UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Propriedades de transporte elétrico de gases bidimensionais de elétrons nas proximidades de pontos-quânticos de InAs.

Ivan Ramos Pagnossin

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Euzi Conceição Fernandes da Silva

Banca examinadora:

Prof.^a Dr.^a Euzi Conceição Fernandes da Silva (IFUSP)

Prof.^a Dr.^a Lucy Vitoria Credidio Assali (IFUSP)

Prof. Dr. Marcelo Nelson Paez Carreño (EPUSP)

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

São Paulo - SP
Maior de 2004

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo serviço de biblioteca e informação do
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Pagnossin, Ivan Ramos

Propriedades de transporte elétrico de gases bidimensionais de elétrons
nas proximidades de pontos-quânticos de InAs. São Paulo, 2004.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo
Instituto de Física – Depto. de Física dos Materiais e Mecânica

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Euzi C. Fernandes da Silva
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos:

1. Pontos-quânticos;
2. Fotodetectores;
3. Shubnikov-de Haas;
4. Hall;
5. Fotoluminescência.

USP/IF/SBI-026/2004

Dedico esta obra aos meus pais,
à minha esposa Fabiana e
ao meu filho Giovanni.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço à minha esposa **Fabiana Aparecida de Farias** e ao meu filho **Giovani Cagnotto Pagnossin**, cuja presença neste trabalho é tão sublime e imprescindível que somente eu posso compreender. Não existe manifestação linguística capaz de sequer representar esta influência, contida em cada idéia deste trabalho, redigida ou não.

Iguais sentimentos valem para os meus pais, **Marco Antônio Pagnossin** e **Luci Andrade Ramos Pagnossin**, aos quais sou grato sobretudo pela oportunidade de viver e por todo o sacrifício a que se dispuseram para que eu chegasse até aqui (dentre tantos outros itens que não cabem aqui).

Agradeço à minha amiga **Euzi Conceição Fernandes da Silva**, por escolher orientar-me nestes dois últimos anos e por tê-lo feito maravilhosamente bem sobre todos os assuntos deste trabalho e sobre os diversos tópicos que permearam minha mente neste período, a maioria dos quais sem relação direta com este trabalho.

Ao **Celso de Araújo Duarte** agradeço pela amizade e pelas inumeráveis situações em que se prontificou a me ajudar. Em especial, sou-lhe grato por me transmitir desinteressadamente os conhecimentos necessários sobre os equipamentos das medidas de fotoluminescência e de criogenia. Gratidão de igual medida remeto ao colega e amigo **Cássio Sanguini Sérgio**, por me ensinar a utilizar os equipamentos das medidas de transporte elétrico e de criogenia.

Aos amigos **Alain André Quivy**, **Angela María Ortiz de Zavallos Márquez**, **Francisco de Paula Oliveira**, **José Geraldo Chagas**, **Júlio Antônio Nieri de Toledo Soares**, **Marcelo Jacob da Silva**, **Márcia Ribeiro**, **Mônica Jimenez Clauzet**, **Sandro Martini** e **Tomas Erikson Lamas**, agradeço pelas “figurinhas” trocadas, pelos auxílios e, sobretudo, pelo ambiente saudável que vocês construíram, do qual tive a satisfação de desfrutar.

Ao professor **José Roberto Leite** agradeço pela oportunidade de fazer parte deste grupo.

Finalmente, sou grato à **FAPESP** pelo suporte financeiro, posto que eu ainda não aprendi a viver sem ele.

Resumo

Neste trabalho, realizamos medidas sistemáticas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas em função do tempo de iluminação das amostras a fim de investigar as propriedades de transporte elétrico de um gás bidimensional de elétrons confinado num poço-quântico de GaAs/InGaAs próximo a pontos-quânticos de InAs introduzidos na barreira superior do poço-quântico (GaAs). Nós não observamos qualquer degradação expressiva da mobilidade eletrônica devido a inserção deles na heteroestrutura. Contudo, observamos diferentes variações das mobilidades quânticas de amostra para amostra, as quais atribuímos ao acúmulo da tensão mecânica na camada de InAs. O comportamento das mobilidades quânticas e de transporte são discutidas no contexto da modulação local dos perfís das bandas de condução e de valência pela camada de InAs.

Abstract

In this work, systematic Shubnikov-de Haas and Hall measurements as a function of the sample illumination time were used to investigate the transport properties of a two-dimensional electron gas (2DEG) confined in GaAs/InGaAs quantum wells and close to InAs quantum-dots placed in the GaAs top barrier. We did not observe any expressive degradation of the electronic mobility due to the insertion of them in the heterostructure. However, we observed a different change of the quantum mobility of the occupied subbands from sample to sample, which was attributed to the accumulation of mechanical strain in the InAs layer. The behavior of the quantum and transport mobilities are discussed in the context of the local modulation of the band edges by the InAs layer.

Sumário

Resumo/Abstract	iii
Lista de figuras	vi
Lista de tabelas	xv
1 Introdução	1
1.1 Sólidos cristalinos	1
1.2 Heteroestruturas	3
1.3 Os pontos-quânticos	5
2 Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos	9
2.1 A técnica MBE	10
2.2 A formação dos pontos-quânticos	16
3 As amostras	21
3.1 Descrição das amostras	22
3.2 Preparando as amostras	26
4 As técnicas utilizadas	31
4.1 O efeito Hall	32
4.1.1 Concentração de portadores e mobilidade de transporte	36
4.1.2 Condução em várias sub-bandas: Concentração e mobilidade efetivas	38
4.2 O efeito Shubnikov-de Haas	40

Sumário

4.2.1	As concentrações das sub-bandas	45
4.2.2	As mobilidades quânticas das sub-bandas	45
4.3	A Fotoluminescência	53
4.4	Microscopia de força atômica (AFM)	56
5	Instalações	63
6	Resultados	69
6.1	das medidas de AFM	70
6.2	das medidas de Fotoluminescência	71
6.3	das medidas do efeito Shubnikov-de Haas	76
6.3.1	Os efeitos da iluminação	76
6.3.2	Os efeitos da camada de InAs	87
6.4	das medidas do efeito Hall	99
6.5	Resumo geral	106
6.5.1	Concentrações	106
6.5.2	Mobilidades quânticas e de transporte	106
7	Conclusões	109
A	A transformada contínua de Fourier de $\rho^{(r)}(t)$	111
B	Dedução da equação (4.21)	115
B.1	O teorema da convolução	120
B.2	A transformada de Fourier de $e^{-\alpha_s t}$	121
B.3	A transformada de $\cos(\omega_s t + \phi_s)$	122
B.4	A Transformada de Fourier da janela Hanning	122
B.5	Determinação de $\sigma(A, B)$	124
C	Determinação de $\bar{\mu}_s/\mu_s$	127
D	Lista de símbolos	133
	Bibliografia	139

Lista de Figuras

- 1.1 Da esquerda para a direita, ilustramos a evolução dos interesses científicos acerca da estrutura da matéria no último século, começando com o átomo, cuja imagem popular ainda é aquela devida a Ernest Rutherford, em 1911. Depois, Felix Bloch aplicou a recém-nascida Mecânica-Quântica às estruturas cristalinas macroscópicas, chamadas de *bulks* (volume), introduzindo conceitos completamente novos e iniciando um conhecimento que culminou na invenção do transistor, hoje fundamental em praticamente todas as aplicações tecnológicas. Por volta da década de 1950, os cientistas voltaram-se para o estudo dos fenômenos decorrentes do confinamento espacial dos elétrons, até então ignorado pela teoria de Bloch. Foi neste ínterim que surgiram o conceito de heteroestruturas e as técnicas de crescimento epitaxial, capazes de construir filmes cristalinos extremamente delgados e quase isentos de defeitos. Finalmente, a atenção atualmente volta-se em parte para o estudo dos pontos-quânticos, diminutas regiões do espaço capazes de capturar e confinar elétrons em todas as três direções do espaço, como nos átomos. 2
- 2.1 Ao incidir sobre o substrato, os átomos ou moléculas do feixe molecular tendem a se posicionar nos sítios da rede. Deste modo, o crescimento segue a estrutura cristalina do substrato, pois é assim que a energia total é minimizada. Situações como aquelas representadas pelos círculos (átomos) vermelhos são possíveis, embora menos freqüentes. Os átomos amarelos podem ou não ser diferentes daqueles do substrato, dependendo do que se quer obter. 10

Lista de Figuras

- 2.2 (a) Esquema genérico de um sistema MBE (visto de cima). (b) Fotografia do equipamento MBE do laboratório LNMS no Instituto de Física da Universidade de São Paulo (*campus* SP). A câmera (na parte inferior) capta os padrões de difração que aparecem na tela fosforescente e envia-os para um monitor. O leitor pode ter uma noção do tamanho do equipamento observando o filtro-de-linha na parte inferior direita da figura. 12
- 2.3 À esquerda vemos o padrão de difração característico de uma estrutura bidimensional (veja o texto); À direita, o padrão é devido à rugosidade da superfície (aglomerados tridimensionais de átomos), indicando que a monocamada mais superficial ainda não está completa. O ponto intenso no centro é a parte do feixe que não sofreu difração. 13
- 2.4 Em (a) apresentamos separadamente uma representação das ligas do substrato (círculos pretos) e do filme epitaxial (círculos amarelos) que queremos crescer sobre ele, ilustrando a diferença entre seus respectivos parâmetros de rede (distâncias entre círculos vizinhos). (b) Ao crescermos um filme epitaxial cujo parâmetro de rede difere daquele do substrato, o filme fica mecanicamente tensionado. Mesmo assim, a estrutura cristalina do filme ainda é igual à do substrato. Este é o regime de crescimento Frank-van der Merwe (FM). (c) Quando o filme atinge uma espessura crítica, a tensão se torna tão grande que não pode mais ser contida por ele. Quando isto acontece, os átomos da epicamada tensa se rearranjam e formam pequenas ilhas tensionadas (ou seja, com o parâmetro de rede do *substrato*). Essas ilhas são chamadas de pontos-quânticos e o regime de crescimento é agora conhecido como Stranski-Krastanov (SK). Abaixo dos qds é comum restar um filme ultra-fino (de 1 MC aproximadamente) conhecido por *wetting-layer*. (d) Depois de formados os qds, é comum retomarmos o crescimento da liga do substrato, *cobrindo* os pontos-quânticos, daí o nome “cobertura.” 17
- 2.5 Em (a) apresentamos a concentração de pontos-quânticos auto-organizados em função da espessura nominal de InAs depositado. Este resultado foi obtido por Ramachandran *et al* em 1997 [22]. Já em (b), ilustramos a existência de “famílias” de sqds, caracterizadas pelas suas dimensões. Este resultado foi obtido por Duarte *et al* em 2002 [6]. 19

3.1	Ilustração da heteroestrutura utilizada neste trabalho. O crescimento se dá da esquerda para a direita e neste sentido todas as camadas estão em escala. No plano perpendicular, as camadas foram ligeiramente “desalinhadas” para que o leitor possa identificá-las com maior facilidade. As camadas em vermelho são as regiões de GaAs dopado com silício (δ -Si e a cobertura); o poço-quântico de InGaAs é apresentado em verde, os pontos-quânticos em azul e o padrão de listras a esquerda é a super-rede, tendo cada período aproximadamente 84 Å.	25
3.2	Os cortes nas amostras são feitos numa direção cristalográfica definida pelo vinco. O palito-de-dentes, usado para pressionar a amostra, é particularmente bom por que não machuca a amostra.	26
3.3	Uma vista em planta da barra-Hall. Somente a região interna a ela permite o fluxo de corrente elétrica e a região de interesse (área amarela) é acessada por contatos instalados nas periferias (ponto F). As medidas de tensão são feitas entre B e C para experiências do efeito Hall e entre B e E para Shubnikov-de Haas. A corrente é aplicada através dos terminais em A e D.	26
3.4	O processo litográfico de aplicação da barra-Hall sobre as amostras é o primeiro passo em direção à investigação das propriedades de transporte elétrico. Note o leitor que as camadas da heteroestrutura não estão representadas, e que as dimensões não estão em escala.	28
3.5	Representação de como a barra-Hall instalada nos permite controlar a geometria da amostra: Qualquer condução elétrica através da amostra (por qualquer um dos terminais) fica agora limitada ao interior da barra-Hall e, em especial, à região de interesse (fig. 3.3).	29
4.1	Vista em perspectiva da região de interesse (fig. 3.3) ilustrando o efeito Hall: A força magnética gera um desequilíbrio na distribuição de carga transversal à corrente elétrica (j_x), dando origem ao chamado campo Hall (E_H) e, por conseguinte, à tensão Hall (V_H).	33
4.2	Em baixos campos magnético (à esquerda), a órbita ciclotrônica dos elétrons na amostra não se fecha dentro da amostra e, nesta situação, os níveis de Landau não se formam coerentemente. No entanto, como $r_s \propto 1/B$, quando B é suficientemente intenso (à direita), r_s torna-se menor que l_y , a órbita se fecha dentro da amostra e a formação dos níveis de Landau ocorre coerentemente.	40

Lista de Figuras

- 4.3 Níveis de Landau e sua relação com o efeito Shubnikov-de Haas: As linhas tracejadas evidenciam a dependência linear da energia do l -ésimo nível de Landau com o campo magnético e as linhas cheias horizontais identificam-lhes em três situações de grande interesse para a compreensão do efeito Shubnikov-de Haas (veja o texto). O eixo D na parte inferior é a degenerescência, que também cresce com o campo magnético; Ela também é representada pelo comprimento dos níveis. ζ é o potencial químico e os círculos representam os elétrons. Note que a quantidade de elétrons não se mantém constante nas três situações ilustradas. Isto ocorre simplesmente por que esta representação não apresenta todos os níveis ocupados, desde $l = 0$ 42
- 4.4 As colisões do tipo (a) ilustram espalhamentos que pouco contribuem para o (inverso do) tempo de relaxação ($\bar{\tau}_s$): Nestes casos, o ângulo θ é pequeno e, portanto, $1/\bar{\tau}_s \rightarrow 0$, embora $1/\tau_s$ seja finito (veja as equações (4.18)); Por outro lado, os espalhamentos do tipo (b) representam espalhamentos que prejudicam o estado atual de condução elétrica: Agora, θ é grande e, conseqüentemente, $1/\bar{\tau}_s$ e $1/\tau_s$ são finitos! Os pontos pretos são os centros espalhadores (impurezas, defeitos, etc.), E é o campo elétrico e note que todos esses espalhamentos são elásticos pois conservam $|p|$ 47
- 4.5 Ilustração do procedimento utilizado para calcular as mobilidades quânticas de uma amostra baseado no efeito Shubnikov-de Haas: Em (a) apresentamos o resultado bruto de uma medida do efeito SdH: O conjunto $\{(B_j, V_j)\}$, chamado de **traço SdH**, onde V_j é a queda de tensão entre os pontos B e C na figura 3.3 quando o campo magnético perpendicular ao plano de confinamento dos elétrons tem intensidade B_j . (b) A partir dessas medidas, o primeiro passo é criar o conjunto $\{(1/B_j, V_j'')\}$, no qual a periodicidade da magnetoresistividade (proporcional a V_j) pode ser observada. (c) Depois, calculamos diversas transformadas discretas de Fourier (cinco neste caso), cada qual com um valor diferente de t_1 , limite inferior da janela Hanning (lembre-se de que $t_j = 1/B_j$). Cada um dos picos observados na transformada corresponde a uma sub-banda. Neste caso, as sub-bandas são a segunda ($s = 2$) e a terceira. A primeira não é visível por motivos que serão expostos no capítulo 6. A posição dos picos, que permanece aproximadamente constante, dá a concentração de portadores da sub-banda, conforme (4.17). (d) O logaritmo dos valores dos picos (magnitudes da transformada), quando desenhados contra t_1 , resultam em uma reta cujo coeficiente angular é $-\pi s/\mu_s$, onde μ_s é a mobilidade quântica da s -ésima sub-banda. 52

4.6	A fotoluminescência em um material condutor consiste na emissão de um fóton cuja energia é igual ao <i>gap</i> do material. Este fóton é emitido quando um elétron (buraco) na banda de condução (de valência) transita para a banda de valência (de condução). Note que a radiação emitida possui frequência inferior à incidente.	55
4.7	Os diversos mecanismos de recombinação radiativa possíveis num material semiconductor: (a) Transição da banda de condução para a banda de valência, $e - h$; (b) exciton livre, EX; (c) exciton ligado a impureza doadora, D^0X ; (d) exciton ligado a impureza aceitadora, A^0X ; (e) transição doador-aceitador, DA; (f) emissão da BC para nível aceitador e (g) emissão de nível doador para a BV. As caixas vermelhas identificam as transições que envolvem éxciton.	56
4.8	As linhas em preto indicam o sentido da varredura. Os pontos azuis representam as medidas feitas enquanto a sonda se move da esquerda para a direita (trace). Inversamente, os pontos vermelhos representam as medidas feitas no sentido contrário (retrace). Embora a representação acima os coloque em posições ligeiramente distintas, em verdade eles se superpõem, possibilitando duas medidas “simultaneamente:” Uma em <i>trace</i> e outra em <i>retrace</i>	58
4.9	A microscopia de força atômica (AFM) caracteriza-se pela interação de Van-der Waals entre a ponta e a superfície da amostra. Esta técnica se divide em três modalidades, cada qual agindo em uma região diferente do gráfico acima. No caso da AFM de contato, essas forças são da ordem de 10^{-6} – 10^{-7} N (repulsivas); E no caso da AFM de não-contato, de 10^{-12} N (atrativa); A AFM de contato intermitente atinge valores intermediários (atrativa).	59
4.10	Esquema de organização da sonda para a microscopia de força atômica.	60
5.1	Esquema simplificado das interligações dos equipamentos mostrados na figura 5.2, página 68.	64
5.2	À esquerda, indicadores de (1) nível de nitrogênio, hélio e (2) de temperatura na câmara da amostra (longe da amostra); (3) <i>lock-in</i> e chave ch2 (imediatamente abaixo do rótulo); (4) Chave ch3; (5) Indicador de temperatura na amostra (termopar); (6) Fonte de corrente que alimenta o LED; (7) gerador do campo magnético; (8) Amplificador analógico e (9) conversor analógico-digital. À direita vemos (10) todos os equipamentos da figura à esquerda, (11) a mangueira de transferência de hélio líquido, (12) o criostato (sua maior parte fica abaixo do nível do chão), (13) a mangueira de transferência de nitrogênio líquido, (14) o sistema de vácuo e (15) a bomba mecânica. O computador fica à esquerda e não está na fotografia.	68

Lista de Figuras

6.1	Vista em perspectiva de uma imagem AFM de uma superfície repleta de pontos-quânticos (ondulações). As regiões claras estão associadas às elevações, enquanto as escuras representam as depressões. Note, no entanto, que a escala vertical está deveras ampliada. A altura desses pontos-quânticos é de aproximadamente $67 \text{ \AA}$	70
6.2	Histogramas das alturas e diâmetros dos pontos-quânticos da amostra 2,5 MC, determinados a partir da contagem dos QDs presentes na imagem AFM (à direita, em cima). Perceba o início da formação de coalescências, destacadas pelas circunferências.	72
6.3	Espectros de fotoluminescência a 1,4 K das amostras utilizadas neste trabalho.	73
6.4	Traços SdH no (a) <i>escuro</i> e no (b) <i>claro</i> das cinco amostras com $d_{\text{InAs}} \neq 0$ e da amostra-referência (sem camada de InAs, $d_{\text{InAs}} = 0$).	77
6.5	Espectros de frequências (ν) ou de concentrações ($n = 0,04836 \nu$, equação (4.17)) no (a) <i>escuro</i> e no (b) <i>claro</i> das oscilações de magnetoresistividades (traços SdH apresentados na figura anterior). Para facilitar a visualização, estes espectros foram normalizados, de modo que suas amplitudes não podem ser comparadas.	79
6.6	Espectro de frequências da magnetoresistividade da amostra 1 MC após $t_{\odot} \approx 17 \text{ s}$ de iluminação utilizando janela (a) Hanning e (b) retangular. Esta foi a única situação em que a primeira sub-banda pôde ser vista claramente nos espectros calculados. A partir deste resultado pudemos identificar n_1 em meio aos ruídos na maioria dos outros espectros utilizados neste trabalho.	80
6.7	Apresentamos nesta figura a evolução (a) dos traços SdH, (b) dos espectros, (c) das concentrações e (d) das mobilidades quânticas da amostra 1,74 MC devido à iluminação. As mobilidades em (d) foram obtidas segundo o método apresentado na seção 4.2.2.	81
6.8	(a) Representação das bandas de condução (bc) e de valência (bv) e das funções de distribuição eletrônica ($ \psi_s ^2$, $s = 1,2,3$) da região-ativa no <i>escuro</i> (preto) e no <i>claro</i> (vermelho). (b) O processo de iluminação desloca $ \psi_3 ^2$ em direção à superfície, elevando a integral de sobreposição (equação (6.1)) e prejudicando a mobilidade dos elétrons da terceira sub-banda. $g(z)$ é a função que descreve o perfil da distribuição de átomos dopantes na direção do crescimento. Tanto o perfil de potencial como as funções de probabilidade foram obtidas adequando qualitativamente os cálculos autoconsistentes da referência [54] ao nosso caso.	82
6.9	Representação simplificada da banda de condução apresentada na figura 6.8 ilustrando a transferência de elétrons (•) dos centros profundos para o 2DEG.	84

6.10	Representação da banda de condução ilustrando a transferência de elétrons dos estados de superfície para o 2DEG: A quantidade de elétrons armadilhados neles é proporcional a φ , o potencial de superfície . De acordo com os cálculos autoconsistentes de Cavalheiro [54], $\varphi \approx 750$ meV no <i>escuro</i> e ≈ 200 meV no <i>claro</i>	84
6.11	Mobilidades quânticas da segunda e terceira sub-bandas em função da espessura nominal de InAs depositada nas situações <i>escuro</i> e <i>claro</i> . As linhas que ligam os pontos são guias para os olhos e as duas linhas traço-ponto horizontais representam a mobilidade da amostra-referência ($d_{\text{InAs}} = 0$), no <i>escuro</i> e no <i>claro</i> para uma estrutura similar à amostra-referência.	86
6.12	Concentração total de portadores na região-ativa no <i>escuro</i> e <i>claro</i> . O crescimento ocorre no modo Frank-van der Merwe até que d_{InAs} atinja a espessura crítica, d_c (região branca). Neste ponto, a tensão mecânica acumulada no filme de InAs não pode mais ser contida e, conseqüentemente, formam-se os pontos-quânticos. A partir daí o crescimento segue o modo Stranski-Krastanov (região cinza). As linhas cheias que ligam os pontos são guias para os olhos e as linhas vermelhas pontilhadas ilustram a influência da <i>espessura</i> da camada de InAs em n_T	88
6.13	Representação da correlação entre o potencial de superfície φ e a concentração de elétrons na região-ativa: (a) Quando não há transferência de elétrons da região de dopagem para a superfície, a amostra permanece neutra. Neste caso, o perfil das bandas de condução e valência (<i>band-edge</i>) é horizontal e o potencial de superfície é a energia de ligação do nível doador. (b) Mas quando ocorre a transferência, a região da dopagem (superfície) adquire carga líquida positiva (negativa), dando origem a um campo elétrico que deforma os perfis das bandas e eleva o potencial de superfície.	90
6.14	Concentrações das três sub-bandas do 2DEG. No <i>escuro</i> , a introdução da camada de InAs causa uma queda em n_1 e n_2 , mas não em n_3 , evidenciando a profunda perturbação que ela causa na estrutura.	91

Lista de Figuras

- 6.15 Representação qualitativa das bandas de condução e de valência das amostras deste trabalho no (a) *escuro*, (b) durante a iluminação e (c) no *claro*, ou ainda: Percorrendo a figura na direção horizontal, ilustramos o efeito da camada de InAs (diferentes amostras; diferentes d_{InAs}), ao passo que na direção vertical mostramos o efeito da iluminação: Devido ao campo elétrico gerado pelo plano da dopagem, na amostra-referência ($d_{\text{InAs}} = 0$) todos os elétrons fotogerados deslocam-se para o 2DEG, aumentando sua concentração total. O mesmo também é verdadeiro para a amostra 1 MC pois a camada de InAs ainda não contém elétrons. No entanto, para as amostras com $d_{\text{InAs}} \geq 1,5$, existem elétrons na camada de InAs e, por isso, um campo elétrico oposto àquele gerado pela dopagem é criado. Com isso, esta região se torna energeticamente favorável aos buracos. Assim, com a iluminação, eles deslocam-se até lá e recombinam-se com os elétrons capturados, descarregando a região. Ao final do processo, a camada de InAs volta a ficar neutra e os perfís das bandas de condução e de valência, semelhante àquele da amostra 1 MC. 93
- 6.16 Ao capturar elétrons, a camada de InAs torna-se negativamente carregada e deforma os perfís das bandas de condução e de valência de modo inverso àquela produzida pela dopagem. É mais fácil entender esta idéia interpretando a dopagem e o poço-quântico como um capacitor de placas paralelas. Assim, como a camada de InAs está negativamente carregada, as linhas do campo elétrico E digirem-se para ela, e afastam-se da dopagem, que tem carga líquida positiva. Em termos do potencial escalar, isto equivale às mudanças na derivada de $V(z)$ 94
- 6.17 Mobilidade quântica da segunda sub-banda com (preto) e sem (vermelho) a influência das variações da concentração de portadores (n_2). Note que os resultados coincidem exatamente para a amostra 1,75 MC. Isto ocorre por que foi esta a amostra escolhida como referência, ou seja, $n_2 = 0,66$ é a concentração da amostra 1,75 MC no *escuro*, enquanto $n_2 = 1,22$ é a sua concentração no *claro*. Ambas obtidas diretamente das medidas do efeito Shubnikov-de Haas. 97
- 6.18 Traços Hall no (a) *escuro* e no (b) *claro* das cinco amostras com $d_{\text{InAs}} \neq 0$ e da amostra-referência (sem camada de InAs, $d_{\text{InAs}} = 0$). 99
- 6.19 Concentrações e mobilidades efetivas no *escuro* e *claro* de todas as amostras analisadas neste trabalho, obtidas das medidas do efeito Hall clássico através do método exposto na seção 4.1. 100

6.20	Razão entre as mobilidades quântica e de transporte da segunda e terceira sub-bandas do 2DEG, obtidas através do método exposto no apêndice C. As “cardioides” ilustram os efeitos das variações em β_s sobre um mecanismo de espalhamento fictício, equação (6.2).	103
6.21	Exemplo qualitativo de um mecanismo de espalhamento que privilegia ângulos pequenos no <i>escuro</i> (preto) e no <i>claro</i> (vermelho). Note que o processo de iluminação não modifica a forma de $W_{k,k'}$, embora o reduza como um todo. Isto explica o fato de β_s não variar com a iluminação. Os ângulos médios de espalhamento, $\langle\theta\rangle$, são apenas ilustrativos.	104
A.1	O módulo da transformada de Fourier da magnetoresistividade (para $\alpha_s = 1$ e $\omega_s = 10$) tem um comportamento parecido com o de uma seqüência delta (no sentido de que quando $\alpha_s \rightarrow 0$, $ F(\omega_s) \rightarrow \infty$ e a largura a meia altura ($2\sqrt{3}\alpha_s$) tende a zero), embora não seja uma pois $\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) d\omega$ diverge.	113
B.1	Percurso no plano Argand-Gauss utilizado para a determinação de $\oint f(\lambda) d\lambda$.	124
C.1	Exemplo de aplicação do método exposto neste apêndice para a amostra 2,5 MC no <i>claro</i> . Cada símbolo + representa uma solução da equação (C.10) para a condição $1,22 \leq n_1 \leq 2,29$. Analogamente, os símbolos $\circ$ são as soluções para a condição $n_1 = 1,67$ (veja a tabela C.1). Note como a imposição das condições $\beta_2 \geq 2,5$ e $2,5 \leq \beta_3 \leq \beta_2$ limita enormemente as soluções possíveis (retângulo cinza).	130

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

3.1	Resumo das características das heteroestruturas utilizadas neste trabalho: Os valores de d_{InAs} são 1,0 MC, 1,5 MC, 1,75 MC, 2,0 MC e 2,5 MC, cada um referente a uma amostra (conforme notação apresentada no texto). A temperatura apresentada na coluna à direita é aquela utilizada durante o crescimento e as camadas em azul compreendem a região-ativa .	25
4.1	A tabela à esquerda apresenta uma possibilidade genérica de cálculo da mobilidade quântica: O valor de t_1 (lembre-se que $t_j = 1/B_j$) varia, sendo igual a τ_1 na primeira transformada, τ_2 na segunda e assim sucessivamente até a quinta transformada. t_N , por outro lado, é mantido fixo em τ_M . A figura ao lado da tabela é uma representação gráfica dela, na qual podemos ver explicitamente a variação em t_1 e em Δ . À medida que t_1 diminui, a amplitude da transformada nos picos (que identificam as sub-bandas) cresce (veja a figura 4.5) e dessa variação podemos obter a mobilidade quântica μ_s : equação (4.21).	51
5.1	Exceto pela primeira coluna (j), este é um exemplo do formato do arquivo texto que contém as medidas de V_j . Note que $V_j = V_{BC}$ ou V_{BE} , dependendo do que estamos medindo: efeito Shubnikov-de Haas ou Hall, respectivamente.	66
6.1	Concentrações <i>médias</i> das sub-bandas $s = 1, 2$ e 3 do 2DEG no <i>escuro</i> e no <i>claro</i> .	83
6.2	Mobilidades quânticas da segunda e terceira sub-bandas em função da espessura nominal de InAs depositada nas situações <i>escuro</i> e <i>claro</i> . Estes valores foram obtidos através do método exposto na seção 4.2.2 e as incertezas estatísticas foram avaliadas em 0,01 e 0,05 $\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ para a segunda e terceira sub-bandas, respectivamente.	86
6.3	Concentração total de portadores na região-ativa no <i>escuro</i> e no <i>claro</i> . Estes valores foram obtidos segundo o método exposto na seção 4.2.1 e a incerteza estatística (superestimada) foi avaliada em $0,05 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (aproximadamente igual à dimensão vertical dos símbolos).	88

Lista de Tabelas

6.4	Concentrações e mobilidades efetivas no <i>escuro</i> e <i>claro</i> de todas as amostras analisadas neste trabalho, obtidas das medidas do efeito Hall clássico através do método exposto na seção 4.1.	100
C.1	Resultados utilizados para calcular o gráfico da figura C.1, obtidos das medidas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas para a amostra 2,5 MC no <i>claro</i> . As concentrações estão escritas em unidades de $10^{12} \text{ c}^{-2}\text{m}$ e as mobilidades, de $\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	130

1

Introdução

1.1 Sólidos cristalinos

A idéia de que os cristais são compostos por um arranjo tridimensional periódico de átomos já era bastante difundida no século XVIII, mas foi só na década de 1920 que o conhecimento acerca desses materiais (e de todos aqueles semelhantes aos cristais, ditos cristalinos) atingiu maturidade Física e Matemática suficientes para desenvolver-se a todo vapor. Isto ocorreu pioneiramente pelas mãos de Felix Bloch¹ (1905-1983), que introduziu o conceito de **estrutura de bandas** dos cristais (e, conseqüentemente, dos materiais cristalinos) baseado nas formulações da recém-nascida Mecânica-Quântica. As idéias de Bloch fizeram uma revolução no meio científico (que, na época, preocupava-se principalmente com a compreensão do átomo isolado) e comercial, culminando com a descoberta das junções p-n (em 1939) e com a invenção do transistor (em 1948).

Átomos isolados possuem níveis de energia discretos e elétrons muito bem localizados em redor do núcleo; mas quando esses átomos são agrupados para formar uma estrutura

¹F. Bloch recebeu o prêmio Nobel de Física em 1952 por esses estudos.

1 Introdução

extensa (**bulk**), as funções de onda dos elétrons se superpõem (especialmente aquelas dos elétrons no nível de valência), dando origem a conjuntos (quase) contínuos de estados possíveis e energeticamente distintos chamados de **bandas de energia**.² As regiões energeticamente proibidas dos átomos, quando não são eliminadas por essas bandas, dão origem às **bandas proibidas**, ou **gaps**.

Figura 1.1: Da esquerda para a direita, ilustramos a evolução dos interesses científicos acerca da estrutura da matéria no último século, começando com o átomo, cuja imagem popular ainda é aquela devida a Ernest Rutherford, em 1911. Depois, Felix Bloch aplicou a recém-nascida Mecânica-Quântica às estruturas cristalinas macroscópicas, chamadas de *bulks* (volume), introduzindo conceitos completamente novos e iniciando um conhecimento que culminou na invenção do transistor, hoje fundamental em praticamente todas as aplicações tecnológicas. Por volta da década de 1950, os cientistas voltaram-se para o estudo dos fenômenos decorrentes do confinamento espacial dos elétrons, até então ignorado pela teoria de Bloch. Foi neste ínterim que surgiram o conceito de heteroestruturas e as técnicas de crescimento epitaxial, capazes de construir filmes cristalinos extremamente delgados e quase isentos de defeitos. Finalmente, a atenção atualmente volta-se em parte para o estudo dos pontos-quânticos, diminutas regiões do espaço capazes de capturar e confinar elétrons em todas as três direções do espaço, como nos átomos.

Na teoria de Bloch, todo material cristalino é composto por um arranjo espacialmente periódico e *ilimitado* de átomos (ou grupo de átomos). Em termos práticos, isto significa que as propriedades desses materiais não dependem de seus tamanhos nem dos possíveis processos que ocorram em suas superfícies;³ e as experiências têm demonstrado que esta é uma ótima aproximação mesmo para amostras muito pequenas, de alguns micrometros. Essas dimensões são ainda extremamente grandes quando comparadas com as distâncias interatômicas (parâmetro de rede)⁴ que caracterizam o período do arranjo. Mas quando

²Para maiores detalhes, consulte o capítulo 13 da referência [1].

³É interessante notar que na formulação proposta por Bloch, várias das características de um sólido cristalino sequer dependem dos átomos que o compõem. O exemplo mais imediato disso é o próprio conceito de estrutura de bandas.

⁴A definição de parâmetro de rede é um pouco mais complexa que isso [2, 3].

as dimensões da amostra vão abaixo disso, os elétrons passam a “enxergar” os limites da amostra e as conseqüências desse confinamento (e dos processos de superfície) não podem mais ser ignoradas. Na linguagem da Mecânica-Quântica, diz-se que as dimensões da amostra tornaram-se comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie (λ) dos elétrons [4]:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2 m^* k_B T}}, \quad (1.1)$$

onde $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ é a constante de Planck, p é o módulo do momento do elétron, T é a temperatura (em kelvin), $k_B = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ é a constante de Boltzmann e m^* é a massa efetiva⁵ do elétron na estrutura cristalina.

Assim, no caso do GaAs ($m^* = 0,067 m_0$, onde $m_0 = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ é a massa de repouso do elétron) a 1,4 K, por exemplo, se qualquer uma das dimensões da amostra for da ordem de 3500 Å, os efeitos de confinamento tornar-se-ão relevantes! Mas quais seriam eles? Vamos ver...

1.2 Heteroestruturas

No final da década de 1950 a idéia de se utilizar **filmes finos**⁶ para estudar esses efeitos de quantização já era popular e a principal estrutura estudada eram os filmes de semimetais depositados a vácuo sobre substratos de mica (filmes de metais e semicondutores também eram estudados). Nesta época, muitas previsões teóricas foram feitas, como o tunelamento ressonante e a resistência diferencial negativa, mas as técnicas experimentais disponíveis não permitiam aos pesquisadores construir filmes de qualidade suficientemente boa para verificarem esses fenômenos. Isto ocorria principalmente por que a observação desses efeitos exigia o uso de filmes extremamente delgados (ditos ultra-finos) e isentos de defeitos para que os elétrons pudessem ser refletidos nas interfaces ou superfícies (de modo a estarem confinados neste plano) e, ao mesmo tempo, que pudessem transitar sem obstáculos (sem espalhar) no plano do filme.

Foi na década de 1960 que esse cenário mudou radicalmente: Nasciam as técnicas de

⁵Um elétron numa estrutura cristalina comporta-se diferentemente de outro no vácuo e a massa efetiva é uma maneira aproximada de representar essa diferença de comportamento.

⁶Um filme fino nada mais é que uma folha plana de algum material, geralmente sustentada por algum outro material, de espessura (deveras) maior, chamado substrato.

1 Introdução

crescimento⁷ epitaxial, como a epitaxia por feixe molecular (MBE, *molecular beam epitaxy*; capítulo 2). A partir daí, tornou-se possível inserir coerentemente camadas com alguns angströms de espessura de semicondutores de *gap* menor sobre substratos de *gap* maior, restringindo o movimento dos elétrons a apenas duas direções (plano do filme: veja a figura 1.1) e garantindo uma interface quase perfeita. Era o que faltava: A partir daí os diversos fenômenos de confinamento previstos puderam ser verificados e muitas outras idéias foram experimentadas. Particularmente impressionantes foram os resultados obtidos com experiências ópticas: Em 1974, Dingle *et al* [5] observaram diretamente o espectro de absorção em forma de degraus característico de um gás bidimensional de elétrons (2DEG, *two-dimensional electron gas*) descrito pela teoria de Sommerfeld. Além disso, esses estudos enfatizaram a importância dos efeitos excitônicos, fundamentais em alguns dispositivos como moduladores ópticos⁸ e elementos ópticos biestáveis.⁹

Esse tipo de estrutura, construída artificialmente através da superposição de filmes ultra-finos de materiais distintos, ficou conhecido como **heteroestruturas** (HES). Dois tipos particularmente interessantes de heteroestrutura são os **poços-quânticos** (QWs, *quantum wells*) e as **super-redes** (SRS). O primeiro deles é composto por duas camadas de um semicondutor qualquer separadas por uma terceira camada de um semicondutor distinto, de *gap* menor, cuja função é prover aos elétrons uma região na qual a energia potencial do gás bidimensional de elétrons seja menor que em qualquer outra região do material e, portanto, mantê-los ali confinados. Antes do advento das HE, os poços-quânticos não passavam de estruturas teóricas cuja única função era ilustrar as equações da Mecânica-Quântica; mas agora eles são utilizados na confecção de vários dispositivos opto-eletrônicos de alta performance como *lasers* e fotodetectores [9].

As super-redes, por outro lado, são uma sucessão de QWs e são utilizadas para melhorar a performance de heteroestruturas baseadas em poços-quânticos. Além disso, elas isolam as impurezas do substrato (que geralmente possui qualidade muito inferior àquela exigida na fabricação das HES) da heteroestrutura de interesse, construída sobre ele. Neste trabalho

⁷A confecção de estruturas cristalinas através das técnicas de epitaxia consiste em montar essas estruturas camada após camada atômica, de tal modo que o substrato *cresce* na direção perpendicular à sua superfície, daí o termo “crescimento,” utilizado no sentido de construir uma tal estrutura.

⁸Um modulador óptico é um dispositivo capaz de variar, ou modular, um sinal óptico, geralmente com o intuito de fazê-lo transmitir informações. Um exemplo é o *chopper*, utilizado em medidas de fotoluminescência [6, 7, 8].

⁹Um elemento biestável é qualquer dispositivo capaz de assumir apenas dois estados distintos, independentemente do sinal de entrada. Exemplos são portas lógicas e memórias.

utilizamos uma SR justamente para isso (capítulo 3).

1.3 Os pontos-quânticos

No final da década de 1980, as principais propriedades dos poços-quânticos e das super-redes estavam bem compreendidas e o interesse dos pesquisadores voltou-se para estruturas com maior grau de confinamento dos elétrons: em duas dimensões, os **fios-quânticos**, e em três, os **pontos-quânticos** (QDs, *quantum-dots*).¹⁰

O confinamento nas três direções do espaço, que dá origem aos pontos-quânticos, traduz-se na completa localização dos portadores (elétrons ou buracos), à imagem dos átomos. De fato, algumas das propriedades dos QDs assemelham-se às daquelas de um elétron confinado em uma caixa [4], dentre as quais a discretização dos níveis de energia (a estrutura de bandas, presente nos *bulks*, é completamente inexistente nos pontos-quânticos). Além disso, as propriedades dessas novas estruturas (como os níveis de energia, por exemplo) são altamente dependentes das dimensões envolvidas.

