B_{Fc} e B_{Fp} são as freqüência de cintura e a freqüência de pescoço, respectivamente, e n_{sdH} é a concentração de portadores Shubnikov-de Haas.

Amostra	L_B (Å)	$n_H (\times 10^{13} cm^{-2})$	$\mu_H (T^{-1})$	$B_{Fc} (T)$	$B_{Fp} (T)$	$n_{sdH} (\times 10^{12} cm^{-2})$
2533	60	7.0	0.1000	82.7		4.0
2561	55	6.8	0.1769	36.0	22.5	1.4
2562	45	8.4	0.1144	45.1	26.6	1.7
2563	40	8.3	0.1182	48.1	20.9	1.7
2532	35	10.0	0.1013	62.6	22.0	2.1
2564	30	8.0	0.0782	65.9		3.2

Na figura (4.15) apresentamos as freqüências de oscilação em função do ângulo de inclinação das amostras para as medidas do efeito Shubnikov-de Haas em ângulos oblíquos, para as amostras identificadas na tabela 4. Na parte (a) amostra 2561, (b) amostra 2562, (c) amostra 2563, e (d) amostra 2532.

A figura (4.15) mostra que: (1) obtemos um conjunto de amostras, de região correspondente a L_B no intervalo de 35 Å à 55 Å, apto a nos fornecer freqüências de oscilação bem resolvidas e afastadas do espectro de fundo (ver capítulo 2); (2) os estados de Tamm estão ausentes nestas amostras; (3) há uma concordância entre as freqüências de oscilação experimentais e as previstas pelo modelo teórico. Na seção seguinte iremos investigar a fotoluminescência destas super-redes.

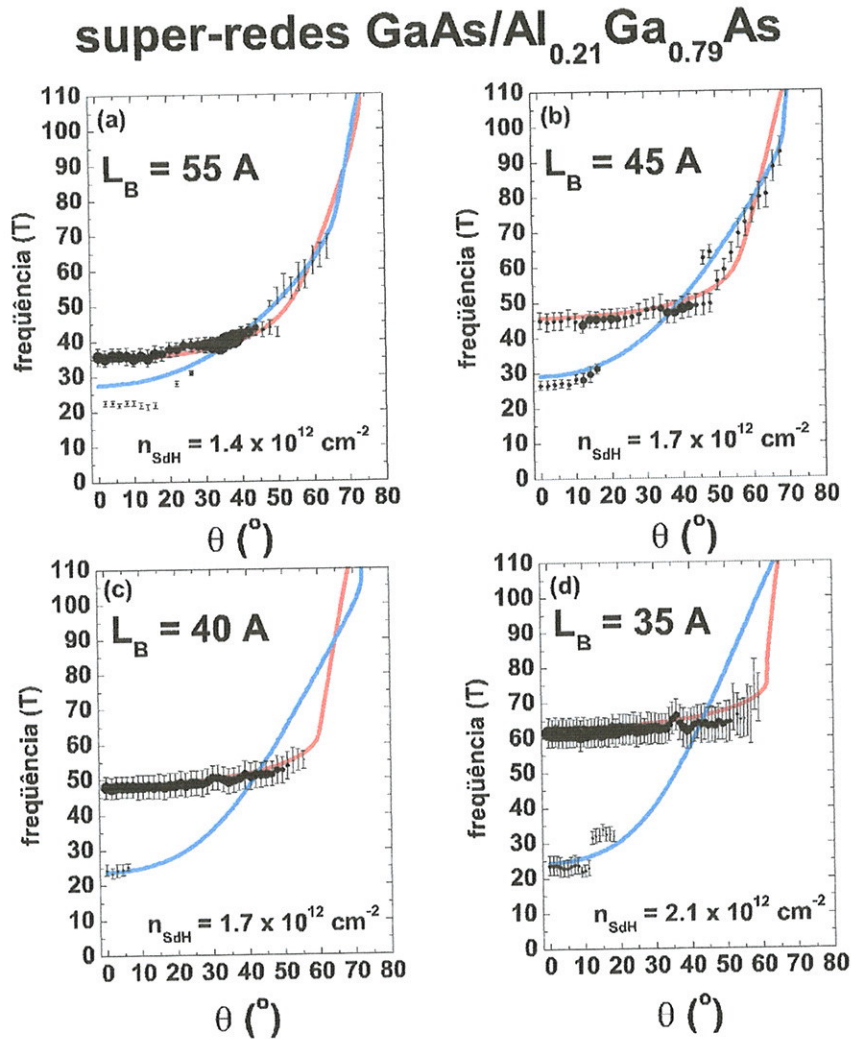


Figura 4.15: (a) Pontos experimentais das frequências de oscilação para: (a) amostra 2561, (b) amostra 2562, (c) amostra 2563, e (d) amostra 2532. Estes resultados são provenientes da análise de Fourier das medidas do efeito Shubnikov-de Haas em vários ângulos de inclinação. A área de cada ponto é proporcional à intensidade do pico do espectro de Fourier. A estimativa das barras de erros foi feita através do procedimento já descrito anteriormente para as amostras 2434 e 2268.

4.3 Medidas de Fotoluminescência

4.3.1 Super-rede com Dopagem nas Camadas de Barreira Internas e Externas

A fotoluminescência de super-redes com dopagem apenas nas camadas de barreiras internas foram investigadas anteriormente em amostras de *InP/InGaAs* e apresentam uma banda de luminescência inteiramente dominada por transições entre os estados de Tamm [21]. A luminescência associada a estados de minibanda não foi detectada nas amostras com este perfil de dopagem, pois a força do oscilador associada a estas frequências é muito pequena [47]. O objetivo deste trabalho é a investigação da fotoluminescência em super-redes com um novo perfil de dopagem: super-redes dopadas nas camadas de barreiras internas e externas, a fim de detectarmos a fotoluminescência devida a transições entre as minibandas de valência e condução.

Na medida de fotoluminescência (PL), em baixa temperatura ($T=2\text{K}$) e em campo magnético nulo, observamos uma banda de luminescência para a amostra 2268 (ver parte (a) da figura 4.16). Identificamos nesta figura a energia do gap do GaAs. Obtemos a posição do pico (1.610 eV), a largura a meia altura da fotoluminescência (32.0 meV) e uma largura de banda de fotoluminescência de 80 meV. Estas características indicam que há confinamento, pois detectamos uma banda de luminescência acima da energia do gap e com uma largura comparável à energia de Fermi para esta super-rede.

Para investigar a origem da fotoluminescência observada, a luminescência foi estudada em função do campo magnético perpendicular às camadas (configuração de Faraday). Na parte (b) da figura (4.16) observamos várias curvas da fotoluminescência, cada uma realizada em campos magnéticos diferentes de 0 T até 9.6 T, com passo de 0.4 T. Nesta figura é possível observar uma fraca modificação na fotoluminescência conforme aumentamos o campo magnético.

A modificação do espectro de fotoluminescência em campo alto está relacionada à formação de níveis de Landau. A figura (4.17) mostra esquematicamente os leques de níveis de Landau esperados para uma super-rede. Dois leques de Landau, associados às singularidades da densidade de estados, M_0 e M_1 , são esperados. A alta densidade de níveis de Landau, associada a uma baixa mobilidade eletrônica que conduz a um alargamento dos níveis de energia, tem como resultado apenas uma pequena modulação na intensidade da fotoluminescência em campos magnéticos altos, como é observado experimentalmente, como se vê na parte (b) da figura (4.16).

Para fazermos um levantamento do leque de Landau (energia dos níveis de Landau em função do campo magnético), medimos a intensidade da fotoluminescência em energias do fóton fixas em função do campo magnético.

A intensidade da fotoluminescência, para uma energia do fóton fixa, deve apresentar um máximo de intensidade sempre que a energia do fóton coincidir com a separação em energia entre um nível de Landau na faixa de condução e um nível de Landau na faixa de valência. A figura (4.18) apresenta, na parte (a), estas medidas para a amostra 2268. Identificamos na figura as energias fixas e variamos

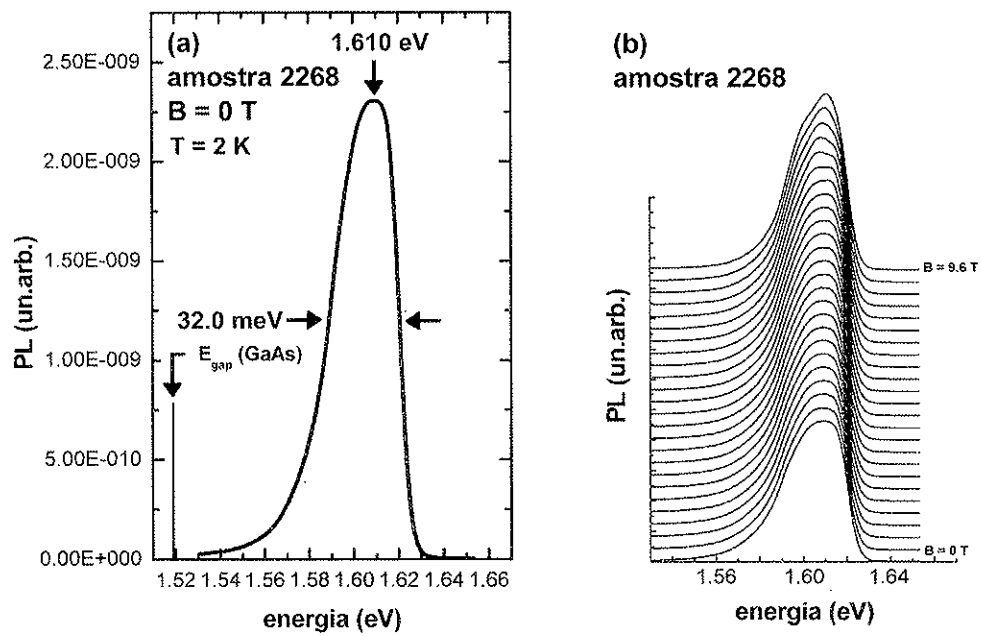


Figura 4.16: (a) Fotoluminescência em campo magnético nulo da amostra 2268. (b) Fotoluminescência em função do campo magnético da amostra 2268, cada uma realizada em campos magnéticos diferentes de 0 T até 9.6 T, com passo de 0.4 T.

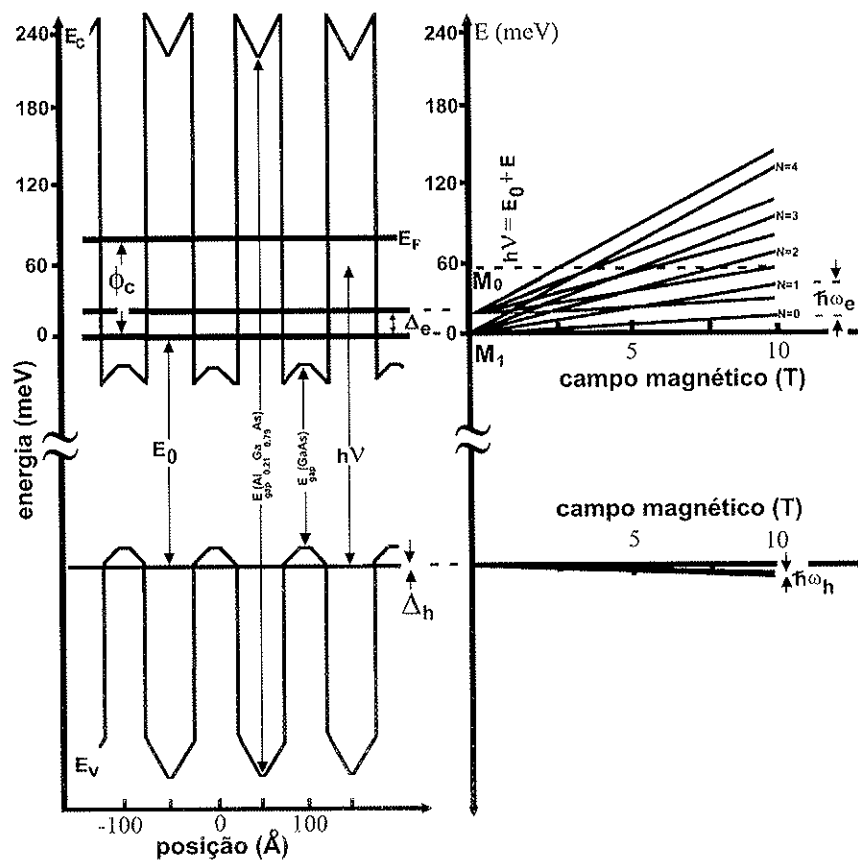


Figura 4.17: Lado esquerdo: Perfil de potencial esquemático para uma super-rede dopada interna e externamente cujo período é de 100 Å. $h\nu$ é a energia dos fótons, E_0 é a energia do gap em campo magnético nulo, Δ_e é a largura energética da minibanda de condução, Δ_h é a largura energética da minibanda de valência, E_c é a energia do limiar da banda de condução, E_v é a energia do limiar da banda de valência, E_F é a energia do nível de Fermi, ϕ_c que é a diferença de energia entre o nível de Fermi e o fundo da minibanda de condução e E_{gap} é o gap das camadas GaAs e $Al_{0.21}Ga_{0.79}As$. Do lado direito da figura observamos o efeito do campo magnético, onde ocorre a formação dos níveis de Landau. A diferença em energia do início dos níveis de Landau eletrônicos é dada pela largura energética da minibanda de condução, ω_e é a frequência ciclotron para a banda de condução, ω_h é a frequência ciclotron para a banda de valência e $N = 0, 1, 2, \dots$ designa o número quântico magnético dos níveis de Landau. Identificamos os N 's associados ao leque de Landau originado no fundo da minibanda de condução.

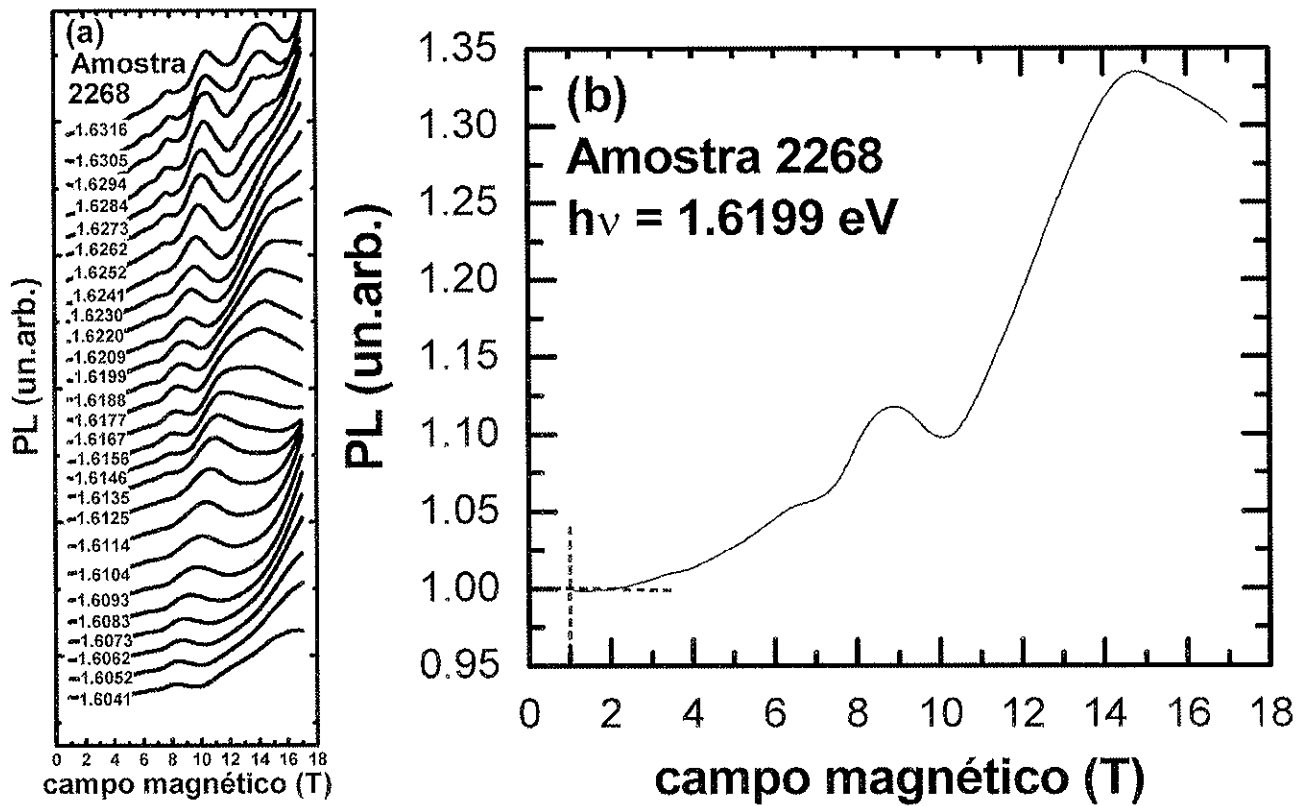


Figura 4.18: (a) Fotoluminescência em função do campo magnético com energia fixa da amostra 2268. As energias de cada espectro estão inseridas no gráfico (em eV). (b) Para efeito de comparação dos diversos espectros e ajuste posterior com a fórmula teórica, a intensidade da fotoluminescência foi normalizada a fim de que o valor da luminescência em $B = 1T$ seja de 1 unidade arbitrária.

o campo magnético de 1 T à 17 T. Observa-se uma oscilação da intensidade da fotoluminescência, que se assemelha ao efeito Shubnikov-de Haas.

