**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

**O Efeito da Fotocondutividade e a
Estrutura Eletrônica de Poços
Quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs
com Dopagem Planar do Tipo n na
Barreira**

Ademir Cavalheiro

Orientadora: Profa. Dra. Euzi Conceição Fernandes da Silva

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação
Tombo: 3589
ex. 1

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

Banca examinadora:

Profa. Dra. Euzi Conceição Fernandes da Silva (IFUSP) --
Prof. Dr. Armando Corbani Ferraz (IFUSP)
Prof. Dr. José Brás Barreto de Oliveira (UNESP-Bauru)
Profa. Dra. Márcia Carvalho de Abreu Fantini (IFUSP)
Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz (UNICAMP)

**Trabalho financiado p/
PICD - UFU**

**São Paulo
2001**

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

deferida 23/11/01

537.5
C376
D
ex. 1

SBI-IFUSP

305M810T3589

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Cavalheiro, Ademir

O Efeito Fotocondutivo e a Estrutura Eletrônica de
Poços Quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs com Dopagem
Planar na Barreira. São Paulo 2001.

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

Orientador: Profa. Dra. Euzi Conceição F. da Silva
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos: 1. Fotocondutividade;
2. Dopagem planar; 3. Mobilidades Quânticas;
4. Cálculos Autoconsistentes.

USP/IF/SBI-066/2001

Agradecimentos

À minha esposa Elena e aos meus filhos Renato, Guilherme, Aretusa e Taísa, por todos os sacrifícios a que se submeteram para que me fossem viabilizadas as condições de realização deste trabalho.

À Profa. Euzi Conceição Fernandes da Silva, por toda a sua dedicação à minha orientação. Dedicação esta que as palavras formais não sabem representar.

Ao Prof. José Roberto Leite, pela oportunidade de trabalhar junto ao LNMS.

Ao Prof. Dr. Eduardo Kojy Takahashi, que elaborou o programa computacional para que eu realizasse os cálculos, e pela disposição com que me atendeu nas inúmeras vezes que a ele recorri para sanar as dúvidas provenientes dos resultados obtidos com seu programa.

Aos Dr. Américo Sheitiro Tabata, Dr. Alain André Quivy, Dr. Alexander Levin, Nilo Mauricio Sotomayor Choque e Marcos Frizzarini, pela disposição desinteressada que mostraram ao me iniciarem nas técnicas experimentais que utilizei.

A todos os colegas do LNMS-USP que me permitiram conviver com eles, trocando experiências.

A todos os colegas da FAFIS-UFU que me incentivaram e tornaram possível esta minha titulação.

À CAPES, pelo apoio financeiro através do PICD-UFU.

Índice

Resumo.....	i
Abstract.....	ii
Lista de Figuras.....	iii
Lista de Tabelas.....	ix

1 Introdução Geral.....	1
----------------------------------	---

2 Estrutura Eletrônica de Poços Quânticos com Dopagem Planar do Tipo n na Barreira	
2.1 - Introdução.....	8
2.2 - A dopagem planar em semicondutores.....	9
2.3 - Formalismo do cálculo autoconsistente para δ -MDQWs.....	14
2.4 - Considerações sobre o efeito da tensão na estrutura de bandas do InGaAs crescido sobre GaAs.....	23
2.5 - Descrição da arquitetura das amostras.....	30
2.6 - Descrição dos parâmetros utilizados nos cálculos autoconsistentes.....	32

3	Descrição das Técnicas Experimentais	
3.1	- Introdução.....	35
3.2	- O efeito Shubnikov-de Haas (SdH) e a ocupação das sub-bandas eletrônicas.....	36
3.3	- O efeito Shubnikov-de Haas e a mobilidade quântica das sub-bandas eletrônicas.....	40
3.4	- O efeito Hall.....	46