Para compreendermos a importância deste intenso confinamento, suponha que temos um QD com apenas dois estados. As energias desses estados são tão precisas quanto permitem a relação de incerteza de Heisenberg (ignorando os efeitos da temperatura) e, por este motivo, a transição de um elétron do nível de energia mais alto (primeiro e único estado excitado) para o mais baixo (fundamental) ocorre mediante a emissão de um fóton de energia extremamente bem definida. Podemos utilizar esta transição para construir um *laser* [10] que emite num comprimento de onda muito bem definido. Inversamente, para que o elétron transite do nível de energia mais baixo para o mais alto, ele deve absorver um fóton de energia igualmente bem definida, e disto podemos construir um fotodetector [11] capaz de identificar um comprimento de onda muito específico! São as duas pontas de uma linha de transmissão de dados: Um emissor (*laser*) e um receptor (fotodetector).

Não é preciso dizer que essas características dos pontos-quânticos são inestimáveis para a tecnologia das telecomunicações, mas podemos ir muito mais longe: Nos últimos anos, as fibras ópticas de sílica vêm substituindo os antigos fios de cobre e possibilitando uma nova gama de aplicações, desde procedimentos cirúrgicos até simples decorações domésticas. As fibras ópticas atuais apresentam um mínimo local de atenuação em 1,3 μm e um

¹⁰Lembre-se de que os filmes ultra-finos confinam os elétrons em apenas *uma* dimensão, deixando as duas direções do plano do filme livres para os elétrons transitarem.

1 Introdução

mínimo absoluto em 1,5 μm , isto é, sinais com estas frequências podem percorrer distâncias muito maiores (dezenas a centenas de vezes) nas fibras ópticas antes de serem perdidos em meio aos ruídos. Para as telecomunicações, isto implica numa redução significativa do número de *repetidores*¹¹ numa longa linha de transmissão de dados e, conseqüentemente, numa redução dos custos de instalação e manutenção. Isto afeta os preços praticados por serviços prestados e, por conseguinte, a economia de um país e do mundo...! Mas foi só há alguns poucos anos que as primeiras emissões em 1,3 μm foram atingidas [12, 13], e apenas ainda mais recentemente (em meados de 2002), o grupo do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) da Universidade de São Paulo (USP) conseguiu fabricar pontos-quânticos que emitem (e absorvem) fótons de 1,5 μm [14], tornando-se um dos primeiros laboratórios no mundo a obter tal resultado, e a despeito de alguns trabalhos que impossibilitavam a obtenção de QDs com o tamanho necessário para isso [12].

Várias outras aplicações para os pontos-quânticos têm sido previstas e experimentadas como transistores monoeletrônicos [15], memórias ópticas [16], *traçadores*¹² biológicos [17], LEDs (*light emitting diode*) orgânicos [18] e um possível grande papel no desenvolvimento da recente computação quântica [19]. Cada uma dessas aplicações apresenta inúmeras vantagens sobre as similares atuais: No caso dos traçadores biológicos, e.g., os pontos-quânticos oferecem um espectro de emissão deveras mais estreito que os atuais traçadores (baseados em tintas orgânicas fluorescentes), facilitando e melhorando a interpretação dos resultados. Além disso, por não serem radioativos, os QDs não oferecem os mesmos prejuízos à saúde de um paciente que precise passar por este tipo de atividade, como ocorre atualmente com o tecnécio meta-estável (isótopo 95).

Todas essas aplicações são muito novas e bastante complexas, especialmente por que ainda sabemos pouco a respeito dos pontos-quânticos. Em verdade, a maioria delas ainda é realidade apenas no meio acadêmico e está longe de ser utilizada comercialmente. No entanto, é curioso notar que a primeira aplicação comercial dos QDs data da década de 1930, quando semicondutores (e.g., CdSe) nanométricos foram inseridos em vidro [4] e comercializados como filtros de cores por várias décadas. Os efeitos de quantização desse tipo de estrutura foram experimentalmente confirmados em 1984 [4], mas o fato de o vidro

¹¹Um repetidor é um dispositivo cuja função é amplificar o sinal recebido e reenviá-lo para o próximo trecho de uma linha de transmissão, de modo que o sinal não seja perdido antes de atingir seu destino.

¹²Um traçador é uma substância utilizada para marcar e acompanhar (ou traçar) a evolução de um sistema (geralmente biológico).

ser isolante dificultou, por muito tempo, o estudo e a utilização desses pontos-quânticos em dispositivos eletrônicos ou opto-eletrônicos.

Mas não é só na Física Aplicada que os qds são interessantes: À imagem do que ocorreu com as heteroestruturas, muitos novos fenômenos estão sendo previstos e observados, como por exemplo o efeito **bottleneck** [20, 21] e a importância das tensões mecânicas (inerente ao método de fabricação dos pontos-quânticos: veja a seção 2.2) para as estruturas de bandas das heteroestruturas (sobre as quais os qds são formados) e para os portadores de cargas em suas imediações, que é um dos intuitos deste trabalho.

1 Introdução

2

Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos

As primeiras tentativas de se produzir estruturas com confinamento tridimensional de elétrons (pontos-quânticos) utilizaram técnicas de fotolitografia e eletrolitografia de alta resolução, bem como crescimento sobre substratos pré-gravados. Contudo, essas técnicas mostraram-se incapazes de produzir QDs com dimensões controladas ou pequenos o suficiente para garantir os efeitos do confinamento. Além disso, as estruturas produzidas por essas técnicas apresentavam má qualidade cristalina, com altas densidades de impurezas e defeitos estruturais provenientes dos tratamentos químicos. Estes problemas foram resolvidos na década de 1980 com a descoberta do processo de auto-formação e organização dos pontos-quânticos durante o crescimento epitaxial por MBE de camadas tensionadas mecanicamente pelo descasamento (*misfit*) entre os parâmetros de rede da camada em crescimento (**epicamada**) e do substrato, em torno de 10% (regime de crescimento Stranski-Krastanov, sk [7]). Especificamente no nosso caso (capítulo 3), onde os QDs são de InAs ($a_{\text{InAs}} = 6,058 \text{ \AA}$) e utilizamos um substrato de GaAs ($a_{\text{GaAs}} = 5,653 \text{ \AA}$), este descasamento

$((a_{\text{InAs}} - a_{\text{GaAs}})/a_{\text{GaAs}})$ é de 7%.

2.1 A técnica MBE

A epitaxia por feixe molecular é apenas uma das chamadas técnicas de crescimento epitaxial¹ e caracteriza-se principalmente pela capacidade de produzir filmes monocristalinos ultra-finos com precisão atômica. A palavra “epitaxia” é um hibridismo do prefixo grego “epi” (acima) com o radical latino “axis” (eixo) e procura representar a idéia de que a camada cristalina em crescimento (epicamada) tende a seguir a orientação cristalográfica da camada imediatamente abaixo (substrato); Já o termo “feixe molecular” refere-se ao regime molecular dos elementos químicos direcionados para o substrato. Assim, a técnica MBE consiste em incidir um feixe *molecular* de átomos ou moléculas sobre um substrato cristalino (previamente produzido por alguma outra técnica) e, com isso, produzir mais uma camada atômica estruturalmente idêntica à anterior, e assim sucessivamente para as camadas seguintes (veja a figura 2.1).

Figura 2.1: Ao incidir sobre o substrato, os átomos ou moléculas do feixe molecular tendem a se posicionar nos sítios da rede. Deste modo, o crescimento segue a estrutura cristalina do substrato, pois é assim que a energia total é minimizada. Situações como aquelas representadas pelos círculos (átomos) vermelhos são possíveis, embora menos freqüentes. Os átomos amarelos podem ou não ser diferentes daqueles do substrato, dependendo do que se quer obter.

A figura 2.2(a) é uma representação das partes principais de um equipamento de MBE genérico e a figura 2.2(b) é uma fotografia do equipamento utilizado para crescer as amostras deste trabalho.² O equipamento é constituído de duas câmaras de vácuo independentes

¹Técnicas correlatas são a MOCVD (*metalorganic chemical vapour deposition*) e a CBE (*chemical beam epitaxy*).

²No Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica (DFMT) do Instituto de Física (IF) da Universidade de São Paulo (USP).

(sistemas de vácuo independentes) e conectadas por uma válvula gaveta, específica para ambientes de ultra-alto-vácuo. A primeira delas (*câmara de entrada*) não está representada na figura 2.2(a) por que tem pouco interesse para a compreensão do método propriamente dito: Ela é utilizada para manusear as amostras e, por isso, freqüentemente exposta à atmosfera-ambiente (daí a necessidade de essas duas câmaras possuírem sistemas de vácuo independentes). É na segunda **câmara (de crescimento)**, acima da válvula gaveta (fig. 2.2(a)), que o crescimento ocorre: O substrato é fixado no centro (porta-amostras) e para ele estão apontadas as **células de Knudsen**, cada qual contendo um bloco de elemento químico sólido puro, e somente ele. No nosso caso, as células contêm As (arsênio), Al (alumínio), In (índio), Ga (gálio) e Si (silício, usado nas dopagens). O feixe molecular é obtido pela sublimação desses elementos e seu fluxo é controlado pela temperatura de cada célula. Entre o substrato e cada célula existe um obturador pneumático que interrompe ou não a incidência desse fluxo sobre o substrato, conforme o interesse. Então, e.g., se quisermos jogar apenas alumínio no substrato, abrimos o obturador da célula de Al e fechamos os das outras. A quantidade de átomos que incide sobre o substrato é diretamente proporcional ao tempo de abertura do obturador. Deste modo, manipulando as temperaturas das células de Knudsen e os tempos de exposição (do substrato às células) podemos atingir taxas de crescimento tão baixas quanto 1 $\mu\text{m/h}$ (ou alguns angströms por segundo).

O canhão de elétrons e a tela fluorescente na figura 2.2(a) são necessários para monitorar o crescimento através de uma técnica chamada **RHEED** (*reflection high-energy electron diffraction*): Basicamente, o canhão de elétrons incide sobre a superfície da amostra em crescimento um feixe rasante ($\sim 1^\circ$ com a superfície) de elétrons altamente energéticos (8 keV no nosso caso), projetando na tela fluorescente o padrão de difração produzido pelo feixe na superfície da amostra. Então suponha que temos uma superfície perfeitamente lisa. Como a incidência é rasante, o feixe é totalmente refletido e difratado pelas camadas mais superficiais (1 a 5 **MC**).³ Assim, o padrão de difração observado é um conjunto de listras, característico de uma estrutura bidimensional (a área de incidência). Inversamente, suponha agora que temos uma superfície rugosa. Neste caso o feixe será fortemente bloqueado pela rugosidade. Agora, o feixe de elétrons tem de atravessar as rugosidades e quando isto acontece as condições de difração são associadas a um arranjo tridimensional de átomos.

³Chamamos de monocamada (MC) a distância entre dois planos sucessivos de átomos da mesma espécie numa estrutura cristalina. Especificamente no nosso caso, onde a estrutura é do tipo *zinc-blend* [2, 3] e a orientação cristalográfica é (001), $1 \text{ MC} = a/2$, onde a é o parâmetro de rede.

2 Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos

Figura 2.2: (a) Esquema genérico de um sistema MBE (visto de cima). (b) Fotografia do equipamento MBE do laboratório LNMS no Instituto de Física da Universidade de São Paulo (*campus SP*). A câmera (na parte inferior) capta os padrões de difração que aparecem na tela fosforescente e envia-os para um monitor. O leitor pode ter uma noção do tamanho do equipamento observando o filtro-de-linha na parte inferior direita da figura.

Isto implica que o padrão de difração, nesta situação, é um conjunto de pontos, característico de uma estrutura tridimensional (rugosidade da superfície). A figura 2.3 ilustra essas duas situações.

Embora o crescimento por MBE seja praticamente isento de defeitos, ele não ocorre camada por camada atômica exatamente. A figura 2.1 ilustra isso: Cada linha horizontal de átomos (círculos) é uma monocamada. O leitor pode reparar que a primeira monocamada acima do substrato (círculos amarelos) ainda não está completa, embora a segunda (imediatamente acima) já tenha começado a se formar. Essa figura mostra uma situação em que a rugosidade é alta, mas dentro em breve a primeira camada acima do substrato estará completa e a segunda (acima) ainda estará em formação. Quando isto ocorrer a rugosidade terá reduzido. O crescimento ocorre desta maneira: A rugosidade da superfície oscila, e é isso que a técnica RHEED mede. Quando uma monocamada está completa, a rugosidade é mínima e a difração do feixe eletrônico é característico de uma estrutura bidimensional

(conjunto de listras). Mas quando só metade de uma monocamada está completa, a rugosidade é máxima e o padrão de difração é o de uma estrutura tridimensional (conjunto de pontos). A figura 2.3 mostra uma foto dessas duas situações e as referências [7] e [8] explicam pormenorizadamente a técnica.

Figura 2.3: À esquerda vemos o padrão de difração característico de uma estrutura bidimensional (veja o texto); À direita, o padrão é devido à rugosidade da superfície (aglomerados tridimensionais de átomos), indicando que a monocamada mais superficial ainda não está completa. O ponto intenso no centro é a parte do feixe que não sofreu difração.

A técnica RHEED também é utilizada para verificar a formação dos pontos-quânticos: Conforme veremos na próxima seção, os QDs são pequenos aglomerados tridimensionais de átomos e, por isso, produzem um padrão de difração característico de uma estrutura tridimensional.

Vamos ver com mais detalhes como é que se cresce uma estrutura simples (um qw com uma dopagem delta ao lado, por exemplo): Primeiramente o crescedor⁴ precisa determinar as taxas de crescimento que lhe interessam. Isto é feito manipulando as temperaturas das células de Knudsen e monitorando o crescimento de uma amostra de referência através da técnica RHEED. Com isso ele pode definir, e.g., que a taxa de crescimento da liga GaAs (naquelas temperaturas) é 0,704 MC/s, e a da liga InGaAs, 0,998 MC/s. Perceba que essas taxas são definidas previamente ao crescimento e passadas ao programa através do comando `rate`; Este comando não faz nada além de definir uma constante que armazena a taxa de crescimento da liga. Agora tudo corre automaticamente: O comando `grow` diz ao equipamento para crescer 500 Å da liga GaAs, a barreira anterior do qw de InGaAs.

```
begin // Inicia o programa
```

⁴Crescedor é a pessoa responsável por manipular a máquina MBE e construir as estruturas desejadas.

2 Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos

```
rate GaAs 0.704      // Define a taxa de crescimento da liga GaAs...
rate InGaAs 0.998    // ... em MC/s (monocamadas por segundo)
grow GaAs 500        // Cresce 500 angströms de GaAs
open Si              // Abre o obturador da célula de silício
wait 10              // Aguarda por 10 segundos (não faz nada)
close Si             // Fecha o obturador da célula de silício
grow GaAs 70
grow InGaAs 100
grow GaAs 80
end                  // Finaliza o programa
```

Em seguida (as três linhas seguintes), o equipamento cresce uma dopagem do tipo delta. Para fazer isso ele simplesmente abre o obturador do silício (`open Si`), espera 10 segundos (`wait 10`) e fecha-o (`close Si`). O tempo que o obturador fica aberto define a concentração da dopagem, que também é determinada com base no crescimento de uma amostra de referência.

Agora o sistema MBE cresce outros 70 angströms: É a **camada de espaçamento** (*spacer-layer*), responsável por *separar* a dopagem delta do poço-quântico de InGaAs (100 Å de espessura) que vem logo em seguida (comando `grow InGaAs 100`). Finalmente a barreira posterior é crescida (`grow GaAs 80`) e o programa, finalizado (`end`).

Na realidade, o comando `grow` é uma sub-rotina baseada nos comandos `open`, `wait` e `close` que calcula automaticamente o tempo de exposição (comando `wait`) necessário para que se cresça a espessura desejada. Tomemos, e.g., o caso do poço-quântico, de 100 Å de espessura. A taxa de crescimento desta liga foi definida como 0,998 MC/s, ou ainda, sabendo que uma monocamada de InGaAs corresponde a meio parâmetro de rede da liga,⁵ 2,844 Å/s. Isto significa que precisamos manter as células de In, Ga e As abertas por $100/2,844 = 35,16$ s. Portanto o comando `grow InGaAs 100` acima é equivalente a

```
open In,Ga,As
wait 35.16
close In,Ga,As
```

O uso de um programa como este que acabamos de apresentar é opcional. Essencialmente, ele é utilizado apenas para melhorar o controle do tempo de exposição, das aberturas

⁵Considerando a liga de $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ utilizada neste trabalho, onde $y = 16,534\%$.

e dos fechamentos dos obturadores.

O feixe molecular obtido da sublimação dos elementos químicos nas células de Knudsen incide sobre o substrato a uma taxa que varia de 10^{18} até 10^{20} átomos por metro quadrado e por segundo. Ao atingir a superfície, esses átomos sofrem uma enorme variedade de trocas energéticas antes de entrarem em equilíbrio termodinâmico com o substrato e, só então, serem efetivamente incorporados na amostra⁶ (isto ocorre por que as temperaturas do substrato e a das células de Knudsen não são a mesma). Essas trocas energéticas ocorrem através de cinco maneiras, ou fenômenos, distintos (basicamente): **Adsorção, difusão e incorporação; desadsorção e dissociação**. Um átomo ou molécula *adsorvido* está simplesmente em contato com a superfície do substrato, mantido ali por intermédio de interações de Van der Waals (sem troca de elétrons). Esse é, geralmente, o primeiro estado pelo qual os átomos ou moléculas do feixe incidente passam. A partir daí, eles podem “passar” (*difundir*) pela superfície trocando energia até se ligarem quimicamente (com troca de elétrons) a algum átomo da superfície, o que corresponde à *incorporação* no cristal propriamente dita. A desadsorção e a dissociação são os antônimos da adsorção e da incorporação, respectivamente.

A incorporação de um átomo ou molécula no cristal é o estado final desejado e geralmente ocorre *junto* de defeitos, impurezas ou ligações químicas incompletas (ou insaturadas: **dangling bonds**) na superfície pois eles propiciam uma menor variação da energia livre do substrato [8]. Mas isto não significa que a incorporação *gere* os defeitos, contrariando o que dissemos no início deste capítulo: Observe, por exemplo, a figura 2.1. Numa situação como esta, a incorporação ocorrerá mais provavelmente no degrau (que é um defeito) formado pelo substrato e pela epicamada, mas ainda assim seguindo a orientação cristalográfica da região.

Para que a incorporação ocorra eficientemente (o que dá origem a amostras de melhor qualidade), os átomos ou moléculas adsorvidos precisam ter liberdade para difundirem-se pela superfície do substrato até encontrarem o sítio da rede mais apropriado para a incorporação. Se a superfície do substrato for muito rugosa (de má qualidade), os átomos ou moléculas adsorvidos não terão energia para transpor os aglomerados tridimensionais de átomos (já incorporados à superfície) e trocarão energia nas imediações da região onde incidiram. Assim, eles não poderão se difundir e acabarão sendo incorporados ali mesmo,

⁶Para uma taxa de crescimento típica, de 1 MC/s, um átomo de gálio sobre um substrato de GaAs a 600 °C pode realizar aproximadamente 10^6 interações antes de ser efetivamente incorporado pelo cristal [8].

2 Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos

prejudicando a qualidade da amostra. Por outro lado, se a superfície da amostra for lisa, haverá poucos obstáculos e os átomos ou moléculas poderão se difundir apreciavelmente, melhorando a qualidade da amostra. Portanto, a rugosidade inicial do substrato é um parâmetro que influencia fortemente a qualidade da amostra crescida; A temperatura é outro: Em baixas temperaturas, a adsorção é promovida (em detrimento da desadsorção) mas a difusão não; Em altas, a difusão melhora mas a adsorção não (a desadsorção melhora). Com efeito, os processos pelos quais os átomos ou moléculas do feixe incidente e os do substrato interagem são, por si só, extremamente complexos e um sem número de trabalhos procura abordá-los. O leitor interessado em maiores detalhes pode começar, por exemplo, pelas excelentes referências [7] e [8].

A condição de vácuo ultra-alto tem importância fundamental pois não só garante o regime molecular do feixe de átomos oriundos das células de Knudsen como também minimiza a contaminação da amostra em crescimento: Para se ter uma idéia, a câmara de crescimento é mantida em 10^{-10} torr (ultra-alto-vácuo) e, nesta pressão, o tempo necessário para que uma monocamada de impureza se forme numa superfície qualquer é da ordem de 28 horas; Em 10^{-6} torr (alto-vácuo), no entanto, esse tempo cai para cinco minutos! Com efeito, o crescimento epitaxial por feixe molecular não seria possível sem a atual tecnologia de vácuo.

2.2 A formação dos pontos-quânticos

Quando o filme epitaxial (epicamada) e o substrato sobre o qual ele é crescido possuem a mesma estrutura cristalina e um parâmetro de rede muito parecido (o caso do AlGaAs sobre GaAs) ou idêntico (GaAs sobre GaAs), o crescimento é coerente, *i.e.*, o material depositado adota *naturalmente* o mesmo parâmetro de rede que o do substrato e o filme cresce camada por camada (fig. 2.1). Este regime de crescimento é conhecido como Frank-van der Merwe (FM) [7] e é o principal modo de crescimento em sistemas isentos de tensões (a seguir). No entanto, quando o material sublimado (na célula de Knudsen) tem um parâmetro de rede consideravelmente diferente daquele do substrato (InAs sobre GaAs, como no nosso caso, por exemplo), a camada em crescimento (epicamada) é *forçada* a assumir o parâmetro de rede do substrato. Isto significa que a energia potencial contida nas ligações químicas da epicamada não é mínima por que o parâmetro de rede do filme não é o

2.2 A formação dos pontos-quânticos

seu natural. Neste caso, surge uma tensão mecânica que aumenta conforme aumentamos a quantidade (ou camadas) de material depositado. Mesmo assim o crescimento ainda é coerente e a epicamada é cristalograficamente perfeita; idêntica ao substrato. Mas esta situação não prossegue indefinidamente: Existe uma espessura crítica a partir da qual a tensão não pode mais ser contida pelas camadas epitaxiais. Quando isso acontece, os átomos das camadas recém-depositadas se deslocam e se aglutinam para formarem pequenas ilhas tridimensionais *tensionadas* (ditas *coerentes*). Essas ilhas são chamadas de **pontos-quânticos** e são literalmente pequenos “montes” (aglomerados) de átomos arranjados numa estrutura cristalina cujo parâmetro de rede ainda é o do substrato (por isso dita coerente), mas com um leve relaxamento em suas bordas (ou seja, à medida que nos afastamos do centro de um qd e nos aproximamos de sua superfície, o parâmetro de rede tende ao seu valor natural). Veja a figura 2.4.

Figura 2.4: Em (a) apresentamos separadamente uma representação das ligas do substrato (círculos pretos) e do filme epitaxial (círculos amarelos) que queremos crescer sobre ele, ilustrando a diferença entre seus respectivos parâmetros de rede (distâncias entre círculos vizinhos). (b) Ao crescermos um filme epitaxial cujo parâmetro de rede difere daquele do substrato, o filme fica mecanicamente tensionado. Mesmo assim, a estrutura cristalina do filme ainda é igual à do substrato. Este é o regime de crescimento Frank-van der Merwe (FM). (c) Quando o filme atinge uma espessura crítica, a tensão se torna tão grande que não pode mais ser contida por ele. Quando isto acontece, os átomos da epicamada tensa se rearranjam e formam pequenas ilhas tensionadas (ou seja, com o parâmetro de rede do *substrato*). Essas ilhas são chamadas de pontos-quânticos e o regime de crescimento é agora conhecido como Stranski-Krastanov (SK). Abaixo dos qds é comum restar um filme ultra-fino (de 1 MC aproximadamente) conhecido por *wetting-layer*. (d) Depois de formados os qds, é comum retomarmos o crescimento da liga do substrato, *cobrindo* os pontos-quânticos, daí o nome “cobertura.”

2 Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos

O restante das camadas epitaxiais recém-depositadas que não é utilizado para formar os pontos-quânticos fica sob a forma de um filme ultra-fino de aproximadamente 1 MC de espessura chamado **wetting-layer** (camada molhada) logo abaixo dos qds. Este nome visa representar a idéia de que esta camada se espalha por toda a superfície da amostra, “molhando-a.”

À medida que o crescimento prossegue, novos pontos-quânticos são formados e os já existentes crescem [6], elevando drasticamente a rugosidade da superfície. Por isso, o crescimento deixa de ser bidimensional (camada por camada) e passa a ocorrer tridimensionalmente: É o chamado regime **Stranski-Krastanov** (SK) [7].

O gráfico da figura 2.5(a) ilustra a concentração de qds de arseneto de índio (nosso caso) em função da quantidade nominal (em monocamadas) de InAs depositada, obtida por Ramachandran *et al* em 1997 [22]. Como podemos ver, a densidade de pontos-quânticos cresce abruptamente logo após a espessura crítica (transição FM→SK ou 2D→3D), mas tem um valor máximo próximo de 10^{11} cm^{-2} . Além disso, o crescimento não é homogêneo e na superfície da amostra coexistem qds com dimensões distintas. Em verdade, geralmente os pontos-quânticos se agrupam em **famílias**, cada qual com uma distribuição gaussiana de tamanhos (altura, raio ou volume) em torno de um valor médio (figura 2.5(b)) que caracteriza essa família. Para um estudo mais detalhado sobre a formação e a evolução dos pontos-quânticos recomendamos ao leitor as referências [6], [7] e [22].

A despeito de a concentração de pontos-quânticos crescer abruptamente após a espessura crítica (aproximadamente 1,6 MC), o processo de remanejamento dos átomos da epicamada tensa parece iniciar-se um pouco antes e um pouco menos drasticamente com a formação de imensos platôs com dimensões de $\sim 400 \text{ \AA}$ paralelamente ao plano do crescimento e de 2 – 3 MC ($\sim 7 \text{ \AA}$) perpendicularmente. Aparentemente este é o primeiro passo na formação dos pontos-quânticos e o fato de esses platôs ainda não serem ilhas tridimensionais renderam-lhes o nome de Q3Ds (*quasi-three dimensional*). Ainda existe muita controvérsia a respeito desse fenômeno, especialmente por que — até onde sabemos — somente dois trabalhos no mundo conseguiram observá-los experimentalmente: [6] e [23], o primeiro deles realizado neste laboratório (LNMS).

Embora a formação dos pontos-quânticos represente uma redução na tensão mecânica acumulada durante o crescimento, ainda assim esta configuração não está completamente relaxada, haja vista que as ilhas tridimensionais possuem o parâmetro de rede do substrato,

2.2 A formação dos pontos-quânticos

(a) A concentração de qds cresce drasticamente a partir de aproximadamente 1,6 MC de InAs depositadas, ilustrando a transição 2D→3D (ou FM→SK, Frank-van der Merwe para Stranski-Krastanov): É neste momento que a tensão acumulada na epimada não pode mais ser contida e formam-se os QDs, a forma encontrada pela estrutura para reduzir esta tensão.

(b) A evolução dos sqds ocorre através de “famílias” de pontos-quânticos, caracterizadas pelas suas dimensões. Aqui podemos ver claramente a existência de duas dessas famílias, uma com altura média de 45 Å, e outra com 75 Å. A figura inserida no gráfico é uma imagem obtida através de AFM (seção 4.4), e é a partir desta figura que contamos os QDs e medimos suas dimensões.

Figura 2.5: Em (a) apresentamos a concentração de pontos-quânticos auto-organizados em função da espessura nominal de InAs depositado. Este resultado foi obtido por Ramachandran *et al* em 1997 [22]. Já em (b), ilustramos a existência de “famílias” de qds, caracterizadas pelas suas dimensões. Este resultado foi obtido por Duarte *et al* em 2002 [6].

e não o seu natural. Destarte, à medida que o crescimento prossegue e os qds crescem em quantidade e tamanho, a tensão também aumenta. Novamente, existe um tamanho máximo dos pontos-quânticos acima do qual a tensão não pode mais ser contida por eles. Neste momento as ilhas tensas relaxam, assumindo seu parâmetro de rede natural, e o crescimento deixa o modo sk, dando origem a inúmeros defeitos estruturais indesejáveis. De fato, qualquer aplicação atual de pontos-quânticos utilizando esta técnica de crescimento sempre permanece no regime sk, até por que as dimensões e a concentração dos qds neste regime são controláveis através da quantidade de material depositado (dentre outros parâmetros), embora este controle não seja tão preciso quanto se gostaria.

Resumindo, o fenômeno de auto-formação e organização dos pontos-quânticos consiste na reorganização espontânea de parte da camada epitaxial tensa durante o crescimento para diminuir sua energia total, e os qds crescidos desta maneira são comumente conhecidos

2 Epitaxia por feixe molecular e a formação dos pontos quânticos

como **pontos-quânticos auto-organizados** (SQDs, *self-organized quantum-dots*).

É interessante, importante e instrutivo observar que, grosso modo, não há diferenças morfológicas entre uma superfície repleta de pontos-quânticos e outra simplesmente rugosa: Ambas são formadas por “ondulações.” Dito de outra forma, tanto os QDs como as ondulações numa superfície rugosa são aglomerados de átomos. Em verdade, a diferença essencial reside no fato de que os pontos-quânticos são formados por uma liga diferente da do substrato, enquanto as ondulações numa superfície rugosa não. Isto significa que o *gap* de energia na região do ponto-quântico é diferente daquele no substrato. Então, e.g., no caso de QDs de arseneto de índio crescido sobre um substrato de GaAs, o *gap* do InAs é menor e a região do QD se torna um QW tridimensional. Todavia, o conceito de banda proibida (*gap*) tem origem na teoria de Bloch e não pode ser aplicado aqui indiscriminadamente pois a estrutura cristalina dos pontos-quânticos não é infinita, como requer esta teoria. De fato, uma das discussões a respeito dos QDs é justamente que tipo de centro espalhador ele é: atrativo [24] ou repulsivo [25]. Esta é uma das questões que procuraremos abordar no capítulo 6.

A técnica de crescimento MBE fornece pontos-quânticos praticamente isentos de defeitos, além de oferecer um confinamento muito mais efetivo do que aquele obtido por litografia, por exemplo. Contudo, devido à espontaneidade da formação dos QDs, o controle de suas características é limitado. Particularmente, a aleatoriedade de tamanho e da distribuição espacial dos pontos-quânticos sobre a superfície da amostra são desvantagens com relação a outras técnicas. Com efeito, atualmente a principal dificuldade em se aplicar os QDs em dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos reside aí.

3

As amostras

No capítulo 1 vimos que o desenvolvimento e o aprimoramento das técnicas de crescimento epitaxial vêm estimulando o estudo e a aplicação de novas estruturas semicondutoras onde o confinamento dos portadores ocorre em uma ou mais direções do espaço. Dentre essas estruturas, provavelmente as mais interessantes e difíceis de se obter atualmente de maneira controlada sejam aquelas que contenham pontos-quânticos auto-organizados: Elas são *interessantes* por que diversas aplicações práticas têm sido previstas, seja sobrepujando as anteriores, seja introduzindo novas (capítulo 1); E são *difíceis* de se obter de maneira controlada por que o principal método utilizado para forjar os qds é através do fenômeno de auto-formação e organização durante o crescimento epitaxial de camadas mecanicamente tensionadas, um processo espontâneo (capítulo 2).

Com relação aos aspectos fundamentais da Física Moderna, muito esforço tem sido dedicado na obtenção de informações sobre o processo de formação dos sqds, sua estrutura eletrônica e diversos outros processos como a relaxação de portadores fotogerados, que dá origem ao efeito *bottleneck*, a influência das tensões mecânicas e das deformações da estrutura cristalina devido a essa tensão sobre os portadores, e também o papel dos qds como

3 As amostras

centros espalhadores.

Visando contribuir para este cenário, neste trabalho vamos estudar as influências de uma camada tensa de InAs (crescida sobre um substrato de GaAs com orientação cristalográfica (001)) sobre um gás bidimensional de elétrons confinado num poço-quântico de InGaAs próximo a ela (figura 3.1 na página 25). Cada amostra terá uma espessura *nominal* de InAs diferente, desde nenhuma deposição até 2,5 MC. Assim poderemos averiguar o comportamento desse 2^{DEG} em cada fase da evolução dos qds, desde absolutamente nenhum qd até grandes concentrações deles, e passando pelos q3ds. Perceba que nossa preocupação será o 2^{DEG}, não os qds. Faremos isso por que estamos interessados nas aplicações dos qds em dispositivos eletrônicos, particularmente em fotodetectores de infravermelho [26, 27].

Estudos sobre a formação dos qds mostram que eles são efetivamente formados quando a camada de InAs depositada atinge aproximadamente 1,6 MC de espessura nominal (figura 2.5(a)) [22], embora já tenhamos observado, através de medidas de fotoluminescência e de microscopia de força atômica (seção 4.4), pontos-quânticos com apenas 1,5 MC de InAs depositadas [6]. Além disso, esse filme epitaxial de InAs reduz sua espessura para cerca de 1,2 MC após contribuir com parte de seu conteúdo para a formação dos pontos-quânticos. Essa camada ultra-fina remanescente é comumente chamada de *wetting-layer*. Prosseguindo com o crescimento, o InAs depositado passa a contribuir para a formação de novos pontos-quânticos e para o aumento das dimensões dos já existentes (crescimento sk). A evolução no tamanho desses qds é limitada e a relaxação das ilhas coerentes (pontos-quânticos) ocorre quando a espessura nominal depositada atinge cerca de 3,4 MC [7]. Todas as amostras deste trabalho limitam-se a espessuras nominais inferiores a esta e, por isso, as ilhas tridimensionais são todas coerentes, *i.e.*, tensas: têm o parâmetro de rede do substrato.

3.1 Descrição das amostras

As várias amostras utilizadas neste trabalho diferem entre si pelo estágio evolutivo em que os pontos-quânticos se encontram e referir-nos-emos a esse estágio em termos da espessura nominal de InAs (d_{InAs}) depositada durante o crescimento das amostras. Desta forma, poderemos abranger todos os estágios evolutivos dos qds (capítulo 2), desde as primeiras estruturas precursoras (q3ds) até a sua completa formação, quando já apresentam grande regularidade de tamanho e forma. Utilizaremos cinco amostras com espessuras nominais de

1,00 MC, 1,50 MC, 1,75 MC, 2,00 MC e 2,50 MC, todas com a seguinte estrutura básica (tabela e figura 3.1):

- **Substrato** comercial semi-isolante de GaAs com orientação cristalográfica (001);
- **Buffer** de 500 Å de GaAs para melhorar a qualidade da superfície do substrato: O substrato possui rugosidade de algumas centenas de angströms, o que não é bom, pois nosso estudo envolve camadas de apenas alguns angströms. Com esta **camada de preenchimento** (*buffer*) a rugosidade da amostra cai para duas monocamadas aproximadamente;
- **Super-rede** (SR) composta por 10 períodos de AlAs/GaAs, cada qual com 5 monocamadas de AlAs e 10 de GaAs, cuja finalidade é evitar a migração de contaminantes do substrato para a região-ativa (a seguir) da estrutura. Esta camada têm aproximadamente 840 Å de espessura;
- A **barreira anterior**, com 2000 Å de GaAs, afasta a região-ativa da região do substrato, além de reduzir ainda mais a rugosidade da amostra;
- A chamada região-ativa (fig. 3.1) inicia-se com uma monocamada de GaAs dopada com silício (camada **δ -Si**), com concentração nominal (n_{Si}) de átomos dopantes igual a $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (incerteza de 10%);
- Segue-se a **Camada de espaçamento 1** (*spacer-layer*), de 70 Å de GaAs, separando a camada δ -Si do poço-quântico de InGaAs;
- O **poço-quântico** de $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ ($y = 16,534\%$, proporção atômica), com espessura de 100 Å, constitui o principal canal de condução da heteroestrutura. O índice de proporção atômica (y) será omitido daqui para frente pois é constante em todas as amostras utilizadas. Assim, quando escrevermos InGaAs estaremos, na verdade, querendo dizer $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$;
- **Camada de espaçamento 2** (*spacer-layer*), de 80 Å de GaAs, separando o qw dos pontos-quânticos;
- Uma camada de InAs com espessura d_{InAs} própria para cada amostra (veja a tabela 3.1). É esta camada que contém a *wetting-layer* e os **pontos-quânticos** (ou seus precursores) em diferentes dimensões e concentrações. Aqui termina a região-ativa;
- A **barreira posterior** (500 Å de GaAs) separa a camada de InAs da cobertura (a seguir) e da superfície da amostra;
- Finalmente, a **cobertura** consiste numa camada de 100 Å de GaAs uniformemente

3 As amostras

dopada com aproximadamente $1,0 \times 10^{17}$ átomos de silício por cm^3 . Esta camada têm por finalidade evitar a depleção dos portadores da região-ativa: Os elétrons fornecidos por esta dopagem servem para saturar as ligações pendentes na superfície, os chamados **estados de superfície**. Caso contrário, os elétrons fornecidos pela camada δ -Si seriam utilizados para isso e o gás de elétrons no poço de InGaAs teria a sua concentração reduzida. Mesmo assim, veremos mais a frente (capítulo 6) que parte dos elétrons fornecidos pela dopagem delta migram para a superfície.

A descrição acima é resumida e complementada pela tabela 3.1 e graficamente representada pela figura 3.1.

Além das cinco amostras do conjunto descrito, outras três (amostras-referência) serão analisadas. Elas possuem estruturas idênticas à descrita anteriormente, exceto pelos detalhes que seguem: A primeira não apresenta a camada de InAs, ou seja, essa amostra contém apenas o poço-quântico de InGaAs e a dopagem delta à sua esquerda (veja a figura 3.1). Esta será a amostra-referência das medidas de transporte elétrico (seções 4.1 e 4.2) e freqüentemente a citaremos como “a amostra com zero monocamadas;” A segunda não apresenta apenas a dopagem, ou seja, não possui elétrons extrínsecos. Ela será utilizada como referência para as medidas de fotoluminescência. Finalmente, a última amostra-referência não apresenta a dopagem delta (não possui elétrons extrínsecos na banda de condução) e seu crescimento foi finalizado na camada de InAs, com $d_{\text{InAs}} = 2,5^1$ (não possui *barreira posterior* nem *cobertura*). Por isso, os qds estão na superfície, o que nos possibilita analisá-los morfológicamente através da microscopia de força atômica (AFM, *atomic force microscopy*; Veja a seção 4.4).

Daqui para frente, referir-nos-emos a cada uma das amostras utilizadas neste trabalho pela sua espessura nominal de arseneto de índio. Então, por exemplo, quando quisermos citar a amostra que possui 1,50 monocamadas, diremos apenas “a amostra 1,50 MC.” Com relação às amostras-referência, não haverá dúvida em dizer apenas “a amostra-referência” por que o contexto explicará qual das duas a que nos referimos. Especialmente no caso da amostra-referência das medidas de transporte (aquela com $d_{\text{InAs}} = 0$), poderemos, alternativamente, referirmo-nos a ela por 0 MC. Finalmente, será considerado equivalente dizer, e.g., 1,5 ou 1,50 monocamadas: A incerteza na espessura nominal de qualquer monoca-

¹A unidade da espessura nominal da camada de InAs (d_{InAs}) será sempre *monocamadas* (MC) e, portanto, não haverá ambiguidade quando não apresentarmos explicitamente a unidade junto com o valor numérico. Faremos isso freqüentemente apenas para não poluir visualmente o texto.

3.1 Descrição das amostras

Tabela 3.1: Resumo das características das heteroestruturas utilizadas neste trabalho: Os valores de d_{InAs} são 1,0 MC, 1,5 MC, 1,75 MC, 2,0 MC e 2,5 MC, cada um referente a uma amostra (conforme notação apresentada no texto). A temperatura apresentada na coluna à direita é aquela utilizada durante o crescimento e as camadas em azul compreendem a **região-ativa**.