Na parte (b) observa-se o gráfico da fotoluminescência em função do campo magnético para uma energia do fóton fixa. Realizamos uma normalização da intensidade da fotoluminescência a fim de que todos os espectros iniciem valendo 1, ou seja, $I(B = 1T) = 1$. Esta normalização foi feita dividindo-se todos os pontos experimentais pela intensidade da fotoluminescência em $B = 1T$.

Podemos escrever a energia dos fótons emitidos, quando os elétrons transitam entre os níveis de Landau das bandas de condução e valência, na condição de máxima intensidade ²:

$$h\nu = E_0 + \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_v$$

$$h\nu = E_0 + \Delta_e + \Delta_h + \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_v$$

para transições nas singularidades de van Hove M_0 e M_1 respectivamente, onde $N = 0, 1, 2, \dots$, $\omega_c = \frac{eB}{m_c}$ e $\omega_v = \frac{eB}{m_h}$. Substituindo ω_c e ω_v temos:

$$h\nu = E_0 + \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar e B}{\mu} \quad (4.1)$$

$$h\nu = E_0 + \Delta_e + \Delta_h + \left(N + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar e B}{\mu}, \quad (4.2)$$

onde $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}$ é a massa reduzida do par elétron-buraco.

Resolvendo as equações (4.1) e (4.2) para o inverso do campo magnético, obtemos os valores do campo magnético em que a intensidade da luminescência deve ser máxima:

$$\frac{1}{B_N} = \frac{\left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar e}{\mu(h\nu - E_0)} \quad (4.3)$$

$$\frac{1}{B_N} = \frac{\left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar e}{\mu(h\nu - E_0 - \Delta_e - \Delta_h)}, \quad (4.4)$$

para transições nas singularidades de van Hove M_0 e M_1 respectivamente. As equações (4.3) e (4.4) mostram que, para um aumento em $h\nu$, ocorre um aumento de B_N , isto é, um máximo de intensidade se desloca para valores maiores de campo magnético quando $h\nu$ aumenta, em acordo com a observação experimental representada na figura (4.18(a)).

As equações (4.3) e (4.4) mostram também que, graficada em inverso do campo magnético (isto é, num gráfico em função de $\frac{1}{B}$), a intensidade da luminescência deverá apresentar oscilações periódicas,

²Para bandas de condução e valência parabólicas onde uma transição direta é permitida em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ temos a conservação do momento cristalino ($\hbar\mathbf{k}$), picos de absorção ocorrem em energias acima da energia do gap à campo magnético zero. A regra de seleção para estas transições é $\Delta N = 0$ onde N é o número quântico magnético[48].

com períodos dados por:

$$\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{1}{B_{N+1}} - \frac{1}{B_N} = \frac{\hbar e}{\mu (h\nu - E_0)}$$

e

$$\Delta \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{1}{B_{N+1}} - \frac{1}{B_N} = \frac{\hbar e}{\mu (h\nu - E_0 - \Delta_e - \Delta_h)},$$

para transições nas singularidades de van Hove M_0 e M_1 respectivamente. Conseqüentemente, espera-se que a transformada de Fourier da oscilação da fotoluminescência (*MOPL* - magneto-oscilação da fotoluminescência), para os estados de energia da minibanda seja caracterizada por um dubleto nas frequências, $f = [\Delta (\frac{1}{B})]^{-1}$:

$$f_{MOPL}(M_0) = \frac{\mu (h\nu - E_0)}{\hbar e} \quad (4.5)$$

$$f_{MOPL}(M_1) = \frac{\mu (h\nu - E_0 - \Delta_e - \Delta_h)}{\hbar e} \quad (4.6)$$

Em particular, quando a energia do fóton detectado for igual à energia de Fermi, isto é, quando:

$$h\nu = E_F = E_0 + \phi_c,$$

onde E_F é a energia do nível de Fermi e ϕ_c é a diferença de energia entre o nível de Fermi e o fundo da minibanda de condução, então a transformada de Fourier da oscilação da fotoluminescência, será dada por:

$$f_{MOPL}^{EF}(M_0) = \frac{\mu \phi_c}{\hbar e}$$

$$f_{MOPL}^{EF}(M_1) = \frac{\mu (\phi_c - \Delta_e - \Delta_h)}{\hbar e}$$

Este dubleto de frequências pode ser comparado com o dubleto de frequências observados no espectro de Shubnikov-de Haas. De acordo com a fórmula semi-clássica de uma órbita fechada feita por L.Onsager[38] as frequências de Fourier das oscilações Shubnikov-de Haas são encontradas substituindo as áreas das seções extremais da superfície de Fermi na equação $f = \frac{\hbar}{2\pi e} A_{ext}$, onde f é a frequência de oscilação e A_{ext} é a área da seção extremal da superfície de Fermi. Para uma relação de dispersão parabólica, conforme vista na seção 2.6 ($A_{pesc} = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} (\phi_c - \Delta)$ e $A_{cint} = \frac{2\pi m_e}{\hbar^2} \phi_c$), obtemos:

$$f_{sDH}(M_0) = B_{Fc} = \frac{\hbar}{2\pi e} \left(\frac{\pi 2m_e}{\hbar^2} \phi_c \right) = \frac{m_e}{\hbar e} \phi_c$$

$$f_{sdH}(M_1) = B_{Fp} = \frac{\hbar}{2\pi e} \left(\frac{\pi 2m_e}{\hbar^2} (\phi_c - \Delta) \right) = \frac{m_e}{\hbar e} (\phi_c - \Delta)$$

Relacionando as frequências de oscilação de Shubnikov-de Haas e da fotoluminescência quando $h\nu = E_F$ obtemos:

$$\frac{f_{MOPL}^{EF}(M_0)}{f_{sdH}(M_0)} = \frac{\mu}{m_e} \leq 1 \quad (4.7)$$

pois $\mu \leq m_e$, então $f_{MOPL}^{EF} \leq f_{sdH}$. Para energias do fóton inferiores a E_F , de acordo com (4.5) e (4.6), as frequências de oscilação da luminescência serão ainda menores, isto é:

$$\frac{f_{MOPL}}{f_{sdH}} < 1 \quad (4.8)$$

A figura (4.19) mostra na parte (a) o espectro do efeito Shubnikov-de Haas e a intensidade da fotoluminescência em função do campo magnético na energia fixa de 1.6316 eV para a amostra 2268. Observa-se uma oscilação semelhante em ambos os espectros. Na parte (b) observa-se a amplitude do espectro de Fourier para as duas medidas apresentadas na parte (a). Verifica-se que as frequências de oscilação do espectro da fotoluminescência são menores do que as frequências de oscilação do espectro do efeito Shubnikov-de Haas, conforme previsto pela fórmula (4.8). Isto é uma demonstração inequívoca de que a fotoluminescência detectada é efetivamente decorrente da recombinação de um elétron pertencente à minibanda de energia da faixa de condução[49].

A separação entre os picos de Fourier M_0 e M_1 fornece uma medida da largura da minibanda, isto é, segundo as equações (4.5) e (4.6):

$$f_{MOPL}(M_0) - f_{MOPL}(M_1) = \frac{\mu(\Delta_e + \Delta_h)}{\hbar e}$$

Os cálculos autoconsistentes indicam que $\Delta_h < 0.3meV$ e $\mu \simeq m_e$, portanto, em boa aproximação:

$$\Delta_e \simeq \frac{\hbar e}{m_e} [f_{MOPL}(M_0) - f_{MOPL}(M_1)], \quad (4.9)$$

obtendo-se $\Delta_e = 19.9$ meV, onde utilizamos $m_e = 0.068 m_0$, obtido para a amostra 2268 a partir das medidas do efeito Shubnikov-de Haas em função da temperatura através de uma análise de acordo com a referência [50](Esta análise foi apresentada nas referências[51, 52], e será mostrada no apêndice C.). Isto está em boa concordância com $\Delta_e = 19.6$ meV, obtido a partir do espectro de Shubnikov-de Haas.

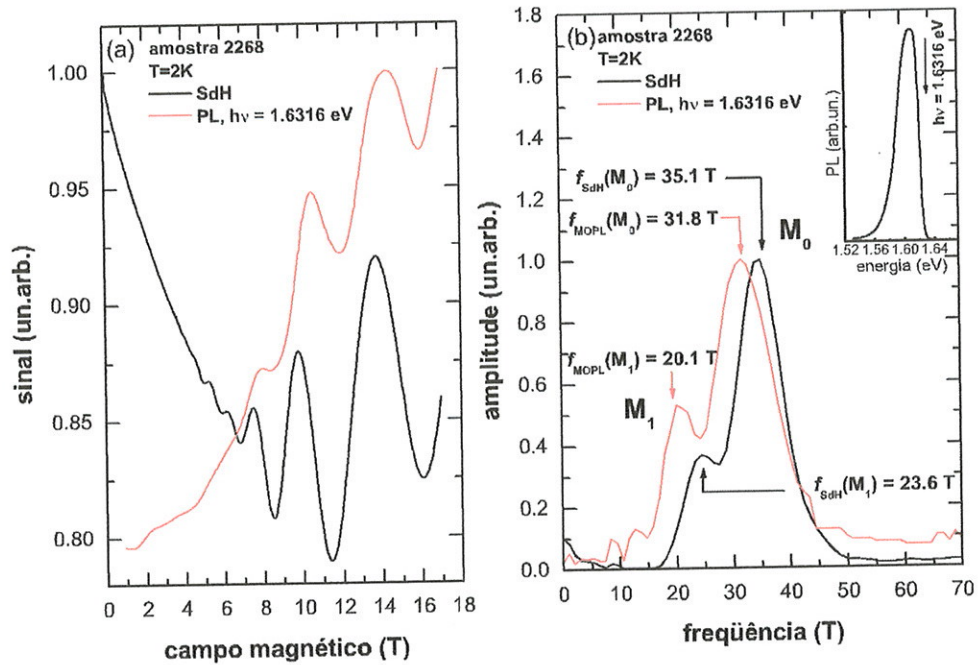


Figura 4.19: (a) Espectros do efeito Shubnikov-de Haas e da fotoluminescência em função do campo magnético na energia fixa de 1.6316 eV para a amostra 2268. (b) Gráfico das amplitudes do espectro de Fourier das medidas identificadas na parte (a). O espectro de fotoluminescência da amostra 2268 encontra-se inserido nesta figura, neste espectro, indicamos o ponto do espectro, de energia $h\nu = 1.6316$ eV onde realizamos a medida da fotoluminescência em função do campo magnético mostrada na parte (a).

4.3.2 Modelo para a Fotoluminescência

Na seção anterior, vimos que uma análise de Fourier das oscilações da intensidade da fotoluminescência em função do campo magnético pode fornecer as frequências $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$, características de uma dada energia do fóton $h\nu$, a partir das quais a largura da minibanda eletrônica pode ser estimada de acordo com (4.9). Um outro parâmetro de interesse é a energia E_0 - gap de energia entre os estados de valência e condução da super-rede.

De acordo com (4.5) e (4.6), este parâmetro poderia em tese ser obtido a partir dos valores experimentais $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ graficados em função da energia do fóton $h\nu$: espera-se uma reta que intercepta o eixo das ordenadas em $h\nu = E_0$. Porém, ainda que o espectro de Fourier apresente os dois picos $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ para energias $h\nu$ próximas à região de altas energias da faixa de luminescência, o mesmo não acontece quando reduzimos a energia $h\nu$. Isto se deve a dois fatores principais: (1) para energias $h\nu$ menores, as frequências diminuem, aproximando-se do espectro de frequências associado ao fundo não-oscilatório; (2) para energias $h\nu$ menores, a luminescência está associada a estados eletrônicos de energia menor, cujo tempo de meia-vida é mais curto [42], o que causa um alargamento dos picos no espectro de Fourier [40, 53]. Na referência [53] encontra-se explicitamente uma fórmula que informa a proporcionalidade inversa entre a largura dos picos da transformada de Fourier de um espectro do efeito Shubnikov-de Haas e a mobilidade eletrônica, $\delta = \frac{4\frac{3}{2}-1}{2\mu_Q}$, onde δ é a largura do pico da transformada de Fourier e μ_Q é a mobilidade quântica, que é diretamente proporcional ao tempo de meia-vida.

Para contornar esta dificuldade, e obtermos as frequências $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ associadas a todo o espectro de luminescência, nesta seção desenvolveremos um modelo teórico para a forma de linha das oscilações da intensidade da fotoluminescência em função do campo magnético aplicado. Um modelo semelhante foi investigado por P.T. Coleridge[54] para analisar a condutividade de um gás de elétrons bidimensionais em campos magnéticos, e determinar o tempo de meia-vida quântico e de transporte a partir de medidas do efeito Shubnikov-de Haas.

As oscilações na intensidade da fotoluminescência, de uma dada energia do fóton $h\nu$, na aproximação da regra de ouro de Fermi e na aproximação da função envelope ([29] pág. 262), será proporcional à:

$$\frac{\Delta I(h\nu, B)}{I(h\nu, B=0)} \sim \sum_{N, N', k_e, k_h} |\langle \phi_h(N', k_h) | \phi_e(N, k_e) \rangle|^2 \delta \left[E_0 + \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_e + E_e(k_e) + \left(N' + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_h + E_h(k_h) - h\nu \right],$$

onde a soma é sobre os estados eletrônicos, (N, k_e) , que estão situados abaixo do nível de Fermi, e sobre os estados de buraco, (N', k_h) , que contém os buracos fotoexcitados, ϕ_h e ϕ_e são as funções de onda de buracos e elétrons, respectivamente.

Devido a conservação de momento, as transições somente ocorrem se $N = N'$ e $k_e = k_h = k$ ³.

³Para maiores detalhes da regra de seleção para transições diretas entre as bandas de condução e valência, ver

Então, ficamos com:

$$\frac{\Delta I(h\nu, B)}{I(h\nu, B=0)} \sim |\langle \chi_h | \chi_e \rangle|^2 \sum_{N,k} \delta \left[E_0 + \left(N + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e B}{\mu} + E_e(k) + E_h(k) - h\nu \right] \quad (4.10)$$

onde χ_e e χ_h são as funções de onda envelope do elétron e do buraco, respectivamente, cujas dependências em k foram ignoradas, e μ é a massa reduzida do par elétron-buraco.

Na aproximação *tight-binding*, as relações de dispersão de minibanda eletrônica e de buraco serão dadas, respectivamente, por:

$$E_e(k) = \frac{\Delta_e}{2} (1 - \cos kd) \quad (4.11)$$

$$E_h(k) = \frac{\Delta_h}{2} (1 - \cos kd), \quad (4.12)$$

onde d é o período da super-rede.

Substituindo (4.11) e (4.12) na equação (4.10), e efetuando o somatório de acordo com o procedimento descrito em [40] obtêm-se que:

$$\frac{\Delta I(h\nu, B)}{I(h\nu, B=0)} \sim - \exp \left(- \frac{2\pi\gamma}{\hbar e B/\mu} \right) J_0 \left(\pi \frac{\Delta_e + \Delta_h}{\hbar e B/\mu} \right) \cos \left(2\pi \frac{h\nu - E_0 - \frac{\Delta_e + \Delta_h}{2}}{\hbar e B/\mu} \right),$$

onde foi admitido que todos os níveis de energia eletrônicos são alargados, descritos por uma gaussiana de meia largura à meia altura igual a γ , e J_0 é a função de Bessel de ordem zero.