4	Resultados das Medidas de Transporte em Poços de GaAs/InGaAs/GaAs com Dopagem Planar do Tipo n na Barreira	
4.1	- Introdução.....	50
4.2	- Detalhes experimentais.....	56
4.3	- Resultados para a amostra D20	57
4.3.1	- Medidas de Shubnikov-de Haas.....	57
4.3.2	- Simulações numéricas.....	72
4.4	- Resultados para a amostra D40	90
4.4.1	- Medidas de Shubnikov-de Haas.....	90
4.4.2	- Simulações numéricas.....	92
4.5	- Resultados para a amostra D100	102
4.6	- Simulações numéricas em função da largura da camada de espaçamento D	107
4.7	- Resumo e comparação entre as amostras.....	109
4.8	- Projetos futuros.....	117

Conclusões	118
Referências	120

Resumo

Neste trabalho, a estrutura eletrônica de poços quânticos de GaAs/ $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ /GaAs com dopagem planar de silício na barreira superior foi investigada utilizando-se medidas de Shubnikov-de Haas em função do tempo de iluminação das amostras. Antes da exposição das heteroestruturas a qualquer iluminação, observou-se que uma quantidade significativa de elétrons estava faltando na região ativa (formada pela camada de InGaAs e pela região delta-dopada) de todas as estruturas analisadas. Um efeito fotocondutivo persistente (que persiste pelo menos 27 horas depois que a excitação óptica é desligada) foi observado em todas as amostras. Durante o processo de iluminação, portadores são liberados pela iluminação e fortes modificações nas mobilidades quânticas das sub-bandas foram observadas. Uma análise fenomenológica dos dados é apresentada, baseada em cálculos autoconsistentes da estrutura eletrônica dos sistemas analisados.

Abstract

In this work, the sub-band electronic structure of GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs quantum wells with a Si delta-doped layer in the top barrier was investigated by Shubnikov-de Haas measurements as a function of the illumination time of the samples. Before the exposure of the heterostructure to any illumination time, we observed that a significant quantity of electrons was missing in the active region (consisting of the quantum well formed by the InGaAs layer and the Si delta-doped region) of all the analyzed structures. A persistent photoconductivity effect (which persisted at least for 27 hours after the optical excitation was turned off) was observed in all samples. During the illumination process, carriers are released by illumination and strong modifications on the quantum mobilities of the sub-bands were observed. A phenomenological analysis of the data is presented based on the self-consistent calculations of the electronic structure of the analyzed systems.

Lista de Figuras

- 1.1** Descrição do desenvolvimento histórico da mobilidade eletrônica em poços quânticos de GaAs com dopagem modulada, em função da temperatura. As duas curva superiores foram obtidas usando-se δ -MDQWs. Esta figura foi obtida na referência **23**.....5
- 1.2** Representação esquemática da arquitetura das amostras analisadas neste trabalho e do perfil de potencial na região ativa. **D** é a distância entre o plano de átomos dopantes e o poço de InGaAs.....7
- 2.1** Representação esquemática de um semiconductor contendo um único plano de átomos dopantes. **(b)** Perfil do potencial induzido pela dopagem planar do tipo n e as respectivas energias de confinamento para uma concentração de dopantes $N_D^{2D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. O perfil de potencial e as energias estão desenhados na escala correspondente ao cálculo autoconsistente apresentado na referência **58**. E_i indica a energia do fundo da