Camadas	Espessuras (Å)	Observações	Temperaturas (°C)
GaAs	Substrato semi-isolante (001)		
GaAs	500	<i>Buffer</i>	570
$[(\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_{10}] \times 10$	840	Super-rede (SR)	585
GaAs	2 000	Barreira anterior	570
GaAs : Si	~ 1 MC	$n_{\text{Si}} = 4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$	600
GaAs	70	<i>Spacer-layer 1</i>	520
$\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$	100	qw ($y = 16,534\%$)	520
GaAs	80	<i>Spacer-layer 2</i>	520
InAs	d_{InAs} (MC)	QDS	520
GaAs	500	Barreira posterior	520
GaAs : Si	100	$n_d = 1,0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$	520

Figura 3.1: Ilustração da heteroestrutura utilizada neste trabalho. O crescimento se dá da esquerda para a direita e neste sentido todas as camadas estão em escala. No plano perpendicular, as camadas foram ligeiramente “desalinhadas” para que o leitor possa identificá-las com maior facilidade. As camadas em vermelho são as regiões de GaAs dopado com silício (δ -Si e a cobertura); o poço-quântico de InGaAs é apresentado em verde, os pontos-quânticos em azul e o padrão de listras a esquerda é a super-rede, tendo cada período aproximadamente 84 Å.

mada crescida pela técnica MBE em nosso laboratório reside na segunda casa decimal e não nos preocuparemos com isso.

3.2 Preparando as amostras

O preparo da amostra destinada ao experimento de AFM consiste apenas em fazermos os devidos cortes para que ela caiba no porta-amostras do equipamento utilizado. Esse processo é tão simples quanto interessante: Primeiro, fazemos um pequeno vinco (1 mm é suficiente) na posição e direção desejadas da amostra (figura 3.2) com um cortador a diamante (*diamond-cutter*). Depois, basta pressionar com, e.g., um palito-de-dentes sobre a linha imaginária dada pelo prolongamento do vinco que a amostra quebrará segundo essa linha. A quebra ocorre desta maneira por que ao fazermos o vinco, fragilizamos a amostra naquela direção. É como quando cortamos um plástico qualquer: Se utilizarmos um estilete para marcar uma direção, o corte se torna mais fácil e regular.

Figura 3.2: Os cortes nas amostras são feitos numa direção cristalográfica definida pelo vinco. O palito-de-dentes, usado para pressionar a amostra, é particularmente bom por que não machuca a amostra.

Figura 3.3: Uma vista em planta da barra-Hall. Somente a região interna a ela permite o fluxo de corrente elétrica e a região de interesse (área amarela) é acessada por contatos instalados nas periferias (ponto F). As medidas de tensão são feitas entre B e C para experiências do efeito Hall e entre B e E para Shubnikov-de Haas. A corrente é aplicada através dos terminais em A e D.

As medidas de transporte (efeitos Hall e Shubnikov-de Haas, seções 4.1 e 4.2, respectivamente), por outro lado, exigem uma atenção especial: Neste tipo de experimento, é crucial que conheçamos a geometria da amostra. No nosso caso, por exemplo, precisamos trabalhar numa pequena região onde possamos assumir que a densidade de corrente que percorrerá a amostra seja uniforme, ou seja, que $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{constante}$. Uma geometria já bastante difundida neste sentido é a barra-Hall (uma *alternativa* aos contatos de Van der Pauw), ilustrada em escala na figura 3.3: Somente na região em forma de “I” é permitido o fluxo de corrente elétrica e, apesar disso, a **região de interesse** consiste apenas na área hachurada no centro, medindo $200\text{ }\mu\text{m} \times 500\text{ }\mu\text{m}$. A corrente, que será fornecida por uma fonte de tensão, percorre a amostra no sentido D→A (capítulo 5) e as medidas de tensões serão feitas entre B e C para as experiências do efeito Shubnikov-de Haas e entre B e E para o efeito Hall (veja os capítulos 4 e 5 para maiores detalhes).

A implantação da barra-Hall nas amostras foi feita através de um processo litográfico no Laboratório de Microeletrônica (LME)² da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, e o ilustramos qualitativamente na figura 3.4: Primeiramente devemos limpar a amostra com acetona e secá-la com nitrogênio gasoso (fig 3.4(a)); Depois, fixamo-la (a vácuo) pela base (substrato) em uma aparelho chamado *spinner* (que pode ser grosseiramente comparado a uma centrifugadora), pingamos algumas gotas de revelador fotosensível (*fotoresist*) e fazemo-la girar durante algum tempo. Este passo deve ser feito sob luz amarela para que o *fotoresist* não seja sensibilizado incorretamente. Com isso o *fotoresist* fica espalhado uniformemente pela superfície da amostra (fig. 3.4(b)); Em seguida, colocamos a amostra em forno a $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ por vinte minutos; Depois posicionamos a máscara da barra-Hall sobre a amostra (fig. 3.4(c)) e incidimo-lhe luz ultra-violeta por 10 s. Deste modo, a parte do *fotoresist* que não estava protegida pela máscara é sensibilizada; Agora, mergulhamos a amostra no revelador por aproximadamente trinta segundos, imergimo-la em água e a secamos novamente com N_2 . A revelação extrai o *fotoresist* não-sensibilizado (figura 3.4(d)) e, assim, o ataque químico a seguir não agride a região protegida pelo *fotoresist* sensibilizado (figura 3.4(e)). O tempo do ataque químico depende da amostra e dos objetivos que queremos atingir. No caso de heteroestruturas como a nossa, entretanto, uma regra prática é usar um minuto de ataque para cada $1000\text{ }\text{\AA}$; Finalmente, retiramos o *fotoresist*: A barra-Hall está instalada (figura 3.4(f)) e a amostra está pronta para receber os contatos.

²Parte do Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos, PSI.

3 As amostras

(a) O primeiro passo na instalação da barra-Hall é a limpeza da amostra.

(b) Daí, segue-se a deposição e o espalhamento do fotore Resist.

(c) A máscara deixa parte do fotore Resist exposto à luz ultra-violeta, sensibilizando-o.

(d) Em seguida, a revelação extrai o fotore Resist que não foi sensibilizado.

(e) Agora procede-se o ataque químico, que corroe as regiões desprotegidas.

(f) Finalmente, retira-se o fotore Resist e a amostra está pronta para receber os contatos.

Figura 3.4: O processo litográfico de aplicação da barra-Hall sobre as amostras é o primeiro passo em direção à investigação das propriedades de transporte elétrico. Note o leitor que as camadas da heteroestrutura não estão representadas, e que as dimensões não estão em escala.

Figura 3.5: Representação de como a barra-Hall instalada nos permite controlar a geometria da amostra: Qualquer condução elétrica através da amostra (por qualquer um dos terminais) fica agora limitada ao interior da barra-Hall e, em especial, à região de interesse (fig. 3.3).

Uma ilustração representativa de como a barra-Hall se relaciona com as camadas da heteroestrutura pode ser vista na figura 3.5 (compare-a com a figura 3.1). Note, contudo, que embora a direção do crescimento tenha sido mantida em escala, a direção perpendicular a esta (a do plano de dopagem planar) não o foi.

Agora precisamos instalar os contatos metálicos para que a heteroestrutura torne-se acessível aos equipamentos de medidas. Para isso, cortamos pequenos pedaços de In (da ordem de 1 mm) e posicionamo-los em cada uma das bordas externas à barra-Hall, o mais longe possível da região de interesse (ponto F na figura 3.3). Em seguida, colocamos as amostras numa atmosfera saturada de nitrogênio gasoso e aquecemo-las por 4 minutos à temperatura de 300 °C. A esta temperatura, a taxa de difusão do índio é tal que em quatro minutos toda a heteroestrutura terá sido atingida por ele (na direção vertical). Assim, um equipamento qualquer que se conecte a esse contato estará também conectado à camada δ -silício, ao poço-quântico de InGaAs e aos qds (entre outras camadas).

Finalmente somos capazes de fazer fluir corrente elétrica pela heteroestrutura segundo uma geometria conhecida: a região de interesse. Mas para facilitar o manuseio das amostras e evitarmos tocá-las com frequência maior que a necessária, instalamos pequenos terminais de cobre, tipicamente de 1 ou 2 centímetros de comprimento. Este passo é bastante crítico

3 *As amostras*

por que é feito à mão, com ferro de solda comum: Existe um risco grande de, acidentalmente, espalharmos o índio dos contatos pela superfície, criando curto-circuitos indesejáveis. Além disso, devido às diminutas extensões das amostras, ocasionalmente ocorre de esses terminais não ficarem apropriadamente fixados, podendo originar maus contatos e/ou conexões não puramente ôhmicas (este problema pode ser evitado monitorando a fase entre os sinais aplicado e medido, conforme explicamos no capítulo 5).

4

As técnicas utilizadas

Para estudar e compreender as estruturas que apresentamos no capítulo anterior, utilizaremos três técnicas experimentais já bastante difundidas, cujos princípios teóricos serão agora apresentados. As duas primeiras são técnicas de transporte elétrico e, por isso, fornecem-nos informações relativas à condução de corrente elétrica, como a quantidade de portadores que contribuem para este processo e a velocidade com que o fazem. Elas estão baseadas nos efeitos Hall clássico e Shubnikov-de Haas; Finalmente, utilizaremos a microscopia de força atômica para analisar morfologicamente os pontos-quânticos na superfície de uma amostra crescida especialmente para este fim (veja o capítulo anterior). Deste estudo sere-mos capazes de avaliar suas dimensões e a densidade superficial deles, além da rugosidade da superfície. De quebra, obteremos imagens representativas dos qds que nos permitirão avaliar qualitativamente a homogeneidade da distribuição espacial.

4.1 O efeito Hall

A figura 4.1 é uma ampliação da região de interesse (fig. 3.3) vista em perspectiva e serve para ilustrar o efeito Hall: Devido ao campo elétrico E_x aplicado na região de interesse, os elétrons da amostra, impelidos pela força elétrica ($-eE_x$), dão origem à densidade de corrente j_x . Ao aplicarmos um campo magnético B perpendicularmente a esta corrente (na direção z , por exemplo), a força magnética ($-e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, onde $\mathbf{v}$ é a velocidade de arrasto dos elétrons) passa a agir sobre esses elétrons empurrando-os para o lado direito da amostra (fig. 4.1); mas este movimento é limitado pela dimensão da amostra nesta direção e, por isso, os elétrons vão se acumulando ali. À medida que isso ocorre, o excesso de elétrons à direita e o conseqüente déficit à esquerda geram um campo elétrico E_y no sentido de conter este movimento. O equilíbrio ocorre quando a força elétrica gerada pelo desequilíbrio de cargas dentro da amostra balanceia a força magnética:

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E}_y + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \mathbf{0}.$$

Nessa situação, $E_y \doteq E_H$ é conhecido como campo Hall e o fenômeno de seu aparecimento é o efeito Hall, descoberto em 1879 por Edwin Herbert Hall.

No caso de portadores do tipo-p (buracos), o sentido da velocidade de arrasto é invertido e (por isso) a força magnética permanece inalterada. Logo, no lado direito da amostra passam a se acumularem os buracos e o sentido de E_H também inverte. De fato, o sentido de E_H costuma ser utilizado para verificar qual o tipo de portador que domina a condução.

A teoria de Drude fornece a descrição matemática mais simples deste fenômeno, mas peca em alguns aspectos teóricos importantes, dentre os quais destacamos o **tempo de relaxação** ($\bar{\tau}$). Classicamente, $\bar{\tau}$ é definido como o tempo médio entre duas colisões sucessivas de um elétron com os *íons* da rede cristalina. No entanto, o paradigma quântico mostra [2] que esta definição é incompleta e incorreta, além de não nos permitir relacionar $\bar{\tau}$ com as possíveis maneiras (mecanismos) com que essas colisões ocorrem. Por esta razão, daremos a seguir uma breve descrição semi-clássica do efeito Hall que nos permita contornar esses problemas e, ao mesmo tempo, evitar (em parte) o formalismo da teoria quântica.

Na teoria de Sommerfeld [2], as equações do movimento de *um* elétron num orbital $\mathbf{k}$ de uma sub-banda qualquer (suponhamos, primeiramente, que a condução elétrica decorra da

Figura 4.1: Vista em perspectiva da região de interesse (fig. 3.3) ilustrando o efeito Hall: A força magnética gera um desequilíbrio na distribuição de carga transversal à corrente elétrica (j_x), dando origem ao chamado campo Hall (E_H) e, por conseguinte, à tensão Hall (V_H).

contribuição dessa sub-banda apenas) são

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \quad \text{e} \quad \hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

onde $\epsilon(\mathbf{k})$ é a energia desse elétron, $\mathbf{r}$ é o vetor de posição; $\mathbf{k}$ o de onda e $\mathbf{F}$ é a força de Lorentz. No caso de uma banda parabólica, onde $\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$, obtemos a equação clássica do movimento de um elétron sujeito à força de Lorentz: $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{p}/m \times \mathbf{B})$. Mas esta expressão não leva em conta as colisões (espalhamentos) desse elétron. Para fazermos isso, adicionamos a $\mathbf{F}$ a assim rotulada **força de espalhamento** ($-\mathbf{p}/\bar{\tau}$), e obtemos [2]

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{p}}{m} \times \mathbf{B} \right) - \frac{\mathbf{p}}{\bar{\tau}}. \quad (4.1)$$

$1/\bar{\tau}$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer algum espalhamento (por qualquer que seja o mecanismo) *que prejudique* o fluxo de elétrons que dá origem à corrente elétrica (j_x na figura 4.1).¹ Consequentemente, $\mathbf{p}/\bar{\tau}$ representa a taxa de variação do momento $\mathbf{p}$ devido a todos esses mecanismos. Essas conclusões ainda são idênticas às aquelas obtidas a partir da teoria de Drude. No entanto, a vantagem da presente formulação não

¹Esse é um dos erros do modelo de Drude: Nele, $\bar{\tau}$ é o tempo médio entre duas colisões sucessivas, independentemente do resultado dessa colisão. Do ponto de vista quântico, entretanto, nem todo espalhamento prejudica a corrente elétrica (veja a discussão na seção 4.2, página 40).

4 As técnicas utilizadas

reside aí, mas no fato de que agora podemos relacionar $\bar{\tau}$ com os diversos mecanismos de espalhamento possíveis (impurezas, defeitos, centros coulombianos, etc.) através da equação de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col.}} = 0, \quad (4.2)$$

onde $f \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ é a função de distribuição de Fermi-Dirac perturbada e a última parcela é o **termo de colisão**, que descreve as variações de f devido aos espalhamentos. De fato, o tempo de relaxação é uma aproximação (conhecida como **aproximação do tempo de relaxação**) do termo de colisão para espalhamentos elásticos.² No caso do arseneto de gálio, sabe-se [28] que esta aproximação é aceitável para temperaturas inferiores a 100 K, como é o nosso caso. Por conta disto, utilizaremos esta aproximação daqui para frente. Para temperaturas maiores que 100 kelvin o principal mecanismo de espalhamento envolve fônons ópticos de altas energias e, por conseguinte, a aproximação do tempo de relaxação não se aplica.

Por simplicidade, tomemos $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ (fig. 4.1) e determinemos $\mathbf{p}$ a partir da equação (4.1) para o estado estacionário, dado pela condição $d\mathbf{p}/dt = \mathbf{0}$ (ou seja, quando as forças elétrica, magnética e de espalhamento se equilibram e não mais modificam $\mathbf{p}$). Encontramos³

$$\frac{\mathbf{p}}{m^*} = \mathbf{v} = -\frac{e}{m^*} \frac{\bar{\tau}}{1 + \Omega^2 \bar{\tau}^2} \begin{pmatrix} 1 & -\Omega \bar{\tau} & 0 \\ \Omega \bar{\tau} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{E}, \quad (4.3)$$

onde a frequência ciclotrônica $\Omega \doteq eB/m^*$ está associada com a formação dos chamados **níveis de Landau**, que não aparecem explicitamente nesta formulação semi-clássica (veja a seção 4.2).

Nesta equação, o campo elétrico é acessível experimentalmente por intermédio da diferença de potencial entre os pontos B e C (região de interesse, fig. 3.3), mas $\mathbf{v}$ é uma incógnita. Para contornarmos isso, lembremo-nos de que a corrente elétrica — mensurável

²Nesses casos, $\bar{\tau} \equiv \bar{\tau}(\epsilon)$ e ϵ é a energia (inicial e final) desse processo.

³Isto deve ser feito escrevendo as três equações (componentes x , y e z) separadamente, resolvendo-as para p_x , p_y e p_z (com $\dot{p}_x = \dot{p}_y = \dot{p}_z = 0$: estado estacionário) e reescrevendo-as na forma vetorial.

— deriva da velocidade de arrasto [28]:

$$\mathbf{j} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = -n_{3D} \mathbf{e} \frac{\int_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}}{\int_{\mathbf{k}} f^0(\mathbf{k}) d\mathbf{k}}, \quad (4.4)$$

onde f (f^0) é a função de distribuição de Fermi-Dirac *perturbada* (*não perturbada*) pela presença dos campos elétrico e magnético e pelos processos de espalhamento. Dito de outra forma, $f(\mathbf{k})$ é a probabilidade de o estado $\mathbf{k}$ estar ocupado na presença dessas perturbações; n_{3D} é a concentração volumétrica de elétrons na sub-banda em questão (lembre-se de que estamos considerando apenas uma); $\mathbf{j} = (j_x, j_y, j_z)$ e o fator 2 no numerador reflete a degenerescência de *spin* dos elétrons.

Note que, a partir da expressão anterior, deixamos de “olhar” para apenas um elétron e passamos a considerar todos aqueles pertencentes à sub-banda que contribui para a condução. Isto decorre do sinal de integração.

A densidade de corrente é algo acessível experimentalmente e é possível unirmos (4.3) e (4.4) de modo a obtermos um resultado prático. Tudo o que nos falta para conseguirmos isso é $f(\mathbf{k})$ que, a rigor, deve ser determinada a partir da equação (4.2). Alternativamente, podemos supor que as perturbações que levam a distribuição de Fermi-Dirac de $f^0(\epsilon(\mathbf{k}))$ para $f(\mathbf{k})$ são pequenas e, neste caso, podemos obter $f(\mathbf{k})$ a partir de uma expansão de $f^0(\epsilon)$ em torno de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &\approx f^0(\epsilon) + \mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f^0(\epsilon) \\ &\approx f^0(\epsilon) + 2\epsilon \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Agora levamos (4.3) e (4.5) até (4.4) e concluímos que

$$\mathbf{j} = -n_{3D} \mathbf{e} \langle \mathbf{v} \rangle, \quad \text{com} \quad \langle \xi(\epsilon) \rangle = \frac{\int_0^\infty \xi(\epsilon) \epsilon^{3/2} \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} d\epsilon}{\int_0^\infty \epsilon^{3/2} \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} d\epsilon}.$$

Este resultado é muito parecido com aquele proposto por Drude ($\mathbf{j} = -n_{3D} \mathbf{e} \mathbf{v}$), mas não passa da aparência: Agora cada elétron num orbital $\mathbf{k}$ contribui diferentemente para a corrente elétrica de outro num orbital $\mathbf{k}'$. Mais ainda: todos os experimentos de transporte elétrico deste trabalho foram executados a baixíssimas temperaturas (1,4 K) e, nesta situa-

4 As técnicas utilizadas

ção, $\partial f^0 / \partial \epsilon \approx -\delta(\epsilon - \epsilon_F)$, sendo ϵ_F a energia de Fermi.⁴ Conseqüentemente, $\langle \xi(\epsilon) \rangle \approx \xi(\epsilon_F)$ e, então, $\mathbf{j} = -n_{3D} e \mathbf{v}(\epsilon_F)$. Isto é, apenas os elétrons nas imediações do nível de Fermi (ϵ_F) contribuem para a condução elétrica! Agora, trazemos (4.3) para cá e concluímos que

$$\mathbf{j} = \frac{n_{3D} e^2}{m^*} \frac{\bar{\tau}}{1 + \Omega^2 \bar{\tau}^2} \begin{pmatrix} 1 & -\Omega \bar{\tau} & 0 \\ \Omega \bar{\tau} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{E} \doteq \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{E}, \quad (4.6)$$

onde $\bar{\tau} \equiv \bar{\tau}(\epsilon_F)$.

Lembre-se de que, no início desta seção, dissemos que o movimento dos elétrons na direção y (fig. 4.1) é limitado pelas dimensões da amostra e que o equilíbrio ocorrerá quando não houver mais fluxo de elétrons nesta direção, ou seja, quando $j_y = 0$. Esta imposição nos leva a

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}{\sigma_{xx}} E_x \quad (j_y = 0) \\ &= \underbrace{n_{3D} e}_{\sigma} \overbrace{\frac{e \bar{\tau}}{m^*}}^{\bar{\mu}} E_x, \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde $\bar{\mu} \doteq \bar{\mu}(\epsilon_F) = e \bar{\tau}(\epsilon_F) / m^*$ é a **mobilidade de transporte** e σ é a **condutividade** da amostra. Além disso, uma quantidade convenientemente definida é o **coeficiente Hall**, $R_H \doteq E_y / (j_x B)$, que na mesma condição acima resulta

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \quad (j_y = 0) \\ &= -\frac{1}{n_{3D} e}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

4.1.1 Concentração de portadores e mobilidade de transporte

Supondo que j_x seja uniforme na região de interesse (figura 3.3), podemos escrever $j_x = I / (l_y l_z)$, sendo I a corrente que percorre a amostra. Além disso, $V_H \approx l_y E_y$ (Lembre-se de que $E_y \doteq E_H$ no equilíbrio), onde V_H é a diferença de potencial entre os pontos B e E na

⁴Devido à baixa temperatura na qual trabalhamos, trataremos os conceitos de potencial químico (ξ) e energia de Fermi como sinônimos.

figura 3.3, chamada de **tensão Hall**. Então

$$R_H \doteq \frac{E_y}{j_x B} = \frac{V_H/l_y}{I/(l_y l_z) B} = \frac{l_z V_H}{I B},$$

e fazendo-nos valer do resultado (4.8), segue que

$$n \doteq n_{3D} l_z = -\frac{I B}{e V_H} \quad (\text{SI}). \quad (4.9)$$

Perceba a diferença entre n_{3D} e n : O primeiro é a concentração volumétrica de portadores na amostra, enquanto n , dita a **concentração bidimensional** ou **Hall**, já leva em consideração o fato de que os portadores estão confinados numa região de tamanho l_z (na direção z). A rigor, este comprimento não é a espessura da amostra, como a figura 4.1 pode sugerir, mas proporcional à extensão espacial da função de onda desses portadores na direção do confinamento.

Assim, tudo o que temos de fazer para determinarmos n é desenhar o gráfico $V_H \times B$ e ajustar-lhe uma reta:

$$n = n_{\text{ef}} = \frac{0,624}{\text{coeficiente angular de } V_H \times B}, \quad (4.10)$$

com $[n] = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $[I] = 1 \text{ } \mu\text{A}$ (veja o capítulo 5), $[V_H] = \text{mV}$ e $[B] = \text{T}$. O sinal negativo da equação (4.9) pode ser ignorado completamente por que sabemos que os portadores de nossa amostra são elétrons.⁵ Quando mais de uma sub-banda contribui para a condução, esta expressão dá a **concentração efetiva** n_{ef} de portadores da amostra (próxima seção).

Uma vez determinada a concentração, a mobilidade de transporte segue de j_x (equação (4.7)):

$$\underbrace{\rho = \frac{1}{\sigma} = R_{BC} \frac{l_y l_z}{l_x}}_{\text{segunda lei de Ohm}} \Rightarrow \frac{1}{n e \bar{\mu}} = R_{BC} \frac{l_y l_z}{l_x} \Rightarrow \frac{l_x}{l_y} \frac{1}{\underbrace{(n_{3D} l_z)}_n e R_{BC}} = \bar{\mu}$$

e, como $R_{BC} = V_{BC}/I$ é a resistência entre os pontos B e C em campo nulo,

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_{\text{ef}} = \frac{I (l_x/l_y)}{n e V_{BC}} = \frac{15\,605,49}{n V_{BC}}, \quad (4.11)$$

⁵Isto foi imposto durante o crescimento, quando dopamos com silício o GaAs(001): Veja a seção 3.1, página 22.

4 As técnicas utilizadas

com $[\bar{\mu}] = \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$, $[I] = 1 \text{ } \mu\text{A}$, $[n] = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $[V_{BC}] = \text{mV}$. $l_x = 500 \text{ } \mu\text{m}$ e $l_y = 200 \text{ } \mu\text{m}$ na barra-Hall utilizada (veja a figura 3.3). $\bar{\mu}_{ef}$ é a **mobilidade efetiva** (a seguir).

Tudo o que fizemos até aqui (e tudo o que vier a seguir) foi realizado para uma banda parabólica ($\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$) ou, mais precisamente, na **aproximação da banda parabólica**, e não é difícil ver por que isso foi possível: Suponha, por um instante, que de fato nossas sub-bandas sejam parabólicas. Então, a relação entre o vetor de onda de Fermi e a concentração de portadores no caso de sistemas bidimensionais como o nosso (veja o capítulo 6) é $k_F^2 = 2\pi n$. Por outro lado, o vetor do espaço recíproco que define os limites da primeira zona de Brillouin ($\mathbf{k}_B$) tem módulo aproximadamente igual π/a , onde a é o parâmetro de rede. No nosso caso, especificamente, $a \approx 5 \text{ cm}^{-8}$ e veremos que as concentrações são da ordem de 10^{12} cm^{-2} . Então

$$\frac{k_B}{k_F} \approx \frac{\pi/a}{\sqrt{2\pi n}} \approx 25.$$

Destarte, o nível de Fermi está próximo do fundo da banda ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$) e podemos aproximá-la (a banda) por uma série de Taylor em torno de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, o que corresponde à aproximação da banda parabólica.

4.1.2 Condução em várias sub-bandas: Concentração e mobilidade efetivas

A densidade de corrente dada pela equação (4.4) refere-se a uma sub-banda apenas, conforme procuramos deixar claro desde o início. Isto significa que os resultados obtidos na seção anterior referem-se aos processos de condução elétrica que ocorrem devido à contribuição de apenas uma sub-banda. No entanto, este não costuma ser o caso, especialmente em heteroestruturas como a nossa, onde o confinamento dos portadores dá origem a um conjunto de estados (sub-bandas) que não pode ser interpretado como um *quasi*-contínuo, à imagem do que se costuma fazer com as bandas de valência e condução nos *bulks*. Então, para levarmos em consideração esta nova realidade precisamos somar a densidade de corrente $\mathbf{j}_s$ (devido à s -ésima sub-banda) em todas as sub-bandas ocupadas, assim:

$$\mathbf{j} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{\mathbf{k}} \mathbf{e} \mathbf{v}_s(\mathbf{k}) f_s(\mathbf{k}) d\mathbf{k}.$$

Com isso, ao invés de fornecerem a concentração e a mobilidade de transporte de *uma* sub-banda, as equações (4.10) e (4.11) dão a concentração (n_{ef}) e a mobilidade de transporte ($\bar{\mu}_{\text{ef}}$) *efetivas*, respectivamente. Então, e.g., se a condução elétrica em um material ocorre através de 5 sub-bandas, cada qual com concentração n_s e mobilidade de transporte $\bar{\mu}_s$, este material comportar-se-á como se a condução ocorresse por intermédio de apenas uma sub-banda com concentração de portadores n_{ef} (dada pela equação (4.10)) e mobilidade de transporte $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ (dada por (4.11)). Além do mais, podemos mostrar que [28, 29]

$$n_{\text{ef}} = \frac{(\sum_s n_s \bar{\mu}_s)^2}{\sum_s n_s \bar{\mu}_s^2} \quad \text{e} \quad \bar{\mu}_{\text{ef}} = \frac{\sum_s n_s \bar{\mu}_s^2}{\sum_s n_s \bar{\mu}_s}. \quad (4.12)$$

As concentrações e mobilidades de transporte de cada sub-banda não são diretamente mensuráveis pelo método do efeito Hall (que fornece apenas n_{ef} e $\bar{\mu}_{\text{ef}}$), mas podem ser obtidas algebricamente quando apenas *duas* sub-bandas participam da condução [28]. Visando resolver este problema, em 1987 Beck e Anderson [30] propuseram um espectro de mobilidades e concentrações capazes de determinarem as mobilidades e concentrações de estruturas com mais de duas sub-bandas a partir de medidas do efeito Hall. Mas infelizmente não poderemos utilizar nem um nem outro método: Primeiro por que, conforme veremos no capítulo 6, nossas amostras possuem três sub-bandas ocupadas; E segundo por que elas apresentam um comportamento conhecido como **magnetoresistividade negativa** [31, 32, 33], um efeito não considerado por Beck e Anderson. Em verdade, na maioria das medidas efetuadas não seremos capazes de determinar $\bar{\mu}_s$, tendo de nos contentar com $\bar{\mu}_{\text{ef}}$.

Finalmente, um pequeno comentário acerca da notação utilizada: A barra indica quantidades relacionadas ao transporte elétrico e visa distinguir o tempo de relaxação ($\bar{\tau}_s$) e a mobilidade de transporte ($\bar{\mu}_s$), obtidos do efeito Hall, do tempo de espalhamento (τ_s) e da mobilidade quântica (μ_s), obtidos do efeito Shubnikov-de Haas (próxima seção). O índice “s” designa a sub-banda. Os tempos de espalhamento e relaxação e as mobilidades quânticas e de transporte são, essencialmente, equivalentes, já que $\mu_s \doteq e\tau_s/m_s^*$ e $\bar{\mu}_s \doteq e\bar{\tau}_s/m_s^*$. Note ainda que não existe uma tal diferenciação no caso das concentrações de portadores e que, por isso, não há sentido em colocarmos uma barra em n_s e n_{ef} .

Figura 4.2: Em baixos campos magnético (à esquerda), a órbita ciclotrônica dos elétrons na amostra não se fecha dentro da amostra e, nesta situação, os níveis de Landau não se formam coerentemente. No entanto, como $r_s \propto 1/B$, quando B é suficientemente intenso (à direita), r_s torna-se menor que l_y , a órbita se fecha dentro da amostra e a formação dos níveis de Landau ocorre coerentemente.

4.2 O efeito Shubnikov-de Haas

Além do fenômeno Hall, uma outra consequência da aplicação de um campo magnético sobre um gás de elétrons é a formação dos chamados **níveis de Landau**, os quais dão origem às oscilações de resistividade (ou condutividade) alcunhadas de efeito Shubnikov-de Haas, descoberto em 1920 por Lev Vasiljevich Shubnikov e Wander Johannes de Haas (em colaboração).

Basicamente, os níveis de Landau são estados de um oscilador harmônico simples cuja frequência é a ciclotrônica ($\Omega_s = eB/m_s^*$, onde “s” identifica a s-ésima sub-banda): Na seção 4.1, vimos que os elétrons que percorrem a região de interesse (figura 3.3) são defletidos transversalmente à corrente elétrica (j_x) pela força magnética. Isto ocorre segundo um arco de circunferência de raio $r_s = p_s/(eB) = v/\Omega_s$ (raio de Larmor). Quando B é suficientemente intenso, este raio torna-se menor que a dimensão l_y da amostra, a órbita se fecha (fig. 4.2) dentro dela e um oscilador harmônico se forma. Consequentemente, a formação dos níveis de Landau está condicionada à relação $l_y \gg r_s$. No nosso caso, $l_y = 200 \mu\text{m}$ e $v = v_F = \hbar k_F = \hbar \sqrt{2\pi n}$ (n é a concentração bidimensional de elétrons), de sorte que o campo magnético mínimo necessário para que ocorra a formação dos níveis de Landau é de 20 G. Embora este seja um campo intenso (o da Terra é 0,3 G no equador), esta condição é satisfeita em praticamente todos os valores de campo investigados (entre zero e $10 \text{ T} = 10^4 \text{ G}$) e iremos ignorá-la daqui para frente.

Uma vez formados os níveis de Landau, o conjunto de números quânticos que descrevem

os estados do 2DEG muda de $(s, \mathbf{k})$ ⁶ para (s, l, k_z) :

$B = 0$ (2DEG)	$B \neq 0$ (níveis de Landau)
$\epsilon_s(\mathbf{k}) = \epsilon_s + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_s^*}$	$\epsilon_{s,l}(k_z) = \epsilon_s + \left(l + \frac{1}{2}\right) \hbar \Omega_s + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_s^*}$

Aí, ϵ_s é a energia de fundo de banda da s -ésima sub-banda e $l = 0, 1, 2, \dots$ identifica um nível de Landau. k_z não se altera com a aplicação do campo pois $\mathbf{B} \parallel \mathbf{k}_z$ e, além disso, podemos considerá-lo nulo ($k_z = 0$) por que não há fluxo de elétrons nesta direção (no estado estacionário), posto que as funções de onda estão confinadas em z (veja o capítulo 6 para maiores detalhes) e que não há campo elétrico nesta direção.⁷

Os níveis de Landau possuem degenerescência $D = 2eB/h$ (por unidade de área) [2, 3, 34]. onde h é a constante de Planck. Ora, se uma sub-banda qualquer possui n_s elétrons, serão necessários $\eta = n_s/D$ níveis de Landau para acomodá-los todos (diz-se que η é o **fator de preenchimento**). Agora, note que a degenerescência é uma função linear do campo e, portanto, que cresce conforme aumentamos B . Como n_s permanece constante,⁸ o número de níveis de Landau necessário para instalá-los diminui à medida que aumentamos o campo magnético, ou seja, o fator de preenchimento diminui à medida que aumentamos B . Este fenômeno é conhecido como **depopulação dos níveis de Landau**.

Mas isto não é só: O *gap* de energia entre dois níveis de Landau consecutivos é $\hbar \Omega_s$ e também cresce com o campo (pois $\Omega_s = eB/m_s^*$). Assim, o campo magnético tende a reduzir a energia do sistema por intermédio da depopulação dos níveis e, simultaneamente, aumentá-la, por consequência do aumento do *gap* de energia. Esses dois fenômenos estão ilustrados na figura 4.3 e dão origem aos efeitos Shubnikov-de Haas (oscilações de resistividade) e de Haas-van Alphen (oscilações do momento magnético): Nesta figura, as linhas tracejadas representam a evolução dos níveis de Landau com o campo e os traços horizontais cheios identificam-lhes em três situações de grande interesse (a seguir). Os pontilhados horizontais denotam os meios de *gap* e ζ é o potencial químico (ou energia de Fermi), mantido fixo por todo o volume da amostra (e não só pela região-ativa); A degenerescência (D) está representada pelo comprimento dos níveis e os círculos escuros são os elétrons.

⁶Lembre-se de que $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$.

⁷Ou seja, não há força agindo sobre os elétrons na direção z .

⁸Supõe-se que a perturbação causada pela aplicação do campo magnético não é suficiente para alterar a estrutura de bandas do material. Aliás, decorre daí também o fato de a expressão anterior não apresentar variação na forma como nos referimos às sub-bandas (índice s).

4 As técnicas utilizadas

Figura 4.3: Níveis de Landau e sua relação com o efeito Shubnikov-de Haas: As linhas tracejadas evidenciam a dependência linear da energia do l -ésimo nível de Landau com o campo magnético e as linhas cheias horizontais identificam-lhes em três situações de grande interesse para a compreensão do efeito Shubnikov-de Haas (veja o texto). O eixo D na parte inferior é a degenerescência, que também cresce com o campo magnético; Ela também é representada pelo comprimento dos níveis. ζ é o potencial químico e os círculos representam os elétrons. Note que a quantidade de elétrons não se mantém constante nas três situações ilustradas. Isto ocorre simplesmente por que esta representação não apresenta *todos* os níveis ocupados, desde $l = 0$.

A explicação completa do efeito Shubnikov-de Haas baseia-se na solução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$\mathcal{H}_0 \Psi(\mathbf{r}) = \epsilon \Psi(\mathbf{r}), \quad \text{com } \mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi, \quad (4.13)$$

sendo $\mathbf{A}$ e ϕ os potenciais vetor e escalar, respectivamente: $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ (no gauge $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) e $\mathbf{E} = -\nabla\phi$. $\mathbf{p}$ é o momento mecânico. Além de ser instrutivo, este caminho traz à tona a relação entre este fenômeno e o efeito Hall. Mas não vamos segui-lo aqui por que é demasiadamente complexo; fora do alcance deste trabalho. Ao invés disso, daremos uma descrição qualitativa simples que serve para compreender os aspectos fundamentais. Feito isso, partiremos da expressão completa da resistividade (obtida da equação acima) em busca de um método experimental de obtermos as concentrações e mobilidades quânticas das sub-bandas envolvidas nas oscilações. Ao leitor interessado no percurso completo recomendamos consultar o capítulo 7 da referência [34].

Na seção 4.1 mostramos que a densidade de corrente elétrica que percorre a amostra é proporcional à velocidade dos elétrons *no nível de Fermi*: $\mathbf{j} \propto \mathbf{v}(\epsilon_F)$, isto é, somente os elétrons nas imediações do nível de Fermi contribuem para a condução elétrica. Naquela ocasião, as sub-bandas eram um *quasi*-contínuo de estados e sempre era possível termos

$m_s^*/(\pi\hbar^2)$ elétrons (densidade de estados de um gás bidimensional de elétrons) no nível de Fermi, qualquer que fosse essa energia. Mas agora, com a aplicação do campo magnético, a densidade de estados deixa de ser constante (característica de 2DEGS) e torna-se discreta, com picos em $\epsilon_{s,l}$: Não há estados disponíveis entre dois níveis de Landau e podemos dizer, grosso modo, que a densidade de estados é uma função delta de Dirac:⁹ $D \sum_{l < \eta} \delta(\epsilon - \epsilon_{s,l})$, onde $D = 2eB/h$ é a degenerescência dos níveis de Landau e η é o fator de preenchimento.¹⁰ Assim, quando o nível de Fermi está precisamente sobre um nível de Landau (situação $B = B_0$ na figura 4.3), temos portadores e disponibilidade de estados no nível de Fermi e a condução elétrica ocorre plenamente: A condutividade (resistividade) experimenta um máximo (mínimo). Mas à medida que aumentamos o campo magnético, a energia desse nível ultrapassa ζ (já que $\epsilon_{s,l} \propto B$) e ele começa a ser depopulado (situação $B = 3B_0/2$). Com isso, diminui a disponibilidade de *estados* nas imediações da energia de Fermi e a condução é prejudicada. A condutividade (resistividade) cai (cresce) até que o nível de Fermi esteja a meio-caminho de dois estados de Landau ($B = 2B_0$): Nesta situação, a quantidade de estados nas imediações do nível de Fermi é mínima (ou nula) e a condutividade (resistividade) também é mínima (máxima). Agora, aumentar o campo magnético tem efeito contrário: A condutividade melhora por que o nível de Landau imediatamente abaixo ($l-1$ na figura 4.3) passa a se aproximar do de Fermi e tudo o que foi descrito acima se repete. Destarte, a condutividade (e a resistividade) da amostra oscila conforme variamos B . Mais que isso, esta oscilação é periódica em $1/B$ e sua frequência é proporcional à concentração de portadores dessa sub-banda: Teremos um máximo (mínimo) na condutividade (resistividade) sempre que $\zeta = (l + \frac{1}{2})\hbar\Omega_s$. Mas como $m_s^*\zeta = \frac{1}{2}\hbar^2\mathbf{k}_F^2 = \frac{1}{2}\hbar^2(2\pi n_s)$, podemos escrever

$$\frac{1}{B_l} = \left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{2e}{n_s h}. \quad (4.14)$$

Ou seja, o gráfico $1/B_l \times l$ (onde B_l são os valores de campo que correspondem a mínimos de resistividade) é uma reta e de seu coeficiente angular podemos tirar imediatamente a concentração de portadores (n_s). Note que não é necessário sabermos a que l corresponde um determinado mínimo da resistividade para fazermos isto, pois um erro constante em l acarretará numa alteração do coeficiente linear do gráfico, que é irrelevante para o nosso

⁹A rigor, o perfil da densidade de estados é uma lorentziana, cuja largura está associada à mobilidade quântica, conforme explicaremos mais a frente no texto.

¹⁰Lembre-se de que $\eta = n_s/D$ e, conseqüentemente, de que qualquer nível de Landau com $l > \eta$ estará desocupado, daí a somatória ser limitada aos $l < \eta$.

4 As técnicas utilizadas

propósito; o importante é saber numerar os mínimos: l cresce à medida que $1/B$ cresce.

Da expressão acima é também possível verificar que as oscilações de resistividade (e de condutividade) são periódicas em $1/B$:

$$\frac{1}{B_l} - \frac{1}{B_{l-1}} = \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) - \left(l - 1 + \frac{1}{2} \right) \right] \frac{2e}{n_s h} = \frac{2e}{n_s h},$$

onde B_l é a intensidade do campo magnético associado ao máximo de condutividade devido à superposição do l -ésimo nível de Landau ao nível de Fermi. Portanto, o período das oscilações SdH é $2e/(n_s h)$ e, por conseguinte, a frequência das oscilações de resistividade é $\nu_s = n_s h/(2e)$. Isto é o efeito Shubnikov-de Haas!