Considerando, novamente, o fato de que Δ_h é pequena comparada a Δ_e podemos suprimí-la da expressão da intensidade das oscilações da fotoluminescência, então podemos escrever:

$$\frac{\Delta I(h\nu, B)}{I(h\nu, B=0)} \sim - \exp \left(- \frac{2\pi\gamma}{\hbar e B/\mu} \right) J_0 \left(\pi \frac{\Delta_e}{\hbar e B/\mu} \right) \cos \left(2\pi \frac{h\nu - E_0 - \frac{\Delta_e}{2}}{\hbar e B/\mu} \right) \quad (4.13)$$

Esta é a expressão a qual queríamos chegar, e que será utilizada para analisar os resultados experimentais. Para analisarmos qualitativamente este resultado, faremos a seguinte consideração: o argumento da função de Bessel J_0 , $\pi \frac{\Delta_e}{\hbar e B/\mu}$, é muito maior do que 1, pois, para valores típicos temos que: $\Delta_e = 15meV$, $\mu = 0.07m_0$ e $B < 17T$. Então

$$\pi \frac{\Delta_e}{\hbar e B(< 17)/\mu} > 1.68 > 1$$

Para $x > 1$, a diferença entre $J_0(x)$, e sua forma assintótica

apêndice D.

$$\lim_{x \rightarrow \infty} J_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \quad (4.14)$$

é maior do que 3% da amplitude de oscilação. Isto justifica substituir a função de Bessel, J_0 , por sua fórmula assintótica, para descrever os nossos dados experimentais. Portanto, substituindo (4.14) em (4.13) ficamos com a seguinte equação:

$$\frac{\Delta I(h\nu, B)}{I(h\nu, B=0)} \sim -\sqrt{\frac{2\hbar e B/\mu}{\pi^2 \Delta_e}} \exp\left(-\frac{2\pi\gamma}{\hbar e B/\mu}\right) \cos\left(\pi \frac{\Delta_e}{\hbar e B/\mu} - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(2\pi \frac{h\nu - E_0 - \frac{\Delta_e}{2}}{\hbar e B/\mu}\right),$$

utilizando a propriedade trigonométrica: $\cos a \cos b = \frac{1}{2} [\cos(a+b) + \cos(a-b)]$, temos que:

$$\frac{\Delta I(h\nu, B)}{I(h\nu, B=0)} \sim -\sqrt{\frac{\hbar e B/\mu}{2\pi^2 \Delta_e}} e^{-\frac{2\pi\gamma}{\hbar e B/\mu}} \left[\cos\left(2\pi \frac{h\nu - E_0}{\hbar e B/\mu} - \frac{\pi}{4}\right) + \cos\left(2\pi \frac{h\nu - E_0 - \Delta_e}{\hbar e B/\mu} + \frac{\pi}{4}\right) \right] \quad (4.15)$$

Esta equação mostra que, em um gráfico em função de $\frac{1}{B}$, a intensidade da fotoluminescência será oscilatória com períodos T_0 e T_1 , sendo:

$$T_0^{-1} = f_{MOPL}(M_0) = \frac{h\nu - E_0}{e\hbar/\mu}$$

e

$$T_1^{-1} = f_{MOPL}(M_1) = \frac{h\nu - E_0 - \Delta_e}{e\hbar/\mu},$$

que coincide exatamente com (4.5) e (4.6), respectivamente. Em termos destes períodos, a relação (4.13) pode ser reformulada como:

$$I(h\nu, B) = I(h\nu, B=0) + \Delta I(h\nu, B) =$$

$$1 - Ae^{-\frac{\pi}{\mu_Q B}} J_0 \left[\pi \frac{f_{MOPL}(M_0) - f_{MOPL}(M_1)}{B} \right] \cos \left[\pi \frac{f_{MOPL}(M_0) + f_{MOPL}(M_1)}{B} \right] \quad (4.16)$$

onde $\mu_Q = \frac{e\hbar}{\mu 2\gamma}$ é a mobilidade quântica, introduzida na seção 2.8, e foi admitido que a intensidade da luminescência para $B = 0$ é igual a 1 unidade arbitrária.

Na figura (4.20) observa-se um exemplo teórico de espectro de oscilações da intensidade da fotoluminescência obtido segundo a equação (4.16). Observe nesta figura que a amplitude da oscilação é

modulada por uma função que aumenta quando o campo magnético aumenta, sendo que a intensidade da luminescência oscila em torno da intensidade para $B = 0\text{T}$.

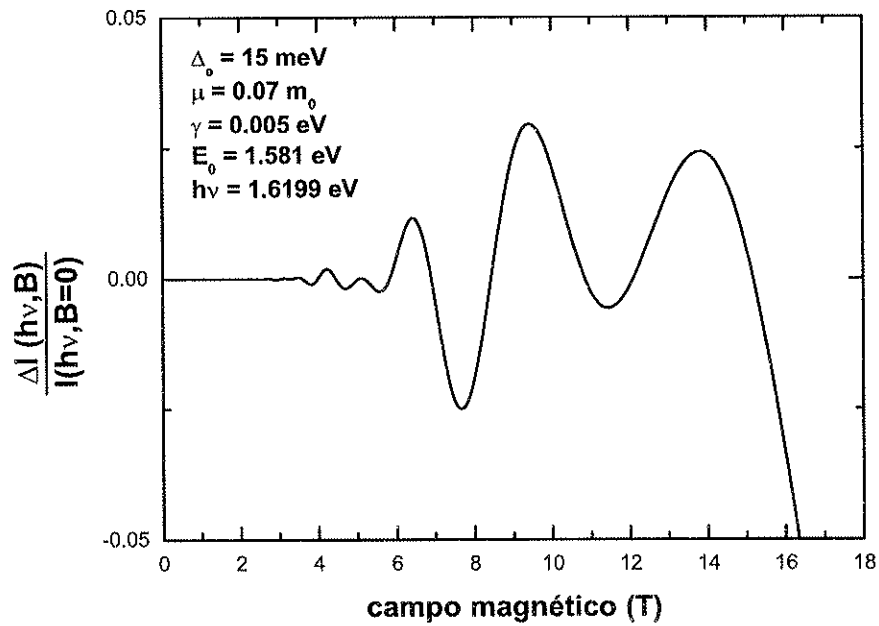


Figura 4.20: Gráfico da intensidade da fotoluminescência teórica em função do campo magnético, na energia do fóton fixa em $h\nu = 1.6199\text{eV}$. Admitimos os seguintes valores típicos: $\Delta_e = 0.15\text{meV}$, $\mu = 0.07m_0$, $\gamma = 0.005\text{eV}$, $E_0 = 1.581\text{eV}$ e $h\nu = 1.6199\text{eV}$.

4.3.3 Análise da Fotoluminescência

Conforme mostra a figura (4.20), o resultado teórico (4.16) resulta em uma fotoluminescência cuja intensidade oscila em torno de uma constante quando a intensidade do campo magnético aumenta. Porém, a experiência mostra que a intensidade da fotoluminescência oscila em torno de um valor que aumenta com o campo magnético (veja figura 4.18). Isto pode ser atribuído a uma força do oscilador que aumenta monotonamente com o campo magnético. Para incorporar este aumento monótono no modelo teórico iremos acrescentar uma função não-oscilatória à fórmula teórica (4.16).

Escolhemos para a função não-oscilatória uma função polinomial. Incluído o fundo não-oscilatório, a fórmula teórica para o ajuste será:

$$I(h\nu, B) = 1 - Ae^{-\frac{\pi}{B\mu_Q}} J_0 \left[\pi \frac{f_{MOPL}(M_0) - f_{MOPL}(M_1)}{B} \right] \cos \left[\pi \frac{f_{MOPL}(M_0) + f_{MOPL}(M_1)}{B} \right] \\ + c_1 (B - 1) + c_2 (B - 1)^2 + c_3 (B - 1)^3, \quad (4.17)$$

onde A é uma amplitude arbitrária multiplicativa, c_1 , c_2 e c_3 são os coeficientes do polinômio de fundo. Note que, para $B = 1T$ o termo não-oscilatório é igual a 1, enquanto que o primeiro termo é efetivamente zero, devido ao pequeno valor de μ_Q para as amostras que estudamos neste trabalho, resultando $I(h\nu, B = 1T) = 1$, em acordo com os dados experimentais, conforme descrito na seção 4.3.1, e apresentado na parte (b) da figura (4.18).

O ajuste da curva teórica sobre os dados experimentais foi realizado utilizando o método dos mínimos quadrados. Os parâmetros ajustáveis na equação (4.17) são: A , μ_Q , $f_{MOPL}(M_0)$, $f_{MOPL}(M_1)$, c_1 , c_2 e c_3 . Devido ao grande número de parâmetros ajustáveis, um ajuste utilizando valores iniciais arbitrários para todos os parâmetros, pode fornecer um bom ajuste formal, porém sem significado físico (por exemplo: frequências de oscilação negativas, etc.). Esta dificuldade na minimização ou maximização de funções em múltiplas dimensões é um problema bem conhecido ([55], pág.388).

Para contornar esta dificuldade, o ajuste por mínimos quadrados foi feito em duas etapas. Na primeira etapa, procuramos um ajuste preliminar para o fundo não-oscilatório (parâmetros c_1 , c_2 e c_3), para a amplitude das oscilações A , e para $f_{MOPL}(M_0)$. Nesta etapa, a diferença $f_{MOPL}(M_0) - f_{MOPL}(M_1)$ foi fixada no valor igual a $f_{sdH}(M_0) - f_{sdH}(M_1)$ (11.5 T para a amostra 2268, conforme apresentado na figura 4.19), e μ_Q foi tomado igual ao valor teórico estimado ($0.15\text{m}^2/\text{Vs}$) (ver tabela 2, capítulo 2). Os valores iniciais foram: $c_1 = c_2 = c_3 = 0$, $A = 1$, e $f_{MOPL}(M_0)$ foi tomado igual ao valor da frequência observada no espectro de Fourier das oscilações da fotoluminescência (por exemplo: 31.8 T, ver figura 4.19). O resultado do ajuste não apresentou variação com os valores iniciais dos parâmetros c_1 , c_2 , c_3 , A e $f_{MOPL}(M_0)$.

Numa segunda etapa, todos os parâmetros foram deixados livres para obtermos o melhor ajuste; evidentemente, nesta segunda etapa, os valores iniciais foram tomados iguais aos obtidos no final da primeira etapa. Como resultado do ajuste, foram obtidos os parâmetros: A , μ_Q , $f_{MOPL}(M_0)$,

$f_{MOPL}(M_1)$, c_1 , c_2 e c_3 . O resultado de cada etapa está apresentado na figura (4.21) para $h\nu = 1.6199\text{eV}$ para a amostra 2268, que mostra o fundo não-oscilatório e a fotoluminescência oscilatória separadamente. Para ilustrar o resultado dos ajustes apresentamos na figura (4.22) o ajuste para as energias (a) $h\nu = 1.6062\text{eV}$; (b) $h\nu = 1.6199\text{eV}$ e (c) $h\nu = 1.6241\text{eV}$, para a amostra 2268, que pertencem ao limiar, meio e final, respectivamente, do espectro de luminescência da amostra 2268.

A figura (4.23) apresenta, na parte (a), um gráfico das frequências $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ obtidas em função da energia do fóton. Conforme esperado, obtêm-se, em boa aproximação, duas retas paralelas. Isto é uma demonstração da validade do modelo. As linhas retas apresentadas na figura (4.23) foram obtidas através de um ajuste linear simultâneo dos dois conjuntos de pontos, com a mesma inclinação, referentes às frequências de oscilação em função da energia do fóton, com as equações (4.5) e (4.6).

A partir do gráfico $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ em função de $h\nu$, podemos estimar (a) a energia de Fermi, E_F ; (b) o gap de energia entre as faixas de valência e condução, E_0 ; (c) a largura da minibanda eletrônica, Δ_e ; e (d) a massa efetiva reduzida do par elétron-buraco, μ .

(a) Segundo, (4.7), para $h\nu = E_0$, $f_{MOPL}(M_0) \simeq f_{SDH}(M_0)$, logo da parte (a) da figura (4.23) deduzimos que $E_F \simeq 1.644\text{ eV}$.

(b) Segundo (4.5), $f_{MOPL}(M_0) = 0$ quando $h\nu = E_0$, logo a interseção da reta $f_{MOPL}(M_0)$ com o eixo horizontal oferece uma estimativa de $E_0 = 1.582\text{ eV}$, como se vê na parte (a) da figura (4.23).

(c) Segundo (4.5) e (4.6), a separação horizontal entre as retas $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ em função de $h\nu$ é igual à largura da minibanda eletrônica Δ_e , de onde obtemos $\Delta_e = 23.7\text{ meV}$, como se vê na parte (a) da figura (4.23).

(d) Segundo (4.5) e (4.6), a inclinação das retas $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ em função de $h\nu$ é igual a $\frac{\mu}{\hbar e}$, logo do gráfico apresentado na parte (a) da figura (4.23), obtêm-se $\mu = 0.066m_0$.

Na parte (b) da figura (4.23), mostramos o gráfico da fotoluminescência da amostra 2268, onde podemos observar os pontos do limiar da minibanda (E_0), o topo da minibanda ($E_0 + \Delta_e$), e a energia de Fermi a partir do fundo da minibanda de condução ($E_F = E_0 + \phi_c$).

Para uma avaliação crítica do modelo, apresentamos na figura (4.24), juntamente com os pontos experimentais e o ajuste linear destes pontos, uma curva teórica das frequências de oscilação em função da energia do fóton, onde utilizamos as massas eletrônicas efetivas para o fundo e para o topo da minibanda calculadas autoconsistentemente através do modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ apresentado na seção 2.2.2, as massas eletrônicas efetivas estão identificadas na figura (4.24). Estas massas, $m_e^{\text{teórico}}(M_0) = 0.071m_0$ e $m_e^{\text{teórico}}(M_1) = 0.070m_0$, definem a inclinação das retas, acordo com $\frac{m_e^{\text{teórico}}(M_0)}{\hbar e}$ e $\frac{m_e^{\text{teórico}}(M_1)}{\hbar e}$, respectivamente. A interseção das retas $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ com o eixo de energia determina os valores E_0 e $E_0 + \Delta_e$, respectivamente, e foram escolhidos de tal maneira que o desvio dos pontos teóricos e experimentais fosse mínimo. Observe-se que a massa eletrônica no fundo da minibanda é aproximadamente 3% menor do que no topo da minibanda, pois a função de onda envelope para os elétrons do fundo ($k = 0$) penetram mais na barreira de AlGaAs do que os elétrons do topo da minibanda ($k = \frac{\pi}{d}$). Há uma pequena discrepância entre as inclinações das retas teóricas e as retas obtidas a partir do ajuste da teoria para $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ e os dados experimentais.