Apesar de dar resultados corretos, a equação (4.14) é insatisfatória quando mais de uma sub-banda está presente por que as oscilações se sobrepõem. Neste caso, precisamos de um método melhor: A solução do problema (4.13), aliado aos processos de espalhamento, influências da temperatura e do *spin* do elétron, conforme apresentado no capítulo 7 da referência [34] (um texto alternativo é [35]), permite-nos escrever a **magnetoresistividade** de um gás bidimensional de elétrons como

$$\rho\left(\frac{1}{B}\right) = \rho_{\text{n-osc}} + \sum_s K_s \overbrace{\frac{2\pi^2 s k_B T / \hbar \Omega_s}{\sinh(2\pi^2 s k_B T / \hbar \Omega_s)}}^{(3)} \underbrace{e^{-\alpha_k/B}}_{(2)} \overbrace{\cos\left(\frac{\omega_s}{B} + \phi_s\right)}^{(1)}. \quad (4.15)$$

μ_s ($\alpha_s = \pi s / \mu_s$) e n_s ($\omega_s = 2\pi\nu_s = \pi h n_s / e$) são a **mobilidade quântica** e a concentração da s -ésima sub-banda, respectivamente; K_s é uma constante, ϕ_s é uma fase e a somatória é feita sobre todas as sub-bandas ocupadas; $\rho_{\text{n-osc}}$ é uma parcela não oscilatória.

O termo (1) representa a oscilação de resistividade conforme descrita há pouco: É o efeito Shubnikov-de Haas propriamente dito. Já (2) denota o alargamento dos níveis de Landau devido aos espalhamentos e (3) resulta da influência da temperatura. Finalmente, a constante K_s engendra, dentre outros fatores de menor importância, o efeito do *spin* do elétron.

No nosso caso, (3) é aproximadamente igual a 1 por que a temperatura em que trabalhamos é muito baixa: 1,4 K. Além disso, objetivando reduzir a influência da parte não

oscilatória ($\rho_{n\text{-osc}}$), podemos tomar a r -ésima derivada de ρ com relação a $1/B$:

$$\rho^{(r)}(t) = \sum_s K_s \left(\alpha_s^2 + \omega_s^2 \right)^{r/2} e^{-\alpha_s t} \cos(\omega_s t + \theta_s), \quad (4.16)$$

$$\theta_s = \phi_s + r \cdot \arctan(\omega_s / \alpha_s).$$

Fizemos $t \doteq 1/B$ para simplificar a visualização e o tratamento que faremos logo mais.

4.2.1 As concentrações das sub-bandas

Uma maneira simples e direta de obtermos cada uma das concentrações n_s (associadas a cada sub-banda ocupada do 2DEG) é aplicar uma transformada de Fourier (TF) em (4.16) (tomando $t \doteq 1/B$ como o domínio do tempo). A representação desta equação no domínio da frequência, resultado da TF, é um pico em cada uma das frequências ν_s (veja o apêndice A). Mas n_s e ν_s estão relacionados (observe o argumento do cosseno em (4.16) e a definição de ω_s) por $\nu_s = n_s \hbar / 2e$ (haja vista que $\omega = 2\pi\nu$), o que nos permite escrever

$$n_s = 0,048\,36 \cdot \nu_s, \quad [n_s] = 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ e } [\nu_s] = \text{T}^{-1}. \quad (4.17)$$

Assim, tudo o que devemos fazer para determinarmos n_s é aplicar uma transformada de Fourier ao gráfico $\rho^{(r)} \times B^{-1}$, determinar as posições ν_s dos picos (tantos quantos forem as sub-bandas ocupadas) e aplicá-las na equação (4.17).

Neste ponto, convidamos o leitor a retornar à discussão feita sobre a equação (4.14) e compará-la com este novo resultado, que independe do número de sub-bandas ocupadas.

4.2.2 As mobilidades quânticas das sub-bandas

Graças ao princípio de Heisenberg, as energias de Landau apresentam uma incerteza de $\hbar/2\tau_s$ que se manifesta alargando os níveis:¹¹ a chamada **largura natural** dos níveis de Landau. $1/\tau_s$ é a taxa de espalhamento (e, conseqüentemente, τ_s é o **tempo de espalhamento**) de um elétron, desde um estado com energia $\epsilon_{s,l}$ (nível de Landau) para outro com energia ligeiramente distinta (da ordem de $\hbar/2\tau_s$). Este alargamento é representado pela

¹¹Do princípio da incerteza, $\Delta\epsilon \Delta t \approx \hbar/2$ e, conseqüentemente, $\Delta\epsilon \approx \hbar/2\tau_s$ ($\tau_s \doteq \Delta t$).

4 As técnicas utilizadas

exponencial na equação (4.16) e é através dele que podemos determinar τ_s ou, equivalentemente, a **mobilidade quântica** $\mu_s \doteq e \tau_s / m_s^*$.

É instrutivo notar que μ_s só é possível de se avaliar por causa do princípio da incerteza, não pelo efeito Shubnikov-de Haas propriamente dito (representado pelo cosseno nas expressões acima). Ou melhor, avaliar as mobilidades quânticas é equivalente a verificar este que é um dos princípios mais controversos da Mecânica Quântica. Por outro lado, se a estrutura cristalina fosse perfeita não haveria espalhamento e $\tau_s \rightarrow \infty$. Mas $\Delta \epsilon \tau_s$ é finito e, conseqüentemente, τ_s deve ser finito. Logo, a estrutura cristalina não pode ser perfeita! De fato e, em verdade, τ_s é também uma medida da imperfeição do material, como mostra a equação (4.18), a seguir.

Outro aspecto importante de se compreender é a diferença entre o *tempo de espalhamento* (τ_s) e o de *relaxação* ($\bar{\tau}_s$), que aparece na definição da mobilidade de transporte (página 36): O primeiro é uma medida da probabilidade (e da taxa) de um elétron ser espalhado; só isso. O segundo importa-se apenas com os espalhamentos que prejudicam o transporte elétrico. Isso é mais fácil de entender escrevendo-os matematicamente:¹²

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_s(\mathbf{k})} &= \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} d\mathbf{k}' & \text{e} \\ \frac{1}{\bar{\tau}_s(\mathbf{k})} &= \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') d\mathbf{k}'. \end{aligned} \quad (4.18)$$

$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de a transição (espalhamento) $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ ocorrer. Por esta forma, $1/\tau_s$ é a probabilidade de um elétron transitar de seu estado atual ($\mathbf{k}$) para *qualquer* outro acessível ($\mathbf{k}'$). O tempo de relaxação é exatamente a mesma coisa, exceto que $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ é ponderada pelo ângulo $\cos \theta = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$: $1/\bar{\tau}_s$ prefere espalhamentos com θ grande.

Para entender isso, suponha que todos os espalhamentos são para frente, ou seja, que $\theta = 0$ (fig. 4.4). Neste caso, a existência de um tal mecanismo de espalhamento não modifica um estado estacionário de condução elétrica previamente atingido. Isto é, embora ocorram espalhamentos (τ_s é finito), eles são irrelevantes do ponto de vista do transporte elétrico e o tempo médio entre espalhamentos sucessivos que o *prejudicam* tende ao infinito: $\bar{\tau}_s \rightarrow \infty$. Dito de outra forma, a probabilidade de que ocorra algum espalhamento que *prejudique* o transporte elétrico é nula: $1/\bar{\tau}_s \rightarrow 0$ (veja a figura 4.4). Por este motivo, τ_s (o tempo de

¹²Veja as referências [36], [2, cap. 16], [37, seção 39.2] e [38, seção 7.3].

Figura 4.4: As colisões do tipo (a) ilustram espalhamentos que pouco contribuem para o (inverso do) tempo de relaxação ($\bar{\tau}_s$): Nestes casos, o ângulo θ é pequeno e, portanto, $1/\bar{\tau}_s \rightarrow 0$, embora $1/\tau_s$ seja finito (veja as equações (4.18)); Por outro lado, os espalhamentos do tipo (b) representam espalhamentos que prejudicam o estado atual de condução elétrica: Agora, θ é grande e, conseqüentemente, $1/\bar{\tau}_s$ e $1/\tau_s$ são finitos! Os pontos pretos são os centros espalhadores (impurezas, defeitos, etc.), E é o campo elétrico e note que todos esses espalhamentos são elásticos pois conservam $|p|$.

espalhamento) sozinho não tem muita importância para o transporte elétrico, já que não leva em consideração esse aspecto; O grande mérito de conhecê-lo é que podemos compará-lo com $\bar{\tau}_s$ e, a partir daí, buscar compreender os mecanismos de espalhamento presentes. Uma quantidade particularmente útil nesse tipo de atividade é a razão entre esses tempos [39, p. 522]:

$$\frac{\bar{\tau}_s}{\tau_s} = \frac{1}{\langle 1 - \cos \theta \rangle}.$$

O que se faz é determinar $W_{k,k'}$ para algum mecanismo de espalhamento com base em considerações teóricas, calcular $\bar{\tau}_s/\tau_s$ e compará-lo com resultados experimentais. Essa razão está atualmente avaliada entre 2 e 3 para *bulks*, podendo atingir várias ordens de grandeza no caso de heteroestruturas como a nossa [36]. Isto significa que em heteroestruturas o espalhamento é altamente não isotrópico.

Agora podemos introduzir mais uma condição necessária para que o efeito SdH ocorra: Ω_s é a frequência angular de um elétron numa órbita de Landau. Então, é claro que esse elétron percorre essa órbita num tempo $2\pi/\Omega_s$. Ora, se o tempo de espalhamento (τ_s) for menor que esse período o elétron não conseguirá completar a órbita e o movimento do gás de elétrons se torna incoerente. Neste caso, a densidade de estados entre os níveis pode tornar-se significativa e destruir as oscilações. Assim, costuma-se exigir que $\tau_s \gg 2\pi/\Omega_s$,

4 As técnicas utilizadas

ou equivalentemente,¹³ $B \gg 1/\mu_s$.

Uma vez compreendido o significado das mobilidades quânticas, vamos determiná-las: Uma medida do efeito Shubnikov-de Haas fornece-nos um conjunto de M pontos experimentais

$$\{(B_j, V_j)\} = \{(B_1, V_1), (B_2, V_2), \dots, (B_M, V_M)\},$$

onde V_j é a diferença de potencial associada à corrente j_x ($V_j \doteq V_{BC}$ na figura 3.3) e B_j é a intensidade do campo magnético perpendicular a essa corrente (fig. 4.1). Pela primeira e segunda leis de Ohm podemos mostrar que $\rho \propto V_{BC}$. O fator de proporcionalidade (que inclui eventuais fatores de escala) pode ser incorporado na constante K_s , cuja influência na determinação das mobilidades (e das concentrações: observe a equação (4.17)) é nula. Por esses motivos, a resistividade da amostra e a diferença de potencial paralela à corrente (medida diretamente através de um voltímetro, por exemplo) são quantidades equivalentes.

Em qualquer transformada discreta de Fourier (DFT, *discrete Fourier transform*), o conjunto de dados transformado é sempre *discreto* e *limitado*. Com efeito, a definição de transformada de Fourier deixa de ser uma integral imprópria e passa a ser [40]

$$F(\omega_\ell) \doteq C_F \sum_{j=1}^N f_j J_j e^{i\omega_\ell t_j} \Delta t, \quad (4.19)$$

$$\omega_\ell = 2\pi\nu_\ell = 2\pi \frac{\ell}{N \Delta t} \quad \text{e} \quad \ell = 0, \dots, N-1,$$

onde N é o número de pares ordenados (t_j, f_j) utilizados na transformada que, no nosso caso, correspondem aos pares $(1/B_j, V_j'')$, com $j = 1, 2, \dots, N$.¹⁴ Δt é a diferença entre dois t_j consecutivos e, como podemos ver, é constante (não tem índice). Isto significa que precisaremos interpolar $\{(t_j, f_j)\}$ antes de aplicar-lhe a transformada. Vamos supor que isso já foi feito e ignoraremos esse detalhe. J_j é a **função janela** e C_F é uma constante de normalização que depende do algoritmo utilizado para avaliar (4.19).¹⁵

O modo como $F(\omega_\ell)$ é determinado é irrelevante para nós.¹⁶ Importa sim sabermos que o resultado da equação (4.19) está disponível uma vez conhecido o conjunto experimental

¹³Lembrando que $\Omega = e B/m_s^*$ e que $\mu_s = e \tau_s/m_s^*$.

¹⁴Este conjunto é obtido a partir do original, $\{(B_j, V_j)\}$, com $j = 1, 2, \dots, M$.

¹⁵Os softwares *Mathematica* e *MathCAD*, por exemplo, utilizam $1/\sqrt{N}$, enquanto o *Microcal Origin* usa 1 quando a opção normalização está desativada e $1/N$ em caso contrário.

¹⁶Existe uma infinidade de softwares e algoritmos, proprietários ou não, que se prestam a essa tarefa. Nós utilizamos o pacote *Origin* da *OriginLab* (<http://www.originlab.com>).

$\{(t_j, f_j)\}$ e escolhida a função janela mais apropriada.

Então vejamos: *O resultado obtido numericamente a partir da equação acima é uma aproximação da transformada contínua* (CFT, *continuous Fourier transform*) de $\rho^{(r)}$ (equação (4.16)) e, sendo assim, podemos compará-los; Foi isso que fizemos para concluirmos (4.17). Mas isso é insuficiente quando queremos determinar μ_s simplesmente por que não conhecemos K_s .¹⁷ Então faremos o contrário: vamos *aproximar a transformada contínua de Fourier de* (4.16) *do resultado numérico* (DFT) obtido a partir de (4.19) incluindo na CFT o conceito de função janela. Com isso poderemos dar conta da limitação (mas não da discretização)¹⁸ do intervalo $t_1 \leq t_j \leq t_N$ imposta pela impossibilidade de se obter um conjunto experimental infinito. Destarte, ao revés de calcularmos $\mathcal{F}[\rho^{(r)}(t)]$, determinaremos $\mathcal{F}[\rho^{(r)}(t) J(t)]$:

$$F_J(\omega) \doteq \mathcal{F}[\rho^{(r)}(t) J(t)] \doteq C_F \int_{t_1}^{t_N} \rho^{(r)}(t) \mathbf{J}(t) e^{i\omega t} dt$$

Note que usamos C_F no lugar do usual $1/\sqrt{2\pi}$ para mantermos a conformidade com a equação (4.19).

Uma janela é qualquer função limitada e positiva dentro do intervalo $[t_1, t_N]$ e identicamente nula fora dele.¹⁹ Utilizaremos a janela Hanning (ou Hann),

$$J(t) = h(t) \doteq \begin{cases} \frac{1}{2}[1 - \cos(\omega_\bullet t + \theta_\bullet)], & t \in [t_1, t_N] \\ 0 & t \notin [t_1, t_N], \end{cases}$$

por que sua expressão pode ser escrita em termos de exponenciais, o que é uma vantagem pois não só $\rho^{(r)}$ consiste numa composição de exponenciais como também a própria definição de transformada de Fourier as envolve. $\omega_\bullet = 2\pi/(t_N - t_1)$ e $\theta_\bullet = -\omega_\bullet t_1$.

Então queremos determinar

$$F_H(\omega) \doteq \mathcal{F}[\rho^{(r)}(t) h(t)] = \sum_s K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} \mathcal{F}[e^{-\alpha_s t} \cos(\omega_s t + \theta_s) h(t)] \quad (4.20)$$

¹⁷Veja o apêndice A para maiores detalhes.

¹⁸Considerar também a discretização do intervalo $t_1 \leq t_j \leq t_N$ significa retornar à equação (4.19).

¹⁹O conceito de função janela aparece no desenvolvimento das DFTs como uma forma de melhorá-las quando comparadas com seus respectivos espectros contínuos. O leitor interessado pode consultar qualquer boa literatura sobre tratamento digital de sinais (DSP, *digital signal processing*), tal como [40] ou [41].

4 As técnicas utilizadas

Embora não seja realmente difícil, resolver a expressão acima é uma tarefa árdua e deixaremos esse trabalho para o apêndice B. O resultado desejado é

$$\ln |F_H(\omega_s)| = -\alpha_s t_1 + Q_s(\Delta), \quad (4.21)$$

onde Q_s é uma função de $\Delta = t_N - t_1$, a largura da janela Hanning, e t_1 e t_N são os limites inferior e superior dessa janela, respectivamente.

Em palavras: O logarítmo do módulo da transformada *discreta* de Fourier da (derivada da) magnetoresistividade em $\omega = \omega_s$ varia linearmente com o limite inferior da janela Hanning, sendo $-\pi s/\mu_s$ (lembre-se que $\alpha_s = \pi s/\mu_s$) o fator de proporcionalidade, desde que a largura da janela seja mantida constante.

Apesar da equação acima exigir que Δ seja constante, nós verificamos através de simulações numéricas que podemos ignorar essa condição (dentro dos limites de n_s e μ_s encontrados neste trabalho).

Então vamos ver como utilizar (4.21): Suponha que medimos M pares (B_j, V_j) distintos (figura 4.5(a)), lembrando que V_j é a queda de tensão (paralela à corrente aplicada) associada ao campo magnético B_j aplicado (perpendicular ao plano de confinamento dos elétrons). O primeiro passo é criar o conjunto (fig. 4.5(b))

$$\begin{aligned} \left\{ \left(\frac{1}{B_1}, V_1'' \right), \left(\frac{1}{B_2}, V_2'' \right), \dots, \left(\frac{1}{B_j}, V_j'' \right), \dots, \left(\frac{1}{B_M}, V_M'' \right) \right\} \equiv \\ \equiv \{ (\tau_1, f_1), (\tau_2, f_2), \dots, (\tau_j, f_j), \dots, (\tau_M, f_M) \}, \end{aligned}$$

lembrando que $\rho(B) \propto V(B)$ de tal forma que $\rho'' \propto V''$.

Um detalhe a ser notado pelo leitor é que $\tau_j \doteq 1/B_j$ denota os *pontos experimentais obtidos* (j varia de 1 até M), enquanto $t_j \doteq 1/B_j$ corresponde aos *pontos utilizados na transformada* (j varia de 1 até N). Assim, $[t_1, t_N] \in [\tau_1, \tau_M]$ (veja a tabela 4.1).

O passo seguinte é gerar, por exemplo, 5 DFTs utilizando 5 intervalos $[t_1, t_N] \in [\tau_1, \tau_M]$ (figura 4.5(c)) distintos. A tabela 4.1 ilustra uma possibilidade genérica.

Finalmente, basta fazer um gráfico do conjunto $\{(\tau_1, 1), (\tau_2, 2), \dots, (\tau_5, 5)\}$ e ajustar-lhe uma reta (figura 4.5(d)). O coeficiente linear é $\alpha_s = -\pi s/\mu_s$ e, com isso, resolvemos o problema: determinamos α_s, μ_s e τ_s !

No exemplo dado na figura 4.5 utilizamos a magnetoresistividade da amostra-referência

Tabela 4.1: A tabela à esquerda apresenta uma possibilidade genérica de cálculo da mobilidade quântica: O valor de t_1 (lembre-se que $t_j = 1/B_j$) varia, sendo igual a τ_1 na primeira transformada, τ_2 na segunda e assim sucessivamente até a quinta transformada. t_N , por outro lado, é mantido fixo em τ_M . A figura ao lado da tabela é uma representação gráfica dela, na qual podemos ver explicitamente a variação em t_1 e em Δ . À medida que t_1 diminui, a amplitude da transformada nos picos (que identificam as sub-bandas) cresce (veja a figura 4.5) e dessa variação podemos obter a mobilidade quântica μ_s : equação (4.21).

($d_{\text{InAs}} = 0$) no claro (veja os capítulos 5 e 6). Perceba que o espectro de frequências ou de concentrações (fig. 4.5(c)) apresenta dois picos: O maior deles corresponde à segunda sub-banda ($s = 2$) e o menor, à terceira ($s = 3$). A primeira sub-banda não é visível por que o tempo de espalhamento dos elétrons nessa sub-banda é inferior ao período ciclotrônico ($\Omega_s \tau_s < 1$; veja o capítulo 6 para maiores detalhes). Devemos desenhar um gráfico $\ln |F_H(\omega_s)| \times t_1$ para cada um dos picos (sub-bandas), de modo a determinarmos μ_2 e μ_3 . Na figura 4.5(d), apresentamos somente o gráfico referente a $s = 2$.

Esse método de calcular as mobilidades quânticas é consideravelmente complexo por que existe uma infinidade de detalhes para os quais devemos atentar; detalhes que não cabem aqui. Como se não fosse suficiente, o tempo gasto é também muito grande: em torno de trinta minutos por sub-banda (utilizando o software de análise de dados *Microcal Origin*). Felizmente, grande parte desses cálculos não depende da intervenção do usuário e, graças a isso, pudemos desenvolver um script (interpretado pelo *Microcal Origin*) capaz de executá-los automaticamente. De fato, esta é uma das grandes contribuições deste trabalho ao grupo de pesquisas do Departamento de Física dos Materiais de Mecânica (DFMT) da Universidade de São Paulo: Com ele, o tempo acima foi reduzido para cinco minutos, aproximadamente! Mesmo assim, por envolver uma série de transformadas de Fourier (algoritmo FFT, *fast Fourier transform*), interpolações, derivações e alisamentos, o tempo de processamento é bastante elevado (algo em torno dos dois minutos num processador de 400 MHz com 196 MiB de memória RAM). Por este motivo estamos atualmente traduzindo este script para uma linguagem compilada (C e MatLab), o que nos permitirá reduzir ainda mais o tempo gasto na análise para, essencialmente, o tempo de interação com o usuário (ou seja, o tempo gasto

4 As técnicas utilizadas

Figura 4.5: Ilustração do procedimento utilizado para calcular as mobilidades quânticas de uma amostra baseado no efeito Shubnikov-de Haas: Em (a) apresentamos o resultado bruto de uma medida do efeito SdH: O conjunto $\{(B_j, V_j)\}$, chamado de **traço SdH**, onde V_j é a queda de tensão entre os pontos B e C na figura 3.3 quando o campo magnético perpendicular ao plano de confinamento dos elétrons tem intensidade B_j . (b) A partir dessas medidas, o primeiro passo é criar o conjunto $\{(1/B_j, V_j'')\}$, no qual a periodicidade da magnetoresistividade (proporcional a V_j) pode ser observada. (c) Depois, calculamos diversas transformadas discretas de Fourier (cinco neste caso), cada qual com um valor diferente de t_1 , limite inferior da janela Hanning (lembre-se de que $t_j = 1/B_j$). Cada um dos picos observados na transformada corresponde a uma sub-banda. Neste caso, as sub-bandas são a segunda ($s = 2$) e a terceira. A primeira não é visível por motivos que serão expostos no capítulo 6. A posição dos picos, que permanece aproximadamente constante, dá a concentração de portadores da sub-banda, conforme (4.17). (d) O logaritmo dos valores dos picos (magnitudes da transformada), quando desenhados contra t_1 , resultam em uma reta cujo coeficiente angular é $-\pi s/\mu_s$, onde μ_s é a mobilidade quântica da s -ésima sub-banda.

nos cálculos será ínfimo). Essa busca pela redução do tempo de processamento pode parecer preciosismo, mas não é: A criação deste script facilitou enormemente os cálculos (para o usuário) e nos permitiu explorar bastante profundamente o método através de simulações numéricas. Novamente, não cabe aqui apontar os resultados, mas um deles é apresentado no apêndice B. Além disso, esse estudo nos trouxe conhecimentos significativos na área de Processamento Digital de Sinais.

4.3 A Fotoluminescência

Fotoluminescência (PL, *photoluminescence*) é o nome dado ao fenômeno da emissão radiativa que ocorre quando um elétron transita de um estado com energia ϵ_1 para outro de energia mais baixa, ϵ_0 . A frequência ν dessa emissão (ou, equivalentemente, a energia do fóton gerado) é dada pela relação de Planck, $h\nu = \epsilon_1 - \epsilon_0$, sendo $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ a constante de Planck.

Na Física dos semicondutores, a técnica conhecida por PL, que se baseia neste fenômeno, é largamente utilizada por ser capaz de disponibilizar informações valiosas acerca da estrutura de bandas de uma amostra qualquer. Além disso, grande parte do sucesso desta técnica reside também em sua simplicidade e em várias outras características desejáveis:

- A PL é uma técnica não destrutiva, ou seja, a amostra não é prejudicada durante a realização da medida;
- Apenas uma pequena quantidade de material é necessário (tipicamente, de alguns milímetros);
- A técnica nos permite investigar portadores minoritários. No caso de amostras que contenham portadores do tipo-n e do tipo-p, isto significa que a PL pode nos fornecer informações complementares às medidas de transporte elétrico (não é o nosso caso);
- Não é necessário nenhum tipo especial de preparo das amostras (veja a seção 3.2);
- Podemos detectar qualitativamente a presença de impurezas.

Por outro lado, as limitações da PL residem especialmente na (i) restrição a processos de recombinação radiativa e na (ii) impossibilidade de se determinar a densidade de dopantes e/ou impurezas.

Basicamente, a técnica de fotoluminescência, quando aplicada aos semicondutores, consiste na criação de um par elétron-buraco pela incidência de radiação (através de *laser*, veja

4 As técnicas utilizadas

o capítulo 5) e na posterior detecção da radiação emitida (de frequência inferior à incidente). A figura 4.6 ilustra a situação característica: Devido à quase-continuidade das bandas de valência (bc) e de condução (bv), ao incidirmos sobre uma amostra semicondutora fótons com energia superior ao *gap* do material, esses fótons são absorvidos pelos elétrons na banda de valência e transitam, desde seu estado atual ϵ_0 (por exemplo), até algum estado ϵ_1 disponível na banda de condução.²⁰

Ao deixar a banda de valência para ocupar um estado antes desocupado na banda de condução, o elétron libera o estado ϵ_0 . A ausência deste elétron neste estado é, sob todos os aspectos teóricos e práticos, equivalente à ocupação deste estado por uma partícula de carga oposta à do elétron, comumente chamada de *buraco* (veja o capítulo 8 da referência [3] para maiores detalhes). Por esta razão, diz-se que a luz incidente criou na amostra um par elétron-buraco.

Enquanto o elétron estiver no nível energético ϵ_1 e o buraco, no ϵ_0 , o material estará excitado, posto que o estado fundamental é aquele em que o elétron está na banda de valência e o buraco, na de condução (ou seja, o estado inicial). Por este motivo, imediatamente após criados, o elétron e o buraco “caminham” em direção ao estado com $k = 0$, trocando energia com a rede através da emissão de fônons (não radiativos): É o que se chama de **termalização**. Outra maneira de retornar ao estado inicial é a emissão imediata de um fóton de energia igual ao do incidente (processo chamado de **emissão espontânea** ou **estimulada**). Entretanto, no caso de semicondutores, onde sempre existe a possibilidade de o elétron (e o buraco) trocar energia através de um fônon (devido à relação de dispersão $\epsilon(\mathbf{k})$), este é o caminho menos provável; mas no caso de sistemas com estados discretos (onde não existe uma relação de dispersão), esta é uma maneira bastante provável.

Enquanto o *gap* dos semicondutores é da ordem de alguns eletron-volts (o do GaAs, por exemplo, é 1,5192 eV a 1,4 K), os fônons têm energias da ordem de algumas dezenas de *mili* eletron-volts. Deste modo, ao atingirem o estado com $k = 0$ (veja a figura 4.6), não existe fônon capaz de fazer o elétron (buraco) transitar da bc (bv) para a bv (bc). Então, a transição ocorre através da emissão de um fóton de energia igual ao *gap* (ϵ_g) do material, ou seja, de frequência $\nu = \epsilon_g/h$, menor que a do fóton incidente. Esta transição costuma ser representada por $e - hh$, indicando que o elétron na banda de condução (e) recombinau-se

²⁰Por simplicidade, suponha que a banda de condução está desocupada, como é o caso de amostras não dopadas no zero absoluto.

Figura 4.6: A fotoluminescência em um material condutor consiste na emissão de um fóton cuja energia é igual ao *gap* do material. Este fóton é emitido quando um elétron (buraco) na banda de condução (de valência) transita para a banda de valência (de condução). Note que a radiação emitida possui frequência inferior à incidente.

com o buraco na banda de buracos-pesados (hh, *heavy-holes*).²¹

Na realidade, a energia do fóton emitido é ligeiramente menor que o *gap* do material por que, ao ser criado o par elétron-buraco, a interação coulombiana entre eles cria um estado ligado chamado **éxciton**, cuja energia é ligeiramente inferior ao *gap* (o éxciton do GaAs, e.g., tem energia 1,5156 eV). Destarte, o sinal luminoso detectado numa medida de fotoluminescência decorre da **recombinação excitônica** do par elétron-buraco.

A figura 4.7 ilustra os diversos tipos de recombinação possíveis, incluindo aquelas provenientes da presença de impurezas aceitadoras (A^0) e doadoras (A^0).

No caso de pontos-quânticos, onde o confinamento ocorre nas três dimensões, os níveis de energia são discretos e não existe relação de dispersão em nenhum dos componentes de k . Por isso, a emissão de fônons como mecanismo de relaxação é altamente improvável

²¹Similarmente, “lh” representa a banda de buracos leves: *light-holes*.

Figura 4.7: Os diversos mecanismos de recombinação radiativa possíveis num material semicondutor: (a) Transição da banda de condução para a banda de valência, $e - h$; (b) exciton livre, EX; (c) exciton ligado a impureza doadora, D^0X ; (d) exciton ligado a impureza aceitadora, A^0X ; (e) transição doador-aceitador, DA; (f) emissão da BC para nível aceitador e (g) emissão de nível doador para a BV. As caixas vermelhas identificam as transições que envolvem éxciton.

por que é preciso que eles tenham energia exatamente igual à diferença entre dois níveis do qd; e também por que, dependendo da magnitude dessa diferença, pode não ser possível um tal fônon (como já dissemos, fônons possuem energias da ordem de algumas dezenas de *mili* elétron-volts). Deste modo, o tempo de vida de um elétron num determinado nível é muito longo, e torna-se perfeitamente possível a ocupação de estados excitados mesmo que o estado fundamental não esteja completamente preenchido. Chamamos isto de efeito **bottleneck** (engarrafamento) [20, 21, 42, 43, 44, 45].

4.4 Microscopia de força atômica (AFM)

A microscopia de força atômica (AFM, *atomic force microscopy*) é apenas uma das modalidades de microscopia conhecida genericamente como **microscopia de varredura por ponta** (SPM, *scanning probe microscopy*), da qual fazem parte a microscopia de tunelamento (STM, *scanning tunneling microscopy*), de força lateral (LFM, *lateral-force microscopy*), de força magnética (MFM, *magnetic force microscopy*) e várias outras. A distinção entre cada uma dessas modalidades reside no tipo de interação entre a ponta de prova e a *superfície* da amostra. Na AFM e LFM, e.g., é a interação de Van-der Waals; na STM, é o fenômeno de tunelamento de elétrons da superfície, desde a ponta até a amostra (ou vice-versa); na MFM,

é a força magnética.

Uma característica peculiar a todas as modalidades SPM (incluindo AFM) é o fato de a ponta não registrar continuamente a interação ponta-amostra, como ocorre num microscópio óptico usual, por exemplo. Ao invés, ela faz isso em intervalos denominados **tamanho de pixel** (Δ) que, por simplicidade, é constante durante toda uma medida, tanto na varredura lenta quanto na rápida (a seguir). Além disso, a área varrida pela sonda geralmente é quadrada, também apenas para simplificar a administração dos resultados.

A idéia é formar um conjunto de ternos ordenados (x,y,z) onde (x,y) é a posição da sonda numa amostra mapeada por uma matriz quadrada de pontos igualmente distanciados (figura 4.8) e z é algum registro de interação entre sonda e amostra que depende do tipo de microscopia que se pretende fazer.

A varredura de uma única linha na figura 4.8 leva algum tempo $T = 1/\nu$, onde ν é a **taxa de leitura** de linhas (ajustável pelo usuário). Finalizada a leitura de uma linha, a sonda passa para a seguinte, levando mais T para completá-la. Se a linha possui N pontos, teremos também N linhas (pois a matriz é quadrada) e, portanto, a varredura de toda a matriz consome NT , obviamente maior que o tempo gasto com apenas uma linha. Por este motivo, o movimento de leitura de apenas uma linha horizontal na figura 4.8 recebe o nome de **varredura rápida**, enquanto o na direção vertical, **varredura lenta**.

Já que os registros das interações não são feitos de forma contínua, qualquer estrutura menor que Δ passa despercebida pela sonda.²² Isto significa que todas as modalidades SPM são verossímeis apenas para estruturas maiores que o tamanho de pixel e, portanto, que Δ é um parâmetro de fundamental importância. Para calculá-lo, utilizamos a extensão da área varrida e o número de medidas por linha, N (igual ao número de linhas varridas), por vezes tomado como sinônimo de **resolução**. Por exemplo: Suponha que esperamos encontrar em uma determinada amostra estruturas da ordem de $20 \text{ \AA}$, numa área de $L^2 = 200 \times 200 \text{ nm}$. Então,

$$\Delta = \frac{L}{N} < 20 \text{ \AA} \quad \Rightarrow \quad N > \frac{200 \text{ nm}}{20 \text{ \AA}} = 100$$

Assim, devemos escolher fazer pelo menos 100 medidas por linha. Na interface do equipamento, escolhemos uma *resolução* superior a 100.

Outra característica das técnicas SPM é o fato de a sonda (ponta) interagir com a *superfície* da amostra, sendo incapaz de avaliar o interior da amostra como ocorre na microscopia

²²Exceto quanto esta estrutura ocorre de forma periódica.

4 As técnicas utilizadas

Figura 4.8: As linhas em preto indicam o sentido da varredura. Os pontos azuis representam as medidas feitas enquanto a sonda se move da esquerda para a direita (*trace*). Inversamente, os pontos vermelhos representam as medidas feitas no sentido contrário (*retrace*). Embora a representação acima os coloque em posições ligeiramente distintas, em verdade eles se superpõem, possibilitando duas medidas “simultaneamente:” Uma em *trace* e outra em *retrace*.

de varredura eletrônica, por exemplo. Além disso, todas as técnicas SPM podem ser utilizadas em pressão ambiente, o que constitui uma enorme vantagem sobre outras técnicas de microscopia.

Vejam os com um pouco mais de detalhe a AFM, modalidade SPM que utilizaremos no capítulo 6 para obtermos informações morfológicas sobre os pontos-quânticos de uma amostra crescida especialmente para este fim (veja o capítulo 3), tais como suas dimensões, densidade superficial, rugosidade (da superfície) e homogeneidade: Existem três “sub-modalidades” ou *modos* desta técnica: AFM de contato, de não contato e de contato intermitente. Em todos eles a interação sonda-amostra é a força de Van-der Waals, cuja dependência com a distância está ilustrada qualitativamente na figura 4.9. Na primeira modalidade, a distância entre a ponta e a amostra é tal que a força de Van-der Waals é repulsiva. Neste caso, dissemos que a amostra e a ponta estão em contato. Por isso AFM *de contato*. Nas outras duas modalidades a força é atrativa e a ponta oscila sobre a amostra: Quando esta oscilação toca a amostra, dizemos que se trata de AFM *de contato intermitente*; quando não, de *não contato* (note que na AFM de contato a ponta não oscila, permanecendo sempre em contato com a amostra).

A rigor, existe ainda uma terceira força envolvida: A de **capilaridade**, atrativa e da or-

4.4 Microscopia de força atômica (AFM)

Figura 4.9: A microscopia de força atômica (AFM) caracteriza-se pela interação de Van-der Waals entre a ponta e a superfície da amostra. Esta técnica se divide em três modalidades, cada qual agindo em uma região diferente do gráfico acima. No caso da AFM de contato, essas forças são da ordem de 10^{-6} – 10^{-7} N (repulsivas); E no caso da AFM de não-contato, de 10^{-12} N (atrativa); A AFM de contato intermitente atinge valores intermediários (atrativa).

dem de 10^{-8} N. Esta força é irrelevante no caso da AFM de contato. Por outro lado, a AFM de contato intermitente é pouco suscetível à capilaridade e a AFM de não-contato, muito suscetível. Destarte, vemos que os três modos se completam, no sentido de que eles são gradativamente mais delicados com a amostra, na mesma medida que são mais suscetíveis ao menisco de água adsorvido na superfície (e outros artefatos). Neste aspecto, a AFM de não-contato oferece-nos a vantagem de podermos analisar a topografia de uma amostra sem que haja contato real entre ponta e amostra (especialmente útil no caso de amostras biológicas), enquanto a AFM de contato não se deixa levar por este artefato sempre presente. Já a AFM de contato intermitente faz a ponte entre uma modalidade e outra, juntando vantagens e desvantagens de ambas.

Em todos os modos de AFM, a sonda é composta por uma diminuta agulha (de alguns micrometros) montada sobre um cantiléver que, por seu turno, está acoplado ao *scanner* (a seguir). Também fazem parte deste arranjo um feixe de *laser* e um fotodetector, organizados conforme a ilustração da figura 4.10.

O *scanner* é o dispositivo responsável por mover a sonda nas três direções do espaço, ou seja, pela varredura e pelos deslocamentos verticais. Esses deslocamentos nanométricos são feitos com base no fenômeno da **piezoeletricidade**: O *scanner* é uma cerâmica piezoelétrica que, quando submetida a um campo elétrico $\mathbf{E}$, deforma-se segundo $\mathbf{s} = \mathbf{d}\mathbf{E}$, onde $\mathbf{s}$ é vetor de deslocamento e $\mathbf{d}$ é o *tensor de acoplamento piezoelétrico*, da ordem de 10^{-12} C/N. O carácter tensorial desta expressão é útil para representar o fato experimental de que $\mathbf{s}$ não é paralelo a $\mathbf{E}$. No entanto, esta relação não é rigorosamente verdadeira por que os deslocamentos $\mathbf{s}$ não são lineares com $\mathbf{E}$, além de dependerem de várias outras características do material.

4 As técnicas utilizadas

Figura 4.10: Esquema de organização da sonda para a microscopia de força atômica.

Na figura 4.10, vemos que o *laser* incide sobre a parte de cima do cantiléver e é refletido para o fotodetector. Assim, no caso da AFM de contato, quando aproximamos ou afastamos a ponta da amostra, o cantiléver é defletido no intuito de equilibrar a força de Van-der Waals. Esta deflexão causa um desvio para cima ou para baixo da posição original de incidência do *laser* sobre o fotodetector que é proporcional à aproximação ou afastamento da ponta. Destarte, a idéia imediata de funcionamento é que, conforme a ponta segue a topografia da superfície, o equipamento interpreta as deflexões do *laser* como ondulações na amostra e as armazena em *z*. Esta é uma primeira forma de acompanharmos a morfologia da superfície. Outra é a seguinte: O equipamento nos permite ajustar um parâmetro chamado **setpoint**, que é essencialmente a pressão com que a ponta toca a superfície (ou, equivalentemente, a deflexão inicial do cantiléver). Quanto maior o **setpoint**, maior a pressão sobre a amostra. Suponha, *e.g.*, que tenhamos encostado a ponta na superfície com **setpoint** igual a 0,5 V (a tensão aplicada no *scanner* necessária para produzir uma tal pressão) e, ao deslocar-se para o ponto vizinho na matriz de varredura (fig. 4.8), a ponta tenha encontrado uma protuberância. Nesta situação, a distância ponta-amostra diminuiu, aumentando a força de Van-der Waals e, conseqüentemente, a deflexão do cantiléver. Esta alteração na deflexão

4.4 Microscopia de força atômica (AFM)

aparece como um deslocamento vertical para cima do *laser* refletido, alterando a leitura do fotodetector (veja a figura 4.10). O *software* do microscópio percebe esta alteração e retrai verticalmente a cerâmica piezoelétrica até que a deflexão original do cantiléver seja reestabelecida. Finalmente, o equipamento registra essa correção vertical em z , junto com a posição da ponta na matriz de varredura e está formado o terno (x,y,z) .

A primeira forma de medida pode atingir taxas de varredura superiores à segunda, sendo, por isso, especialmente útil no estudo de formação de superfícies, onde é interessante uma varredura em “tempo real.” No entanto, esta técnica se limita a amostras cuja rugosidade é bastante baixa. Por outro lado, a segunda maneira de acompanhar a morfologia da amostra sobrepuja a primeira justamente aí: Ela pode captar variações que vão desde frações de angströms até dezenas de micrometros! No nosso caso, utilizamos esta última forma.

Embora todas as modalidades de SPM sejam correlatas e muito interessantes de se compreender, vamo-nos ater ao que expusemos até o momento apenas para manter a brevidade e a objetividade deste trabalho.

4 *As técnicas utilizadas*

5

Instalações

É comum em trabalhos científicos encontrarmos um certo distanciamento entre a teoria desenvolvida para analisar uma amostra e a forma como manipulamos os equipamentos destinados à medição desta amostra. O capítulo 4, por si só, é um exemplo disto: Não mencionamos, e.g., como é possível mantermos a amostra em 1,4 K, nem como conseguimos uma região de campo magnético uniforme; tampouco explicamos como manter fixa a corrente elétrica que percorre a amostra. Estes são apenas alguns exemplos e visando reduzir¹ este distanciamento entre a teoria e a prática, vamos agora apresentar e descrever os equipamentos que nos permitiram realizar as medidas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas.

Conforme vimos no capítulo 4, as análises das medidas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas são feitas com base nos gráficos de $V_{BE} \times B$ e $V_{BC} \times B$, respectivamente. Isto significa que, sob a óptica das instalações necessárias, essas duas técnicas diferem apenas pela direção na qual medimos a diferença de potencial: Perpendicularmente à corrente

¹Não pretendemos exaurir aqui todos os detalhes acerca desses equipamentos (este é o trabalho dos manuais), mas apenas evidenciar os principais pontos.

5 Instalações

aplicada no primeiro caso, e paralelamente no segundo. Assim, podemos utilizar a mesma instalação para medir qualquer um dos dois fenômenos. De fato, a figura 5.1 é um esquema simplificado dessa instalação e podemos observar que somente a posição da chave *ch3* diferencia essas duas técnicas. Deste modo, o que fizemos foi manter esta chave na posição *SdH* enquanto aumentávamos a intensidade do campo magnético (desde zero até 10 T), e na posição *Hall* enquanto a reduzíamos de volta a zero.

Figura 5.1: Esquema simplificado das interligações dos equipamentos mostrados na figura 5.2, página 68.

As amostras são medidas uma após a outra, individualmente, e durante as diversas medidas de uma mesma amostra, esta é incessantemente percorrida por uma corrente de 1 μA , fornecida por uma fonte de tensão alternada de 1 V (RMS, *root mean square*) e regulada por um resistor de 1 $\text{M}\Omega$ em série com a amostra. Em verdade, como a *maior* resistência (medida diretamente com um ohmímetro) observada entre os pontos A e D (fig. 5.1) foi de aproximadamente 50 $\text{k}\Omega$,² a corrente é ligeiramente inferior (no mínimo):

$$\frac{1 \text{ V}}{1 \text{ M}\Omega + 50 \text{ k}\Omega} \approx 0,95 \mu\text{A},$$

²Amostra 2,5 MC, a 1,4 K no escuro (veja o capítulo seguinte).

correspondendo a um erro *máximo* de 5%. Além disso, a impedância dos equipamentos acoplados é, pelo menos, cem vezes maior que a resistência deste ramo, de modo que podemos ignorá-los. Por conta disto, daqui para frente desconsideraremos este erro e diremos que a corrente é *constante e igual* a $1 \mu\text{A}$.

Ao invés do resistor de $1 \text{ M}\Omega$, podemos mudar a posição da chave ch2 e regular a corrente através do resistor de $10 \text{ M}\Omega$, reduzindo-a para $0,1 \mu\text{A}$. Isto serve para verificarmos o comportamento ôhmico (ou linearidade) da amostra: Devido à primeira lei de Ohm, ao reduzirmos a corrente por um fator de 10, a tensão entre os pontos *A* e *D* da amostra também diminui pelo mesmo fator. Caso isto não ocorra, a amostra *não* obedece às leis de Ohm e, portanto, é não-linear. Assim, utilizamos a chave ch2 apenas para averiguar a linearidade (nenhuma medida foi feita com $0,1 \mu\text{A}$). Isto é importante por que a análise de dados desenvolvida no capítulo anterior pressupõe que conhecemos R_{BC} (tanto para as medidas do efeito Hall, equação (4.11), quanto para as do efeito Shubnikov-de Haas, equação (4.16)); não V_{BC} (que realmente medimos). Como nossas amostras são lineares, $V_{BC} = R_{BC} I$ e medir a tensão ou a resistência entre os pontos *B* e *C* é equivalente, posto que *I* é conhecida; Mas se elas não fossem, precisaríamos antes determinar a curva $V_{BC} \times I$ nas imediações de $I = 1 \mu\text{A}$ para cada valor de campo magnético aplicado e tomar $R_{BC}(I, B) = \partial V_{BC}(I, B) / \partial I$.

Acompanhemos o esquema da figura 5.1 para que possamos compreendê-lo: O objetivo é medir V_{BC} ou V_{BE} (dependendo da posição da chave ch3) em função do campo magnético aplicado, e tudo o mais está lá apenas para melhorar os resultados. Então vejamos: Inicialmente, suponha que $B = 0$. A diferença de potencial V_{BC} (ou V_{BE}) é analogicamente amplificada (EG & G INSTRUMENTS 5186) em dez vezes (20 dB) e, em seguida, avaliada por um *lock-in* (grosso modo, um multímetro melhorado). Este resultado é digitalizado (conversor analógico-digital — ADC — HP 34401A) e enviado ao computador, onde é armazenado em um arquivo de texto puro pelo *software* de coleta de dados. Ao receber esta informação, este mesmo *software* (desenvolvido no próprio grupo) envia ao gerador de campo uma solicitação de campo magnético, digamos $0,1 \text{ T}$, ao que este responde, gerando na região da amostra um campo magnético com esta intensidade. Agora, devido à influência de $B \neq 0$ sobre os portadores de carga na amostra, V_{BC} (e V_{BE}) muda (conforme o que discutimos no capítulo anterior) e uma nova medição é feita, seguindo os mesmos passos acima descritos.

Este processo se repete $M = 1500$ vezes, enquanto $B \in [B_{\text{mín}}, B_{\text{máx}}]$, sendo $B_{\text{mín}} = 0$ e $B_{\text{máx}} = 10 \text{ T}$ dois parâmetros determinados pelo usuário (os valores numéricos são aqueles

5 Instalações

que utilizamos). Assim, temos uma medida de V_{BC} (ou V_{BE}) a cada $(B_{\text{máx}} - B_{\text{mín}})/(M - 1) \approx 0,007$ T, de sorte que o arquivo contendo o resultado dessas medidas assemelha-se a (exceto pela coluna j , que não existe no arquivo):

j	B_j (T)	V_j
1	0	V_1
2	0,007	V_2
3	0,014	V_3
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1500	10	V_{1500}

Tabela 5.1: Exceto pela primeira coluna (j), este é um exemplo do formato do arquivo texto que contém as medidas de V_j . Note que $V_j = V_{BC}$ ou $= V_{BE}$, dependendo do que estamos medindo: efeito Shubnikov-de Haas ou Hall, respectivamente.

Assim que terminamos uma medida SdH e Hall,³ irradiamos a amostra com fótons de aproximadamente 2 eV por alguns segundos e voltamos a fazer uma medida SdH e outra Hall. Esses fótons são emitidos por um LED (próximo da amostra) alimentado por uma fonte de corrente contínua (KEITHLEY 224) ajustada em 1 μ A (não confunda com a corrente que percorre a amostra), promovendo a concentração de portadores no 2^{DEG} e facilitando a sua detecção (dentre outros efeitos). O porquê disto ficará claro no capítulo seguinte e todo o procedimento acima é repetido até que duas medidas SdH e Hall sucessivas *não* difiram significativamente, situação que chamamos de **saturação**.

Um detalhe a ser notado pelo leitor na figura 5.1 é que a fonte que alimenta a amostra está representada em vermelho, assim como o *lock-in*. Fizemos isso por que, em verdade, essa fonte faz parte do *lock-in* (EG & G PRINCETON APPLIED RESEARCH 5210): é o seu *signal de referência*. O *lock-in* é um voltímetro especialmente desenvolvido para ampliar a relação sinal/ruído de um sinal ruidoso em várias dezenas de decibéis. Para fazer isso, ele precisa receber em sua entrada o sinal de interesse modulado por um outro, alternado e de frequência conhecida, chamado *portadora* (veja o apêndice A) ou, especificamente no caso do *lock-in*, **sinal de referência**. Assim, para cada valor de campo magnético aplicado, V_{BC} e V_{BE} são senoidais de frequência 11 Hz (fig. 5.1) e cujo valor RMS é o desejado.

Outra característica do *lock-in* é a sua capacidade de medir a fase entre o sinal medido e o de referência. No nosso caso, verificamos que ela era sempre zero, evidenciando a

³Daqui para frente referir-nos-emos a “uma medida SdH” ou “Hall” como todas as M avaliações de V_j em função de B .

característica puramente resistiva da amostra (veja, e.g., o capítulo 8 da referência [46]). Isso endossa a análise inteiramente resistiva da corrente que percorre a amostra, feita no 3º parágrafo.

Na figura 5.1, o retângulo cinza representa o criostato (OXFORD) no qual as amostras ficam em contato com hélio-4 líquido a 1,4 K. Esta temperatura pode ser atingida e mantida através da transição de fase (evaporação) do hélio líquido puro sob pressão inferior à atmosférica,⁴ i.e., durante todo o processo de medição, mantemos a amostra imersa em hélio líquido numa câmara (*da amostra*) isolada do meio-ambiente e a bombeamos mecanicamente (bomba LEYBOLD) para reduzir a pressão ali. Deste modo, enquanto houver hélio nesta câmara, ele estará em transição de fase e a temperatura será mantida em 1,4 K.

Há duas razões para trabalharmos em temperaturas tão baixas: Primeiro por que, conforme a condição $\hbar\Omega_s \gg k_B T$ apresentada na seção 4.2, as oscilações SdH só são visíveis nessas baixíssimas temperaturas (em verdade, podemos ver na equação (4.16) que a amplitude das oscilações caem rapidamente à medida que aumentamos a temperatura do 2DEG); Segundo, por que queremos utilizar o fenômeno da *fotocondutividade persistente* (próximo capítulo), existente em baixas temperaturas, para nos auxiliar nas análises.

O campo magnético é gerado por um solenóide supercondutor no interior do criostato, alimentado por uma fonte específica para este fim (OXFORD IPS 120 A-10 V, capaz de gerar campos de até 16 T). A uniformidade do campo, geralmente especificada num volume esférico de 1 cm de diâmetro *na região da amostra*, supera facilmente uma parte em 1000 [47]. No entanto, campos desta magnitude só podem ser atingidos quando as diversas partes da bobina (em especial, o solenóide) trabalham em regime de supercondutividade, a baixíssimas temperaturas.

Existem muitos outros detalhes, como o sistema de vácuo, as medidas de temperatura e de níveis do nitrogênio e do hélio líquidos, as transferências de hélio e os padrões de comunicação entre os dispositivos, dentre muitos outros. No entanto, o que expusemos aqui vai além do que é necessário para a compreensão das medidas e das análises que seguiremos e, por isso, pararemos aqui.

⁴Sob pressão atmosférica, o ⁴He evapora a 4,2 K.

Figura 5.2: À esquerda, indicadores de (1) nível de nitrogênio, hélio e (2) de temperatura na câmara da amostra (longe da amostra); (3) *lock-in* e chave CH2 (imediatamente abaixo do rótulo); (4) Chave CH3; (5) Indicador de temperatura na amostra (termopar); (6) Fonte de corrente que alimenta o LED; (7) gerador do campo magnético; (8) Amplificador analógico e (9) conversor analógico-digital. À direita vemos (10) todos os equipamentos da figura à esquerda, (11) a mangueira de transferência de hélio líquido, (12) o criostato (sua maior parte fica abaixo do nível do chão), (13) a mangueira de transferência de nitrogênio líquido, (14) o sistema de vácuo e (15) a bomba mecânica. O computador fica à esquerda e não está na fotografia.

6

Resultados

Uma vez apresentadas a arquitetura das amostras (capítulo 3) e as técnicas que nos possibilitam obter informações acerca delas (capítulos 4 e 5), partamos para a análise dos resultados experimentais.

No caso das medidas de transporte, que compreendem os efeitos Hall e Shubnikov-de Haas, as informações que queremos limitam-se às concentrações e mobilidades dos portadores envolvidos no transporte elétrico. Isto por que são essas duas propriedades do 2DEG que caracterizam esse transporte de cargas através das amostras, como podemos ver pela equação (4.7). Por outro lado, a Fotoluminescência e a Microscopia de Força Atômica fornecem-nos informações complementares sobre a estrutura dos níveis da região-ativa e sobre a morfologia dos pontos-quânticos, respectivamente. Mais que isso, veremos que essas informações são essenciais para a compreensão das medidas de transporte e, por este motivo, apresenta-la-emos em primeiro lugar.

6.1 das medidas de AFM

As medidas de AFM deste trabalho foram executadas no Laboratório de Física de Plasmas do Instituto de Física da Universidade de São Paulo. Somente uma amostra, com 2,5 MC (veja o capítulo 3), foi medida. Começamos apresentando uma imagem em perspectiva da medida com varredura $1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$ na figura 6.1, com intuito ilustrativo apenas. As ondulações observadas são os pontos-quânticos.

Figura 6.1: Vista em perspectiva de uma imagem AFM de uma superfície repleta de pontos-quânticos (ondulações). As regiões claras estão associadas às elevações, enquanto as escuras representam as depressões. Note, no entanto, que a escala vertical está deveras ampliada. A altura desses pontos-quânticos é de aproximadamente $67\ \text{\AA}$.

A figura 6.2, por outro lado, apresenta um vista em planta da medida com varredura $3\ \mu\text{m} \times 3\ \mu\text{m}$ e os histogramas de altura e diâmetro obtidos desta imagem através do *software* SPM *Image Magic*, específico para este tipo de estudo. Da contagem de pontos-quânticos desta imagem concluímos que existem $3 \times 10^{10}\ \text{cm}^{-2}$ pontos-quânticos de altura média igual a $67\ \text{\AA}$. O histograma dos diâmetros, por outro lado, chama a atenção para a possível presença de duas famílias de pontos-quânticos: A primeira com diâmetro de $480\ \text{\AA}$ e a segunda, com $540\ \text{\AA}$. A existência de uma segunda família concorda com os espectros de fotoluminescência, apresentados na próxima seção. Contudo, é possível que haja uma terceira família de qds com diâmetro médio de $360\ \text{\AA}$.

Finalmente, observe que esta amostra já começa a apresentar coalescências, identificadas na figura 6.2 pelas circunferências na imagem AFM. Estas estruturas podem vir a prejudicar

as mobilidades dos elétrons do 2DEG.

6.2 das medidas de Fotoluminescência

Na figura 6.3 apresentamos os espectros de fotoluminescência das amostras analisadas neste trabalho, obtidos na temperatura 2 K com alta potência de excitação (150 meV). Em todos os espectros observamos um pico em 1,515 eV associado com a recombinação do éxciton livre em GaAs e outro pico em 1,493 eV relacionado com o processo de recombinação de elétrons livres com impurezas residuais de carbono. Na amostra-referência podemos ainda observar um terceiro pico, com energia 1,522 eV, relacionado com o processo de recombinação banda-banda de elétrons e buracos fotogerados em GaAs. Além destes três picos, observamos ainda uma banda larga, com pico em aproximadamente 1,32 eV, associada com o processo de recombinação dos elétrons do gás com buracos fotogerados. A largura a meia altura (FWHM, *full width at half maximum*) desta banda é igual a 40 meV.

Na amostra 1 MC observamos uma banda com forma semelhante à da referência (aspecto triangular) e que possui a mesma largura à meia altura (40 meV) que a referência (transporte). Isto indica que em ambos os casos (da amostra-referência e da amostra 1 MC) a banda larga está associada apenas com o processo de recombinação do 2DEG. Não encontramos sinais de emissão da camada de InAs ou de pontos quânticos na amostra 1 MC. Espectros de fotoluminescência obtidos por diversos autores dividem-se no que concerne à observação de emissões provenientes da camada de InAs: Uns detectam intensos [48, 49] ou fracos [50, 51] sinais desta camada tensionada, enquanto que outros não observam sinal algum [52]. Considerando que a camada de InAs é um poço-quântico de largura bem menor que as dimensões dos pontos-quânticos, suas emissões luminescentes ocorrem em energias superiores às dos qds. Em geral, quando a emissão desta camada é observada para amostras com 1 MC de InAs, a energia do pico ocorre em torno de 1,48 eV [6, 53]. Isto indica que os níveis de confinamento eletrônico da camada de InAs estão localizados acima do nível de Fermi, pois as emissões luminescentes do 2DEG terminam em aproximadamente em 1,40 eV, como podemos observar nos espectros de PL das amostras referência e 1 MC. Em resumo, a amostra com 1 MC de InAs não contém pontos-quânticos e o poço-quântico associado com a camada de InAs não pode capturar elétrons do 2DEG uma vez que seu estado eletrônico fundamental está acima do nível de Fermi.

6 Resultados

Figura 6.2: Histogramas das alturas e diâmetros dos pontos-quânticos da amostra 2,5 MC, determinados a partir da contagem dos QDs presentes na imagem AFM (à direita, em cima). Perceba o início da formação de coalescências, destacadas pelas circunferências.

Figura 6.3: Espectros de fotoluminescência a 1,4 K das amostras utilizadas neste trabalho.

6 Resultados

A amostra 1,5 MC apresenta uma banda larga com pico em 1,33 eV mas com largura à meia altura igual a 79 meV, muito maior (o dobro) do que aquela associada ao 2DEG nas amostras anteriores. Nossas análises indicam que este pico é resultado da composição das emissões do 2DEG e de pontos-quânticos. Mais especificamente, que o lado de alta energia desta banda está associado com as emissões dos precursores dos pontos-quânticos, isto é, com os q3Ds. As emissões dos q3Ds foram observadas por apenas dois grupos de pesquisadores e elas ocorrem em aproximadamente 1,32 eV [23, 53]. A largura de linha da emissão de um único ponto-quântico é da ordem de 100 μ eV. Entretanto, grandes larguras dos picos relacionados com as emissões dos pontos-quânticos são geralmente observadas nos espectros de PL em virtude da distribuição não uniforme de tamanho e forma destas estruturas. Cada ponto quântico individualmente luminesce em uma energia de acordo com o confinamento que seu tamanho e forma impõem sobre os portadores e, no conjunto, o resultado é um pico largo que reflete a distribuição não homogênea do tamanho dos pontos-quânticos. Se o lado de alta energia da banda larga da amostra 1,5 MC esta de fato associada com as emissões dos q3Ds, em nossas amostras estas estruturas têm dimensões menores do que aquelas observadas nos trabalhos de Duarte [6] e Heitz [23] pois elas ocorrem ao redor de 1,37 eV. Portanto, para esta amostra já temos estruturas que podem capturar elétrons do 2DEG, dada a proximidade em energia destas emissões.

Nas amostras com maiores quantidades de InAs, as emissões dos pontos-quânticos dominam os espectros de PL. Observe, entretanto, que as emissões do 2DEG ainda podem ser detectadas na mesma região do espectro (aproximadamente 1,32 eV), com a mesma forma triangular, mas com uma intensidade muito mais fraca quando comparada com as emissões dos pontos-quânticos. Além disso, na amostra com 2 MC, onde as emissões do gás são mais evidentes, a FWHM é 35 meV. Este decréscimo na largura da banda do 2DEG pode estar associada com a captura de elétrons do gás pelos pontos-quânticos.

Os espectros das amostras com $d_{\text{InAs}} \geq 1,75$ mostram também a evolução de tamanho dos pontos quânticos. O espectro da amostra 1,75 MC pode ser decomposto em duas distribuições gaussianas, relacionadas com a presença de duas famílias de pontos quânticos: aquela contendo os menores qds, denominados pqds (pequenos qds), e a outra família com dimensões maiores, denominada gqds (grandes qds). Com o aumento da espessura da camada de InAs, ocorre um aumento do tamanho dos pontos-quânticos. Com isso, a densidade de pqds diminui enquanto a densidade de gqds aumenta. Na amostra 2 MC as densidades des-

tas duas famílias de pontos-quânticos são comparáveis. Na amostras 2,5 MC as emissões da família de grandes pontos-quânticos domina o espectro de PL. Observe que os pontos-quânticos luminescem em energias menores do que o 2DEG e, portanto, que são centros com energias de confinamento menores do que aquelas do 2DEG. Logo, capturam elétrons do gás, ou seja, estão carregados de elétrons.

Estas informações sobre a morfologia das amostras, extraídas das medidas ópticas serão utilizadas na interpretação dos nossos resultados de transporte. Como mostraremos, a possibilidade de captura de elétrons do gás pelos pontos-quânticos é quem determina o comportamento da mobilidade dos portadores nas amostras analisadas neste trabalho.

das medidas de transporte

Nas medidas de transporte as amostras foram imersas em ^4He líquido a 1,4 K em uma região de campo magnético uniforme e perpendicular ao plano de crescimento. Então, fazemos percorrer-lhes uma corrente AC de aproximadamente 1 μA (veja o capítulo 5) e, **(I) no escuro**, medimos as diferenças de potencial paralela V_{BC} (efeito Shubnikov-de Haas) e perpendicular V_{BE} (efeito Hall) a essa corrente (veja a figura 3.3) à medida que variamos o campo magnético de zero até dez tesla. Em seguida, **(II)** iluminamos a amostra através de um LED por alguns segundos, desligamo-lo e retornamos ao passo **(I)**. Executamos alternadamente os passos **(I)** e **(II)** várias vezes até a **saturação**, situação na qual duas medidas consecutivas não apresentam diferenças apreciáveis.

Levando em conta este procedimento, daqui para frente os termos *escuro*, *antes da iluminação* e seus sinônimos referir-se-ão à situação inicial das medidas de transporte, na qual o passo **(II)** não fora executado nenhuma vez, *i.e.*, na qual a amostra ainda não fora exposta ao LED. Similarmente, com *claro*, *após a iluminação* e seus sinônimos referir-nos-emos à situação de saturação (aproximadamente 75 s de iluminação em todas as amostras). Contudo, note que o uso da palavra “claro” não significa que a amostra fora exposta à luz *enquanto* mediamos, mas apenas que fora exposta.

Para simplificar a notação e poupar o leitor de remeter-se à figura 3.3 constantemente, a partir de agora vamos utilizar V_{xx} no lugar de V_{BC} e V_{xy} ao invés de V_{BE} . O primeiro índice denota a direção da corrente elétrica aplicada (eixo x na figura 3.3) e o segundo, a direção na qual medimos a diferença de potencial: x para o efeito Shubnikov-de Haas (paralelamente

6 Resultados

à corrente) e y para o efeito Hall (perpendicularmente). Os gráficos de V_{xx} e V_{xy} em função do campo magnético aplicado (B) são chamados de **traços** SdH e Hall, respectivamente.

Vale mencionar novamente que estamos preocupados com o 2DEG, não com os QDs. Por duas razões: Primeiro por que é monitorando as propriedades do gás de elétrons que iremos compreender os pontos-quânticos; E segundo por que queremos direcionar este estudo para as aplicações em dispositivos eletrônicos, onde o 2DEG é responsável por conduzir a corrente elétrica. Daí a sua importância.

6.3 das medidas do efeito Shubnikov-de Haas

Apenas para simplificar a apresentação dos resultados e das análises a seguir, vamos dividi-los em duas seções: Na primeira discutiremos os efeitos do processo de iluminação sobre as amostras e, na segunda, a influência da camada de InAs (com e sem pontos-quânticos). Os símbolos **#1**, **#2**, *et cetera*, enumeram as observações ou conclusões mais importantes.

6.3.1 Os efeitos da iluminação

A figura 6.4 apresenta os traços SdH, gráficos de $V_{xx} \times B$, no *escuro* e no *claro*, obtidos diretamente das medidas do efeito Shubnikov-de Haas e sem tratamento algum. Já a partir deles é possível extraírmos algumas informações qualitativas. São elas:

As oscilações de magnetoresistividade no *escuro* são monotônicas, **#1** indicando que apenas uma sub-banda contribui visivelmente para o efeito Shubnikov-de Haas neste caso. Por outro lado, no *claro* é possível identificarmos um leve batimento (mais perceptível entre 4 e 8 T) que evidencia a contribuição de uma nova *freqüência* para o traço, conforme a equação (4.16). Ou seja, **o processo de iluminação introduziu uma nova sub-banda ou incrementou a sua participação nas oscilações da magnetoresistividade.**

Além disso, a iluminação dobra a condutividade *média* de *todas* as amostras, **#2** posto que $\rho = 1/\sigma$ (observe os eixos verticais dos traços). E como a condutividade é proporcional ao produto da concentração de portadores pela mobilidade de transporte, ambas efetivas (veja a equação (4.7) e a seção 4.1.2), podemos concluir que **ou n_{ef} ou $\bar{\mu}_{ef}$ aumentou; ou ambos.**

Realmente, existem mais oscilações de resistividade no *claro* do que no *escuro*, ou seja, a freqüência das oscilações de magnetoresistividade cresceu ao iluminarmos as amostras.

Figura 6.4: Traços SdH no (a) *escuro* e no (b) *claro* das cinco amostras com $d_{\text{InAs}} \neq 0$ e da amostra-referência (sem camada de InAs, $d_{\text{InAs}} = 0$).

Isto significa que **a concentração de portadores de alguma sub-banda (não sabemos qual) aumentou,** já que $n_s \propto \nu_s$: equação (4.17). Outrossim, a figura 6.4 mostra também que o início das oscilações desloca-se de 2 (no *escuro*) para 1 T (no *claro*), indicando que **houve também aumento na mobilidade quântica de alguma sub-banda.** Vejamos o porquê disto: Na seção 4.2 vimos que uma das condições necessárias para que o efeito Shubnikov-de Haas ocorra é que o tempo de espalhamento (τ_s) dos elétrons da sub-banda s do 2DEG seja maior que o período ciclotrônico deles ($2\pi/\Omega_s$) ou, equivalentemente, que $\mu_s B \gg 1$. Em palavras, quanto maior for τ_s , menor é a intensidade do campo magnético necessária para que as oscilações ocorram. Então, como no *claro* passamos a ver as oscilações para intensidades menores do campo magnético aplicado, podemos imediatamente inferir que τ_s e, conseqüentemente, μ_s cresceram (lembre-se de que $\mu_s \propto \tau_s$).

Vamos fazer melhor: Podemos dizer que as oscilações ocorrem sempre que $\mu_s B$ supera um determinado valor, digamos Π_s . Ou seja, ao invés de $\mu_s B \gg 1$ podemos escrever $\mu_s B \gtrsim \Pi_s$. Então, se Π_s não depender do tempo de iluminação ($t_\odot$),

$$\mu_s^e B^e \approx \mu_s^c B^c \Rightarrow \frac{\mu_s^c}{\mu_s^e} \approx \frac{B^e}{B^c} = \frac{2 \text{ T}}{1 \text{ T}} = 2.$$

Os índices “e” e “c” indicam as situações *escuro* e *claro*, respectivamente. $B^e = 2 \text{ T}$ é a intensidade do campo magnético a partir da qual observamos as oscilações no *escuro* e

6 Resultados

analogamente para $B^c = 1$ T.

Destarte, concluímos que $\mu_s^c/\mu_s^e \approx 2$, indicando que a mobilidade quântica da sub-banda que mais contribui para as oscilações dobra com o processo de iluminação (veremos logo mais que esta estimativa concorda muito bem para a segunda sub-banda), ou seja: Também as mobilidades são alteradas ao iluminarmos as amostras.

Conforme expusemos na seção 4.2, o passo seguinte da análise consiste em efetuarmos as transformadas discretas de Fourier dos gráficos de $\rho'' \times \frac{1}{B}$, sendo ρ'' a derivada segunda da magnetoresistividade com relação ao recíproco do campo magnético (B). Fizemos isto através do algoritmo FFT (*fast Fourier transform*) disponibilizado pelo *software* de análise de dados Microcal Origin® e obtivemos os espectros de frequências apresentados na figura 6.5, também nas situações *escuro* e *claro*.

Estes espectros são aqueles obtidos com a maior largura da janela Hanning, $\Delta = t_N - t_1 = 0,9 \text{ T}^{-1}$, onde $t_1 = 1/(10 \text{ T})$ e $t_N = 1/(1 \text{ T})$ são os limites inferior e superior da janela. O número de pontos utilizados na DFT (N) foi feito igual a $2^{12} = 4096$ interpolando linearmente os pontos medidos entre t_1 e t_N .¹ O limite superior da janela Hanning foi fixado em 1 T^{-1} por que é só a partir deste valor de campo que as oscilações são observáveis (fig. 6.4).

Assim, observando a figura 6.5 e considerando válidos os rótulos dados aos picos (o porquê deles ficará claro com o docorrer dos parágrafos seguintes) podemos verificar que #5 em ambas as situações estão presentes os picos n_2 e n'_2 . O primeiro deles está associado à segunda sub-banda, enquanto o segundo representa seu segundo **harmônico**. n'_2 não indica a presença de um outra sub-banda e isto nós podemos demonstrar assim: Suponha que associemos a este pico uma sub-banda verídica. Através dos espectros apresentados na figura 6.5 verificamos que $n'_2 = 2n_2$ independentemente da amostra e do tempo de iluminação ($t_\odot$). Portanto, $n'_2 = 0$ quando $n_2 = 0$, indicando que ambas as sub-bandas começam a ser populadas simultaneamente. Mas isto só é possível quando $\epsilon'_2 = \epsilon_2$ (ϵ_s é a energia do fundo da s -ésima sub-banda), o que não é permitido pois ϵ_s são os autovalores do poço-quântico de InGaAs.²

¹É uma exigência do algoritmo da FFT que N seja uma potência de 2 [40, 41].

²Na realidade, ϵ_s são os autovalores da região-ativa. Neste caso, os cálculos autoconsistentes [54, 55] mostram que isto não é possível.

Figura 6.5: Espectros de frequências (ν) ou de concentrações ($n = 0,04836 \nu$, equação (4.17)) no (a) escuro e no (b) claro das oscilações de magnetoresistividades (traços SdH apresentados na figura anterior). Para facilitar a visualização, estes espectros foram normalizados, de modo que suas amplitudes não podem ser comparadas.

Em verdade, os harmônicos têm origem na conjugação do caráter discreto das transformadas de Fourier (equação (4.19)) com fenômenos espúrios tais como ruídos, flutuações de temperatura, etc [41]. Eles são frequentemente encontrados e já foram relatados em vários trabalhos, tais como [54] e [56]. Nós iremos ignorá-los daqui para frente por que não trazem nenhuma informação adicional.

Agora, observando a posição dos picos, vemos que n_2 varia de $0,64$ até $1,25 \times 10^{12}$ elétrons por centímetro quadrado em *média*, desde o *escuro* até o *claro*. Destarte, **#6 a iluminação acresce a concentração de portadores da segunda sub-banda**. Diferentemente da conclusão obtida da figura 6.4, note que agora nós sabemos *qual* foi a sub-banda que teve sua concentração aumentada e sabemos também de *quanto* ela foi aumentada: $0,61 \times 10^{12}$ elétrons por centímetro quadrado. Além disso, como a amplitude de n_2 é *muito* maior que a das outras componentes, as oscilações de magnetoresistividade devem-se majoritariamente à segunda sub-banda. Logo, podemos concluir que o tempo de espalhamento ou, equivalentemente, **#7 a mobilidade quântica, dos elétrons desta sub-banda é maior que das outras sub-bandas, tanto no escuro como no claro**.

Efetivamente, nós só podemos assegurar esta conclusão por que a amplitude de n_2 é deve-

6 Resultados

Figura 6.6: Espectro de freqüências da magnetoresistividade da amostra 1 MC após $t_{\odot} \approx 17$ s de iluminação utilizando janela (a) Hanning e (b) retangular. Esta foi a única situação em que a primeira sub-banda pôde ser vista claramente nos espectros calculados. A partir deste resultado pudemos identificar n_1 em meio aos ruídos na maioria dos outros espectros utilizados neste trabalho.

ras maior que a de n_3 , ao ponto de podermos ver claramente na figura 6.4 que as oscilações da segunda sub-banda realmente dominam as da terceira (n_3): O método apresentado na seção 4.2.2 é recente e, antes dele, costumava-se avaliar as mobilidades quânticas pelas amplitudes dos picos nos espectros de freqüências (ou de concentrações). Isto podia ser feito por que, utilizando-se janela retangular para calcular esses espectros, μ_s torna-se proporcional à amplitude do pico s (veja o apêndice A). Entrementes, nós utilizamos janela Hanning para calcular os espectros da figura 6.5 e, por isso, não podemos usar a amplitude como forma de avaliar as mobilidades quânticas. Fizemos isto por dois motivos: Primeiro, por que o método desenvolvido na seção 4.2.2 necessita dela; Segundo, por que a janela Hanning supera enormemente a retangular em termos de redução de ruídos nos espectros: Veja a figura 6.6.

Os espectros apresentados na figura 6.5 não contemplam situações intermediárias do processo de iluminação, mas apenas os extremos *escuro* e *claro*. Por este motivo o pico n_3 associado à terceira sub-banda apresenta-se “apenas” no *claro* (em $0,50 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Contudo, nossas medidas compreendem um conjunto deveras mais completo, contendo os traços SdH e seus derivados em intervalos de alguns poucos segundos de iluminação, conforme ilustramos na figura 6.7 para a amostra 1,75 MC. Com isto, vemos que terceira

Figura 6.7: Apresentamos nesta figura a evolução (a) dos traços SdH, (b) dos espectros, (c) das concentrações e (d) das mobilidades quânticas da amostra 1,74 MC devido à iluminação. As mobilidades em (d) foram obtidas segundo o método apresentado na seção 4.2.2.

sub-banda distingue-se dos ruídos após alguns poucos segundos de iluminação (tipicamente $t_{\odot} = 5$ s) em todas as amostras, de modo que também podemos acompanhar sua evolução. Mais que isso: A concentração de portadores desta sub-banda é suficientemente previsível para que possamos estimar, por extrapolação, sua concentração no escuro: Concluimos que **n_3 também é promovida com a iluminação, de 0,25 até $0,50 \times 10^{12}$ cm $^{-2}$ (em média).**

Outro detalhe: Considerando que as massas efetivas dos elétrons em cada uma das sub-bandas do 2DEG são similares e sabendo que $\epsilon_s < \epsilon_{s+1}$, podemos afirmar que $n_s > n_{s+1}$ e isto isto explica por que o pico que identifica a terceira sub-banda (n_3) está à esquerda daquele que identifica a segunda (n_2) na figura 6.5.

Falta o estado fundamental, n_1 . Ele não aparece em nenhum dos espectros apresentados

6 Resultados

Figura 6.8: (a) Representação das bandas de condução (bc) e de valência (bv) e das funções de distribuição eletrônica ($|\psi_s|^2$, $s = 1, 2, 3$) da região-ativa no escuro (preto) e no claro (vermelho). (b) O processo de iluminação desloca $|\psi_3|^2$ em direção à superfície, elevando a integral de sobreposição (equação (6.1)) e prejudicando a mobilidade dos elétrons da terceira sub-banda. $g(z)$ é a função que descreve o perfil da distribuição de átomos dopantes na direção do crescimento. Tanto o perfil de potencial como as funções de probabilidade foram obtidas adequando **qualitativamente** os cálculos autoconsistentes da referência [54] ao nosso caso.

na figura 6.5 por que a mobilidade dos elétrons desta sub-banda é muito pequena: Ao estudar as propriedades de transporte de gases bidimensionais de elétrons confinados em poços-quânticos de InGaAs próximos (~ 70 Å) a dopagens planares do tipo-n (GaAs:Si, com $n_{\text{Si}} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), Cavalheiro [54] *et al* [57, 58] mostraram, através de cálculos autoconsistentes, que três sub-bandas são ocupadas e que os elétrons no estado fundamental encontram-se majoritariamente localizados sobre o plano da dopagem (figura 6.8). Esta região é densamente populada por centros espalhadores coulombianos (os íons de silício) e eles se encarregam de prejudicar μ_1 ao ponto de não a identificarmos nos espectros de $\rho'' \times \frac{1}{B}$.

Na realidade, baseado no espectro de frequências apresentado na figura 6.6, a única situação onde n_1 aparece claramente, pudemos identificar a concentração da primeira sub-banda em vários outros espectros e estimá-la em várias outras situações. Disto concluímos que n_1 também cresce com a iluminação, de 0,91 até $1,65 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em média (os valores

encontrados para cada uma das amostras no *escuro* e no *claro* serão apresentados na seção 6.3.2, onde analisaremos os efeitos da camada de InAs).

Assim, tomando $n_T = \sum_{s=1}^3 n_s$ como a concentração total de portadores do 2DEG, concluímos que **o processo de iluminação traz, em média, $1,60 \times 10^{12}$ elétrons por centímetro quadrado para a região-ativa** (tabela 6.1).

Tabela 6.1: Concentrações *médias* das sub-bandas $s = 1, 2$ e 3 do 2DEG no *escuro* e no *claro*.

	n_1	n_2	n_3	$n_T = \sum_{s=1}^3 n_s$
<i>Escuro</i>	0,91	0,64	0,25	1,80
<i>Claro</i>	1,65	1,25	0,50	3,40

Note que a concentração total de portadores na região-ativa (n_T) é sempre menor que $n_{Si} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Isto ocorre por que a distribuição espacial dos elétrons extrínsecos nas amostras não é aquela que impomos durante o crescimento através da dopagem planar, mas sim *alguma* que minimiza a energia total da heteroestrutura. É esta transferência de cargas que deforma os perfís das bandas de condução e de valência, conforme ilustrado na figura 6.8, e propicia a ocupação das três sub-bandas (2DEG) e de outros estados, a saber [54, 57, 58]:

- Níveis aceitadores devidos a impurezas residuais como o carbono;
- Centros profundos produzidos por defeitos estruturais nas amostras;
- Estados de superfície formados pelas ligações químicas insaturadas dos átomos na superfície (*dangling-bonds*);
- Camada de InAs ou pontos-quânticos.

Ao iluminarmos as amostras, os elétrons **armadilhados** nestes estados absorvem fótons e são transferidos para a banda de condução e, dali, para o 2DEG devido à termalização e à presença do campo elétrico gerado pelo desbalanceamento de cargas (derivada de $V(z)$ na figura 6.8, a banda de condução). A contribuição de cada um desses estados depende das estruturas envolvidas, mas Cavalheiro [54] mostrou que são os centros profundos e os estados de superfície que mais fornecem elétrons para a região-ativa (figuras 6.9 e 6.10). De fato, ele mostrou, através de simulações numéricas, que as impurezas aceitadoras contribuem com não mais do que $\sim 0,05 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

6 Resultados

Figura 6.9: Representação simplificada da banda de condução apresentada na figura 6.8 ilustrando a transferência de elétrons (•) dos centros profundos para o 2DEG.

Figura 6.10: Representação da banda de condução ilustrando a transferência de elétrons dos estados de superfície para o 2DEG: A quantidade de elétrons armadilhados neles é proporcional a φ , o **potencial de superfície**. De acordo com os cálculos autoconsistentes de Cavalheiro [54], $\varphi \approx 750$ meV no *escuro* e ≈ 200 meV no *claro*.

Portanto, um dos efeitos da iluminação é incrementar a concentração de *todas* as sub-bandas do 2DEG. Mas isto não é tudo: À medida que mais e mais elétrons são trazidos para a região-ativa, eles se aproximam dos íons de silício no plano da dopagem (especialmente aqueles da primeira sub-banda, cuja função de onda está majoritariamente localizada sobre ele: figura 6.8), favorecendo a formação de dipolos elétricos. Este processo se chama **blindagem** (ou **screening**) e diz-se que os elétrons *blindam* os íons (de Si). Acontece que o potencial elétrico de um íon **nu** é de longo alcance ($\propto 1/|r|$) e, por isso, monopolos elétricos são centros espalhadores por excelência; Mas quando sofrem *screening*, eles se transformam em dipolos elétricos, cujos potenciais são de curto alcance ($\propto 1/r^2$). Desta forma, como consequência do aumento na concentração de portadores na região-ativa, os

tempos de espalhamento (τ_s) e de relaxação ($\bar{\tau}_s$) aumentam, contribuindo para melhores mobilidades quânticas (μ_s) e de transporte ($\bar{\mu}_s$).