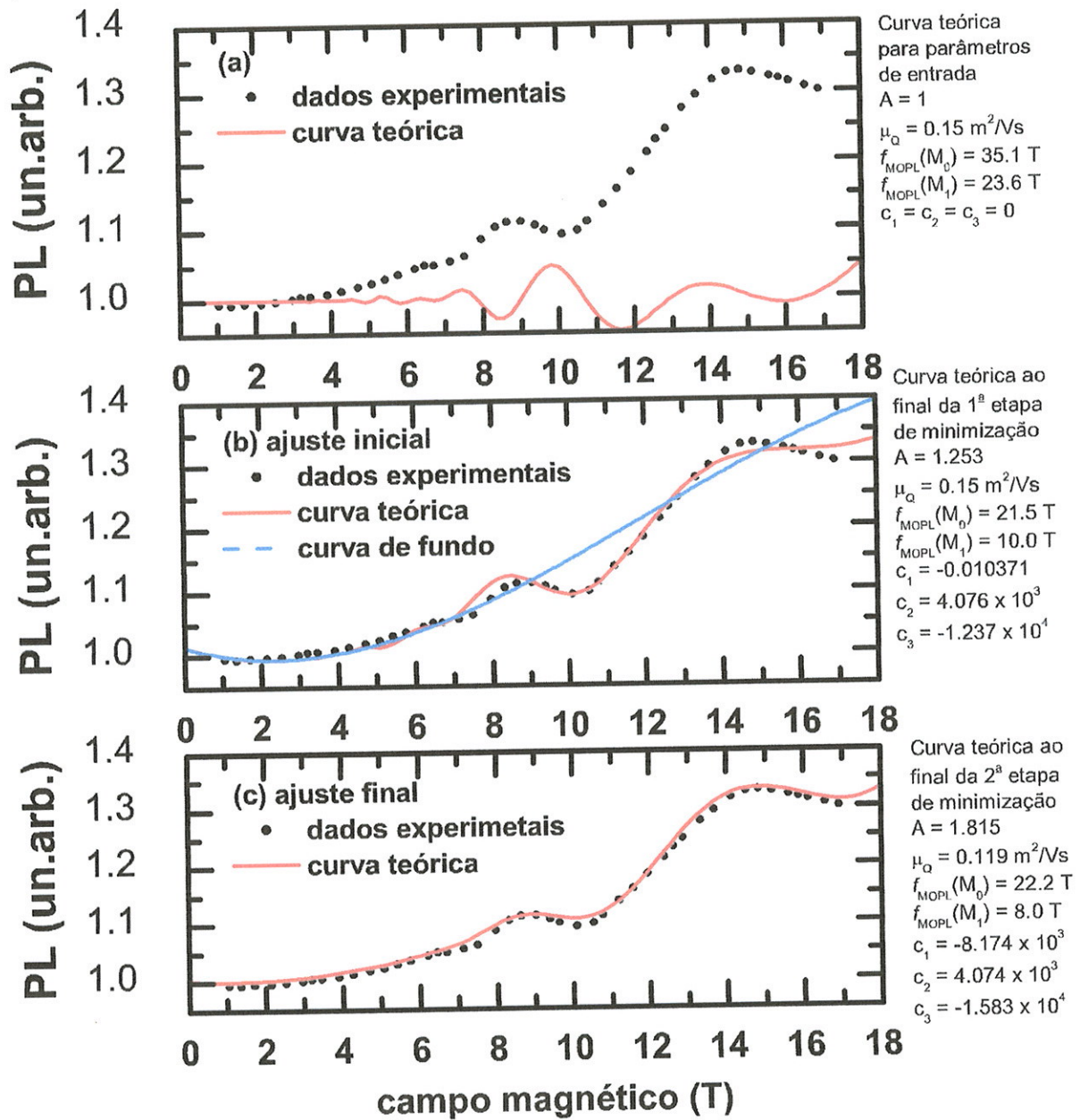


Figura 4.21: Etapas do ajuste para a forma de linha da fotoluminescência para $h\nu = 1.6199\text{eV}$, para a amostra 2268. (a) Gráfico dos pontos experimentais e da curva teórica de entrada; (b) Gráfico dos pontos experimentais, da curva teórica ao final da primeira etapa e da curva do polinômio de fundo; (c) Gráfico dos pontos experimentais e da curva teórica final. Os parâmetros de todas as curvas estão ao lado de cada curva.

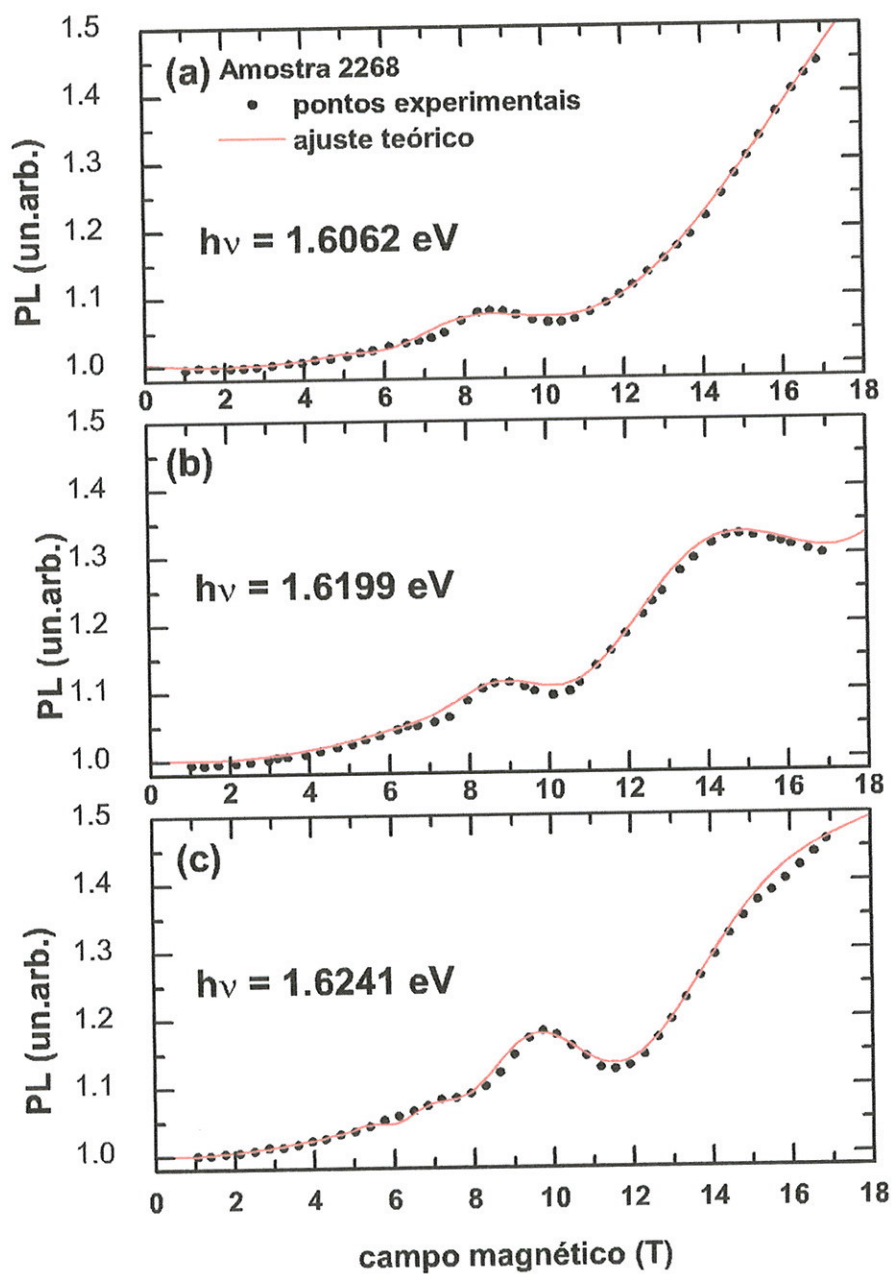


Figura 4.22: Gráfico da intensidade da fotoluminescência em função do campo magnético, para a amostra 2268, nas energias do fóton fixas: (a) $h\nu = 1.6062 \text{ eV}$; (b) $h\nu = 1.6199 \text{ eV}$ e (c) $h\nu = 1.6241 \text{ eV}$.

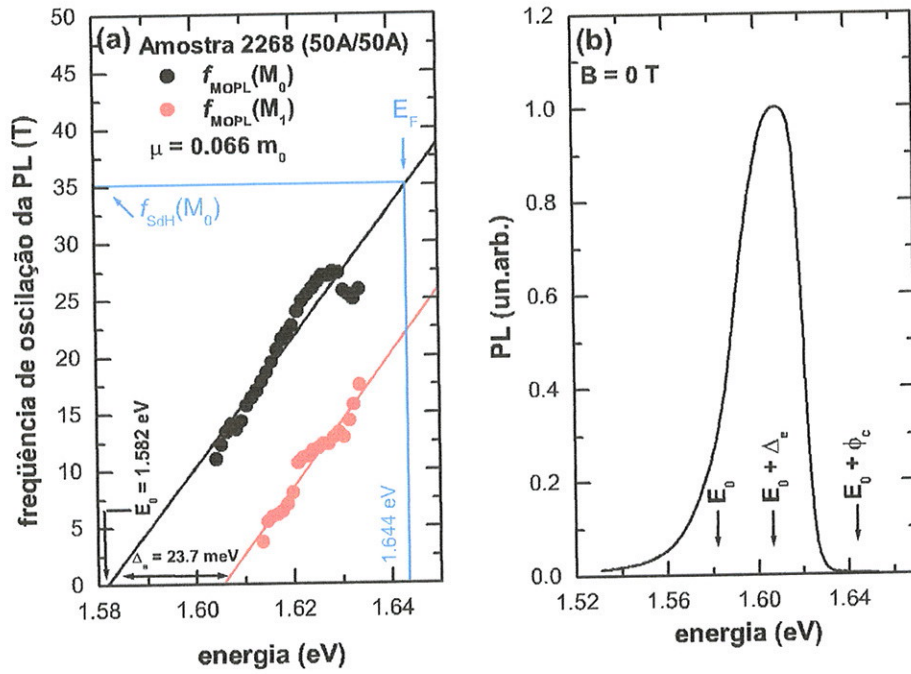


Figura 4.23: (a) Gráfico das frequências de oscilação em função das energias dos fótons obtidas da fotoluminescência em função do campo magnético da amostra 2268. (b) Gráfico da fotoluminescência da amostra 2268, mostramos neste gráfico os pontos do limiar da minibanda (E_0), o topo da minibanda ($E_0 + \Delta_e$), e a energia de Fermi a partir do fundo da minibanda de condução ($E_0 + \phi_c$).

Tal inconsistência se traduz em valores diferentes para E_0 . Para o ajuste de $f_{MOPL}(M_0)$, obteve-se, conforme descrito acima, $E_0 = 1.582$ eV. Utilizando-se a inclinação das retas feitas conforme a previsão teórica, advinda do cálculo autoconsistente, obtêm-se $E_0 = 1.586$ eV. A metade da diferença entre estes dois valores será tomada como incerteza no valor de E_0 , obtendo-se $E_0 = 1.582 \pm 0.002$ eV. Podemos estimar a incerteza do valor da largura da minibanda eletrônica, Δ_e , comparando o valor estimado pela teoria (ver figura 4.24, $\Delta_e = 21.1$ meV) com o valor estimado pela experiência (ver parte (a) da figura 4.23, $\Delta_e = 23.7$ meV). A diferença entre estes dois valores será tomada como uma estimativa da incerteza no valor de Δ_e , obtendo-se $\Delta_e = 23.7 \pm 2.6$ meV.

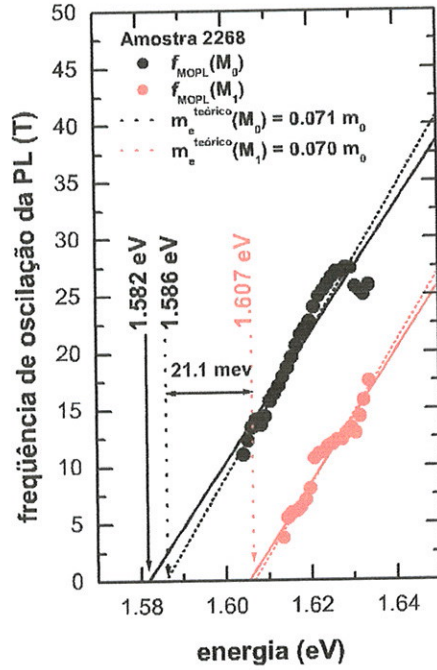


Figura 4.24: Gráfico das frequências de oscilação em função das energias dos fótons obtidas da fotoluminescência em função do campo magnético da amostra 2268.

A mesma análise de dados foi realizada para uma segunda amostra, com os mesmos parâmetros que a primeira (amostra 2268), exceto que o período desta super-rede é de 90\AA e a densidade de portadores é de $n_{sdH} = 1.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, ver tabela 4, amostra 2562.

A amostra 2562 apresenta uma luminescência em campo magnético nulo mostrada na parte (a) da figura (4.25), de onde obtemos a posição do pico (1.627 eV), a largura a meia altura da fotoluminescência (35.2 meV) e uma largura de banda de fotoluminescência de 104 meV. Estas características, como antes, indicam que há confinamento. Na parte (b) da figura (4.25) observamos várias curvas da fotoluminescência, cada uma realizada em campo magnéticos diferentes de 0 T até 17 T, com passo de 0.2 T. Nesta figura é possível observar uma fraca modificação na fotoluminescência conforme aumentamos o campo magnético, devida à formação de níveis de Landau.

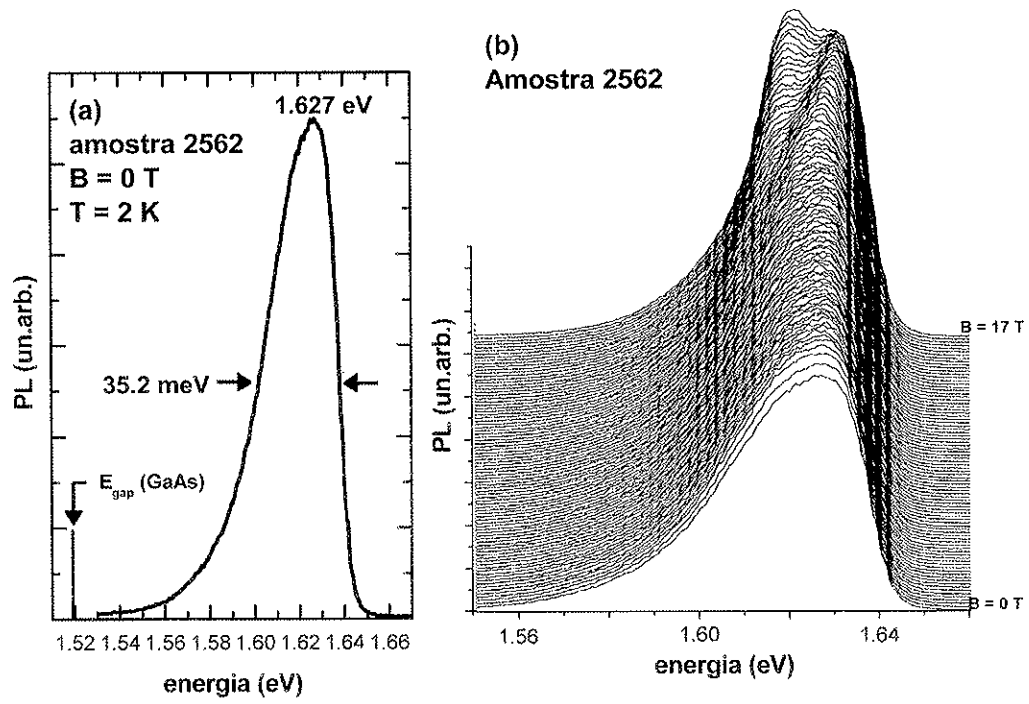


Figura 4.25: (a) Fotoluminescência em campo magnético nulo da amostra 2562. (b) Fotoluminescência em função do campo magnético da amostra 2562, cada uma realizada em campo magnéticos diferentes de 0 T até 17 T, com passo de 0.2 T.

A figura (4.26) mostra a intensidade da fotoluminescência em função do campo magnético, para energias do fóton fixas, para a amostra 2562. As energias dos fótons são mostradas no gráfico.

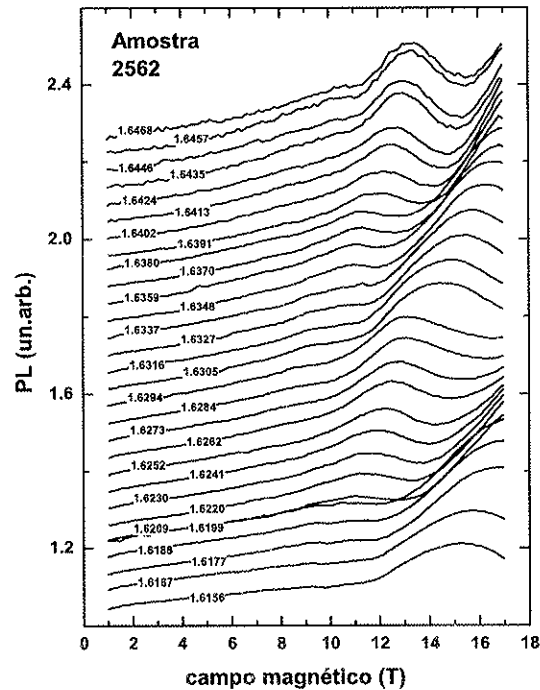


Figura 4.26: Fotoluminescência em função do campo magnético com energia fixa da amostra 2562. As energias de cada espectro estão inseridas no gráfico(em eV).

A figura (4.27) mostra o ajuste para as energias (a) $h\nu = 1.6156\text{eV}$; (b) $h\nu = 1.6305\text{eV}$ e (c) $h\nu = 1.6457\text{eV}$, para a amostra 2562, que pertencem ao limiar, meio e final, respectivamente, do espectro de luminescência desta amostra.