A figura 6.11 ilustra as mobilidades quânticas da segunda e terceira sub-bandas no *escuro* e no *claro* para todas as amostras, obtidas através do método exposto na seção 4.2.2 e a partir dos espectros de concentrações da figura 6.5. Com relação ao processo de iluminação (as variações em função de d_{InAs} serão deixadas para a próxima seção) podemos observar que **#9 a mobilidade quântica da segunda sub-banda cresceu**, de 0,2 até 0,362 m²/V · s em *média*, devido ao *screening* dos íons de silício no plano da dopagem, conforme discutimos há pouco. No entanto, **#10 a mobilidade quântica da terceira sub-banda caiu** de 0,094 até 0,074 m²/V · s em *média*. Basicamente, as mobilidades quânticas e de transporte dependem de dois fatores:

- Da velocidade dos elétrons no nível de Fermi ($\mu_s \propto v_s$, equação (4.7)). Neste caso, *qualquer* incremento na concentração de portadores contribui para melhorá-la, pois $v_s^2 = 2\pi\hbar^2 n_s / (m_s^*)^2$; ³
- Da **sobreposição (*overlap*)** dos elétrons aos potenciais de espalhamento: Quanto maior a sobreposição, mais freqüentes são os espalhamentos (maiores são $1/\tau_s$ e $1/\bar{\tau}_s$) e, por conseguinte, menores as mobilidades (e vice-versa). Matematicamente [59],

$$\frac{1}{\mu_s} \propto \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_s(z)|^2 g(z) dz, \quad (6.1)$$

onde $g(z)$ é a função que descreve o perfil da distribuição de átomos dopantes na direção do crescimento.

Neste último caso, n_s pode contribuir positiva e/ou negativamente. O exemplo mais imediato é o *screening*, introduzido há pouco: O aumento na concentração de portadores devido à iluminação modifica o potencial de espalhamento dos íons de silício no plano da dopagem de monopolos para dipolos elétricos, reduzindo a sobreposição e, conseqüentemente, aumentando a mobilidade da segunda sub-banda. Por outro lado, ao acrescer a quantidade de elétrons, esta mesma modificação no potencial dos íons de silício promove o deslocamento das funções de distribuição eletrônicas em direção à superfície [54].

No caso da segunda sub-banda, este deslocamento influi pouco por que $\psi_2^* \psi_2$ está bem localizada no poço-quântico de InGaAs. No entanto, para a terceira sub-banda este deslo-

³Lembrando que, numa banda parabólica, $k_{F,s}^2 = 2\pi n_s$ e $m_s^* v_s = p_s = \hbar k_{F,s}$

6 Resultados

Tabela 6.2: Mobilidades quânticas da segunda e terceira sub-bandas em função da espessura nominal de InAs depositada nas situações *escuro* e *claro*. Estes valores foram obtidos através do método exposto na seção 4.2.2 e as incertezas estatísticas foram avaliadas em 0,01 e 0,05 $\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ para a segunda e terceira sub-bandas, respectivamente.

d_{InAs} (MC)	μ_s ($\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$)			
	μ_2^e	μ_3^e	μ_2^c	μ_3^c
0	0,434	0,299	0,734	0,255
1	0,350	0,245	0,637	0,231
1,5	0,395	0,267	0,656	0,211
1,75	0,435	0,336	0,766	0,207
2	0,419	0,285	0,798	0,200
2,5	0,362	0,261	0,752	0,226
	<i>Escuro</i>		<i>Claro</i>

Figura 6.11: Mobilidades quânticas da segunda e terceira sub-bandas em função da espessura nominal de InAs depositada nas situações *escuro* e *claro*. As linhas que ligam os pontos são guias para os olhos e as duas linhas traço-ponto horizontais representam a mobilidade da amostra-referência ($d_{\text{InAs}} = 0$), no *escuro* e no *claro* para uma estrutura similar à amostra-referência.

camento é crítico. De fato, é ele que explica a queda em μ_3 : De acordo com os cálculos autoconsistentes de Cavelheiro [54], $\psi_3^*\psi_3$ no *escuro* possui um de seus nós sobre o δ -Si (veja a figura 6.8). Quando as amostras são iluminadas, a função de distribuição eletrônica da terceira sub-banda é deslocada em direção à superfície e, conseqüentemente, o nó que estava sobre a dopagem é afastado, dando lugar para uma região mais significativa de $\psi_3^*\psi_3$. Com isso, a sobreposição dos elétrons da terceira sub-banda aos íons de silício aumenta, crescendo os espalhamentos e prejudicando a mobilidade.

Resumindo esta seção, concluímos que o processo de iluminação

- 1· acresce a concentração de portadores de *todas* as três sub-bandas da região-ativa, trazendo elétrons armadilhados em centros profundos, estados de superfície e impurezas. Como conseqüência,
- 2· a mobilidade quântica da segunda sub-banda é melhorada devido, principalmente, ao *screening* dos íons de silício no plano da dopagem. Por outro lado,
- 3· a da terceira é degradada por causa do deslocamento de $\psi_3^*\psi_3$, que incrementa a sobreposição dos elétrons desta sub-banda com os íons de silício.

6.3.2 Os efeitos da camada de InAs

Vejamos agora como se comportam as concentrações e as mobilidades quânticas do 2DEG à medida que introduzimos e incrementamos a camada de InAs, localizada a 70 Å do poço-quântico de InGaAs (fig. 3.1).

Concentração total no *escuro*

Começaremos pela concentração total: A figura 6.12 apresenta o gráfico de $n_T \times d_{\text{InAs}}$ (concentração total versus espessura nominal da camada de InAs) antes (◆) e após (◇) a iluminação. Com relação à amostra-referência ($d_{\text{InAs}} = 0$), vemos que #11 ao introduzirmos uma monocamada de InAs a concentração total do 2DEG cai de $0,16 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e #12 recupera-se daí até $d_{\text{InAs}} = 1,75$, chegando mesmo a superar a concentração inicial (linha traço-ponto). Depois disso, #13 n_T volta a sofrer uma queda bastante acentuada de $0,50 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

À primeira vista, poderíamos atribuir a queda na concentração de portadores do 2DEG (observação #11) à captura deles pela camada de InAs. No entanto, Duarte [6] *et al* [53] observaram que a emissão de fotoluminescência desta camada é de 1,48 eV (2 K) e vimos

6 Resultados

Tabela 6.3: Concentração total de portadores na região-ativa no *escuro* e no *claro*. Estes valores foram obtidos segundo o método exposto na seção 4.2.1 e a incerteza estatística (superestimada) foi avaliada em $0,05 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (aproximadamente igual à dimensão vertical dos símbolos).

d_{InAs} (MC)	n_T (10^{12} cm^{-2})	
	<i>Escuro</i>	<i>Claro</i>
0	1,84	3,60
1	1,68	3,10
1,5	1,85	3,41
1,75	1,97	3,42
2	1,84	2,96
2,5	1,61	2,93

Figura 6.12: Concentração total de portadores na região-ativa no *escuro* e *claro*. O crescimento ocorre no modo Frank-van der Merwe até que d_{InAs} atinja a espessura crítica, d_c (região branca). Neste ponto, a tensão mecânica acumulada no filme de InAs não pode mais ser contida e, conseqüentemente, formam-se os pontos-quânticos. A partir daí o crescimento segue o modo Stranski-Krastanov (região cinza). As linhas cheias que ligam os pontos são guias para os olhos e as linhas vermelhas pontilhadas ilustram a influência da *espessura* da camada de InAs em n_T .

na seção 6.2 que a emissão do gás de elétrons em nossa amostra com 1 MC termina em 1,40 eV (figura 6.3), indicando que o nível de Fermi situa-se ali. Portanto, esta camada não captura elétrons⁴ e não podemos atribuir a ela a queda na concentração total.

Por outro lado, estudando as propriedades de transporte elétrico de um 2DEG em heteroestruturas bastante similares à nossa amostra-referência (sem camada de InAs), Cavaheiro [54] *et al* [57, 58] mostraram que existe uma correlação entre a concentração de portadores na região-ativa e o potencial de superfície φ : n_T é tão menor quanto maior for φ , e vice-versa. Esta correspondência está associada à troca de elétrons entre o 2DEG e os estados de superfície (veja a figura 6.10).

Para compreendermos isto, consideremos a estrutura representada na figura 6.13: Por simplicidade, ela consiste apenas de um *bulk* com dopagem planar do tipo-n. (a) Inicialmente, a densidade volumétrica de cargas em todo o material é nula e os perfis das bandas de condução e de valência (**band-edge**) são horizontais. Contudo, (b) se houver transferência de elétrons para os estados de superfície, o plano da dopagem adquire carga elétrica líquida positiva, dando origem a um campo elétrico que deforma as bandas e eleva o potencial de superfície, e vice-versa.

Na realidade, não é necessário que a superfície receba os elétrons perdidos pelo plano da dopagem, mas apenas que ocorra o desbalanceamento pontual de cargas. De fato, veremos logo mais que ocorre transferência de elétrons para a camada de InAs e vice-versa, alterando significativamente as bandas de condução e de valência.

Assim, podemos concluir que a *introdução* da camada de InAs implica numa reorganização das cargas tal que os $0,16 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (observação #11) ausentes no 2DEG (amostra 1 MC) foram transferidos para os estados de superfície. A razão pela qual isto ocorre, entretanto, não é clara e não podemos compreender este processo como uma simples evolução da amostra-referência. Ao invés disso, devemos entender que as amostras com $d_{\text{InAs}} \neq 0$ são estruturas deveras distintas daquela com $d_{\text{InAs}} = 0$. A figura 6.14 evidencia isto: Ela apresenta as concentrações de portadores de cada uma das três sub-bandas do 2DEG em função da espessura nominal de InAs. Podemos ver que (no *escuro*), enquanto n_1 e n_2 diminuem ao irmos de $d_{\text{InAs}} = 0$ até 1 MC, n_3 cresce. Este é um comportamento anômalo para um gás bidimensional de elétrons por que a densidade de estados da sub-banda s é constante e proporcional à massa efetiva. Deste modo, a menos que tenha ocorrido uma alteração na

⁴A probabilidade de que esta camada esteja ocupada é da ordem de $\exp[-(1,48 - 1,40)/k_B T]$, onde $T = 1,5 \text{ K}$ é a temperatura e $k_B = 8,617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ é a constante de Boltzmann.

6 Resultados

Figura 6.13: Representação da correlação entre o potencial de superfície ϕ e a concentração de elétrons na região-ativa: (a) Quando não há transferência de elétrons da região de dopagem para a superfície, a amostra permanece neutra. Neste caso, o perfil das bandas de condução e valência (*band-edge*) é horizontal e o potencial de superfície é a energia de ligação do nível doador. (b) Mas quando ocorre a transferência, a região da dopagem (superfície) adquire carga líquida positiva (negativa), dando origem a um campo elétrico que deforma os perfis das bandas e eleva o potencial de superfície.

massa efetiva da terceira sub-banda, ela também deveria ter sua concentração reduzida.

Vejamos agora o intervalo $1 \leq d_{\text{InAs}} \leq 1,75$ (observação #12). Para esta região a concentração total de portadores no 2DEG cresce de $0,29 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Um comportamento semelhante a este foi observado por Sakaki *et al* [24] ao estudarem os efeitos de uma camada de InAs tensionada a 150 Å de um 2DEG confinado numa heterojunção de GaAs/AlGaAs. Naquele trabalho, os elétrons extrínsecos eram fornecidos por uma dopagem planar a 800 Å do gás de elétrons e os autores entenderam que o incremento de d_{InAs} modificava os perfis das bandas de condução e valência de alguma forma (não discutida) tal que a transferência de elétrons desde o plano da dopagem até o 2DEG era promovida, explicando o aumento observado.

Todavia, nas nossas amostras a dopagem localiza-se a apenas 80 Å do 2DEG e pudemos identificar que a concentração dos elétrons neste plano (n_1) também cresce ao aumentarmos d_{InAs} (figura 6.14), mostrando claramente que os elétrons transferidos para o 2DEG *não* provêm da dopagem.

Por outro lado, conforme vimos na seção 6.2, as energias das emissões de fotoluminescência da camada de InAs diminuem à medida que d_{InAs} cresce, indicando que as energias de seus níveis de confinamento decrescem com o acréscimo de InAs (figura 6.3). Especi-

Figura 6.14: Concentrações das três sub-bandas do 2DEG. No escuro, a introdução da camada de InAs causa uma queda em n_1 e n_2 , mas não em n_3 , evidenciando a profunda perturbação que ela causa na estrutura.

ficamente, para a amostra 1,5 MC as emissões sobrepõem-se às do 2DEG (1,40 eV) e isto significa que os níveis da camada de InAs atingiram as imediações do nível de Fermi. Portanto, a partir daí (pelo menos) elétrons são transferidos para esta região. Ao fazê-lo, esta região torna-se negativamente carregada e dá origem a um campo elétrico que modifica os perfis das bandas de condução e de valência de modo oposto àquele que vimos há pouco, *reduzindo* φ e propiciando a transferência de elétrons da superfície para o 2DEG. A figura 6.15(a) ilustra os diferentes perfis de potencial das diferentes amostras aqui analisadas.

Mas isto não ocorre indefinidamente: À medida que elétrons deixam a superfície, esta fica cada vez menos negativamente carregada e dá origem a um campo elétrico que opõe-se a esta transferência. Assim, a partir de aproximadamente 1,75 MC ela cessa, conforme ilustra a linha vermelha na figura 6.12. Esta linha representa a influência da camada de InAs sobre os estados de superfície apenas e o porquê dela ficará mais claro na próxima seção.

No intervalo $1,5 \leq d_{\text{InAs}} \leq 1,75$ ocorre a formação dos pontos-quânticos e a sua densidade superficial cresce rapidamente (fig. 2.5(a)). Mesmo assim, a ocupação dos estados eletrônicos dos qds pelos elétrons nesta situação é quase desprezível quando comparada ao

6 Resultados

aumento de n_T . O mesmo não é verdade para $d_{\text{InAs}} > 1,75$, onde podemos observar uma queda abrupta de n_T (observação #13) devida justamente à ocupação dos estados eletrônicos dos qds. Não obstante, nesta região a variação na concentração de pontos-quânticos é quase nula, mostrando-nos que o crescimento abrupto na quantidade de elétrons capturados pelos pontos-quânticos (a partir de 1,75 MC) não é devido à formação de novos qds, mas sim à evolução das dimensões dos já existentes: Em $d_{\text{InAs}} = 2$ existem tipicamente três famílias, enquanto que em 2,5 MC observa-se apenas uma [53].

De fato, à medida que a dimensão dos pontos-quânticos aumenta as energias de seus estados diminuem, trazendo cada vez mais estados para baixo do nível de Fermi e aumentando a quantidade de elétrons que cada qd pode acomodar. Wójs *et al* mostraram teórica [60] e experimentalmente [61] que os autoestados dos pontos-quânticos podem ser aproximados pelos chamados níveis de Fock-Darwin, que basicamente descrevem os estados energéticos de um poço-quântico tridimensional parabólico. Neste modelo, o nível q possui degenerescência $2q$ (o fator 2 decorre da degenerescência de *spin* do elétron). Assim, como observamos uma queda de $0,36 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em n_T (#13) e como as medidas de AFM nos mostraram que temos 3×10^{10} pontos-quânticos por centímetro quadrado na amostra 2,5 MC (seção 6.1), estimamos que cada qd desta amostra comporta aproximadamente 12 elétrons ($= 0,36 \times 10^{12} / 3 \times 10^{10}$). Conseqüentemente, os pontos-quânticos da amostra 2,5 MC possuem três níveis ($\sum_{q=1}^3 (2q) = 2 + 4 + 6 = 12$) ocupados.

Concentração total no *claro*

Analisemos agora como se comporta a concentração total de portadores do 2DEG no *claro*, representada pelos símbolos $\diamond$ na figura 6.12: As observações #11 e #12 ainda são válidas. De fato, $n_T \times d_{\text{InAs}}$ no *claro* é similar àquela no *escuro*, exceto para $d_{\text{InAs}} \geq 2$, onde #14 não vemos a acentuada queda na concentração de portadores.

Novamente, o porquê deste comportamento está ligado aos perfís das bandas de condução e de valência, modificados pela distribuição de cargas nas amostras: Como já dissemos, à medida que d_{InAs} cresce, os níveis da camada de InAs aproximam-se do de Fermi e elétrons são capturados (no *escuro*). Com isso, a região do InAs torna-se negativamente carregada e produz um campo elétrico que deforma os perfís das bandas de forma oposta àquela produzida pela dopagem (veja a figura 6.16 para mais detalhes), tornando esta região do InAs energeticamente favorável aos *buracos*, conforme ilustram as situações $d_{\text{InAs}} = 1,5$ e

Figura 6.15: Representação qualitativa das bandas de condução e de valência das amostras deste trabalho no (a) *escuro*, (b) durante a iluminação e (c) no *claro*, ou ainda: Percorrendo a figura na direção horizontal, ilustramos o efeito da camada de InAs (diferentes amostras; diferentes d_{InAs}), ao passo que na direção vertical mostramos o efeito da iluminação: Devido ao campo elétrico gerado pelo plano da dopagem, na amostra-referência ($d_{\text{InAs}} = 0$) todos os elétrons fotogerados deslocam-se para o 2DEG, aumentando sua concentração total. O mesmo também é verdadeiro para a amostra 1 MC pois a camada de InAs ainda não contém elétrons. No entanto, para as amostras com $d_{\text{InAs}} \geq 1,5$, existem elétrons na camada de InAs e, por isso, um campo elétrico oposto àquele gerado pela dopagem é criado. Com isso, esta região se torna energeticamente favorável aos buracos. Assim, com a iluminação, eles deslocam-se até lá e recombinaem-se com os elétrons capturados, descarregando a região. Ao final do processo, a camada de InAs volta a ficar neutra e os perfís das bandas de condução e de valência, semelhante àquele da amostra 1 MC.

6 Resultados

Figura 6.16: Ao capturar elétrons, a camada de InAs torna-se negativamente carregada e deforma os perfis das bandas de condução e de valência de modo inverso àquela produzida pela dopagem. É mais fácil entender esta idéia interpretando a dopagem e o poço-quântico como um capacitor de placas paralelas. Assim, como a camada de InAs está negativamente carregada, as linhas do campo elétrico E digirem-se para ela, e afastam-se da dopagem, que tem carga líquida positiva. Em termos do potencial escalar, isto equivale às mudanças na derivada de $V(z)$.

$\geq 1,75$ MC da figura 6.15.

Deste modo, ao criarmos pares elétron-buraco através da iluminação, os buracos gerados entre o plano da dopagem e a superfície deslocam-se até a região do InAs devido ao campo elétrico e recombinam-se com os elétrons ali acomodados, neutralizando a região. Por outro lado, os elétrons fotogerados correspondentes deslocam-se para o 2DEG ou para a superfície, também devido ao E , o que equivale a dizermos que os elétrons da camada de InAs foram transferidos para o 2DEG e para a superfície.

Note que este mecanismo ocorre a partir de 1,5 MC, onde já temos elétrons na camada de InAs. No entanto, este processo torna-se crítico somente a partir de 1,75 MC por que é a partir daí que vemos uma brusca variação na ocupação dos estados da camada de InAs (observação #13). Além disso, como não há acúmulo de cargas na região do InAs, $n_T \times d_{\text{InAs}}$ no *claro* reflete apenas a influência de d_{InAs} sobre n_T . Por isso os pontos medidos e a linha vermelha coincidem.

Após a iluminação, os elétrons no 2DEG não conseguem retornar à camada de InAs devido também ao campo elétrico gerado pelo plano da dopagem, mantendo neutra a região. É por esta razão que os perfis das bandas de condução e de valência ilustradas na figura 6.15 assemelham-se àquele da amostra 1 MC.

Finalmente, note que a concentração total no *claro* para todas as amostras com $d_{\text{InAs}} \neq 0$ é sempre inferior à da amostra-referência. Este efeito é comumente observado e geralmente associado à captura de elétrons pelos pontos-quânticos, como em [62]. Contudo, nossa análise mostrou que, em nossas amostras, não só (i) os pontos-quânticos não capturam elétrons no *claro* como também (ii) a queda observada decorre da transfência de elétrons do 2DEG para a *superfície*.

Resumindo, existem dois mecanismos distintos e dependentes de d_{InAs} que competem entre si: O primeiro deles é a redução do potencial de superfície, que favorece a transição de elétrons da superfície para o 2DEG; O outro é a captura de elétrons pela camada de InAs. No *escuro*, o primeiro domina o segundo na região $d_{\text{InAs}} \leq 1,75$ e por isso vemos o crescimento de n_T . No entanto, quando d_{InAs} torna-se maior que 1,75 MC, a evolução nas dimensões dos pontos-quânticos eleva drasticamente a captura de elétrons pelos pontos-quânticos e o segundo mecanismo domina, resultando na queda de n_T .

Por outro lado, devido à existência de elétrons na camada de InAs, que ocorre desde 1,5 MC, gera-se um campo elétrico que deforma os perfís das bandas de condução e de valência, tornando a região do InAs favorável à ocupação por buracos. Decorre daí que, no *claro*, os elétrons capturados são transferidos tanto para o 2DEG como para a superfície e, conseqüentemente, não há elétrons capturados pela camada de InAs. Destarte, neste caso somente o primeiro mecanismo acima está presente e, por isso, vemos apenas o crescimento e a saturação de n_T , representado pela linha vermelha na figura 6.12.

As mobilidades quânticas no *escuro* e no *claro*

Vejamos agora quais são os efeitos da camada de InAs sobre as mobilidades quânticas. Começaremos pelo gráfico 6.11 (página 86), observando a semelhança no comportamento de μ_2 antes e após a iluminação: **#15** Ambas degradam com relação a amostra-referência na região em que o filme de InAs ainda é uma camada tensa (crescimento FM), **#16** recuperam-se na região de transição 2D→3D (FM→SK) e **#17** voltam a cair. Este comportamento nos incita a acreditar que os mecanismos de espalhamento envolvidos tenham alguma independência da iluminação. Apesar dessa similaridade, há uma diferença notória: No *escuro*, o maior valor de μ_2 ocorre quando $d_{\text{InAs}} = 0$, ou seja, quando não incluímos a camada de InAs. Este resultado é compatível com aqueles obtidos na literatura científica [24, 25] e baseia-se na idéia de que os QDs, ao capturarem elétrons, tornam-se centros espalhadores

6 Resultados

coulombianos, prejudicando a mobilidade do 2DEG. Entrementes, no **#18** *claro* a mobilidade dos portadores da segunda sub-banda é maior justamente na região onde sabemos existir qds (linha traço-ponto)! Este é um fato notável e, até onde sabemos, há apenas mais um outro trabalho na literatura que relate algo parecido: [63].

Observe também que **#19** μ_3 no *escuro* é similar a μ_2 , o que nos permite dizer que a camada de InAs influi de maneira parecida na segunda e na terceira sub-bandas. O mesmo já não podemos dizer no *claro* pois **#20** μ_3 é praticamente constante. Isto ocorre por que, como vimos, a iluminação prejudica a mobilidade da terceira sub-banda através do deslocamento de $\psi_3^* \psi_3$. Com isso, os efeitos da camada de InAs são atenuados a tal ponto que nosso método (seção 4.2.2) não é capaz de identificar o perfil de μ_3 no *claro*.

Assim, por conta destas similaridades (que, *possivelmente*, valem para μ_1) limitar-nos-emos a analisar o comportamento de $\mu_2 \times d_{\text{InAs}}$, supondo que os argumentos a seguir sejam também válidos para a terceira sub-banda (e, *talvez*, para a primeira).

Compare os gráficos de $n_T \times d_{\text{InAs}}$ (fig. 6.12) e $\mu_2 \times d_{\text{InAs}}$ (fig. 6.11) no *escuro*. A semelhança entre eles é inegável e instiga-nos a acreditar que o comportamento da mobilidade quântica é devido (quase) exclusivamente às variações em n_T , de modo que (quase) todo o comportamento tem origem nos espalhamentos devido aos íons de silício no δ -Si e aos elétrons capturados na camada de InAs. Assim: Ao introduzirmos a camada de InAs (amostra 1 MC), n_T cai e o *screening* dos íons de silício reduz, intensificando o potencial espalhador e prejudicando as mobilidades. Em seguida, o acréscimo na espessura nominal da camada de InAs traz elétrons da superfície para a região-ativa, elevando n_T e melhorando o *screening* e as mobilidades na região $1 \leq d_{\text{InAs}} \leq 1,75$. Por outro lado, a partir de 1,5 MC a camada de InAs passa a retirar elétrons do 2DEG, prejudicando o *screening* e, adicionalmente, agindo como centro espalhador. O resultado desta competição é o gráfico da figura 6.11 para $d_{\text{InAs}} > 1$.

No *claro* o comportamento se repete, exceto para $d_{\text{InAs}} > 1,75$: Nesta região, μ_2 continua a mostrar a queda que apresentara no *escuro*, embora não n_T , já que a camada de InAs fora descarregada pelo processo de iluminação e os elétrons ali capturados, devolvidos para o 2DEG. Isto mostra que não podemos atribuir às variações de n_T o comportamento de μ_2 , ao menos nesta região. Este problema pode ser resolvido se assumirmos que o mecanismo de espalhamento devido à camada de InAs carregada é fracamente dependente da concentração de elétrons capturados. Com isso, concluímos que a camada de InAs não

Figura 6.17: Mobilidade quântica da segunda sub-banda com (preto) e sem (vermelho) a influência das variações da concentração de portadores (n_2). Note que os resultados coincidem exatamente para a amostra 1,75 MC. Isto ocorre por que foi esta a amostra escolhida como referência, ou seja, $n_2 = 0,66$ é a concentração da amostra 1,75 MC no escuro, enquanto $n_2 = 1,22$ é a sua concentração no claro. Ambas obtidas diretamente das medidas do efeito Shubnikov-de Haas.

está *totalmente* descarregada no *claro* e que o espalhamento dos elétrons do 2DEG varia pouco com a iluminação.

Como a dúvida reside na influência que a concentração de portadores pode ter sobre as mobilidades, precisamos excluir de $\mu_2 \times d_{\text{InAs}}$ a influência de n_2 .⁵ Podemos fazer isto da seguinte maneira: À exemplo da figura 6.7, nós temos as curvas de n_2 e μ_2 em função do tempo de iluminação (t_0) para todas as amostras, o que nos permite desenhar o gráfico $\mu_2 \times n_2$. Com ele, podemos tomar (e.g.) a concentração média de portadores da segunda sub-banda no *escuro* e *estimar* a mobilidade correspondente para cada uma das amostras (cada d_{InAs}), criando um novo gráfico de $\mu_2 \times d_{\text{InAs}}$ que *não* contém a influência de n_2 (pois o mantivemos constante). Dito de outra forma, *estaremos recriando a curva de μ_2 em função de d_{InAs} para um valor fixo de n_2 .*

Na verdade, ao invés da concentração média, nós utilizamos o maior (menor) valor de $n_2 \times d_{\text{InAs}}$ no *escuro* (*claro*) para evitarmos extrapolar alguma das curvas $\mu_2 \times n_2$: Considere a concentração de portadores da segunda sub-banda da amostra 1,75 MC na figura 6.14. Seu

⁵O procedimento análogo para n_T não levou a resultados esclarecedores.

6 Resultados

menor valor ocorre no *escuro*: $0,66 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Assim, o domínio da curva $\mu_2 \times n_2$ construída começa em $n_2 = 0,66$. Se fixássemos n_2 na concentração média, 0,64, precisaríamos extrapolar $\mu_2 \times n_2$ obtida até este valor, o que não é bom. Ao invés disso, se escolhermos $n_2 = 0,66$, que é o maior valor de concentração no *escuro* (em função da camada de InAs), estaremos assegurando que este valor esteja dentro do domínio de $\mu_2 \times n_2$ de todas as amostras, excluindo a necessidade da extrapolação. Situação análoga ocorre no *claro*.

A figura 6.17 apresenta esses resultados: Fixamos n_2 em $0,66 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ no *escuro* e em $1,22 \times 10^{12}$ no *claro*. Exceto para $d_{\text{InAs}} = 0$ no *escuro*, em ambas as situações a curva calculada (● e ○) assemelha-se àquela medida (● e ○). Ora, se para n_2 fixo ainda assim obtivemos um comportamento de μ_2 similar ao anterior (figura 6.14), isto significa que não podemos atribuir *somente* às variações de n_2 o comportamento de $\mu_2 \times d_{\text{InAs}}$.

Realmente, existe uma outra explicação para o comportamento de μ_2 (lembre-se: e de μ_3 e, *possivelmente*, μ_1) baseada na tensão mecânica acumulada durante o crescimento: Sabendo que a tensão mecânica deforma o parâmetro de rede nas vizinhanças da epicamada [7], podemos supor que sua intensificação prejudique a mobilidade dos portadores ao danificar a periodicidade da rede cristalina nas vizinhanças da epicamada. Assim, podemos entender que, à medida que crescemos a espessura da camada de InAs, a tensão mecânica acumulada também cresce e, de alguma maneira, prejudica a mobilidade dos elétrons do 2DEG. A partir de 1,5 MC a tensão começa a ser aliviada com a formação dos pontos-quânticos (ou de seus precursores) e a mobilidade rapidamente se recupera. Depois, ela volta a cair por que (i) a tensão volta a crescer⁶ e (ii) também por que agora existem elétrons capturados na camada de InAs agindo como centros espalhadores.

Contudo, o processo de iluminação descarrega a região da camada de InAs, eliminando ou reduzindo o mecanismo (ii) acima. Com isso, a mobilidade pode crescer ainda mais. De fato, é exatamente isto que vemos na região $1,75 \leq d_{\text{InAs}} \leq 2,5$! Resultado similar a este foi obtido por Zhukov *et al* [63] ao estudarem as propriedades de transporte de elétrons confinados numa heterointerface de GaAs/AlGaAs a 400 Å de pontos-quânticos de InAs. Naquele trabalho, os elétrons extrínsecos foram fornecidos por uma dopagem modular de silício sobre AlGaAs e os autores atribuíram à captura de elétrons pelos qds a melhora

⁶Lembre-se (capítulo 2) de que, embora a formação dos pontos-quânticos alivie a tensão produzida durante o crescimento, eles são apenas o primeiro estágio da camada de InAs no sentido de relaxar completamente a tensão introduzida pelo descasamento de parâmetros de rede. Depois de formados, a evolução dos qds em concentração e tamanho elevam a tensão até o aparecimento de deslocamentos.

Figura 6.18: Traços Hall no (a) *escuro* e no (b) *claro* das cinco amostras com $d_{\text{InAs}} \neq 0$ e da amostra-referência (sem camada de InAs, $d_{\text{InAs}} = 0$).

na mobilidade (justamente o oposto do que estamos sugerindo). O argumento utilizado foi que, ao serem capturados pelos pontos-quânticos (durante a iluminação), os elétrons melhoravam a distribuição de centros espalhadores coulombianos da dopagem, reduzindo a desordem e promovendo a mobilidade.

Existem trabalhos que tratam da influência da tensão mecânica sobre as bandas de condução e de valência, sobre as massas efetivas de elétrons e buracos e sobre a estrutura cristalina [4, 64], mas nenhum que analise seus efeitos sobre a mobilidade de portadores. A inexistência de algum outro trabalho sobre o assunto é a única desvantagem deste modelo.

6.4 das medidas do efeito Hall

A figura 6.18 apresenta os traços Hall, gráficos de $V_{xy} \times B$ para $0 \leq B \leq 1$ T,⁷ no *escuro* e no *claro*, obtidos diretamente das medidas do efeito Hall clássico e sem tratamento algum. Aplicando a estes gráficos o método exposto na seção 4.1 obtivemos a concentração (n_{ef}) e a

⁷Em verdade, nossas medidas contemplam a região $0 \leq B \leq 10$ T, mas o tratamento matemático desenvolvido na seção 4.1 só é válido para baixos campos, onde $V_{xy} \propto B$. Quando $B > 1$ T, passamos a observar as oscilações de resistividade decorrentes do efeito Shubnikov-de Haas. É instrutivo notar que delas podemos obter as concentrações e mobilidades quânticas de cada uma das sub-bandas, exatamente da mesma maneira como fizemos com os traços SdH. Isto ocorre por que V_{xx} e V_{xy} estão relacionadas através do tensor de condutividade, equação (4.6).

6 Resultados

Tabela 6.4: Concentrações e mobilidades efetivas no *escuro* e *claro* de todas as amostras analisadas neste trabalho, obtidas das medidas do efeito Hall clássico através do método exposto na seção 4.1.

d_{InAs}	$n_{\text{ef}} (10^{12} \text{ cm}^{-2})$		$\bar{\mu}_{\text{ef}} (\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s})$	
0	1,41	2,16	0,547	1,092
1	1,44	2,01	0,203	0,657
1,5	1,53	2,15	0,230	0,495
1,75	1,54	2,06	0,556	1,326
2	1,52	2,02	0,489	1,321
2,5	1,63	2,12	0,283	0,791
	<i>Escuro</i>	<i>claro</i>

Figura 6.19: Concentrações e mobilidades efetivas no *escuro* e *claro* de todas as amostras analisadas neste trabalho, obtidas das medidas do efeito Hall clássico através do método exposto na seção 4.1.

mobilidade ($\bar{\mu}_{\text{ef}}$) efetivas em função da espessura nominal da camada de InAs: Figura 6.19.

Se em nossas amostras a condução elétrica fosse efetuada por apenas uma sub-banda, estes resultados seriam precisamente a concentração de portadores desta sub-banda e a mobilidade de transporte associada a eles. Entretanto, vimos na seção 6.3 que em todas as nossas amostras os elétrons extrínsecos populam três sub-bandas. Por esta forma, n_{ef} e $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ são a concentração e a mobilidade de transporte “médias” destas sub-bandas — conforme discutimos na seção 4.1.2 — e relacionam-se com as concentrações e mobilidades de cada sub-banda através das equações (4.12).

Por este motivo, o gráfico $n_{\text{ef}} \times d_{\text{InAs}}$ sozinho acrescenta pouca ou nenhuma informação. Nós o utilizaremos em breve apenas para calcular a razão entre as mobilidades de transporte e quântica da segunda e terceira sub-bandas. Mesmo assim, é oportuno observar que o

contínuo crescimento de n_{ef} no escuro combina com as medidas de Sakaki *et al* [24], o qual os autores atribuíram à melhoria na transferência de elétrons desde a dopagem, um processo que mostramos não ocorrer em nossas amostras (seção 6.3).

Agora, observe a semelhança entre os comportamentos de $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ e de μ_2 e μ_3 (compare as figuras 6.11 e 6.19). Isto não é óbvio por que μ_2 e μ_3 são mobilidades *quânticas*, ao passo que $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ é uma mobilidade *de transporte*; elas possuem significados distintos: A mobilidade quântica é uma medida de todos os espalhamentos sofridos pelos elétrons de condução, enquanto a mobilidade de transporte é uma medida de todos os espalhamentos que *prejudicam* o transporte elétrico. Um espalhamento que não altere a velocidade dos elétrons de condução, e.g., não perturba a condução elétrica e, por isso, não é considerado pela mobilidade de transporte. Mas a mobilidade quântica o contabiliza indiscriminadamente (veja a figura 4.4 e a seção 4.2.2).

Vejamos isto com um pouco mais de detalhes: No caso de espalhamentos elásticos (como o nosso), o mecanismo de espalhamento $W_{k,k'}$ passa a depender apenas do ângulo $\cos \theta = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$ (supondo simetria azimutal sobre $\mathbf{k}$) e do módulo de $\mathbf{k}$. Destarte, utilizando a equação (4.18) podemos escrever (lembre-se de que $\bar{\mu} \propto \bar{\tau}$):

$$\frac{1}{\bar{\mu}_{\text{ef}}} \propto \int W_{k,k'} (1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') d\mathbf{k}' \propto \int_0^\pi W_{k,k'}(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (4.18)$$

lembrando que $d\mathbf{k}' = \delta(k' - k) (k')^2 \sin \theta d\theta d\phi dk$ em coordenadas esféricas. Portanto, $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ será tão maior quanto mais freqüentes forem os espalhamentos com $\theta \approx 0$. Por outro lado, a mobilidade quântica (lembre-se de que $\mu \propto \tau$),

$$\frac{1}{\mu} \propto \int W_{k,k'} d\mathbf{k}' \propto \int_0^\pi W_{k,k'}(\theta) \sin \theta d\theta, \quad (4.18)$$

não dá preferência a ângulo algum. Assim, para que $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ e μ_s comportem-se similarmente, precisamos garantir que todos os espalhamentos existentes (ou, pelo menos, os mais significativos) sejam contabilizados por ambas as mobilidades. E isto só pode ser feito se $W_{k,k'}(\theta)$ for mais significativo para θ pequenos.

Portanto, podemos dizer que **#21** os mecanismos de espalhamento dominantes envolvidos no transporte elétrico privilegiam pequenos ângulos de espalhamento. Com efeito, comportamentos desta natureza geralmente são associados a centros espalhadores localizados nas *vizinhanças* dos elétrons de condução, ou seja, do 2DEG [36], como é o caso dos

6 Resultados

íons de silício em nossas amostras. Logo, podemos dizer que as mobilidades de transporte e quânticas são determinadas principalmente por eles.

Perceba que esta conclusão não explica as variações de $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ e μ_s devido a d_{InAs} , mas apenas que os *valores* das mobilidades (de transporte e quânticas) são devidos aos espalhamentos pelos íons de silício. Além disso, note que não partilhamos com os pontos-quânticos a tarefa de explicá-las. Fizemos isto por que, conforme veremos, a influência deles não é tão simples como a dos íons de silício.

Finalmente, veja na figura 6.19 como a iluminação eleva o valor médio de $\bar{\mu}_{\text{ef}}$, da mesma maneira como ocorreu para μ_s . Ademais, observe também que $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ das amostras 1,75 MC e 2 MC no *claro* supera a da amostra-referência. Estas duas observações também foram constatadas para as mobilidades quânticas, revelando novamente a íntima relação entre elas: Como os íons de silício estão nas vizinhanças do 2DEG, a melhora do *screening* é enxergada tanto pelas mobilidades de transporte como pelas quânticas, já que tanto no *claro* como no *escuro* os espalhamentos têm uma forte componente para θ pequenos. Mais ainda: Como os pontos-quânticos também estão nas vizinhanças do gás de elétrons, a liberação dos elétrons ali capturados durante a iluminação ameniza o potencial de espalhamento deles, e esta mudança novamente é contabilizada por ambas as mobilidades (quânticas e de transporte).

Resumindo, o fato de observarmos comportamentos parecidos das mobilidades quânticas e de transporte decorre da localização marginal dos principais agentes espalhadores: Os íons de silício e os pontos-quânticos.

Nós ainda não explicamos o perfil de $\bar{\mu}_{\text{ef}} \times d_{\text{InAs}}$. Vamos fazê-lo com o auxílio de um outro gráfico: o da razão entre as mobilidades de transporte e quântica ($\beta_s = \bar{\mu}_s/\mu_s$) em função da espessura nominal da camada de InAs. Como vimos na seção 4.2.2, esta razão pode nos trazer mais algumas informações sobre os mecanismos de espalhamento que determinam o transporte de cargas em nossas amostras.

A figura 6.20 apresenta estes resultados, obtidos da aplicação do método exposto no apêndice C aos resultados das medidas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas. Convém informar que, quanto maior β_s , menor o ângulo médio ($\cos\langle\theta\rangle \doteq 1/\beta_s$) de espalhamento.

Antes de prosseguirmos, façamos uma pequena digressão que facilitará a apresentação

Figura 6.20: Razão entre as mobilidades quântica e de transporte da segunda e terceira sub-bandas do 2DEG, obtidas através do método exposto no apêndice C. As “cardioides” ilustram os efeitos das variações em β_s sobre um mecanismo de espalhamento fictício, equação (6.2).

dos argumentos a seguir: Considere que a expressão

$$W_{k,k'}(\theta) = \begin{cases} \Lambda(1 + \Xi \cos \theta), & 0 \leq \theta \leq \theta_0 \\ 0 & \theta_0 \leq \theta \leq \pi \end{cases} \quad \cos \theta_0 = -\frac{1}{\Xi} \quad (6.2)$$

representa algum mecanismo de espalhamento *fictício*. Λ e Ξ são seus parâmetros. Através das equações (4.18) e da definição de β , podemos mostrar que

- $\beta \doteq \bar{\mu}/\mu$ depende apenas de Ξ , ainda que
- $\bar{\mu}$ e μ sejam funções tanto de Λ como de Ξ .

Então, embora Λ altere as mobilidades quântica e de transporte, a razão β não pode ser modificada por este parâmetro. Isto ocorre por que Λ não determina a *forma* de $W_{k,k'}(\theta)$, cabendo ao parâmetro Ξ esta tarefa. Na figura 6.21 desenhamos a equação (6.2) para ilustrar esta idéia: Quando variamos Λ , caminhamos da curva preta para a vermelha, e vice-versa; quando variamos Ξ , caminhamos da figura da esquerda para a da direita, e vice-versa.

Com estes conceitos em mente, vejamos a figura 6.20: Primeiramente, observamos que β_s varia à medida que crescemos a espessura da camada de InAs, indicando-nos que d_{InAs} influi na forma de $W_{k,k'}(\theta)$. Por outro lado, o perfil $\beta_s \times d_{\text{InAs}}$ permanece praticamente

Figura 6.21: Exemplo qualitativo de um mecanismo de espalhamento que privilegia ângulos pequenos no *escuro* (preto) e no *claro* (vermelho). Note que o processo de iluminação não modifica a forma de $W_{k,k'}(\theta)$, embora o reduza como um todo. Isto explica o fato de β_s não variar com a iluminação. Os ângulos médios de espalhamento, $\langle \theta \rangle$, são apenas ilustrativos.

inalterado ao irmos do *escuro* para o *claro*, o que significa que a iluminação é pouco eficiente em alterar a forma de $W_{k,k'}(\theta)$, embora reduza os espalhamentos (pois amplia as mobilidades quânticas e de transporte). Em termos do mecanismo (6.2), a iluminação altera somente Λ , enquanto d_{InAs} modifica Ξ (e, possivelmente, também Λ).⁸

Na realidade, a iluminação causa uma pequena redução tanto em β_2 quanto em β_3 (apesar de a incerteza em β_3 não nos permitir garantir isto para esta sub-banda), um resultado que opõe-se ao que normalmente esperaríamos, já que a iluminação promove as mobilidades. Isto nos sugere a existência de um terceiro agente espalhador (além dos íons de silício e dos pontos-quânticos) que não depende da iluminação. Deste modo, a iluminação enalteceria os efeitos deste terceiro mecanismo ao reduzir os espalhamentos — dominantes — devidos aos íons de silício. Podemos representar isto acrescentando um terceiro parâmetro à equação (6.2):

$$W_{k,k'}(\theta) = \Lambda(1 + \Xi \cos \theta) + \Gamma. \quad (6.3)$$

Assim, no *escuro* $\Lambda \gg \Gamma$ e a expressão (6.3) tende a (6.2). Todavia, a iluminação reduz Λ

⁸Mantenha em mente que a expressão (6.2) é apenas ilustrativa.

e, com isso, Γ torna-se significativo no *claro*, aumentando o ângulo médio de espalhamento ou, equivalentemente, reduzindo β_s .

Além disso, atine que o acréscimo na concentração de portadores do 2DEG devido à iluminação é aproximadamente dez vezes maior que aquele devido a d_{InAs} (veja as figuras 6.12, 6.14 e 6.19). Ora, se esta alteração não teve efeito sobre β_s (pois β_s no *escuro* e no *claro* — quase — coincidem), não podemos esperar que as variações de n_s decorrentes de d_{InAs} o façam. Logo, não podemos atribuir às variações na concentração de portadores o perfil do gráfico de $\beta_s \times d_{\text{InAs}}$. Mas, conforme vimos na seção 6.3, essas variações influem fortemente nos espalhamentos devidos aos íons de silício e aos elétrons capturados pela camada de InAs através do *screening*, do deslocamento das funções de distribuição eletrônica e da introdução/retirada de elétrons da camada de InAs. Por conseguinte, o perfil de $\beta_s \times d_{\text{InAs}}$ não deve ser atribuído à dopagem nem aos pontos-quânticos!

Realmente: observe na figura 6.12 (página 88) que a concentração total de portadores do 2DEG no *claro* para $d_{\text{InAs}} \geq 1,5$ permanece constante. Mesmo assim, β_s varia nesta região, ou seja, β_s mantém o seu comportamento havendo (*escuro*) ou não (*claro*) elétrons na camada de InAs: β_s não depende da concentração de elétrons acomodados nos pontos-quânticos. Melhor ainda: atente para a brusca variação de β_s quando $d_{\text{InAs}} \approx d_c \approx 1,5$ MC, a despeito da ínfima mudança em n_T (e n_s).

Em d_c ocorre a formação dos pontos-quânticos, processo através do qual a tensão mecânica acumulada na camada de InAs é parcialmente relaxada. Desta forma, todas estas constatações nos levam novamente a crer que a tensão mecânica prejudica a mobilidade dos portadores do 2DEG. Mais que isso, elas mostram que este é o mecanismo de espalhamento que mais sofre variações à medida que introduzimos InAs na estrutura, chegando mesmo a sobrepujar a influência dos elétrons na camada de InAs.

Mesmo assim, estes dados *necessitam* dos pontos-quânticos e da concentração de portadores para explicá-los: Por não haver camada de InAs na amostra-referência, não há tensão mecânica acumulada nela e, por conseguinte, não podemos atribuir a ela a redução de β_s desta amostra. Isto mostra que, embora a tensão esteja presente, ela não age sozinha.

Existem outros agentes espalhadores e para cada um deles, uma razão pela qual não podem explicar os resultados observados:

Impurezas aceitadoras e centros profundos: Ambos dependem da iluminação e, por isto, não explicam a estabilidade do perfil de $\beta_s \times d_{\text{InAs}}$ na presença da iluminação;

6 Resultados

Defeitos estruturais na camada de InAs: Para $d_{\text{InAs}} < d_c$, as emissões de fotoluminescência da camada de InAs apresentam-se como picos delgados [53], indicando alta qualidade cristalina. Quando $d_{\text{InAs}} > d_c$, os defeitos estruturais podem contribuir para a degradação das mobilidades, especialmente quando $d_{\text{InAs}} \geq 2,5$, onde começamos a ver a formação de coalescências. Este fenômeno não pode, contudo, explicar a recuperação das mobilidades nas imediações da espessura crítica;

Tensão mecânica devido ao qw de InGaAs e defeitos nas interfaces: Estes mecanismos são aproximadamente os mesmos em todas as amostras, haja vista que todas possuem a mesma estrutura (a menos da camada de InAs, comentada no item anterior).

6.5 Resumo geral

6.5.1 Concentrações

Vimos neste capítulo que a introdução da camada de InAs na heteroestrutura leva a uma troca de elétrons entre o 2DEG, a camada de InAs (a partir de 1,5 MC) e os estados de superfície. Esta troca incorre num desbalanceamento pontual de cargas por toda a heteroestrutura que deforma o perfil do potencial das bandas de condução e de valência, e vice-versa. Além disso, a iluminação devolve para o 2DEG os elétrons armadilhados em centros profundos, impurezas e estados de superfície, elevando a concentração de portadores em todas as três sub-bandas. Além disso, devido aos perfis das bandas de condução e de valência, a iluminação libera os elétrons capturados pelos pontos-quânticos, levando-os para o 2DEG e para os estados de superfície.

6.5.2 Mobilidades quânticas e de transporte

Os íons de silício no plano da dopagem são os principais centros espalhadores e são eles que determinam a magnitude das mobilidades quânticas e de transporte tanto no *escuro* como no *claro*. De fato, ao iluminarmos as amostras, o aumento na concentração de portadores no 2DEG eleva o *screening*, melhorando em muito as mobilidades. Além disso, este mecanismo é fracamente dependente da quantidade de InAs depositada e favorece os espalhamentos com ângulos pequenos, posto que localiza-se à margem das bandas 2 e 3, que mais contribuem para a condução elétrica.

A tensão mecânica e o espalhamento pelos elétrons capturados pelos pontos-quânticos são os principais responsáveis pelas variações nas mobilidades em função da quantidade de InAs depositada: Durante o crescimento Frank-van der Merwe ($d_{\text{InAs}} < d_c$), a tensão mecânica acumulada na camada de InAs cresce e prejudica as mobilidades; Na transição FM→SK ocorre a formação dos pontos-quânticos e a tensão é liberada, promovendo as mobilidades; Depois, durante o crescimento Stranski-Krastanov, a tensão volta a crescer e, adicionalmente, os pontos-quânticos passam a agir como centros espalhadores. Estes dois mecanismos explicam a queda observada nas mobilidades.

Finalmente, com a iluminação os elétrons capturados pelos pontos-quânticos são liberados, neutralizando a região e, conseqüentemente, reduzindo o efeito deles sobre as mobilidades. O resultado é uma melhora inusitada das mobilidades no *claro*.

7

Conclusões

Neste trabalho, nós investigamos a influência da iluminação e de pontos-quânticos auto-organizados de InAs sobre as propriedades de transporte de gases bidimensionais de elétrons confinados em suas proximidades. Utilizamos para isto um conjunto de oito amostras, das quais cinco diferiam apenas pela quantidade de arseneto de índio depositada, enquanto as outras três serviram como referência para as medidas de transporte (efeitos Hall clássico e Shubnikov-de Haas), fotoluminescência e para a caracterização morfológica através de medidas de AFM.

Concluimos que a introdução da camada de InAs promove a transferência de elétrons entre as diversas regiões da heteroestrutura, modificando os perfís das bandas de condução e de valência. Identificamos ainda que o estado médio de condução elétrica é definido quase integralmente pelos espalhamentos decorrentes dos íons de silício localizados no plano da dopagem planar. Além disso, evidenciamos pela primeira vez que a tensão mecânica acumulada durante o crescimento da camada de InAs é a principal responsável pelas alterações nas mobilidades quânticas e de transporte em função da espessura nominal da camada de arseneto de índio depositada, especialmente durante o crescimento Frank-van der Merwe,

7 Conclusões

onde ainda não existem pontos-quânticos formados.

Outro resultado notável observado é que a iluminação libera os elétrons capturados pelos pontos-quânticos, neutralizando a região e propiciando uma melhora inesperada nas mobilidades quânticas e de transporte.

Por fim, é justo reiterar que este trabalho foi pioneiro sob vários aspectos: Primeiro, por que não existem na literatura trabalhos que contemplem as concentrações e mobilidades quânticas de cada uma das sub-bandas envolvidas no transporte de cargas em heteroestruturas contendo pontos-quânticos crescidos por MBE. Conseqüentemente, também não há estudos que comparem as mobilidades quânticas e de transporte em tais estruturas; Além disso, este é o primeiro trabalho (até onde sabemos) que atribui às tensões mecânicas, inerentes ao crescimento epitaxial, a responsabilidade pelas variações nas mobilidades quânticas e de transporte em função da quantidade de InAs depositada. Igualmente meritório foram os nossos trabalhos em otimizar o cálculo das mobilidades quânticas através das medidas do efeito Shubnikov-de Haas e a introdução da técnica de cálculo da razão entre as mobilidades quânticas e de transporte. Finalmente, por que demos interpretações novas sobre alguns fatos observados na literatura, como o aumento na concentração de portadores em decorrência do acréscimo da quantidade de InAs depositada e a melhoria das mobilidades na presença dos pontos-quânticos.

A transformada contínua de Fourier de $\rho^{(r)}(t)$

Na seção 4.2.1 afirmamos que a transformada de Fourier da equação (4.16) é um pico em cada uma das frequências $\pm\omega_s$,¹ sendo daí possível determinar a concentração de portadores da s -ésima sub-banda. Isto não é óbvio e pode ser confundido com o fato de a transformada de Fourier de uma função cosseno ser um delta de Dirac em $\pm\omega_s$ (apêndice B.3):

$$\mathcal{F} [\cos(\omega_s t + \theta_s)] = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[e^{i\theta_s} \delta(\omega + \omega_s) + e^{-i\theta_s} \delta(\omega - \omega_s) \right],$$

Recorde que definimos $t \doteq 1/B$ para (i) não sobrecarregar a notação e também (ii) por que t é a variável independente no domínio do tempo, costumeiramente representada por t nas teorias das transformadas contínua e discreta de Fourier.

Interessa-nos a transformada de Fourier do produto $e^{-\alpha_s t} \cos(\omega_s t + \theta_s)$, não a acima. Para

¹Tratamos ν_s e ω_s como equivalentes, dada a relação $\omega_s = 2\pi\nu_s$.

A A transformada contínua de Fourier de $\rho^{(r)}(t)$

calculá-la, recorremos ao teorema da convolução (para o produto no domínio do tempo²):

$$\mathcal{F}[f(t) \cdot g(t)] = F(\omega) \otimes G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega - \lambda) G(\lambda) d\lambda, \quad (\text{A.1})$$

onde $G(\omega) \doteq \mathcal{F}[g(t)]$ e $F(\omega) \doteq \mathcal{F}[f(t)]$.

Especificamente no nosso caso,

$$f(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ e^{-\alpha_s t}, & t \geq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad g(t) = \cos(\omega_s t + \theta_s).$$

Perceba que o fato de limitarmos o domínio da exponencial (i) não limitará nosso resultado por que $t \doteq \frac{1}{B} > 0$ sempre e (ii) por que é absolutamente necessário: Caso contrário, ela não teria transformada de Fourier e o problema não poderia ser resolvido desta maneira. Além disso, o fato de utilizarmos DFTs como aproximações para a transformada contínua de Fourier faz com que qualquer conjunto de dados $\{(t_j, f_j)\}$ tenha sempre uma transformada.

Então vejamos: segundo o apêndice B.2, $F(\omega) = 1/[\sqrt{2\pi}(\alpha_s - i\omega_s)]$ e, portanto,

$$\begin{aligned} F(\omega) \otimes G(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\alpha_s - i(\omega - \lambda)} \right\} \cdot \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2}} [e^{i\theta_s} \delta(\lambda + \omega_s) + e^{-i\theta_s} \delta(\lambda - \omega_s)] \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left[\frac{e^{i\theta_s}}{\alpha_s - i(\omega + \omega_s)} + \frac{e^{-i\theta_s}}{\alpha_s - i(\omega - \omega_s)} \right] \end{aligned}$$

Note que este resultado é uma translação de $F(\omega)$ para $\pm\omega_s$ (a menos de uma constante multiplicativa), ou seja, a transformada de Fourier de $e^{-\alpha_s t} \cos(\omega_s t + \theta_s)$ é simplesmente a transformada de $e^{-\alpha_s t}$ deslocada para $\omega = \pm\omega_s$. Acontece que essa transformada é muito parecida com uma função delta de Dirac (veja a figura A.1), conquanto não seja sequer uma sequência delta (por que $\int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)| d\omega$ não converge). Por isso a confusão.

Resumindo, embora as transformadas de $e^{-\alpha_s t} \cos(\omega_s t + \theta_s)$ e $\cos(\omega_s t + \theta_s)$ sejam absolutamente diferentes, a posição do pico é a mesma, o que nos permite fazer a afirmação

²Há outra versão do teorema, no qual o produto é feito no domínio da frequência e a convolução no domínio do tempo: $\mathcal{F}[f(t) \otimes g(t)] = F(\omega) \cdot G(\omega)$.

Figura A.1: O módulo da transformada de Fourier da magnetoresistividade (para $\alpha_s = 1$ e $\omega_s = 10$) tem um comportamento parecido com o de uma sequência delta (no sentido de que quando $\alpha_s \rightarrow 0$, $|F(\omega_s)| \rightarrow \infty$ e a largura a meia altura ($2\sqrt{3}\alpha_s$) tende a zero), embora não seja uma pois $\int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)| d\omega$ diverge.

inicial.

Se ignorarmos a parte negativa do espectro (primeira parcela), poderemos escrever

$$|\mathcal{F}[f(t) \cdot g(t)]| = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \frac{1}{\sqrt{\alpha_s^2 + (\omega - \omega_s)^2}},$$

de modo que $|\mathcal{F}[f(t) \cdot g(t)]|$ em $\omega = \omega_s$ é $1/(\sqrt{8\pi}\alpha_s)$. Como $\alpha_s = \pi s/\mu_s$, segue que a amplitude da transformada da magnetoresistividade (equação (4.16)) em ω_s é proporcional à mobilidade quântica μ_s . No entanto, não é possível determiná-la a partir disso por que não conhecemos K_s (veja a equação (4.16)). Por isso utilizamos o método descrito na seção 4.2.2.

É instrutivo observar que este tipo de fenômeno, onde a transformada de uma função sofre uma translação para a frequência ω_s , é o âmago da modulação em amplitude, utilizada

A A transformada contínua de Fourier de $\rho^{(r)}(t)$

em rádio-difusão: Quando se quer enviar um sinal elétrico qualquer (no nosso caso, $e^{-\alpha_s t}$) por longas distâncias através de ondas eletromagnéticas, primeiro deve-se multiplicá-lo por uma senóide pura ($\cos(\omega_s t + \theta_s)$) chamada **portadora** e só então mandar-lhe para a antena. O destinatário se encarregará de extrair o sinal original da composição. Outro fato curioso é que neste tipo de atividade podemos verificar que as frequências negativas, embora pouco compreensíveis, são reais. Elas são denominadas **lower-sideband** (fig. A.1). Analogamente, a parte positiva do espectro recebe o nome de **upper-sideband**.

B

Dedução da equação (4.21)

Complementando o que foi exposto na seção 4.2.2, este apêndice dedica-se a orientar o leitor entre os meandros matemáticos que nos levaram à equação (4.21), na página 50, desde

$$F_H(\omega) \doteq \mathcal{F} [\rho^{(r)}(t) h(t)] = \sum_s K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} \mathcal{F} [e^{-\alpha_s t} \cos(\omega_s t + \theta_s) h(t)]. \quad (4.20)$$

Faremos isto na íntegra por três boas razões: Primeiro por que **não existe** na literatura uma tal dedução. Ao invés disso, geralmente as explicações são bastante vagas, como em [65, p. 487]: “*The quantum mobility can be obtained from the magnetic field dependence of the amplitude of the SdH oscillations;*” Segundo por que os cálculos a seguir representam um percurso exclusivo do autor, obtido sem base em qualquer outra literatura (se ela existir). E finalmente por que este desenvolvimento, aliado ao script que nos auxiliou nos cálculos (veja a seção 4.2.2), trouxe-nos conhecimentos inestimáveis sobre este método.

Mas antes de continuarmos, vamos recapitular o significado de cada símbolo da equação acima: $\rho^{(r)}$ é a r -ésima derivada da resistividade com relação a $t \doteq 1/B$ (lembre-se de que a resistividade é uma função do inverso do campo magnético); $h(t)$ é a representação da janela

B Dedução da equação (4.21)

Hanning (contínua) no domínio do tempo e $F_H(\omega)$ é a transformada **contínua** de Fourier de $\rho^{(r)}$ utilizando janela Hanning; μ_s ($\alpha_s \doteq \pi s/\mu_s$) e n_s ($\omega_s \doteq \pi h n_s/e$) são a mobilidade e a concentração quânticas da s -ésima sub-banda. θ_s é uma fase (veja a equação (4.16) na página 45) e K_s , uma constante; A somatória é feita sobre todas as sub-bandas ocupadas e ω é a variável independente do espectro de frequências.

Utilizando o teorema da convolução (apêndice B.1), podemos reescrever a equação acima na seguinte forma mais maleável:

$$\mathcal{F}[\rho^{(r)}(t)h(t)] = \sum_s K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} \mathcal{F}^\star[e^{-\alpha_s t}] \otimes \mathcal{F}[\cos(\omega_s t + \theta_s)] \otimes \mathcal{F}[h(t)]. \quad (\text{B.1})$$

O símbolo $\star$ na primeira transformada serve para lembrar que a exponencial é nula quando $t < 0$ (veja o apêndice B.2 para maiores detalhes).

Para resolvermos esta expressão precisamos conhecer cada uma das três transformadas de Fourier envolvidas, e os apêndices B.2, B.3 e B.4 dão conta disso. Resumimos seus resultados abaixo:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^\star[e^{-\alpha_s t}] &= \frac{C_F}{\alpha_s - i\omega}; \\ \mathcal{F}[\cos(\omega_s t + \theta_s)] &= \pi C_F [e^{-i\theta_s} \delta(\omega - \omega_s) + e^{i\theta_s} \delta(\omega + \omega_s)]; \\ H(\omega) \doteq \mathcal{F}[h(t)] &= \frac{1}{2} b C_F e^{i\omega \bar{t}} \{2 \text{senc}(\omega b) + \text{senc}[(\omega + \omega_\bullet) b] + \text{senc}[(\omega - \omega_\bullet) b]\}, \end{aligned}$$

lembrando que $\text{senc}(x) = \text{sen}(x)/x$; t_1 e t_N são os limites inferior e superior de aplicação da janela Hanning, respectivamente. Então, $\bar{t} = (t_1 + t_N)/2$ é o ponto médio dessa janela e $b = (t_N - t_1)/2$ é sua semi-largura; O índice N é o número de pontos experimentais sobre os quais efetuamos a transformada **discreta** de Fourier (equação (4.19)); C_F é uma constante que depende da implementação do algoritmo da DFT (veja apêndice B.1).

Devido à associatividade da operação de convolução, podemos resolver (B.1) paulatinamente. Começamos por determinar

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\cos(\omega_s t + \theta_s)] \otimes \mathcal{F}[h(t)] &= \frac{1}{2\pi C_F} \int_{-\infty}^{\infty} \pi C_F [e^{-i\theta_s} \delta(\omega - \omega_s - \lambda) + e^{i\theta_s} \delta(\omega + \omega_s - \lambda)] \cdot H(\lambda) d\lambda \\ &= \frac{1}{2} e^{-i\theta_s} H(\omega - \omega_s) + \frac{1}{2} e^{i\theta_s} H(\omega + \omega_s). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Com o intuito de simplificar a visualização dos cálculos seguintes, façamos

$$\left(\mathcal{F} [\cos(\omega_s t + \theta_s)] \otimes \mathcal{F} [h(t)] \right)_{\pm} = \frac{1}{2} e^{\pm i\theta_s} H(\omega \pm \omega_s),$$

de modo que (veja a equação (B.1))

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^* [e^{-\alpha_s t}] \otimes \left(\mathcal{F} [\cos(\omega_s t + \theta_s)] \otimes \mathcal{F} [h(t)] \right)_{\pm} &= \frac{1}{2\pi C_F} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{C_F}{\alpha_s - i(\omega - \lambda)} \right] \cdot \\ &\quad \cdot \left[\frac{1}{2} e^{\pm i\theta_s} H(\lambda \pm \omega_s) \right] d\lambda = \\ &= \frac{1}{4\pi} e^{\pm i\theta_s} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{i[\lambda - (\omega + i\alpha_s)]} \frac{1}{2} b C_F e^{i(\lambda \pm \omega_s)\bar{t}} \{ 2 \text{senc}[(\lambda \pm \omega_s) b] + \text{senc}[(\lambda \pm \omega_s + \omega_{\bullet}) b] + \\ &\quad + \text{senc}[(\lambda \pm \omega_s - \omega_{\bullet}) b] \} d\lambda = \\ &= -\frac{i}{8\pi} C_F e^{\pm i(\omega_s \bar{t} + \theta_s)} \left[2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b e^{i\lambda \bar{t}}}{\lambda - (\omega + i\alpha_s)} \text{senc}[(\lambda \pm \omega_s) b] d\lambda + \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b e^{i\lambda \bar{t}}}{\lambda - (\omega + i\alpha_s)} \text{senc}\{[\lambda \pm (\omega_s - \omega_{\bullet})] b\} d\lambda + \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b e^{i\lambda \bar{t}}}{\lambda - (\omega + i\alpha_s)} \text{senc}\{[\lambda \pm (\omega_s + \omega_{\bullet})] b\} d\lambda \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Mas, conforme o apêndice B.5,

$$\sigma(A, B) \doteq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b e^{i\lambda \bar{t}}}{\lambda - A} \text{senc}[(\lambda - B) b] d\lambda = \frac{\pi}{A - B} \left[e^{i(t_N A - bB)} - e^{i(t_1 A + bB)} \right].$$

Levando isto à equação (B.3) obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^* [e^{-\alpha_s t}] \otimes \left(\mathcal{F} [\cos(\omega_s t + \theta_s)] \otimes \mathcal{F} [h(t)] \right)_{\pm} &= -\frac{i}{8\pi} C_F e^{\pm i(\omega_s \bar{t} + \theta_s)} \cdot \\ &\quad \cdot \left[2 \sigma(\omega_s + i\alpha_s, \pm \omega_s) + \sigma(\omega_s + i\alpha_s, \pm(\omega_s - \omega_{\bullet})) + \sigma(\omega_s + i\alpha_s, \pm(\omega_s + \omega_{\bullet})) \right]. \end{aligned}$$

Finalmente, colocando este resultado na equação (B.2) concluímos que

$$F_H(\omega) = -\frac{i}{8\pi} C_F \sum_s K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} e^{-i(\omega_s \bar{t} + \theta_s)} \left[2 \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s) + \right.$$

B Dedução da equação (4.21)

$$\begin{aligned} & \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s - \omega_\bullet) + \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s + \omega_\bullet) \Big] - \\ & - \frac{i}{8\pi} C_F \sum_s K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} e^{i(\omega_s \bar{t} + \theta_s)} \Big[2\sigma(\omega + i\alpha_s, -\omega_s) + \\ & \sigma(\omega + i\alpha_s, -\omega_s + \omega_\bullet) + \sigma(\omega + i\alpha_s, -\omega_s - \omega_\bullet) \Big]. \end{aligned}$$

Embora esta equação seja a solução exata de (B.1), ela é inútil no sentido de atingirmos nosso objetivo: determinar μ_s ; Precisamos de uma forma conveniente e, com este intuito, fazemos nossa **primeira aproximação**: O espectro de frequências, dado pela equação anterior, consiste numa série de picos em cada ω_s ¹ (fig. A.1), donde concluímos que $|F_H(\omega)|$ cai rapidamente a zero quando $\omega \neq \omega_s$. Então, desde que não tenhamos algum $\omega_s \approx 0$, a parte negativa desse espectro influi muito pouco na parte positiva (e vice-versa) e, neste caso, podemos ignorá-la completamente. Isto equivale a excluirmos da equação anterior a segunda somatória. Ficamos com

$$\begin{aligned} F_H(\omega) &= -\frac{i}{8\pi} C_F \sum_s K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} e^{-i(\omega_s \bar{t} + \theta_s)} \Big[2\sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s) + \\ & \quad + \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s - \omega_\bullet) + \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s + \omega_\bullet) \Big] \\ &= \sum_s R_s(\omega). \end{aligned}$$

Nossa **segunda aproximação** consiste em dizer que $|R_s(\omega_j)| \approx 0$ para qualquer $s \neq j$ (cada parcela s da somatória influi muito pouco sobre uma **outra** parcela j qualquer), isto é, que cada “pico” no espectro influi pouco nos seus vizinhos. Neste caso, a desigualdade triangular nos permite escrever

$$|F_H(\omega_j)| = |R_j(\omega_j) + \sum_{s \neq j} R_s(\omega_s)| \leq |R_j(\omega_j)| + \sum_{s \neq j} |R_s(\omega_j)| \quad \Rightarrow \quad |F_H(\omega_j)| \approx |R_j(\omega_j)|.$$

Com isso, a partir de agora podemos ignorar a somatória em s :

$$\begin{aligned} |F_H(\omega)| \approx \left| -\frac{i}{8\pi} C_F K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} e^{-i(\omega_s \bar{t} + \theta_s)} \Big[2\sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s) + \right. \\ \left. + \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s - \omega_\bullet) + \sigma(\omega + i\alpha_s, \omega_s + \omega_\bullet) \Big] \right|. \quad (\text{B.4}) \end{aligned}$$

As informações que estamos interessados encontram-se nos picos do espectro de frequên-

¹Lembre-se de que ω_s dá a concentração da s -ésima sub-banda **ocupada**, de tal forma que teremos tantos picos quantos forem as sub-bandas populadas.

cias (veja apêndice B.2) e, por isso, vamos avaliar a equação (B.4) em $\omega = \omega_s$. Para simplificar este trabalho, ajuizaremos primeiro $\sigma(\omega_s + i\alpha_s, \omega_s \pm \xi)$. O parâmetro ξ será depois substituído por zero ou $\omega_\bullet$, de modo que todas as três funções $\sigma(\dots)$ anteriores serão calculadas de uma só vez:

$$\begin{aligned}\sigma(\omega_s + i\alpha_s, \omega_s \pm \xi) &= \frac{\pi}{\omega_s + i\alpha_s - (\omega_s \pm \xi)} \left\{ e^{i[t_N(\omega_s + i\alpha_s) - b(\omega_s \pm \xi)]} - e^{i[t_1(\omega_s + i\alpha_s) + b(\omega_s \pm \xi)]} \right\} \\ &= \frac{\pi}{i\alpha_s \mp \xi} \left[e^{-\alpha_s t_N} e^{i(t_N - b)\omega_s} e^{\mp i\xi b} - e^{-\alpha_s t_1} e^{i(t_1 + b)\omega_s} e^{\pm i\xi b} \right].\end{aligned}$$

Notando que $t_1 + b = t_N - b = \bar{t}$,

$$\sigma(\omega_s + i\alpha_s, \omega_s \pm \xi) = \frac{\pi}{i\alpha_s \mp \xi} e^{i\omega_s \bar{t}} \left(e^{-\alpha_s t_N} e^{\mp i\xi b} - e^{-\alpha_s t_1} e^{\pm i\xi b} \right).$$

Agora fazemos $\xi = 0$ para obtermos

$$\sigma(\omega_s + i\alpha_s, \omega_s) = \frac{\pi}{i\alpha_s} e^{i\omega_s \bar{t}} (e^{-\alpha_s t_N} - e^{-\alpha_s t_1}). \quad (\text{B.5})$$

Do mesmo modo, $\xi = \omega_\bullet$ (e notando que $\omega_\bullet b = \pi$) nos leva a

$$\sigma(\omega_s + i\alpha_s, \omega_s \pm \omega_\bullet) = \frac{\pi}{i\alpha_s \pm \omega_\bullet} e^{i\omega_s \bar{t}} (e^{-\alpha_s t_N} - e^{-\alpha_s t_1}). \quad (\text{B.6})$$

Retornando (B.5) e (B.6) em (B.4),

$$\begin{aligned}|F_H(\omega_s)| &= \left| -\frac{i}{8} C_F K_s (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2} e^{-i\theta_s} \left(\frac{2}{i\alpha_s} - \frac{1}{i\alpha_s - \omega_\bullet} - \frac{1}{i\alpha_s + \omega_\bullet} \right) (e^{-\alpha_s t_1} - e^{-\alpha_s t_N}) \right| \\ &= \frac{1}{4} K_s C_F \frac{\omega_\bullet^2 (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2}}{\alpha_s (\alpha_s^2 + \omega_\bullet^2)} (e^{-\alpha_s t_1} - e^{-\alpha_s t_N}) \\ &= \frac{1}{4} K_s C_F \frac{\omega_\bullet^2 (\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2}}{\alpha_s (\alpha_s^2 + \omega_\bullet^2)} e^{-\alpha_s t_1} [1 - e^{-\alpha_s (t_N - t_1)}].\end{aligned}$$

Chamando $\Delta \doteq t_N - t_1$ de **a largura da janela Hanning**, vemos que $\omega_\bullet \equiv \omega_\bullet(\Delta) = 2\pi/(t_N - t_1)$. Da mesma forma, a exponencial mais à direita na expressão anterior também possui Δ como argumento, de modo que podemos reorganizar a expressão da seguinte forma:

$$\ln |F_H(\omega_s)| = -\alpha_s t_1 + \ln \left[\frac{1}{4} K_s C_F \frac{(\alpha_s^2 + \omega_s^2)^{r/2}}{\alpha_s} \right] + \ln \left[\frac{\omega_\bullet^2}{\alpha_s^2 + \omega_\bullet^2} (1 - e^{-\alpha_s \Delta}) \right].$$

Como a segunda parcela só depende de constantes (características da s -ésima sub-banda)

B Dedução da equação (4.21)

e a terceira é uma função de Δ ,

$$\ln |F_H(\omega_s)| = -\alpha_s t_1 + Q_s(\Delta), \quad Q_s(\Delta) = \text{constante} + \ln \left[\frac{\omega_s^2}{\alpha_s^2 + \omega_s^2} (1 - e^{-\alpha_s \Delta}) \right],$$

e o nosso objetivo está cumprido.

B.1 O teorema da convolução

A definição mais comum da transformada *contínua* de Fourier é

$$F(\omega) \doteq \mathcal{F}[f(t)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt,$$

Não obstante, quando desejamos calcular transformadas *discretas*, não dispomos de uma função analítica $f(t)$, mas sim de um conjunto discreto e *finito* de pares ordenados:

$$\{(t_1, f_1), (t_2, f_2), \dots, (t_N, f_N)\}.$$

Decorre daí que o fator de normalização $1/\sqrt{2\pi}$ precisa ser alterado [41, p. 207]. Esse fator pode ter qualquer valor desde que a anti-transformada da transformada seja a função original, *i.e.*, desde que $f(t) = \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f(t)]]$. Essa é a única exigência. Por conta disso, os algoritmos responsáveis por calcular as transformadas discretas de Fourier têm uma certa liberdade de escolha: Os softwares *Mathematica* e *MathCAD*, por exemplo, utilizam $1/\sqrt{N}$. Já o *Microcal Origin* utiliza 1 quando a opção normalização não está ativa, e $1/N$ do contrário. Deste modo, para não ficarmos à mercê desse “desacordo”, utilizamos um fator genérico C_F :

$$F(\omega) \doteq \mathcal{F}[f(t)] = C_F \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (\text{B.7})$$

Mas quando fazemos isso, o teorema da convolução, utilizado extensamente neste apêndice, deixa de ter sua forma usual

$$\mathcal{F}[f(t)g(t)] = F(\omega) \otimes G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega - \lambda) G(\lambda) d\lambda, \quad (\text{A.1})$$

e precisamos descobrir qual a sua nova expressão. Então o que fazemos é deduzir este

teorema para a nova definição (B.7): Dados

$$F(\omega) = C_F \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \quad \text{e} \quad G(\omega) = C_F \int_{-\infty}^{\infty} g(t') e^{i\omega t'} dt',$$

então

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega - \lambda) G(\lambda) d\lambda &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(C_F \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i(\omega - \lambda)t} dt \right) \left(C_F \int_{-\infty}^{\infty} g(t') e^{i\lambda t'} dt' \right) d\lambda = \\ &= C_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \int_{-\infty}^{\infty} g(t') dt' e^{-i\lambda t} e^{i\lambda t'} d\lambda = C_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \int_{-\infty}^{\infty} g(t') dt' \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(t' - t)\lambda} d\lambda = \\ &= C_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \int_{-\infty}^{\infty} g(t') dt' 2\pi \delta(t' - t) = 2\pi C_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \int_{-\infty}^{\infty} g(t') \delta(t' - t) dt' = \\ &= 2\pi C_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(t) g(t) e^{i\omega t} dt = 2\pi C_F \left(C_F \int_{-\infty}^{\infty} f(t) g(t) e^{i\omega t} dt \right) = 2\pi C_F \mathcal{F} [f(t) g(t)]. \end{aligned}$$

Concluimos, então, que

$$\mathcal{F} [f(t) g(t)] = \frac{1}{2\pi C_F} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega - \lambda) G(\lambda) d\lambda.$$

Note que se fizermos $C_F = 1/\sqrt{2\pi}$ encontraremos a expressão usual, equação (A.1).

B.2 A transformada de Fourier de $e^{-\alpha_s t}$

A transformada analítica de Fourier de uma exponencial não existe no intervalo $(-\infty, +\infty)$. No entanto, como nosso resultado de magnetoresistividade está sempre limitado ao intervalo $[t_1, t_N]$ com $t_1, t_N \geq 0$ (lembre-se que $t \doteq 1/B$), podemos utilizar a seguinte definição para a exponencial:

$$f(t) = \begin{cases} e^{-\alpha_s t}, & t \geq 0 \\ 0, & t < 0, \end{cases}$$

B Dedução da equação (4.21)

Donde inferimos que

$$\mathcal{F}[f(t)] \doteq \mathcal{F}^*[e^{-\alpha_s t}; \omega] = C_F \int_0^{\infty} e^{-\alpha_s t} e^{i\omega t} dt = C_F \mathcal{L}[e^{i\omega t}; \alpha_s] = \frac{C_F}{\alpha_s - i\omega},$$

sendo $\mathcal{L}[f(t), \alpha_s]$ a transformada de Laplace de $f(t)$.