Utilizando o procedimento em dois estágios descrito anteriormente fitamos a equação (4.17) para todos os espectros de fotoluminescência em função do campo magnético. Os parâmetros $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ extraídos deste procedimento de ajuste formam um conjunto de pontos das frequências de oscilação da fotoluminescência em função da energia do fóton, e são mostrados na parte (a) da figura (4.28) para a amostra 2562. Observa-se uma dependência linear, conforme previsto pelas equações (4.5) e (4.6). Na parte (b), mostramos o gráfico da fotoluminescência da amostra 2562, onde podemos observar os pontos do limiar da minibanda (E_0), o topo da minibanda ($E_0 + \Delta_e$), e a energia de Fermi a partir do fundo da minibanda de condução ($E_0 + \phi_c$).

Apresentamos na figura (4.29) a avaliação crítica do modelo observando os dados obtidos na análise desta segunda amostra. Plotamos, como antes, juntamente com os pontos experimentais e o ajuste linear destes pontos, uma curva teórica das frequências de oscilação em função da energia do fóton, onde utilizamos as massas eletrônicas efetivas para o fundo e para o topo da minibanda calculadas autoconsistentemente através do modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ apresentado na seção 4.2.2, para esta amostra. Há, novamente, uma pequena diferença entre as inclinações das retas teóricas e as retas obtidas a

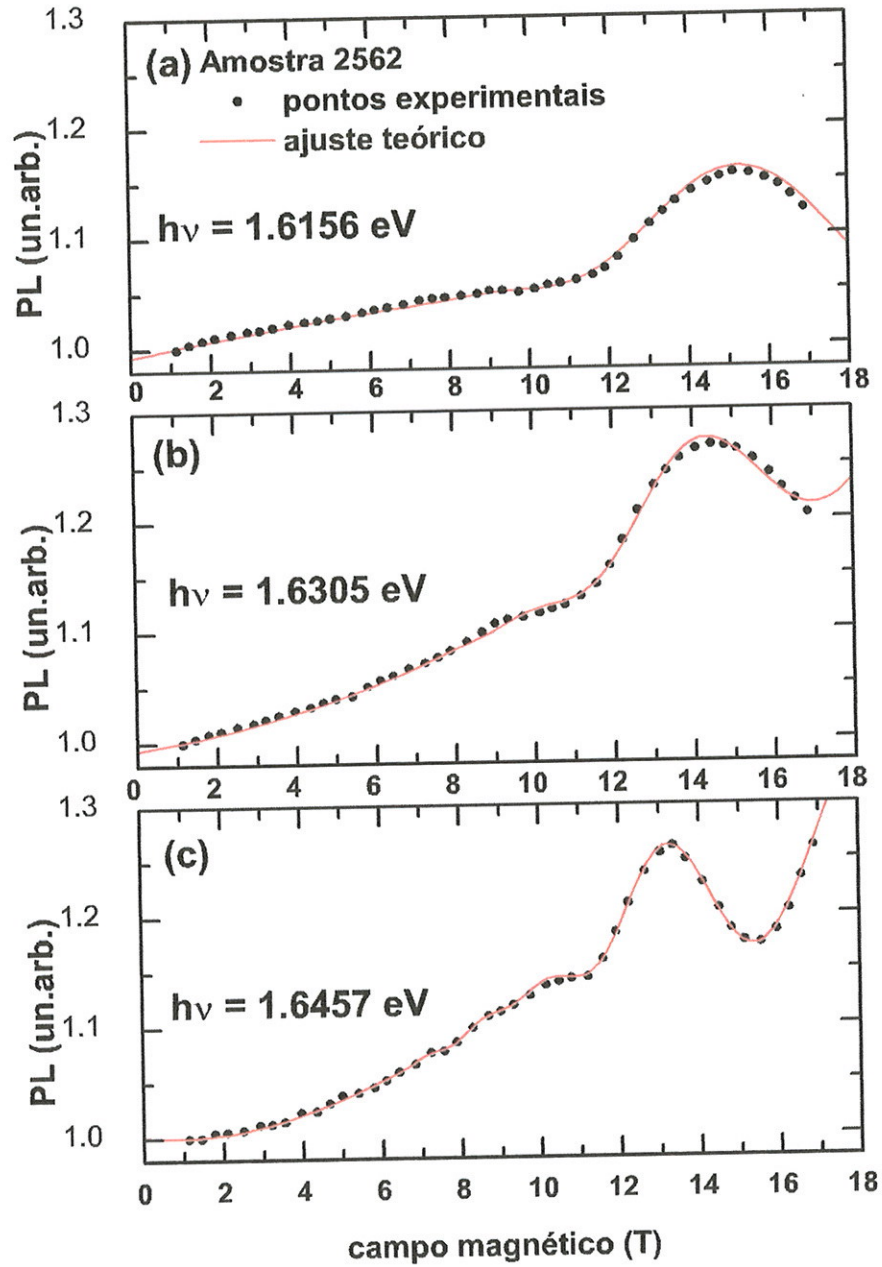


Figura 4.27: Gráfico da intensidade da fotoluminescência em função do campo magnético, para a amostra 2562, nas energias do fóton fixas: (a) $h\nu = 1.6156 \text{ eV}$; (b) $h\nu = 1.6305 \text{ eV}$ e (c) $h\nu = 1.6457 \text{ eV}$.

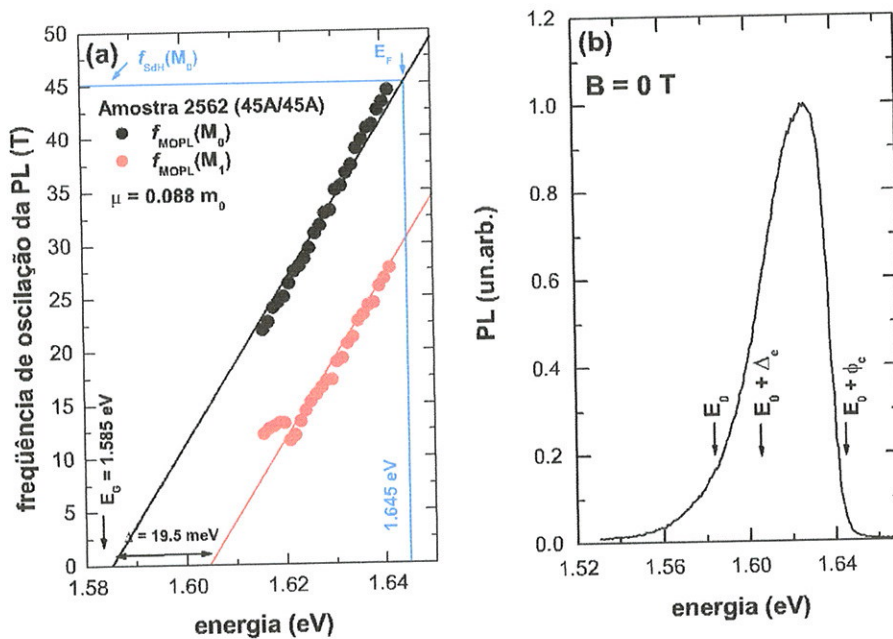


Figura 4.28: (a) Gráfico das frequências de oscilação em função das energias dos fótons obtidas da fotoluminescência em função do campo magnético da amostra 2562. (b) Gráfico da fotoluminescência da amostra 2562, mostramos neste gráfico os pontos do limiar da minibanda (E_0), o topo da minibanda ($E_0 + \Delta_e$), e a energia de Fermi a partir do fundo da minibanda de condução ($E_0 + \phi_c$).

partir do ajuste da teoria para $f_{MOPL}(M_0)$ e $f_{MOPL}(M_1)$ e os dados experimentais. Para o ajuste de $f_{MOPL}(M_0)$, obteve-se, conforme descrito anteriormente, $E_0 = 1.585$ eV. Utilizando-se a inclinação das retas feitas conforme a previsão teórica, advinda do cálculo autoconsistente, obtêm-se $E_0 = 1.575$ eV. A metade da diferença entre estes dois valores será tomada como incerteza no valor de E_0 , obtendo-se $E_0 = 1.585 \pm 0.005$ eV. Podemos estimar, como antes, a incerteza do valor da largura da minibanda eletrônica, Δ_e , comparando o valor estimado pela teoria (ver figura 4.29, $\Delta_e = 23.4$ meV) com o valor estimado pela experiência (ver parte (a) da figura 4.28, $\Delta_e = 19.5$ meV). A diferença entre estes dois valores será tomada como uma estimativa da incerteza no valor de Δ_e , obtendo-se $\Delta_e = 19.5 \pm 3.9$ meV.

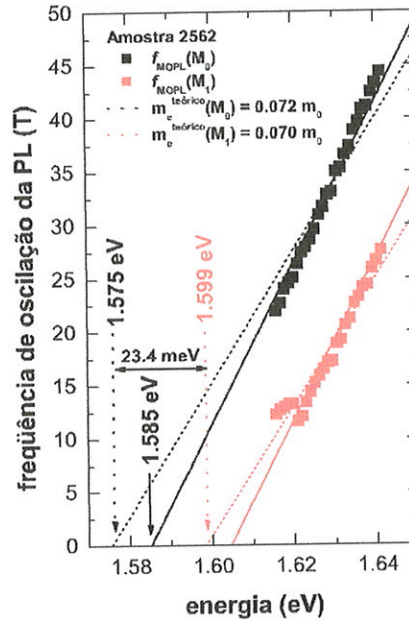


Figura 4.29: Gráfico das frequências de oscilação em função das energias dos fótons obtidas da fotoluminescência em função do campo magnético da amostra 2562.

A tabela 5 resume estes dados obtidos para as amostras 2268 e 2562.

Tabela 5: Comparação entre as amostras 2268 e 2562. Nesta tabela: d é o período da super-rede, n_{SDH} é a concentração de portadores, E_F é a energia de Fermi, E_0 é o gap estimado da super-rede, Δ_e é a largura energética da minibanda eletrônica e μ é a massa efetiva reduzida do par elétron-buraco.

Amostra	d (Å)	n_{SDH} $\times 10^{16} (m^{-2})$	E_F (eV)	E_0 (eV)	Δ_e (meV)	μ (m_0)
2268	100	1.4	1.644	1.582 ± 0.002	23.7 ± 2.6	0.066
2562	90	1.7	1.645	1.585 ± 0.005	19.5 ± 3.9	0.088

Em resumo, medimos a fotoluminescência das super-redes projetadas, demonstramos que esta fotoluminescência advém da recombinação de elétrons em estados estendidos da minibanda com buracos fotoexcitados, desenvolvemos um modelo para a forma de linha da fotoluminescência em função do campo magnético, aplicado na configuração de Faraday, de onde extraímos a largura da minibanda, a massa reduzida efetiva do par elétron-buraco, e o gap de energia entre as faixas de valência e condução da super-rede.

4.3.4 Renormalização da Energia do Gap (BGR)

Na seção anterior deduzimos o valor da energia do gap da super-rede. O gap determinado experimentalmente pode ser comparado com o gap previsto pelo cálculo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Esta comparação está apresentada na tabela 6.

Tabela 6: Comparação entre as amostras 2268 e 2562. Nesta tabela: d é o período da super-rede, n é a concentração de portadores, E_0 é o gap estimado da super-rede, E_0^{teo} é o valor do gap da super-rede calculado pelo método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e BGR é a renormalização da energia do gap.

Amostra	d (Å)	n $\times 10^{16}(m^{-2})$	E_0 (eV)	E_0^{teo} (eV)	BGR (meV)
2268	100	1.4	1.582 ± 0.002	1.6050	-23.0 ± 2
2562	90	1.7	1.585 ± 0.005	1.6059	-20.9 ± 5

Observa-se na tabela 6 que o valor teórico é maior do que o valor experimental. A redução do gap é denominada de renormalização da energia do gap (BGR - *Band Gap Renormalization*). A redução do gap é um efeito de muitos corpos: ele se deve à presença de elétrons em grande quantidade na faixa de condução. A alta densidade de elétrons presentes na amostra abre um novo canal de redução de energia dos estados monoelétrônicos: através da repulsão dos demais elétrons ao seu redor, um dado elétron reduz a sua energia, e esta redução se traduz em uma redução do gap. Este efeito, denominado de efeito de exchange-correlação, já foi amplamente investigado em sistemas bi e tridimensionais. A aproximação mais comum efetuada para se chegar a uma formulação teórica quantitativa para a BGR é a *random phase approximation (RPA)*. Estimamos valores da BGR da seguinte forma: o valor do gap experimental, E_0 , obtido na seção anterior, é comparado com o valor teórico do gap, obtido da equação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para esta estrutura, E_0^{teo} , que não leva em consideração a diminuição do gap devido a efeitos de muitos corpos. Equacionando : $E_0 = E_0^{teo} + BGR$, obtemos $BGR = E_0 - E_0^{teo}$. Os valores de E_0^{teo} e BGR, obtidos segundo este procedimento, são apresentados na tabela 6.

Os dados obtidos para as super-redes investigadas abrem a perspectiva de uma comparação entre os modelos teóricos e os dados experimentais para sistemas com dimensionalidade intermediária entre 2 e 3. Nesta seção, faremos uma comparação dos resultados experimentais com a previsão dos modelos teóricos para 2 e 3 dimensões, e procuraremos estender a formulação teórica para uma situação intermediária.

Sistemas Bidimensionais

Num sistema estritamente bidimensional, os elétrons ficam confinados em um plano geométrico. Para este sistema idealizado, S.Schmitt-Rink *et al.*[58] previu um comportamento característico $BGR \sim n^{\frac{1}{3}}$, onde n é a quantidade de elétrons por unidade de área do plano, para a renormalização da energia do gap. A fórmula quantitativa da renormalização da energia do gap, para sistemas bidimensionais é dada por:

$$BGR^{2D} = -3.1 (na_x^2)^{\frac{1}{3}} E_x \quad (4.18)$$

onde a_X é o raio de Bohr do éxciton, E_X é a energia de ligação do éxciton e n é a quantidade de elétrons por unidade de área do plano. Para um gás de elétrons estritamente bidimensional, substitui-se $E_X=4R^*$ e $a_X = \frac{a_B^*}{2}$ onde R^* é o Rydberg efetivo e a_B^* o raio de Bohr efetivo [59, 60]. Outros trabalhos também indicaram a dependência da BGR com $n^{\frac{1}{3}}$ [61, 62, 63, 64, 65, 66]. Como exemplo, podemos citar o trabalho de G. Trankle *et al.* [61] que, utilizando o limite para sistemas estritamente bidimensionais para analisar seus dados experimentais, investigaram estruturas de múltiplos poços quânticos de GaAs/AlGaAs, onde, por exemplo, para uma amostra de 41Å de largura de poço e densidade superficial n de $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ mediram uma $BGR^{2D} \simeq -44.4 \text{ meV}$, enquanto que, de acordo com a equação (4.18), estimamos $BGR^{2D} \simeq -47.2 \text{ meV}$.

Para realizar um sistema bidimensional, o gás de elétrons tem de ser situado entre duas barreiras de potencial repulsivas (poço quântico). Num sistema real, os elétrons nunca estão confinados num plano geométrico: a função de onda envelope não será uma função delta de Dirac, haverá um vazamento da função de onda eletrônica para o interior das barreiras de potencial. Desta forma, haverá uma espessura não-nula da camada que contém os elétrons. Os elétrons confinados ocuparão subbandas quantizadas de energia. Estes sistemas são denominados quase-bidimensionais.

Para estender a teoria de S.Schmitt-Rink, deduzida para sistemas estritamente bidimensionais, aos sistemas quase-bidimensionais, deve-se calcular o raio do éxciton (a_X) e a energia de ligação do éxciton (E_X) para o poço quântico, incorporando assim a espessura não-nula da distribuição eletrônica. Uma vez calculada estas quantidades para a estrutura a ser analisada, utiliza-se a equação (4.18) para calcular a renormalização da energia do gap.

A renormalização da energia do gap em sistemas quase-bidimensionais também já foi amplamente investigada [67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75]. Como exemplo, podemos citar o trabalho de G. Bongiovanni e J.L. Staehli [67] que investigaram múltiplos poços quânticos de GaAs/Al_{0.38}Ga_{0.62}As, citamos uma amostra de 20 poços de 50Å de largura e barreiras de 220Å de largura, densidade superficial n de $6.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, calcularam a energia de ligação do éxciton ($E_X = 13 \text{ meV}$) e um raio de Bohr do éxciton ($a_X = 83.2 \text{ Å}$), e mediram uma $BGR^{Q2D} \simeq -24.4 \text{ meV}$. Utilizando estes dados, estimamos através da equação (4.18) $BGR^{Q2D} \simeq -30 \text{ meV}$. Isto também pode ser comparado com o valor da BGR no limite de sistemas estritamente bidimensionais: $BGR^{2D} \simeq -37.5 \text{ meV}$.

Sistemas Tridimensionais

A previsão teórica é de que, nestes sistemas, BGR apresente um comportamento proporcional a $n_{3D}^{\frac{1}{4}}$ [61, 76, 77, 78], onde n_{3D} é a quantidade de elétrons por unidade de volume do material semiconductor. A fórmula para a renormalização da energia do gap é dada por:

$$BGR^{3D} = -3.5 [n_{3D} (a_B^*)^3]^{\frac{1}{4}} R^* \quad (4.19)$$

onde n_{3D} é a quantidade de elétrons por unidade de volume do material semiconductor.

Como exemplo, podemos citar o trabalho de G. Trankle *et al.* [61] que investigaram a BGR^{3D} para o GaAs para várias densidades, por exemplo, para $n_{3D} = 1.0 \times 10^{23} m^{-3}$ mediram $BGR^{3D} = -12$ meV, enquanto que, de acordo com a equação (4.19), estimamos $BGR^{3D} = -11.2$ meV.

Comparação das Teorias Estudadas com os Valores da BGR Obtidos neste Trabalho

No caso geral, a dimensionalidade das estruturas que estudamos - as super-redes - não correspondem a nenhuma das dimensionalidades discutidas até aqui (estritamente 2-D, quase-2-D, ou 3-D). Numa super-rede, a carga eletrônica está distribuída em todo o volume, com forte modulação ao longo da direção de crescimento, devido às barreiras de potencial repulsivo.

No limite de barreiras impenetráveis, a super-rede equivale a um conjunto de poços quânticos isolados, cada um contendo n elétrons por unidade de superfície da amostra, em qual caso a renormalização da energia do gap será descrita por (4.18), onde n é a densidade de carga superficial em cada um dos poços da super-rede. Neste caso, a renormalização da energia do gap é dada por (4.18), isto é:

$$BGR^{Q2D} = -3.1 (na_X^2)^{\frac{1}{3}} E_X \quad (4.20)$$

onde a_X e E_X são os valores do raio de Bohr do éxciton e da energia de ligação do éxciton, para um poço que contém uma densidade n de elétrons.

No limite de barreiras completamente transparentes, os elétrons irão se distribuir uniformemente em todo o volume da super-rede, como num sistema 3-D, em qual caso a renormalização da energia do gap será descrita por (4.19), mas $n_{3D} = \frac{n}{d}$, onde n é a densidade superficial de carga em cada período da super-rede, d . Neste caso, utilizando a equação (4.19), a renormalização da energia do gap é dada por:

$$BGR^{3D} = -3.5 \left[\frac{n}{d} (a_B^*)^3 \right]^{\frac{1}{4}} R^* \quad (4.21)$$

A equação (4.20) corresponde a um sistema que denominamos quase-bidimensional; nesta aproximação foi utilizada a expressão teórica deduzida para uma sistema bidimensional, e a espessura não-nula da distribuição de carga eletrônica foi incorporada utilizando-se um raio de Bohr e uma energia de ligação calculadas para um poço quântico, onde a espessura da carga eletrônica é não-nula.

Podemos chegar a uma expressão para BGR na super-rede partindo de um outro extremo: o extremo em que as barreiras são completamente transparentes (equação (4.21)), isto é, um sistema tridimensional, e incorporar a modulação espacial da carga eletrônica, como ocorre numa super-rede através de uma energia de ligação excitônica e um raio de Bohr calculados para um poço quântico. Tal aproximação, que denominaremos de quase-tridimensional resulta na seguinte expressão para BGR:

$$\text{BGR}^{\text{Q3D}} = -3.5 \left[\frac{n}{d} (a_X)^3 \right]^{\frac{1}{4}} E_X, \quad (4.22)$$

onde a_X e E_X são os valores do raio de Bohr do éxciton e da energia de ligação do éxciton, para um poço que contém uma densidade n de elétrons, e d é o período da super-rede. Calculamos teoricamente, para vários períodos d , os valores de a_X e E_X , e o valor da renormalização da energia do gap, pela fórmula (4.22) para uma densidade de elétrons de $n = 1.55 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ (valor aproximado para a densidade nas amostras investigadas). Os valores de BGR obtidos por (4.22) estão apresentados na figura (4.30). Os valores experimentais também são apresentados na figura (4.30).

A tabela 7 mostra os valores de a_X e E_X , raio de Bohr do éxciton e energia de ligação do éxciton, respectivamente, para poços quânticos de densidade $n = 1.55 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ de elétrons. Estes valores foram utilizados no cálculo da renormalização da energia do gap teóricos para as dimensões Q2D e Q3D, utilizando as fórmulas (4.20) e (4.22), respectivamente, e são observados na figura (4.30). O cálculo teórico dos valores de a_X e E_X , calculados para um poço quântico GaAs/AlGaAs, foi feito conforme descrito nas referências [79, 80, 81].

Tabela 7: Nesta tabela: d é o período da super-rede, a_X é o raio de Bohr do éxciton e E_X a energia de ligação do éxciton.

d (Å)	a_X (Å)	E_X (meV)
20	43.0	12.4
30	42.2	12.7
40	42.8	12.5
50	43.6	12.4
60	44.8	11.9
70	46.1	11.5
80	47.3	11.2
90	48.8	10.8
100	49.9	10.6
200	52.1	8.3
300	52.1	6.9
500	52.1	5.4

A figura (4.31) apresenta uma comparação entre os valores teóricos previstos pelas equações de BGR para cada dimensão, mostradas na figura, em função da densidade de portadores na estrutura. Plotamos também os pontos experimentais da BGR estimados para as amostras 2268 e 2562.

A figura (4.30) mostra que, em valores absolutos, os valores de BGR obtidos experimentalmente são muito menores do que os valores teóricos para um sistema rigorosamente 2D. Dentro da margem de incerteza, os valores experimentais para BGR estão em concordância com os valores teóricos Q2D, Q3D ou 3D: para os parâmetros das amostras investigadas, os valores teóricos de BGR para todos estes sistemas são muito próximos entre si. Para se fazer uma distinção mais expressiva entre estas teorias, seria necessário fazer medições de BGR para amostras com parâmetros na região onde há uma

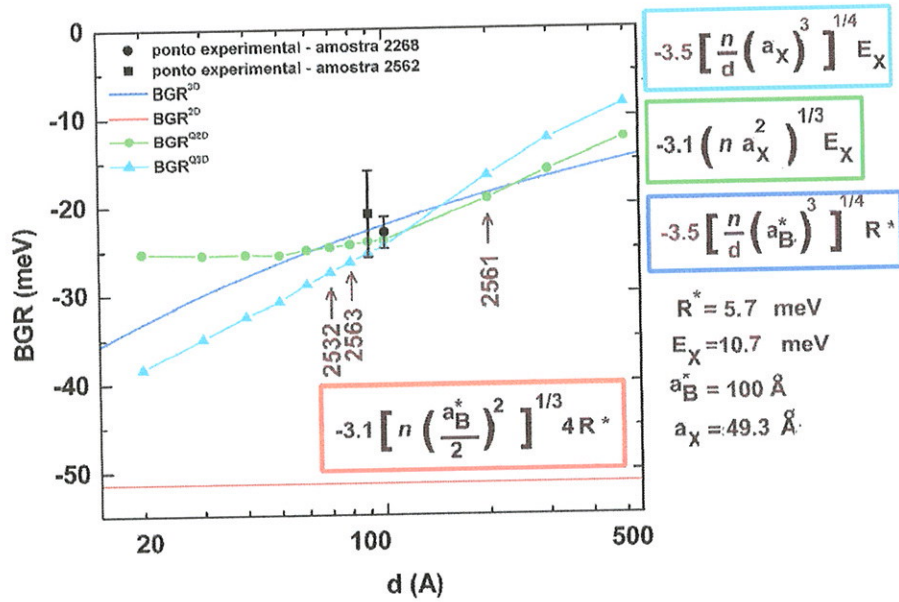


Figura 4.30: Gráfico da renormalização da energia do gap para sistemas bidimensionais, quase-bidimensionais e tridimensionais em função do período da super-rede, neste gráfico, consideramos $n = 1.55 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, que é um valor intermediário entre as densidades superficiais das amostras 2268 e 2562. Os pontos experimentais são referentes à BGR das amostras 2268 e 2562.

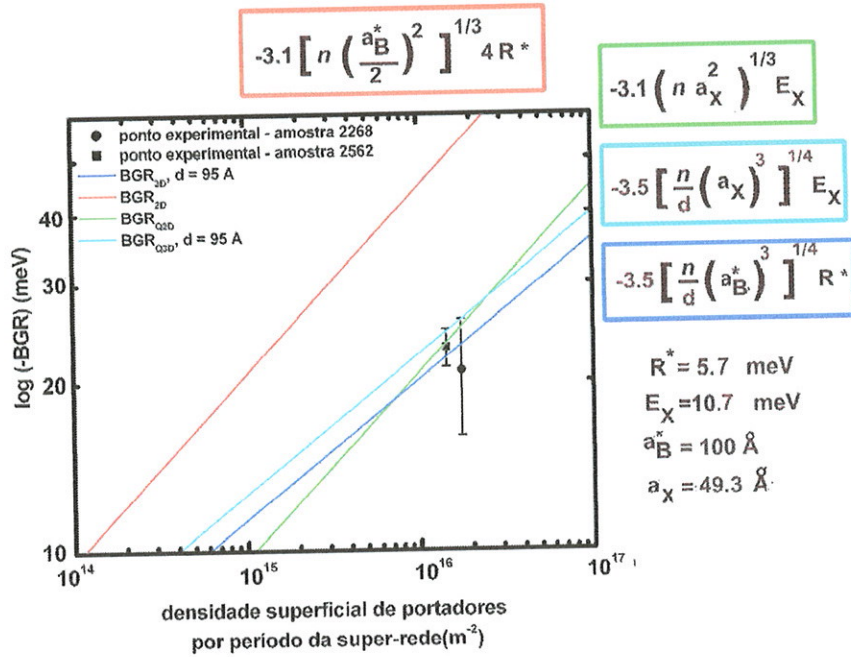


Figura 4.31: Gráfico da renormalização da energia do gap para sistemas bidimensionais, quase-bidimensionais, quase-tridimensionais e tridimensionais em função da densidade superficial de portadores. Os pontos experimentais são referentes à BGR das amostras 2268 e 2562.

maior diferença entre os valores teóricos oferecidos pelas diversas aproximações. Como se vê na figura (4.30), isto significa reduzir o período da super-rede, mantendo-se a concentração de portadores fixa; alternativamente, como pode ser observado na figura (4.31), poderíamos aumentar a concentração de portadores, mantendo-se fixo o período da super-rede. Deve ser observado, porém, que nos dois casos as amostras devem apresentar uma menor mobilidade eletrônica, conforme já foi discutido no Capítulo 2, o que deve se manifestar em uma maior incerteza experimental para os valores de BGR deduzidos experimentalmente.

Capítulo 5

Conclusões

Foram investigadas, através de simulação numérica, super-redes de composição GaAs/AlGaAs dopadas. Procuramos encontrar os parâmetros da estrutura e o perfil de dopagem que nos permitisse evitar a formação de estados de Tamm, e que ao mesmo tempo resultasse tanto num preenchimento completo da minibanda eletrônica quanto numa largura de minibanda superior ao alargamento energético dos níveis eletrônicos. O perfil encontrado consiste em dopagem localizada, com a mesma concentração superficial de átomos doadores, em todas as barreiras internas, e com a metade da concentração nas barreiras externas. Amostras de super-rede com este perfil foram fabricadas pela técnica MBE e caracterizadas através do efeito Shubnikov-de Haas em ângulo oblíquo, que demonstrou a formação de minibandas totalmente preenchidas, alargamento dos níveis energéticos inferior à largura da minibanda, e a ausência de estados de Tamm.

As amostras foram investigadas através do espectro de fotoluminescência em campo magnético na configuração de Faraday. Observamos, pela primeira vez, a fotoluminescência associada à recombinação de elétrons ocupando estados estendidos, pertencentes a uma minibanda de condução, com buracos fotogerados. Foi desenvolvido um modelo teórico para a forma de linha desta luminescência em função do campo magnético aplicado. O confronto deste modelo com os dados experimentais permitiu-nos determinar a largura da minibanda eletrônica, a massa efetiva dos portadores, e a largura do gap entre a faixa de valência e a faixa de condução. Este gap é reduzido em relação ao gap de uma super-rede não-dopada devido a efeitos de exchange-correlação. Esta redução, denominada BGR (*Band Gap Renormalization* - renormalização da energia do gap), foi estimada para as super-redes investigadas. Os valores estimados são comparados com as previsões teóricas conhecidas, para diversas aproximações no que diz respeito à dimensionalidade da estrutura. Dentro da incerteza experimental, os valores experimentais estão em acordo tanto com a teoria para um sistema quase-bidimensional, quanto com a teoria para um sistema quase-tridimensional. Uma distinção entre estas duas teorias exigirá a investigação de super-redes com um período mais curto e concentração maior de portadores livres. O estudo das amostras de período 70 Å e 80 Å (isto é, $L_B=35$ Å e 40 Å, respectivamente) poderá contribuir para melhor distinguir entre a adequação dos modelos teóricos existentes.

Apêndice A

Estados de Tamm

Em 1932, o físico teórico I.Tamm[22] foi o primeiro a demonstrar a existência de estados de superfície levando em consideração que a presença da superfície produz níveis de energia discretos e utilizou o modelo de Kronig-Penney para reproduzir a superfície num cristal. Para representar um cristal semi-infinito o potencial foi representado por uma série de δ - barreiras. As previsões de Tamm para sólidos reais podem ser transportadas para super-redes semicondutoras. As super-redes semicondutoras podem ser descritas como análogos dos sólidos reais onde os átomos são substituídos por poços quânticos fortemente interagentes. Os átomos que constituem a superfície do sólido real são substituídos pelos poços quânticos da extremidade da cadeia, que são denominados de “superfície interna” da amostra.

O tamanho finito do cristal causa a possibilidade de se ter níveis de energia dentro do gap de energia entre as bandas de energia permitidas de um cristal ideal. As funções de onda associadas a estes níveis de energia estão localizadas na superfície. Podemos concluir então que estados de superfície localizados são causados pela interrupção de uma rede periódica de um cristal.

Como estes estados foram inicialmente previstos por I.Tamm, em 1932, são também conhecidos como estados de Tamm ou estados de superfície. Portanto, os estados de Tamm podem ser definidos como os estados devido a mudança do potencial da célula da fronteira do cristal, onde os átomos estão longe o suficiente, isto é, possuem fraca interação, não ocorrendo cruzamento de bandas [85].

Em superfícies reais, a observação dos estados de Tamm puros é difícil por causa da natureza complicada das superfícies onde muitos efeitos ocorrem ao mesmo tempo. Por outro lado, super-redes constituem uma plataforma ideal o estudo dos efeitos de superfície, pois pode-se ter um controle preciso do potencial confinante nas extremidades da super-rede conhecido como superfície interna. Super-redes reais possuem um número finito de períodos, assim os poços das extremidades da super-rede (superfície interna) podem ser removidos da ressonância com os demais poços e portanto, conter os estados localizados ou estados de Tamm.

A primeira observação experimental desses estados de superfície, previstos por Tamm, usando super-redes não-dopadas foi feita por H.Ohno *et al.* em 1990 [9] perturbando a última barreira da super-rede, isto é, aumentando sua energia; neste trabalho também pode-se observar a função de onda envelope que descreve o estado localizado. Também em 1990, M.Steslicka *et al.* num trabalho

teórico [86] propuseram um modelo de Kronig-Penney apropriado para uma super-rede composicional e calcularam analiticamente a energia e as propriedades de localização dos estados de superfície. F. Agulló-Rueda *et al.* [87] quebraram a periodicidade através de um poço mais largo no final da super-rede e através do tunelamento oferecido pela aplicação de um campo elétrico demonstraram interações entre os estados estendidos e estados localizados.