B.3 A transformada de $\cos(\omega_s t + \phi_s)$

Lembrando que $\cos(x) = (e^{ix} + e^{-ix})/2$,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\cos(\omega_s t + \theta_s)] &= C_F \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega_s t + \theta_s) e^{i\omega t} dt = \frac{1}{2} C_F \int_{-\infty}^{\infty} [e^{i(\omega_s t + \theta_s)} + e^{-i(\omega_s t + \theta_s)}] e^{i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{2} C_F \left[e^{i\theta_s} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega + \omega_s)t} dt + e^{-i\theta_s} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega_s)t} dt \right] \\ &= \pi C_F [e^{i\theta_s} \delta(\omega + \omega_s) + e^{-i\theta_s} \delta(\omega - \omega_s)]. \end{aligned}$$

B.4 A Transformada de Fourier da janela Hanning

A janela Hanning (ou Hann) é definida por

$$h(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}[1 - \cos(\omega_{\bullet} t + \theta_{\bullet})], & t \in [t_1, t_N] \\ 0, & t \notin [t_1, t_N], \end{cases}$$

com $\omega_{\bullet} = 2\pi/(t_N - t_1)$ e $\theta_{\bullet} = -\omega_{\bullet} t_1$. Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[h(t)] &= C_F \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{i\omega t} dt = C_F \int_{t_1}^{t_N} \frac{1}{2} [1 - \cos(\omega_{\bullet} t + \theta_{\bullet})] e^{i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{2} C_F \left[\int_{t_1}^{t_N} e^{i\omega t} dt - \int_{t_1}^{t_N} e^{i\omega t} \cos(\omega_{\bullet} t + \theta_{\bullet}) dt \right] \end{aligned}$$

B.4 A Transformada de Fourier da janela Hanning

Lembrando que $\cos(x) = (e^{ix} + e^{-ix})/2$, a segunda integral fica

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_N} e^{i\omega t} \cos(\omega_{\bullet} t + \theta_{\bullet}) dt &= \frac{1}{2} \left[e^{i\theta_{\bullet}} \int_{t_1}^{t_N} e^{i(\omega + \omega_{\bullet})t} dt + e^{-i\theta_{\bullet}} \int_{t_1}^{t_N} e^{i(\omega - \omega_{\bullet})t} dt \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[e^{i\theta_{\bullet}} \frac{e^{i(\omega + \omega_{\bullet})t}}{i(\omega + \omega_{\bullet})} + e^{-i\theta_{\bullet}} \frac{e^{i(\omega - \omega_{\bullet})t}}{i(\omega - \omega_{\bullet})} \right]_{t_1}^{t_N} \end{aligned}$$

Então

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[h(t)] &= \frac{1}{2} C_F \left[\frac{e^{i\omega t}}{i\omega} - \frac{1}{2} e^{i\theta_{\bullet}} \frac{e^{i(\omega + \omega_{\bullet})t}}{i(\omega + \omega_{\bullet})} - \frac{1}{2} e^{-i\theta_{\bullet}} \frac{e^{i(\omega - \omega_{\bullet})t}}{i(\omega - \omega_{\bullet})} \right]_{t_1}^{t_N} \\ &= \frac{1}{2i} C_F \left[\frac{1}{\omega} (e^{i\omega t_N} - e^{i\omega t_1}) - \frac{e^{i\theta_{\bullet}}}{2(\omega + \omega_{\bullet})} (e^{i(\omega + \omega_{\bullet})t_N} - e^{i(\omega + \omega_{\bullet})t_1}) - \right. \\ &\quad \left. \frac{e^{-i\theta_{\bullet}}}{2(\omega - \omega_{\bullet})} (e^{i(\omega - \omega_{\bullet})t_N} - e^{i(\omega - \omega_{\bullet})t_1}) \right] \end{aligned}$$

Notando que $t_1 = \bar{t} - b$ e $t_N = \bar{t} + b$ (pois $\bar{t} = (t_1 + t_N)/2$ e $b = (t_N - t_1)/2$),

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[h(t)] &= \frac{1}{2i} C_F \left[\frac{e^{i\omega \bar{t}}}{\omega} (e^{i\omega b} - e^{-i\omega b}) - \frac{e^{i\theta_{\bullet}} e^{i(\omega + \omega_{\bullet})\bar{t}}}{2(\omega + \omega_{\bullet})} (e^{i(\omega + \omega_{\bullet})b} - e^{-i(\omega + \omega_{\bullet})b}) - \right. \\ &\quad \left. \frac{e^{-i\theta_{\bullet}} e^{i(\omega - \omega_{\bullet})\bar{t}}}{2(\omega - \omega_{\bullet})} (e^{i(\omega - \omega_{\bullet})b} - e^{-i(\omega - \omega_{\bullet})b}) \right] \\ &= \frac{1}{2} C_F \left\{ 2 \frac{e^{i\omega \bar{t}}}{\omega} \text{sen}(\omega b) - \frac{e^{i(\omega_{\bullet} \bar{t} + \theta_{\bullet})} e^{i\omega \bar{t}}}{\omega + \omega_{\bullet}} \text{sen}[(\omega + \omega_{\bullet})b] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{e^{-i(\omega_{\bullet} \bar{t} + \theta_{\bullet})} e^{i\omega \bar{t}}}{\omega - \omega_{\bullet}} \text{sen}[(\omega - \omega_{\bullet})b] \right\} \\ &= \frac{1}{2} b C_F e^{i\omega \bar{t}} \{ 2 \text{senc}(\omega b) - e^{i(\omega_{\bullet} \bar{t} + \theta_{\bullet})} \text{senc}[(\omega + \omega_{\bullet})b] - \\ &\quad - e^{-i(\omega_{\bullet} \bar{t} + \theta_{\bullet})} \text{senc}[(\omega - \omega_{\bullet})b] \} \end{aligned}$$

Finalmente, como $\omega_{\bullet} \bar{t} + \theta_{\bullet} = \pi$ concluímos que

$$H(\omega) \doteq \mathcal{F}[h(t)] = \frac{1}{2} b C_F e^{i\omega \bar{t}} \{ 2 \text{senc}(\omega b) + \text{senc}[(\omega + \omega_{\bullet})b] + \text{senc}[(\omega - \omega_{\bullet})b] \}$$

B.5 Determinação de $\sigma(A, B)$

As integrais na equação (B.3) possuem todas a mesma forma. Assim, podemos resolvê-las todas de uma só vez:

$$\begin{aligned}
 \sigma(A, B) &\doteq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b e^{i\lambda \bar{t}}}{\lambda - A} \operatorname{senc}[(\lambda - B)b] d\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b e^{i\lambda \bar{t}}}{\lambda - A} \frac{\sin[(\lambda - B)b]}{(\lambda - B)b} d\lambda = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\lambda \bar{t}} \sin[(\lambda - B)b]}{(\lambda - A)(\lambda - B)} d\lambda = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\lambda \bar{t}}}{(\lambda - A)(\lambda - B)} \left[e^{i(\lambda - B)b} - e^{-i(\lambda - B)b} \right] d\lambda = \\
 &= \frac{e^{-iBb}}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\bar{t}+b)\lambda}}{(\lambda - A)(\lambda - B)} - \frac{e^{iBb}}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\bar{t}-b)\lambda}}{(\lambda - A)(\lambda - B)} = \\
 &= \frac{e^{-iBb}}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\lambda t_N}}{(\lambda - A)(\lambda - B)} - \frac{e^{iBb}}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\lambda t_1}}{(\lambda - A)(\lambda - B)}.
 \end{aligned}$$

Figura B.1: Percurso no plano Argand-Gauss utilizado para a determinação de $\oint f(\lambda) d\lambda$.

Essas duas integrais são da forma $\int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) d\lambda$ com $f(\lambda) = e^{iC\lambda}/[(\lambda - A)(\lambda - B)]$, $C, B \in \mathbb{R}$ e $\lambda, A \in \mathbb{C}$.² Podemos resolver esta integral utilizando a técnica dos **resíduos**. Para fazermos

²Da expressão (B.3) vemos que $A = \omega + i\alpha_s$ ($\alpha_s \in \mathbb{R}$) sempre e $B = \omega_s$ ou $\omega_s \pm \omega_\bullet$ ($\omega_s, \omega_\bullet \in \mathbb{R}$). $C = t_1$ ou t_N ($t_1, t_N \in \mathbb{R}$).

B.5 Determinação de $\sigma(A,B)$

isso consideramos o percurso no plano complexo ilustrado na figura B.1. Podemos escrever

$$\oint f(\lambda) d\lambda = \int_{-R}^{B-\epsilon} f(\lambda) d\lambda + \int_{\gamma_1} f(\lambda) d\lambda + \int_{B+\epsilon}^R f(\lambda) d\lambda + \int_{\gamma_2} f(\lambda) d\lambda = 2\pi i \sum \text{res}[f(\lambda)],$$

onde a somatória é feita sobre todos os resíduos de $f(\lambda)$ que residem no interior do percurso fechado ilustrado. São dois ao todo, um em $\lambda = A$ e outro em $\lambda = B$:

$$\begin{aligned} \text{res}[f(\lambda = A)] &= \lim_{\lambda \rightarrow A} (\lambda - A) f(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow A} \frac{e^{iC\lambda}}{\lambda - B} = \frac{e^{iCA}}{A - B} \\ \text{res}[f(\lambda = B)] &= \lim_{\lambda \rightarrow B} (\lambda - B) f(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow B} \frac{e^{iC\lambda}}{\lambda - A} = \frac{e^{iCB}}{B - A}. \end{aligned}$$

A integral no percurso γ_1 é

$$\int_{\gamma_1} f(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2} 2i\pi \text{res}[f(\lambda = B)] = i\pi \frac{e^{iCB}}{B - A},$$

enquanto aquela em γ_2 é nula quando $R \rightarrow \infty$.

Portanto,

$$\begin{aligned} \oint f(\lambda) d\lambda &= \int_{-R}^{B-\epsilon} f(\lambda) d\lambda + i\pi \frac{e^{iCB}}{B - A} + \int_{B+\epsilon}^R f(\lambda) d\lambda = 2i\pi \frac{e^{iCA} - e^{iCB}}{A - B} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \int_{-R}^{B-\epsilon} f(\lambda) d\lambda + \int_{B+\epsilon}^R f(\lambda) d\lambda = \frac{i\pi}{A - B} (2e^{iCA} - e^{iCB}). \end{aligned}$$

Quando $\epsilon \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$ encontramos

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) d\lambda = \frac{i\pi}{A - B} (2e^{iCA} - e^{iCB}).$$

Retornando este resultado à equação (B.5) ficamos com

$$\begin{aligned} \sigma(A,B) &= \frac{e^{-ibB}}{2i} \frac{i\pi}{A - B} (2e^{it_N A} - e^{it_N B}) - \frac{e^{ibB}}{2i} \frac{i\pi}{A - B} (2e^{it_1 A} - e^{it_1 B}) \\ &= \frac{\pi}{A - B} [e^{i(t_N A - bB)} - e^{i(t_1 A + bB)}]. \end{aligned}$$

B Dedução da equação (4.21)

C

Determinação de $\bar{\mu}_s/\mu_s$

Neste apêndice mostraremos como foi possível calcularmos as relações entre as mobilidades de transporte e quânticas da segunda e terceira sub-bandas do 2^{DEG}. Começamos pelas equações

$$n_{\text{ef}} = \frac{(\sum_s n_s \bar{\mu}_s)^2}{\sum_s n_s \bar{\mu}_s^2} \quad \text{e} \quad (\text{C.1})$$

$$\bar{\mu}_{\text{ef}} = \frac{\sum_s n_s \bar{\mu}_s^2}{\sum_s n_s \bar{\mu}_s}, \quad (\text{C.2})$$

que relacionam a concentração (n_{ef}) e a mobilidade ($\bar{\mu}_{\text{ef}}$) efetivas (seção 4.1.2) com as concentrações de portadores (n_s) e suas mobilidades de transporte ($\bar{\mu}_s$). A somatória é feita sobre todas as sub-bandas parcialmente ocupadas, ou seja, sobre todas aquelas que contribuem para a condução elétrica.

Supondo que conhecemos n_{ef} , $\bar{\mu}_{\text{ef}}$ e n_s e $\bar{\mu}_s$ de todas as sub-bandas, exceto uma (digamos, $s = i$), podemos calcular n_i e $\bar{\mu}_i$ através das equações acima. Para fazermos isto, primeira-

C Determinação de $\bar{\mu}_s/\mu_s$

mente nós multiplicamos (C.1) por (C.2) e obtemos

$$n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} = \sum_s n_s \bar{\mu}_s, \quad (\text{C.3})$$

ou, equivalentemente,

$$n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} = n_i \bar{\mu}_i + \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s. \quad (\text{C.4})$$

Além disso, levando a equação (C.3) em (C.2),

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_{\text{ef}} &= \frac{\sum_s n_s \bar{\mu}_s^2}{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}} \Rightarrow n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 = n_i \bar{\mu}_i^2 + \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s^2 \Rightarrow \\ &\Rightarrow n_i \bar{\mu}_i^2 = n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s^2. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Agora, juntando (C.4) e (C.5) nós encontramos

$$\bar{\mu}_i (n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s) = n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s^2,$$

o que resulta em

$$\bar{\mu}_i = \frac{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s^2}{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s}. \quad (\text{C.6})$$

Finalmente, colocando este resultado em (C.4) obtemos

$$n_i = \frac{(n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s)^2}{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - \sum_{s \neq i} n_s \bar{\mu}_s^2} \quad (\text{C.7})$$

e, conseqüentemente, podemos determinar univocamente n_i e $\bar{\mu}_i$. No entanto, embora nós conheçamos n_s (inclusive $n_i = n_1$ no nosso caso), nós não temos nenhuma das mobilidades de transporte. Ao invés disso, temos apenas μ_2 e μ_3 , obtidas do efeito shubnikov-de Haas. Mas podemos escrever $\bar{\mu}_s = \beta_s \mu_s$, onde β_s é justamente a razão entre os tempos de relaxação ($\bar{\tau}_s$) e espalhamento (τ_s) ou, equivalentemente, entre as mobilidades de transporte e quântica:

$$\beta_s \doteq \frac{\bar{\mu}_s}{\mu_s} \equiv \frac{\bar{\tau}_s}{\tau_s}.$$

Aplicar esta mudança de variável é útil pois, como a equação (C.7) não contém $\bar{\mu}_i$ ($= \bar{\mu}_1$ no

nosso caso) e como conhecemos $n_i = n_1$, somente β_2 e β_3 são desconhecidas:

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{[n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - \sum_{s \neq 1} n_s (\beta_s \mu_s)]^2}{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - \sum_{s \neq 1} n_s (\beta_s \mu_s)^2} \\ &= \frac{[n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - (n_2 \mu_2) \beta_2 - (n_3 \mu_3) \beta_3]^2}{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - (n_2 \mu_2^2) \beta_2^2 - (n_3 \mu_3^2) \beta_3^2}. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Esta equação (não-linear) define a curva $\beta_3(\beta_2)$ que resolve a equação (C.7). Uma outra abordagem é reescrevê-la como a intersecção das superfícies $n_i f(\beta)$ e $g(\beta)$, onde $\beta = (\beta_2, \beta_3)$, assim:

$$n_i \overbrace{[n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - (n_2 \mu_2^2) \beta_2^2 - (n_3 \mu_3^2) \beta_3^2]}^{f(\beta)} = \overbrace{[n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - (n_2 \mu_2) \beta_2 - (n_3 \mu_3) \beta_3]^2}^{g(\beta)}.$$

Analisando o formato dessas superfícies e lembrando que $\beta_s \geq 0$ sempre, descobrimos que só têm sentido as soluções contidas na região definida por

$$\left(\frac{\beta_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{\beta_3}{a_3}\right)^2 \leq 1 \quad \text{e} \quad \beta_2, \beta_3 \geq 0, \quad (\text{C.9})$$

sendo $a_s = (\bar{\mu}_{\text{ef}}/\mu_s) \sqrt{n_{\text{ef}}/n_s}$. Finalmente, ao invés de dizermos que temos precisamente n_i , fazemos $n_I \leq n_i \leq n_S$ e reescrevemos a equação (C.8) como

$$n_I \leq \frac{[n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}} - (n_2 \mu_2) \beta_2 - (n_3 \mu_3) \beta_3]^2}{n_{\text{ef}} \bar{\mu}_{\text{ef}}^2 - (n_2 \mu_2^2) \beta_2^2 - (n_3 \mu_3^2) \beta_3^2} \leq n_S, \quad (\text{C.10})$$

ou ainda,

$$n_I f(\beta) \leq g(\beta) \leq n_S f(\beta). \quad (\text{C.11})$$

Agora, escrevemos um software que procura na região (C.9) os pares (β_2, β_3) que satisfazem (C.11). No limite em que $n_I, n_S \rightarrow n_i$, obtemos a curva $\beta_3(\beta_2)$.

A figura C.1 ilustra duas soluções para a amostra 2,5 MC no *claro*, ambas utilizando os valores obtidos das medidas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas, apresentados na tabela C.1: A primeira, representada pelos símbolos +, foi obtida fazendo $n_I = n_2 = 1,22$ e $n_S = 4 - (n_2 + n_3) = 2,29$. Esta condição não depende de conhecermos n_1 por que ela diz que a concentração de portadores no estado fundamental (primeira sub-banda) é maior que aquela da segunda sub-banda e, no entanto, menor que os $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ extrínsecos, menos aqueles que — com certeza — estão no 2DEG: $n_2 + n_3$. A outra solução, representada pelos símbolos $\circ$, está associada à condição $n_I \approx n_S \approx n_1 = 1,67$: Este é o valor que encontramos das medidas

C Determinação de $\bar{\mu}_s/\mu_s$

do efeito Shubnikov-de Haas (tabela C.1).

Tabela C.1: Resultados utilizados para calcular o gráfico da figura C.1, obtidos das medidas dos efeitos Hall e Shubnikov-de Haas para a amostra 2,5 MC no *claro*. As concentrações estão escritas em unidades de 10^{12} cm^{-2} e as mobilidades, de $\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$.

n_1	n_2	n_3	n_{ef}	μ_1	μ_2	μ_3	$\bar{\mu}_{\text{ef}}$
1,67	1,22	0,49	2,11	?	0,374	0,074	0,792

Figura C.1: Exemplo de aplicação do método exposto neste apêndice para a amostra 2,5 MC no *claro*. Cada símbolo + representa uma solução da equação (C.10) para a condição $1,22 \leq n_1 \leq 2,29$. Analogamente, os símbolos $\circ$ são as soluções para a condição $n_1 = 1,67$ (veja a tabela C.1). Note como a imposição das condições $\beta_2 \geq 2,5$ e $2,5 \leq \beta_3 \leq \beta_2$ limita enormemente as soluções possíveis (retângulo cinza).

As soluções apresentadas na figura C.1 não resolvem muito o problema, pois existe uma vasta gama de valores possíveis para β_2 e β_3 . Para limitar esses valores, vamos fazer algumas suposições baseadas nos dois seguintes fatos conhecidos:

- [65] A razão entre a mobilidade de transporte e quântica de um 2DEG sobre uma dopagem planar é aproximadamente igual a 2,5;

[36] Esta razão é tão maior quanto mais distante estiver o 2_{DEG} do plano da dopagem.

Assim, como em nossas amostras $\langle \psi_1 | z | \psi_1 \rangle = 0$ (fig. 6.8), ou seja, está sobre o δ -Si (seção 6.3.1), esperamos que $\beta_1 \approx 2,5$. Além disso, como $\langle \psi_2 | z | \psi_2 \rangle \geq \langle \psi_3 | z | \psi_3 \rangle \geq 0$ (seção 6.3.1), podemos esperar que $\beta_2 \geq \beta_3 \geq \beta_1$.

Resumindo, devemos limitar os resultados da figura C.1 à região definida por

$$\beta_2 \geq 2,5 \quad \text{e} \quad 2,5 \leq \beta_3 \leq \beta_2,$$

o que equivale aproximadamente ao retângulo cinza na figura C.1. Perceba como estas duas suposições limitam bastante os valores possíveis de β_2 e β_3 . Isto é verdade para todas as amostras que analisamos e suficiente para construirmos o gráfico da figura 6.20.

Poderíamos também utilizar essas soluções na equação (C.6) e tentar limitar ainda mais os resultados impondo a condição $\mu_1 \leq \mu_3 \leq \mu_2$, que sabemos ser verdade (seção 6.3.1), mas verificamos que em nenhum momento isto melhorou o nosso resultado.

C Determinação de $\bar{\mu}_s/\mu_s$

D

Lista de símbolos

Nesta lista de símbolos, apresentamos somente aqueles aos quais agregamos um conceito ou valor que se mantém por todo o trabalho, isto é, não apresentamos variáveis auxiliares utilizadas localmente (como a variável ξ utilizada no apêndice B, por exemplo). Além disso, muitos desses símbolos representam propriedades que dependem da sub-banda em questão e, por isso, possuem um índice s . Deste modo, para evitarmos repetições desnecessárias, consideraremos subentendido que, quando este índice estiver presente, a grandeza descrita estará associada à s -ésima sub-banda. Eventualmente, contudo, a referência à sub-banda se torna desnecessária (como no caso da seção 4.1) e, nestes casos, o índice poderá ser omitido.

a Parâmetro de rede;

$\alpha_s = \pi s / \mu_s$. Fator de amortecimento das oscilações de resistividade;

A Potencial vetor associado ao campo magnético: $B = \nabla \times A$;

$\beta_s = \bar{\mu}_s / \mu_s$. Razão entre as mobilidades de transporte ($\bar{\mu}_s$) e quântica (μ_s);

D Lista de símbolos

b	$= \Delta/2$. Semi-largura da janela Hanning;
$B = \mathbf{B} $	Campo magnético aplicado;
B_j	j -ésimo valor do campo magnético aplicado;
$B_{\min}, B_{\max}$	Limites inferior e superior da intensidade do campo magnético numa medida de transporte;
C_F	Constante de normalização da transformada de Fourier, usualmente igual a $1/\sqrt{2\pi}$ para transformadas contínuas;
D	Degenerescência dos níveis de Landau;
d_c	Espessura nominal crítica da camada de InAs, a partir da qual ocorre a formação dos pontos-quânticos;
d_{InAs}	Espessura nominal da camada de InAs;
$\delta(x)$	Função delta de Dirac;
Δ	Largura da janela Hanning ($\doteq t_N - t_1$) ou tamanho de pixel;
Δt	$\doteq t_j - t_{j-1}$. Intervalo da amostragem utilizada na transformada discreta de Fourier;
$\langle \Delta z_s \rangle$	$= \sqrt{\langle z_s^2 \rangle - \langle z_s \rangle^2}$. Extensão espacial da função de onda;
e	Carga do elétron ($1,602 \times 10^{-19}$ C);
$E = \mathbf{E} $	Campo elétrico;
E_H	Campo Hall;
ϵ_g	Extensão energética da banda proibida ou <i>gap</i> ;
$\epsilon \doteq \epsilon(\mathbf{k})$	Energia do elétron no orbital (estado) $\mathbf{k}$;
ϵ_F	Energia de Fermi; ¹
ϵ_s	Energia do fundo da banda s ;
f, f^0	Distribuições de Fermi-Dirac perturbada e não perturbada, respectivamente;
$f(t)$	Função genérica associada a V''_{BC} (efeito Shubnikov-de Haas) ou V''_{BE} (Hall);
$f_j \doteq f(t_j)$	j -ésima amostragem de $f(t)$;
F	Força de Lorentz e de Van der Waals;

¹Devido à baixa temperatura utilizada neste trabalho (1,4 K), não fizemos distinção entre energia de Fermi e potencial químico.

F_H	$= \mathcal{F}[\rho^{(r)}h(t)]$. Transformada de Fourier da magnetoresistividade (ρ) com janela Hanning;
F_J	$= \mathcal{F}[f(t)J(t)]$. Transformada de Fourier de $f(t)$ com janela $J(t)$;
$F_\ell \doteq F(\omega_\ell)$	ℓ -ésima amostragem de $F(\omega)$, transformada de Fourier de $f(t)$;
ϕ	Potencial escalar associado ao campo elétrico: $E = -\nabla\phi$;
ϕ_s	Fase das oscilações de magnetoresistividade;
φ	Potencial de superfície;
$\mathcal{F}$	Operador transformada de Fourier;
$h = 2\pi\hbar$	Constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34}$ J · s);
$h(t)$	$= \frac{1}{2} [1 - \cos(\omega_\bullet t + \theta_\bullet)]$. Janela Hanning;
$h_j \doteq h(t_j)$	j -ésima amostragem da janela Hanning, definida como $\frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi j/N)]$;
$H(\omega)$	$\doteq \mathcal{F}[h(t)]$. Transformada de Fourier da janela Hanning. ω é a frequência angular, variável independente no domínio das frequências;
$\mathcal{H}_0$	Operador Hamiltoniano devido a campos elétricos e magnéticos;
i	Número complexo $\sqrt{-1}$;
I	Corrente elétrica que percorre a amostra (fixada em 1 μA);
j	Índice de ordenação do conjunto experimental $\{(B_j, V_j)\}$ e $\{(B_j, V_j'')\}$;
$\mathbf{j}$	Densidade de corrente, $I = \int_{\Sigma} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{\Sigma}$;
$J(t)$	Função janela genérica;
J_j	j -ésima amostragem da janela $J(t)$, utilizada na transformada discreta de Fourier;
$\mathbf{k}$	Estado, orbital ou vetor de onda de um elétron;
k_B	Constante de Boltzmann ($1,381 \times 10^{-23}$ J/K);
$\mathbf{k}_B$	Vetor que define os limites da primeira zona de Brillouin;
$\mathbf{k}_F$	Vetor de onda de Fermi;
k_x, k_y, k_z	Componentes cartesianos de $\mathbf{k}$;
l	Índice de identificação do l -ésimo nível de Landau;
l_x, l_y, l_z	Dimensões da região de interesse nas direções x , y e z , respectivamente;
L	Largura da varredura;

D Lista de símbolos

$\lambda = h/p$	Comprimento de onda de de Broglie;
ℓ	Índice que identifica a ℓ -ésima amostragem de uma função representada no domínio das frequências;
$\mathcal{L}$	Operador transformada de Laplace;
m_0	Massa de repouso do elétron ($9,109 \times 10^{-31}$ kg);
m_s^*	Massa efetiva do elétron;
μ_s	Mobilidade quântica;
$\bar{\mu}_s$	Mobilidade de transporte;
$\bar{\mu}_{\text{ef}}$	Mobilidade de transporte efetiva;
M	Quantidade de pares experimentais (B_j, V_j) medidos;
n_{3D}	Concentração volumétrica de portadores;
n_d	Concentração volumétrica de dopantes na cobertura (10^{17} cm $^{-3}$);
n_{ef}	Concentração bidimensional efetiva de portadores;
n_s	Concentração bidimensional de portadores;
n_s^0	Concentração bidimensional de portadores após t_0 segundos de iluminação;
n_s^∞	Concentração bidimensional máxima de portadores (saturação);
n_{Si}	Concentração bidimensional de dopantes no δ -Si (4×10^{12} cm $^{-2}$);
n_T	$\doteq \sum_s n_s$. Concentração bidimensional total de portadores;
N	Quantidade de pares experimentais (B_j, V_j) utilizados na transformada discreta de Fourier ou de linhas medidas numa varredura SPM;
η	Fator de preenchimento dos níveis de Landau;
ω	Variável independente no domínio das frequências;
$\omega_\ell = 2\pi\nu_\ell$	ℓ -ésima amostragem da frequência ω (ou ν), variável independente no domínio das frequências;
$\omega_s = 2\pi\nu_s$	Frequência das oscilações de magnetoresistividade;
$\omega_\bullet$	$= 2\pi/(t_N - t_1)$. Frequência angular da janela Hanning;
$\Omega_s = eB/m_s^*$	Frequência ciclotrônica;
$\otimes$	Operador de convolução;
ν, p	Velocidade e momento do elétron;

ψ_s	Função de onda do elétron na sub-banda s ;
r	Ordem da derivação aplicada na magnetoresistividade: $\rho^{(r)}$;
r_s	Raio de Larmor;
$\mathbf{r}$	Vetor de posição;
R_{BC}	Resistência entre os pontos B e C da região de interesse (fig. 3.3);
R_H	Coeficiente Hall;
ρ	Resistividade ($B = 0$) ou magnetoresistividade ($B \neq 0$);
$\rho_{n\text{-osc}}$	Parcela não-oscilatória da magnetoresistividade;
s	Índice de identificação da s -ésima sub-banda;
$\mathbf{s}$	Vetor de deslocamento da ponta-de-provas de um microscópio SPM;
σ	Condutividade;
$\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \dots, \sigma_{zz}$	Tensor de condutividade;
t	$\doteq \frac{1}{B}$. Variável independente (da magnetoresistividade) no domínio do tempo;
t_j	j -ésima amostragem de t , variável independente no domínio do tempo;
t_1, t_N	Limites inferior e superior da janela Hanning, respectivamente;
$\bar{t}$	$= (t_1 + t_N)/2$. Posição média da janela Hanning;
$\theta_\bullet$	$= -\omega_\bullet t_1$. Fase da janela Hanning;
τ_s	Tempo de espalhamento;
$\bar{\tau}_s$	Tempo de relaxação;
$t_\odot$	Tempo de iluminação;
T	Temperatura ou período de varredura;
θ	Ângulo entre os vetores $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ ou, equivalentemente, ângulo de espalhamento;
θ_s	Fase da derivada das oscilações de magnetoresistividade;
τ_j	j -ésimo valor de t medido;
τ_j	j -ésimo valor de t utilizado na transformada discreta de Fourier;
V_{BC}, V_{BE}	Diferença de potencial entre os pontos B e C e B e E da região de interesse, respectivamente (fig. 3.3);
V_H	Tensão Hall ($\doteq V_{BE}$ ou V_{xx} no equilíbrio);

D Lista de símbolos

V_j	j -ésima medida de V_{BC} ou V_{BE} ;
V_{xx}, V_{xy}	Diferença de potencial paralela e perpendicular à corrente elétrica, respectivamente;
ν	Taxa de leitura ou frequência de varredura;
ν_s	Frequência das oscilações de magnetoresistividade;
$W_{k,k'}$	Probabilidade (por unidade de tempo e de volume do espaço recíproco) de um elétron transitar para um orbital k' acessível (desde k);
x, y, z	Componentes cartesianos de r ;
y	Proporção atômica da liga $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ (fixada em 16,534%);
ζ	Potencial químico ($\approx \epsilon_F$);
$\langle z_s \rangle$	$= \langle \psi_s z_s \psi_s \rangle$, Distância média entre a função de onda e o plano de dopagem.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Eisberg e R. Resnick, *Física Quântica*, ed. Campus, 1979.
- [2] N. W. Aschcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing, 1976.
- [3] C. Kittel, *Introdução à Física do Estado Sólido*, John Wiley & Sons, 1976.
- [4] D. Bimberg, M. Grundmann e N. N. Ledentsov, *Quantum dot heterostructures*, John Wiley & Sons, 1999.
- [5] R. Dingle, W. Wiegmann e C. H. Henry, *Quantum states of confined carriers in very thin $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ heterostructures*, Phys. Rev. Lett. **33**, 827 (1974).
- [6] C. de Araújo Duarte, *Processos de recombinação em pontos-quânticos em amostras com diferentes espessuras de camadas de InAs utilizando a técnica de fotoluminescência*, Dissertação de mestrado, IFUSP, São Paulo (2002).
- [7] M. J. da Silva, *Crescimento e caracterização de pontos-quânticos de InAs auto-formados*, Dissertação de mestrado, IFUSP, São Paulo (1999).
- [8] A. L. Sperandio, *Crescimento epitaxial por feixe molecular de camadas para aplicação em dispositivos*, Dissertação de mestrado, IFUSP, São Paulo (1998).
- [9] D. Wood, *Optoelectronic semiconductor devices*, Prentice Hall, 1994.
- [10] S. Fafard, K. Hinzer, S. Raymond, M. Dion, J. McCaffrey, Y. Feng e S. Charbonneau, *Red-emitting semiconductor quantum dot lasers*, Science **274**, 1350 (1996).

Referências Bibliográficas

- [11] J. Phillips, K. Kamath e P. Bhattacharya, *Far-infrared photoconductivity in self-organized InAs quantum dots*, Appl. Phys. Lett. **72**, 2020 (1998).
- [12] P. B. Joyce, T. J. Krzyzewski, G. R. Bell, T. S. Jones, E. C. L. Ru e R. Murray, *Optimizing the growth of 1.3 μm InAs/GaAs quantum dots*, Phys. Rev. B **64**, 235317 (2001).
- [13] M. J. da Silva, S. Martini, T. E. Lamas, A. A. Quivy, E. C. F. da Silva e J. R. Leite, *Low growth rate InAs/GaAs quantum dots for room-temperature luminescence over 1.3 μm* , Microelec. J. **34**, 631 (2003).
- [14] M. J. da Silva, A. A. Quivy, S. Martini, T. E. Lamas, E. C. F. da Silva e J. R. Leite, *InAs/GaAs quantum dots optically active at 1.5 μm* , Appl. Phys. Lett. **82**, 2646 (2003).
- [15] G. H. Kim, J. T. Nicholls, S. I. Khondaker, I. Farrer e D. A. Ritchie, *Tuning the insulator-quantum Hall liquid transitions in a two-dimensional electron gas using self-assembled InAs*, Phys. Rev. B **61**, 10910 (2000).
- [16] A. J. Shields, M. P. O'Sullivan, I. Farrer, D. A. Ritchie, K. Cooper, C. L. Foden e M. Pepper, *Optically induced bistability in the mobility of a two-dimensional electron gas coupled to a layer of quantum dots*, Appl. Phys. Lett. **74**, 735 (1999).
- [17] B. Dubertret, P. Skourides, D. J. Norris, V. Noireaux, A. H. Brivanlou e A. Libchaber, *In vivo imaging of quantum dots encapsulated in phospholipid micelles*, Science **298**, 1759 (2002).
- [18] S. Coe, W. K. Woo, M. Bawendi e V. Bulovi, *Electroluminescence from single monolayers of nanocrystals in molecular organic devices*, Nature **420**, 800 (2002).
- [19] E. Venere, 'Quantum dots' could form basis of new computers, Purdue news, (Setembro de 2001).
- [20] A. V. Baranov, V. Davydov, H.-W. Ren, S. Sugou e Y. Masumoto, *Phonon-enhanced intraband transitions in InAs self-assembled quantum dots*, J. of Luminescence **87-89**, 503 (2000).

- [21] K. Mukai, N. Ohtsuka, H. Shoji e M. Sugawara, *Phonon bottleneck in self-formed InGaAs/GaAs quantum dots by electroluminescence and time resolved photoluminescence*, Phys. Rev. B **54**, R5243 (1996).
- [22] T. R. Ramachandran, R. Heitz, P. Chen e A. Madhukar, *Mass transfer in Stranski-Krastanow growth of InAs on GaAs*, Appl. Phys. Lett. **70**, 640 (1997).
- [23] R. Reitz, T. R. Ramachandran, A. Kalburge, Q. Xie, I. Makhamezhanov, P. Chen e A. Madhukar, *Observation of reentrant 2D and 3D morphology transition in highly strained epitaxy: InAs on GaAs.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 4071 (1997).
- [24] H. Sakaki, G. Yusa, T. Someya, T. Noda, H. Akiyama, Y. Kadoya e H. Noge, *Transport properties of two-dimensional electron gas in AlGaAs/GaAs selectively doped heterojunctions with embedded InAs quantum dots*, Appl. Phys. Lett. **67**, 3444 (1995).
- [25] E. Ribeiro, E. Müller, T. Heinzel, H. Auderset, K. Ensslin, G. Medeiros-Ribeiro e P. M. Petroff, *InAs self-assembled quantum dots as controllable scattering centers near a two-dimensional electron gas*, Phys. Rev. B **58**, 1506 (1998).
- [26] V. Ryzhii, *The theory of quantum-dot infrared phototransistors*, Semicond. Sci. Technol. **11**, 759 (1996).
- [27] S.-W. Lee, K. Hirakawa e Y. Shimada, *Boud-to-continuum intersubband photoconductivity of self-assembled InAs quantum dots in modulation-doped heterostructures*, Appl. Phys. Lett. **75**, 1428 (1999).
- [28] D. C. Look, *Electrical characterization of GaAs materials and devices*, John Wiley & Sons, 1992.
- [29] E. F. Schubert, *Delta-doping of semicondutores: Electronic, optical and structural properties of materials and devices em Epitaxial Microstructures*, vol. 40 de Semiconductors and Semimetals, Academic Press, 1994.
- [30] W. A. Beck e J. R. Anderson, *Determination of electrical transport properties using a novel magnetic field-dependent Hall technique*, J. Appl. Phys. **62**(2), 541 (1987).
- [31] A. K. Bakarov, A. A. Bykov, N. D. Aksenova, D. V. Sheglov, A. V. Latyshev e A. I. Toropov, *Commensurate oscillations of the magnetoresistance of a two-dimensional*

Referências Bibliográficas

- electron gas in GaAs quantum wells with corrugated heteroboundaries*, JETP Letters **77**, 662 (2003).
- [32] A. A. Bykov, A. K. Bakarov, A. V. Goran, N. D. Aksenova, A. V. Popova e A. I. Toropov, *Semiclassical negative magnetoresistance of 2D electron gas caused by scattering by short-range and long-range potentials*, JETP Lett. **78**, 134 (2003).
- [33] A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, F. Evers e P. Wölfle, *Quasiclassical negative magnetoresistance of a 2D electron gas: Interplay of strong scatterers and smooth disorder*, Phys. Rev. Lett. **87**, 126805–1 (2001).
- [34] B. K. Ridley, *Quantum processes in semiconductors*, Oxford Science Publications, 1993.
- [35] A. Isihara e L. Smrčka, *Density and magnetic field dependences of the conductivity of two-dimensional electron systems*, J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 6777 (1986).
- [36] S. D. Sarma e F. Stern, *Single-particle time versus scattering time in an impure electron gas*, Phys. Rev. B **32**, 8442 (1985).
- [37] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov e I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Prentice Hall, 1963.
- [38] J. M. Ziman, *Principles of the theory of solids*, Cambridge University Press, 1972.
- [39] E. Conwell, *Transport: the Boltzmann equation* em *Handbook on semiconductors*, vol. 1 de MOSS, North-Holland Publishing Company, 1982.
- [40] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flanner, *Numerical recipes in Fortran*, Cambridge University Press, 1992.
- [41] S. W. Smith, *The scientist and engineers's guide to digital signal processing*, California Technical Publishing, 1999.
- [42] U. Bockelmann e G. Bastard, *Phonon scattering and relaxation in two-, one- and zero-dimensional electron gas*, Phys. Rev. B **42**, 8947 (1990).
- [43] S. Fafard, R. Leon, D. Leonard, J. L. Merz e P. M. Petroff, *Phonons and radiative recombination in self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B **52**, 8 (1995).

- [44] T. Inoshita e H. Sakaki, *Electron relaxation in quantum dot: significance of multiphonon processes*, Phys. Rev. B **46**, 7260 (1992).
- [45] K. Mukai, N. Ohtsuka, H. Shoji e M. Sugawara, *Emission from discrete levels in self-formed InGaAs/GaAs quantum dots by electric carrier injection: influence of phonon bottleneck*, Appl. Phys. Lett. **68**, 3013 (1996).
- [46] W. L. Faissler, *An introduction to modern electronics*, John Wiley & Sons, 1991.
- [47] *Practical cryogenics, an introduction to laboratory cryogenics*. Oxford Instruments Superconductivity Limited, 2000.
- [48] I. Kamiya, I. Tanaka e H. Sakaki, *Optical properties of near surface-InAs quantum dots and their formation processes*, Physica E **2**, 637 (1998).
- [49] S. Fafard, S. Raymond, G. Wang, R. Leon, D. Leonard, S. Charbonneau, J. L. Merz, P. M. Petroff e J. E. Bowers, *Temperature effects on the radiative recombination in self-assembled quantum dots*, Surf. Sci. **361/362**, 778 (1996).
- [50] S. Sanguinetti, M. Henini, M. G. Alessi, M. Capizzi, P. Frigeri e S. Franchi, *Carrier thermal escape and retrapping in self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B **60**, 8276 (1999).
- [51] H. Lee, W. Yang e P.C. Sercel, *Temperature and excitation dependence of photoluminescence line shape in InAs/GaAs quantum-dot structures*, Phys. Rev B **55**, 9757 (1997).
- [52] Z. Y. Xu, Z. D. Lu, Z. L. Yuan, X. P. Yang, B. Z. Zheng, J. Z. Xu, W. K. Ge, Y. Wang, J. Wang e L. L. Chang, *Thermal activation and thermal transfer of localized excitons in InAs self-organized quantum dots*, Superlattices and Microstructures **23**, 381 (1998).
- [53] C. A. Duarte, E. C. F. da Silva, A. A. Quivy, M. J. da Silva, S. Martini, J. R. Leite, E. A. Meneses e E. Laurretto, *Influence of the temperature on the carrier capture into self-assembled InAs/GaAs quantum dots*, J. Appl. Phys. **93**, 6279 (2003).

Referências Bibliográficas

- [54] A. Cavalheiro, *O efeito da fotocondutividade e a estrutura eletrônica de poços-quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs com dopagem planar do tipo n na barreira*, Tese de doutorado, IFUSP, São Paulo (2001).
- [55] Ikai Lo and Y. C. Chang and H. M. Weng and J.-C. Chiang, *Two-dimensional electron gas in δ -doped quantum wells for photodetector application*, J. Appl. Phys. **81**(12), 8112 (1997).
- [56] R. W. Shaw e D. E. Hill, *Shubnikov-de Haas oscillations in n-type GaAs*, Phys. Rev. B **1**, 658 (1970).
- [57] A. Cavalheiro, E. C. F. da Silva, E. K. Takahashi, A. A. Quivy, J. R. Leite e E. A. Meneses, *Illumination as tool to investigate the quantum mobility of the two-dimensional electron gas in Si δ -doped GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs quantum well*, Phys. Rev. B **65**, 111 (2002).
- [58] A. Cavalheiro, E. C. F. da Silva, A. A. Quivy, E. K. Takahashi, S. Martini, M. J. da Silva, E. A. Meneses e J. R. Leite, *Influence of illumination on the quantum mobility of a two-dimensional electron gas in Si δ -doped GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs quantum wells*, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 121 (2003).
- [59] A. B. Henriques, *Quantum and transport mobilities in δ -doped semiconductors*, Phys. Rev. B **53**, 16365 (1996).
- [60] L. Jacak, P. Hawrylack e A. Wójs, *Quantum dots*, ed. Springer, 1998.
- [61] A. Wójs, P. Hawrylak, S. Fafard e L. Jacak, *Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B **54**(8), 5604 (1996).
- [62] G. Yusa e H. Sakaki, *Trapping of photogenerated carriers by InAs quantum dots and persistent photoconductivity in novel GaAs/n-AlGaAs field-effect transistor structures*, Appl. Phys. Lett. **70**(3), 345 (1997).
- [63] A. A. Zhukov, Ch. Weichsel, S. Beyer, S. Schnüll, Ch. Heyn e W. Hansen, *Transport properties of a two-dimensional electron gas in the vicinity of quantum dots in the limit of strong disorder*, Phys. Rev. B **67**, 125310 (2003).

- [64] S. C. Jain, M. Willander e H. Maes, *Stresses and strains in epilayers, stripes and quantum structures of III-V compound semiconductors*, Semicond. Sci. Technol. **11**, 641 (1996).
- [65] P. M. Koenraad, B. F. A. van Hest, F. A. P. Blom, R. van Dalen, M. Leys, J. A. A. J. Perenboom e J. H. Wolter, *Quantum- and transport electron mobility in the individual subbands of a two-dimensional electron gas in Si- δ -doped GaAs*, Physica B **177**, 485 (1992).