Em super-redes não-dopadas observa-se que para remover-se os poços extremos da ressonância com os demais poços necessita-se que estes sejam crescidos com larguras diferentes ou que sejam envolvidos por uma barreira de material diferente dos poços restantes da estrutura. Foi mostrado que, em super-redes dopadas, os poços das extremidades da super-rede ficam fora da ressonância com a minibanda da super-rede até mesmo se eles forem idênticos aos poços do *bulk* da super-rede[46]. Na super-rede dopada, os estados localizados surgem devido a distribuição não-homogênea das cargas próximas a extremidade, que produz um potencial eletrostático que aumenta a energia da subbanda dos poços da extremidade. A energia do estado localizado neste caso é maior que a energia dos estados da minibanda. Além disso, em super-redes dopadas os estados de Tamm são populados com elétrons; assim uma situação interessante é criada, pelo qual um gás de elétrons bidimensional coesiste com um quase-tridimensional, com energia maior que a anterior.

Apêndice B

Refletividade de Raios-x

As amostras de super-rede foram caracterizadas por refletividade de raios-x em incidência rasante em um difratômetro Philips X'Pert MRD a fim de confirmar a estrutura inicialmente projetada para as super-redes estudadas neste trabalho. A estrutura da amostra possui a arquitetura mostrada na seção 4.1 (4.1).

Medidas de refletividade de raios-x em incidência rasante das amostras 2268 e 2434 foram realizadas no Laboratório Associado de Sensores e Materiais do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (LAS-INPE) em São José dos Campos pelo Professor Eduardo Abramof. A amostra 2268 possui dopagem no centro das barreiras internas e externas, enquanto que a amostra 2434 possui dopagem apenas no centro das barreiras internas.

Nos gráficos (B.1) e (B.2) podemos observar tanto a simulação da medida de refletividade de raios-x em incidência rasante quanto a própria medida, para as amostras 2268 e 2434. A partir de uma análise destas medidas e simulações conclui-se que as amostras são de boa qualidade, por apresentarem boa periodicidade e valores bem próximos aos nominais das larguras dos poços e das barreiras estimadas pelas medidas. Para a amostra 2268 temos que tanto a largura do poço quanto a da barreira é de 47.9Å. E para a amostra 2434 temos que tanto a largura do poço quanto a da barreira é de 47.1Å. A largura nominal, para ambas as amostras, tanto para poços quanto para barreiras era 50Å.

Esta técnica utiliza como contraste o índice de refração dos materiais das multicamadas[82], no nosso caso o AlGaAs e o GaAs. Uma descrição destas medidas de raios-x em incidência rasante pode ser encontrada no trabalho de K. Stoev e K. Sakurai[83].

Esta técnica é normalmente utilizada na caracterização de filmes finos e de sol-gel[84].

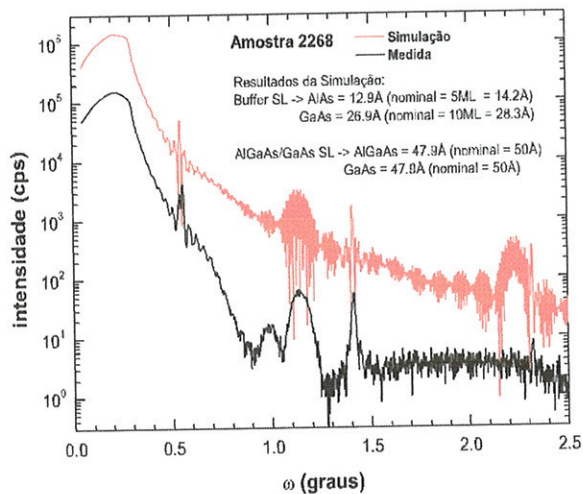


Figura B.1: Medida de refletividade de raios-x em incidência rasante para a amostra 2268

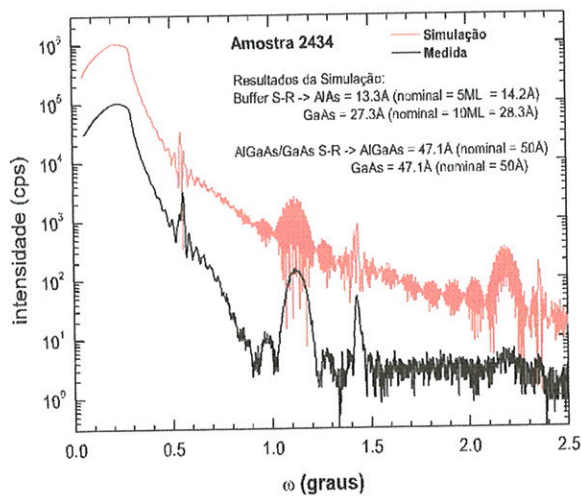


Figura B.2: Medida de refletividade de raios-x em incidência rasante para a amostra 2434

Apêndice C

Efeito Shubnikov-de Haas em Função da Temperatura

Foram realizadas medidas do efeito Shubnikov-de Haas em função da temperatura para a amostra 2268. Estas medidas podem ser observadas na figura (C.1), onde observa-se também a temperatura em cada medida. Nota-se que o aumento da temperatura diminui a amplitude das oscilações do efeito Shubnikov-de Haas. As amplitudes das oscilações do efeito Shubnikov-de Haas possui dependência térmica proporcional à:

$$\frac{X}{\sinh X}$$

onde $X = \frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar e B / m_c}$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura, B é o campo magnético e m_c é a massa ciclotrônica.

Um estudo da contribuição isolada de cada frequência de oscilação da magneto-resistência (cintura e pescoço) pode fornecer-nos uma estimativa da massa ciclotrônica [42, 50]. Na figura (C.2) observa-se, a amplitude das oscilações para a frequência de cintura isolada, da amostra 2268. Para isolar uma componente oscilatória do espectro original passamos um filtro gaussiano passa banda no espectro Shubnikov-de Haas. Após a aplicação do filtro passa banda, todos os passos que levam à transformada de Fourier isolada são revertidos: uma transformada inversa de Fourier é aplicada e as oscilações da magneto-resistência são numericamente integradas. A figura (C.2) mostra a oscilação da componente da magneto-resistência isolada para a frequência de cintura da amostra 2268. As oscilações isoladas cobrem um intervalo menor de campo magnético do que o medido originalmente porque na análise de Fourier em campo inverso apenas um certo intervalo é levado em consideração devido a efeito de extremos. Para maiores detalhes desta análise, veja as referências [42, 50]. Observa-se a diminuição da amplitude conforme aumenta-se a temperatura em que a medida está sendo realizada. Esta análise foi feita até a medida de temperatura 33.2 K, pois nas medidas em temperatura maior, vistas na figura (C.1), não foi possível extrair qualquer oscilação.

Analisando a intensidade das amplitudes das oscilações isoladas em função da temperatura, em um campo magnético fixo, estimamos o valor da massa ciclotrônica para cada frequência analisada, pois

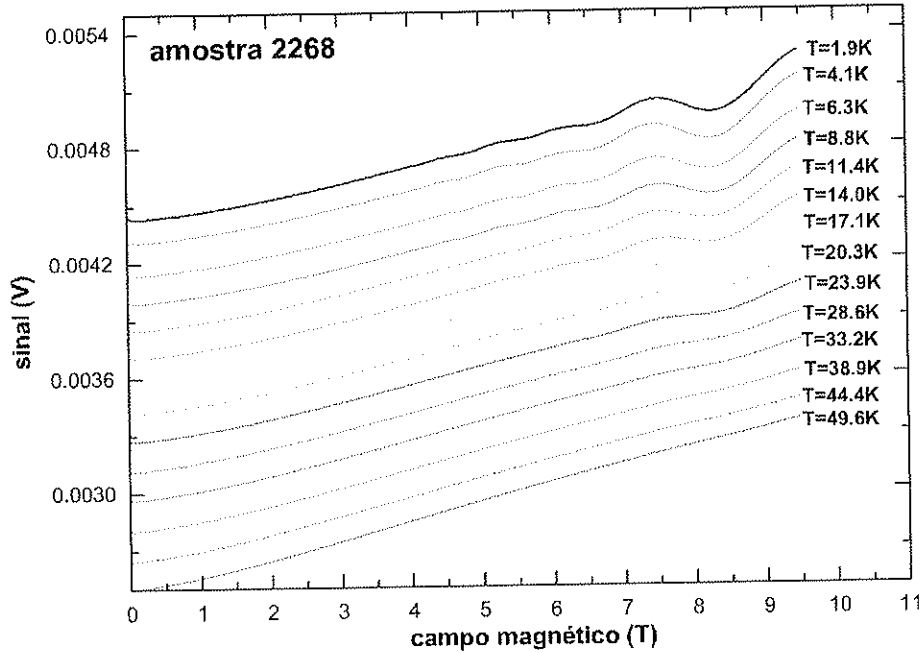


Figura C.1: Medidas do efeito Shubnikov-de Haas, de 0T à 9.5T, em função da temperatura da amostra 2268.

fitando os dados experimentais com o termo $\frac{X}{\sinh X}$ utiliza-se a massa ciclôtrônica como parâmetro de ajuste, pois $X = \frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar \omega_c} = \frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar e B} m_c$. Na figura (C.3) observamos este ajuste para os pontos experimentais extraídos do gráfico da figura (C.2). Para a frequência de pescoço, devido a esta apresentar oscilações muito fracas, a quantidade de pontos extraídos das medidas impossibilitou um bom ajuste para determinarmos a massa ciclôtrônica para a frequência de pescoço. Uma descrição detalhada desta análise pode ser encontrada nas referências [42, 50].

A partir da análise das oscilações SdH em função da temperatura conseguimos determinar a massa ciclôtrônica para a frequência de cintura. A massa ciclôtrônica encontrada para a frequência de cintura ($0.068 m_0$) possui um valor muito próximo do valor teórico da massa eletrônica do GaAs ($0.0665 m_0$).

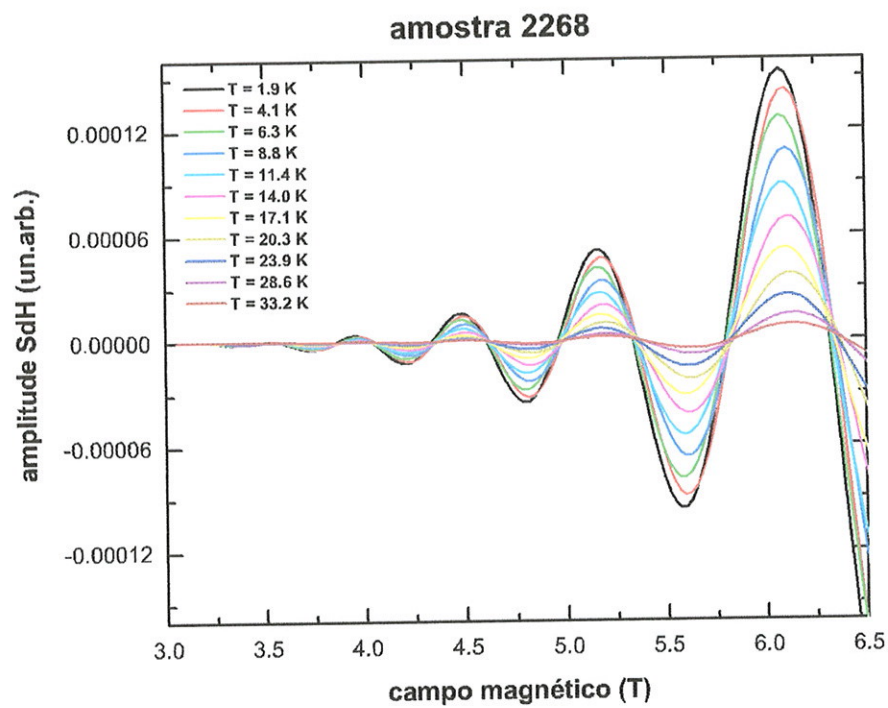


Figura C.2: Oscilações isoladas da frequência de cintura da amostra 2268. As amplitudes destas oscilações serão avaliadas nos seguintes campos magnéticos: 6.1T; 5.6T; 5.2T; 4.8T; 4.5T; 4.2T.

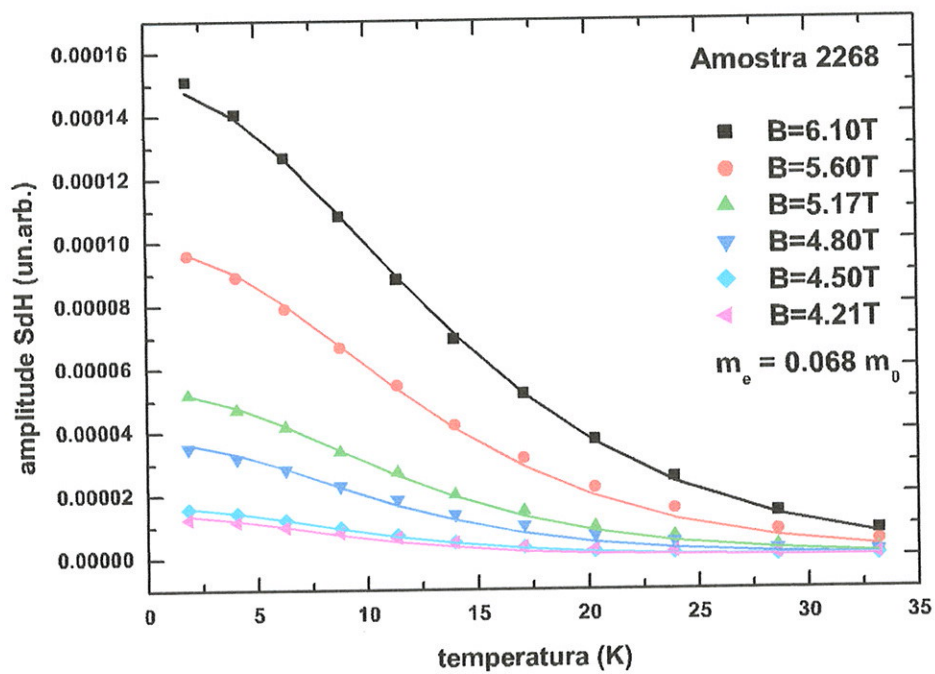


Figura C.3: Ajuste com o termo $\frac{X}{\sinh X}$ da amplitude de oscilação em função da temperatura da frequência de cintura da amostra 2268.

Apêndice D

Regra de Seleção

Neste apêndice, iremos tratar da regra de seleção para transições eletrônicas entre as bandas de condução e valência. Tratando um semicondutor ideal como possuindo duas bandas de energias, com uma relação de dispersão parabólica, separadas por um gap de energia e posicionadas no centro da zona de Brillouin. Supondo que a banda de valência esteja completamente preenchida e a banda de condução completamente vazia. Na ausência de campo magnético, as energias das duas bandas são dadas como função do vetor de onda \mathbf{k} (em unidades de $\hbar = 1$):

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1^0 - \frac{k^2}{2m_1}$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2^0 + \frac{k^2}{2m_2}$$

onde ε_1^0 e ε_2^0 são as energias nas extremidades das bandas e m_1 e m_2 são as massas efetivas das bandas 1 e 2, respectivamente.

Na presença de um campo magnético, o movimento dos elétrons pode ser descrito pela aproximação de massa efetiva. A energia para a banda 1 é obtida em termos da massa efetiva m_1 da equação de Schroedinger:

$$\frac{1}{2m_1} \left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 f_1(\mathbf{r}) = (\varepsilon_1 - \varepsilon_1^0) f_1(\mathbf{r}) \quad (\text{D.1})$$

onde \mathbf{p} é o operador momento $\frac{\nabla}{i}$, $-e$ é a carga eletrônica e \mathbf{A} é o vetor potencial para o campo magnético. A função de onda de ordem zero é dada em termos de $f_1(\mathbf{r})$ por:

$$\Psi(\mathbf{r}) = u_{10}(\mathbf{r}) f_1(\mathbf{r}) \quad (\text{D.2})$$

onde $u_{10}(\mathbf{r})$ é a função de onda para a banda 1, isto é, $u_{N,k}(\mathbf{r})$ para $\mathbf{k} = 0$ e $N = 1$, onde $u_{N,k}$ é a parte periódica da função de Bloch $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{N,k}(\mathbf{r})$.

A solução para a equação (D.1) é conhecida, considerando o campo magnético B na direção z :

$$A_x = A_z = 0, A_y = -Bx$$

então $f_1(\mathbf{r})$ pode ser escrita:

$$f_1(\mathbf{r}) = (L_y L_z)^{-\frac{1}{2}} e^{(ik_y y + ik_z z)} \phi_N \left(x - \frac{ck_y}{eB} \right) \quad (\text{D.3})$$

onde ϕ_N é a função de onda do oscilador harmônico unidimensional, e f_1 é normalizado sobre o cristal que é tido como um paralelepípedo de lados L_x , L_y e L_z . A banda 2 possui funções de onda de mesmo formato que a equação (D.3). As energias das duas bandas são dadas por:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_1^0 - \omega_{c1} \left(N + \frac{1}{2} \right) - \frac{k_z^2}{2m_1} \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_2^0 + \omega_{c2} \left(N + \frac{1}{2} \right) + \frac{k_z^2}{2m_2} \end{aligned}$$

onde $\omega_{c1} = \frac{eB}{m_1 c}$ é a frequência cíclotron para a banda 1, similarmente para a banda 2.

Uma perturbação neste semiconductor é feita por uma radiação descrita por um campo elétrico variável no tempo, e cuja variação espacial pode ser omitida pelo fato de que o comprimento de onda é longo comparado com o comprimento de onda eletrônico envolvido. Esta perturbação é dada pelo termo:

$$H' = \frac{eE_0}{m} \left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \frac{1}{2i\omega} (\varepsilon e^{i\omega t} - \varepsilon^* e^{-i\omega t})$$

onde m é a massa eletrônica livre, ω é a frequência de radiação, E_0 é a magnitude do campo elétrico e ε é um vetor unitário na direção do campo que deve ser complexo no caso de polarização circular.

A probabilidade de transição do processo onde um elétron é elevado da banda 1 para a banda 2, e um fóton é absorvido é proporcional ao quadrado do seguinte elemento de matriz:

$$\begin{aligned} M &= \frac{eE_0}{m\omega} \left\langle 1 \left| \left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \cdot \varepsilon \right| 2 \right\rangle \\ M &\simeq \frac{eE_0}{m\omega} \int f_1^*(\mathbf{r}) u_{10}^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \cdot \varepsilon f_2(\mathbf{r}) u_{20}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned}$$

onde utilizamos as funções de onda de ordem zero dadas pela equação (D.2).

Desde que $f_1(\mathbf{r})$, $f_2(\mathbf{r})$ e \mathbf{A} variem lentamente comparadas com as funções periódicas u_{10} e u_{20} podemos tratar f_1 , f_2 e \mathbf{A} como constantes numa célula unitária, e limitar a integral de u_{10} e u_{20} sobre esta célula, e limitar a integral envolvendo f_1 e f_2 sobre todo o cristal. Assumimos u 's normalizados num volume unitário e f 's normalizados sobre todo o cristal. Desde que as funções periódicas para

ambas as bandas são ortogonais, o único termo não-nulo provém aplicando o gradiente a $u_{20}(\mathbf{r})$. Isto é:

$$M = \frac{eE_0}{m\omega} \frac{1}{V_0} \int_{\text{célula}} u_{10}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} \cdot \epsilon u_{20}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \int_{\text{cristal}} f_1^*(\mathbf{r}) f_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$M = \frac{eE_0}{m\omega} (\mathbf{p}_{12} \cdot \epsilon) \int_{\text{cristal}} f_1^*(\mathbf{r}) f_2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

onde V_0 é o volume da célula unitária. M é expressado em termos do elemento da matriz momento \mathbf{p}_{12} e relacionado à força do oscilador da transição. Deve-se assumir que as duas extremidades das bandas possuem paridade oposta, assim \mathbf{p}_{12} não se anula.

Desde que $f_1(\mathbf{r})$ não dependa da massa efetiva, a correspondente função para a banda 2 possui a mesma forma, assim a integral acima anula-se devido a ortogonalidade a menos que $N = N'$ ($\Delta N = 0$, N é chamado de número quântico magnético), $k_y = k'_y$ e $k_z = k'_z$, onde l refere-se a banda 2. Isto é análogo à regra de seleção de conservação de \mathbf{k} na ausência de um campo magnético [48].

Bibliografia

- [1] L.Esaki e R.Tsu, J.Res.Develop **14**, 61 (1970)
- [2] B.F.Levine, G.G.Bethea, G.Hasnain, J.Walker e R.J.Malik, Appl.Phys.Lett. **53**, 296 (1988).
B.F.Levine, G.Hasnain, G.G.Bethea e N.Chand, Appl.Phys.Lett. **54**, 2704 (1984)
- [3] G.Hasnain, B.F.Levine, G.G.Bethea, R.A.Logan, J.Walker e R.J.Malik, Appl.Phys.Lett. **54**, 2515 (1989)
- [4] J.Faist, F.Capasso, D.L.Sivco, C.Sirtori, A.L.Hutchinson e A.Y.Cho, Science **264**, 553 (1994)
- [5] G.Scamarcio, F.Capasso, C.Sirtori, J.Faist, A.L.Hutchinson, D.L.Sivco e A.Y.Cho, Science **276**, 773 (1997)
- [6] A.Tredicucci, F.Capasso, C.Gmalchl, D.L.Sivco, A.L.Hutchinson, A.Y.Cho, J.Faist e G.Scamarcio, Appl.Phys.Lett. **72**, 2388 (1998)
- [7] C.Gmalchl, D.L.Sivco, R.Colombelli, F.Capasso e A.Y.Cho, Nature **415**, 883 (2002)
- [8] A.Chomette, B.Deveaud, A.Regreny e G.Bastard, Phys.Rev.Lett. **57**, 1464 (1986)
- [9] H.Ohno, E.E.Mendez, J.A.Brum, J.M.Hong, F.Agulló-Rueda, L.L.Chang e L.Esaki, Phys.Rev.Lett. **64(21)**, 2555 (1990)
- [10] H.L.Störmer, Rev.Mod.Phys. **71**, 875 (1999)
- [11] H.T.Grahn, *Semiconductor Superlattices - Growth and Electronic Properties*, cap. 2, World Scientific (1995)
- [12] H.L.Störmer, J.P.Eisenstein, A.C.Gossard, W.Wiegmann e K.Baldwin, Phys.Rev.Lett. **56**, 85 (1986)
- [13] Y.Iye, Mat.Sci.Eng. B **31**, 141 (1995)
- [14] T.Le, A.G.Norman, W.T.Yuen, L.Hart, I.T.Ferguson, J.J.Harris, C.C.Phillips e R.A.Stradling, Surf.Sci. **305**, 337 (1994)
- [15] A.B.Henriques, L.C.D.Gonçalves, P.L.Souza e B.Yavich, Semicond.Sci.Technol. **11**, 190 (1996)

- [16] M.Helm, W.Hilber, T.Fromherz, F.M.Peeters, K.Alavi e R.N.Pathak, *Phys.Rev.B* **48**, 1601 (1993)
- [17] K.J.Nash e D.J.Mowbray, *J. Lumin.* **44**, 315 (1989)
- [18] A.N.Forshaw e D.M.Whittaker, *Phys.Rev.B* **53**, 6955 (1996)
- [19] S.Rudin e T.L.Reinecke, *Phys.Rev.B* **39**, 8488 (1989)
- [20] R.H.Yan, R.J.Simes, H.Ribot, L.A.Coldren e A.C.Gossard, *Appl.Phys.Lett.* **54**, 1549 (1989)
- [21] A.B.Henriques, R.F.Oliveira, P.L.Souza e B.Yavich, *Phys.B* **298**, 320 (2001)
- [22] I.Tamm, *Phys.Z.Sowjetunion* **1**, 733 (1932)
- [23] Ming-Fu Li, *Modern Semiconductor Quantum Physics*, cap. 5, World Scientific (1994)
- [24] R.C.Miller, D.A.Kleinman e A.C.Gossard, *Phys.Rev.B* **29**, 7085 (1984)
- [25] S.Giugni e T.L.Tansley, *Semicond.Sci.Technol.* **7**, 1113 (1992)
- [26] D.L.Smith e C.Mailhiot, *Rev.Mod.Phys.* **62**, 173 (1990)
- [27] P.Y.Yu e M.Cardona, *Fundamentals of Semiconductors - Physics and Materials Properties*, cap. 2, Springer (2001)
- [28] O.Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, cap. 2 e cap. 9, Springer (1996)
- [29] G.Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, cap. 3, Les Editions de Physique (1998)
- [30] J.H.Davies, *The Physics of low Dimensional Semiconductors - An Introduction*, cap. 10, Cambridge University Press (1998)
- [31] D.Schneider, D.Rürup, A.Plichta, H.-U.Grubert, A.Schlachetzki e K.Hansen, *Z.Phys.B* **95**, 281 (1994)
- [32] S.L.Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*, apêndice K, John Wiley and Sons (1995)
- [33] M.F.H.Schuurmans e G.W.Hooft, *Phys.Rev.B* **31**, 8041 (1985)
- [34] E.O.Kane, *Handbook on Semiconductors*, vol.1, pág. 193, North-Holland (1982)
- [35] D.J.BenDaniel e C.B.Duke, *Phys.Rev.* **152**, 683 (1966)
- [36] R.Eppenga, M.F.H.Schuurmans e S.Colak, *Phys.Rev.B* **36**, 1554 (1987)
- [37] A.M.Cohen e G.E.Marques, *Phys.Rev.B* **41**, 10608 (1990)
- [38] L.Onsager, *Phil.Mag.* **43**, 1006 (1952)

- [39] N.W.Ashcroft e N.D.Mermin, *Solid State Physics*, cap. 2, Saunders College Publishing (1976)
- [40] A.B.Henriques, *Phys.Rev.B* **50**, 8658 (1994)
- [41] A.B.Henriques, *Phys.Rev.B* **53**, 16365 (1996)
- [42] A.B.Henriques, L.C.D.Gonçalves, N.F.Oliveira Jr., P.L.Souza e B.Yavich, *Phys.Rev.B* **55**, 13072 (1997)
- [43] A.B.Henriques, P.L.Souza e B.Yavich, *Phys.Rev.B* **64**, 045319 (2001)
- [44] L.Bouzaïene, L.Sfaxi, H.Sghaëir e H.Maaref, *J.Appl.Phys.* **85**, 8223 (1999)
- [45] G.M.Yang, S.G.Park, K.S.Seo e B.D.Choe, *Appl.Phys.Lett.* **60**, 2380 (1992)
- [46] A.B.Henriques, L.K.Hanamoto, P.L.Souza e B.Yavich, *Phys.Rev.B (Rapid Comm.)* **61**, R13369 (2000)
- [47] A.B.Henriques, *Appl.Phys.Lett.* **78**, 691 (2001)
- [48] L.M.Roth, B.Lax e S.Zwerdling, *Phys.Rev.* **114**, 90 (1959)
- [49] R.F.Oliveira, A.B.Henriques, T.E.Lamas, A.A.Quivy, M.P.Pires, P.L.Souza, B.Yavich e E.Abramof, *Braz.J.Phys.* **34**, 650 (2004)
- [50] A.B.Henriques, P.L.Souza e B.Yavich, *Semicond.Sci.Technol.* **16**, 1 (2001)
- [51] R.F.Oliveira, A.B.Henriques, E.Abramof, T.E.Lamas e A.A.Quivy, *Optical Measurement of Miniband Dispersion and Bandgap Renormalization in Modulation-doped AlGaAs/GaAs Superlattices*, XXVII ENFMC - Poços de Caldas - MG (2004)
- [52] R.F.Oliveira, A.B.Henriques, T.E.Lamas e A.A.Quivy, *Van Hove Singularities Detected by Photoluminescence in Doped AlGaAs Superlattices*, 27th ICPS - Flagstaff - USA (2004)
- [53] E.Skuras, R.Kumar, R.L.Williams, R.A.Stradling, J.E.Dmochowski, E.A.Johnson, A.Mackinnon, J.J.Harris, R.B.Beall, C.Skierbeszewski, J.Singleton, P.J.van der Wel e P.Wisniewski, *Semicond.Sci.Technol.* **6**, 535 (1991)
- [54] P.T.Coleridge, R.Stoner e R.Fletcher, *Phys.Rev.B* **39**, 1120 (1989)
- [55] W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling e B.P.Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*, cap.10, Cambridge University Press (1992)
- [56] R.F.Oliveira, A.B.Henriques, T.E.Lamas, A.A.Quivy e E.Abramof, *J.Phys.D:Appl.Phys.* **37**, 2949 (2004)
- [57] R.F.Oliveira, A.B.Henriques, T.E.Lamas e A.A.Quivy, *Int.J.Mod.Phys.B*, **18** (27,28,29), 3817 (2004)

- [58] S.Schmitt-Rink, C.Ell, S.W.Koch, H.E.Schmidt e H.Haug, *Sol.St.Comm.* **52**, 123 (1984)
- [59] S.Schmitt-Rink, D.S.Chemla, D.A.B.Miller, *Adv.Phys.* **38**, 89 (1989)
- [60] C.Weber, C.Klingshirn, D.S.Chemla, D.A.B.Miller, J.E.Cunningham e C.Ell, *Phys.Rev.B* **38**, 12748 (1998)
- [61] G.Trankle, H.Leier, A.Forchel, H.Haug, C.Ell e G.Weimann, *Phys.Rev.Lett.* **58**, 419 (1987)
- [62] M.Potemski, J.C.Maan, K.Ploog e G.Wiemann, 19th International Conference on the Physics of Semiconductors, vol. 11, 119 (1998). M.Potemski, J.C.Maan, K.Ploog e G.Wiemann, *Surf.Sci.* **229**, 380 (1990)
- [63] C.Delalande, G.Bastard, J.Orgonasi, J.A.Brum, H.W.Liu, M.Voos, G.Weimann e W.Schlapp, *Phys.Rev.B* **59**, 2690 (1987)
- [64] R.Cingolani, H.Kalt e K.Ploog, *Phys.Rev.B* **42**, 7655 (1990)
- [65] R.Cingolani e K.Ploog, *Adv.Phys.* **40**, 535 (1991)
- [66] P.Hawrylak, F.J.Terar, M.Potemki e G.Karczewski, *Phys.E* **12**, 495 (2002)
- [67] G.Bongiovanni e J.L.Staehli, *Phys.Rev.B* **39**, 8359 (1989)
- [68] D.A.Kleinman e R.C.Miller, *Phys.Rev.B* **32**, 2266 (1985)
- [69] S.das Sarma, R.Jalabert e S.-R.Eric Yang, *Phys.Rev.B* **39**, 5516 (1989)
- [70] S.Schmitt-Rink e C.Ell, *J.of Lumin.* **30**, 585 (1985)
- [71] S.Schmitt-Rink, C.Ell e H.Haug, *Phys.Rev.B* **33**, 1183 (1986)
- [72] E.Lach, G.Lehr, A.Forchel, K.Ploog e G.Weimann, *Surf.Sci.* **228**, 168 (1990)
- [73] G.Trankle, E.Lach, A.Forchel, F.Scholz, C.Ell, H.Haug, G.Weimann, G.Griffiths, H.Kroemer e S.Subbana, *Phys.Rev.B* **36**, 6712 (1987)
- [74] S.das Sarma, R.Jalabert e S.-R.Eric Yang, *Phys.Rev.B* **41**, 8288 (1990)
- [75] S.Haacke, R.Zimmermann, D.Bimberg e J.N.Miller, *Superlatt.Microstruct.* **9**, 27 (1991)
- [76] T.L.Reinecke, S.C.Ying, *Phys.Rev.Lett.* **43**, 1054 (1979)
- [77] F.Thuselt, *Phys.Lett.* **94A**, 93 (1983)
- [78] F.Thuselt, *Phys.St.Sol.B* **123**, 257 (1984)
- [79] A.B.Henriques, *Superlatt.Microstruct.* **12**, 527 (1992)
- [80] A.B.Henriques, *Phys.Rev.B* **44**, 3340 (1991)

- [81] K.J.Moore, G.Duggan, K.Woodbridge e C.Roberts, *Phys.Rev.B* **41**, 1090 (1990)
- [82] I.Kojima e B.Li, *The Rigaku J.* **16**, 31 (1999)
- [83] K.Stoev e K.Sakurai, *The Rigaku J.* **14**, 22 (1997)
- [84] S.L.Morelhão, G.E.S.Brito e E.Abramof, *J.Alloys and Compounds* **344**, 207 (2002)
- [85] S.L.Davidson e M.Steslicka, *Basic Theory of Surface States*, Oxford Science Publications (1995)
- [86] M.Steslicka, R.Kucharczyk e M.L.Glasser, *Phys.Rev.B* **42**, 1458 (1990)
- [87] F.Agulló-Rueda, E.E.Mendez, H.Ohno e J.M.Hong, *Phys.Rev.B (Rapid Comm.)* **42**, 1470 (1990)