	i-ésima sub-banda eletrônica. A energia do quase-nível de Fermi E_F foi desenhada com linha tracejada.....	11
2.2	Representação esquemática do perfil de potencial de um poço quântico de GaAs/InGaAs/GaAs. Os semicondutores GaAs e InGaAs têm a mesma estrutura cristalina e diferentes faixas de energia proibidas.....	13
2.3	Representação das camadas de InGaAs crescidas sobre GaAs: (a) material isolado, relaxado; (b) camada perfeitamente tensionada; (c) camada totalmente relaxada.....	25
2.4	(a) Ilustração da estrutura de bandas do InGaAs não tensionado. Alterações nesta estrutura devido às componentes de pressão: (b) hidrostática e (c) uniaxial ou de cisalhamento.....	27
2.5	Representação esquemática da arquitetura das amostras analisadas neste trabalho. Nesta figura não representamos a super-rede depositada depois da <i>buffer layer</i>	31
3.1	Representação (a) das órbitas ciclotrônicas dos elétrons, paralelas ao plano da dopagem planar e (b) da variação da densidade de estados em função do aumento do campo magnético. Figura extraída da referência [86].....	37
3.2	Representação da desocupação dos níveis de Landau com o aumento do campo magnético. Figura extraída da referência [86].....	38
3.3	Oscilações da magnetoresistividade (ρ_{osc}) com o campo magnético, em um experimento de SdH, da amostra D100.....	39
3.4	(a) Transformada Rápida de Fourier (FFT) (b) da função $G(x) = \cos[2\pi(3x)] + \sin[2\pi(7x)] - \cos[2\pi(11x)]$	41
3.5	(a) Espectro obtido em uma medida de Shubnikov-de Haas; (b) Este espectro em função de $(1/B)$; (c) Frequência dos portadores obtida através da FFT.....	41
3.6	(a) Traço das oscilações de SdH de uma das amostras analisadas neste trabalho. (b) A mesma curva plotada em função de $1/B$. (c) Segunda derivada da curva apresentada em (b). (d) Transformadas de Fourier da função resultante do produto da segunda derivada pela janela Hanning. As diferentes curvas estão relacionadas com as diferentes janelas ($[x_1, x_2]$) utilizadas.	

	(e) Ajuste linear dos logaritmos das amplitudes máximas das FFTs apresentadas em (d), em função do limite inferior (x_1) da janela Hanning.....	45
3.7	Representação esquemática do efeito Hall.....	47
4.1	Representação esquemática da arquitetura da amostra analisada por Babinski e colaboradores. ^[80]	52
4.2	Concentração Hall (○) e concentração dos elétrons do 2DEG (●) obtidas por medidas de SdH em função da mobilidade Hall, para a estrutura de GaAs/InGaAs/GaAs representada na figura anterior. Esta figura, que descreve o comportamento da mobilidade Hall em função das concentrações, foi obtida na Ref. [80].....	54
4.3	Ilustração das conexões utilizadas em medidas de (a) efeito Hall e (b) SdH.....	57
4.4	(a) Oscilações de SdH e (b) as correspondentes ocupações das sub-bandas determinadas a partir destas oscilações, pelo método da transformada de Fourier, para a amostra D20 . Os diferentes traços são relativos aos diferentes tempos de iluminação da amostra. Nestas medidas utilizamos $I_{LED} = 1 \mu A$	59
4.5	Ocupações das sub-bandas determinadas pelo método da transformada de Fourier, utilizando a janela Hanning, para a amostra D20 . Para ilustrarmos o efeito do tratamento utilizando a janela Hanning, incluímos a curva equivalente (tracejada) que não foi obtida por este método.....	61
4.6	Ocupações das sub-bandas (n_1 , n_2 , n_3) e n_{SdH} ($n_1+n_2+n_3$) obtidas nas medidas de SdH em função do tempo de iluminação da amostra. Nesta figura, os círculos (losangos) indicam resultados extraídos das medidas realizadas na ausência (presença contínua) de iluminação.....	62
4.7	Oscilações de SdH obtidas em diversos momentos após o LED ter sido desligado.....	63
4.8	Variação da magnetoresistência (R_{xx}), em $B = 2$ T: (a) em função do T_{ilum} . Valores extraídos da Figura 4.4a ; (b) para diversos momentos após o LED ter sido desligado. Valores extraídos da Figura 4.7	63

4.9	Mobilidades quânticas (μ_{q1} , μ_{q2}) calculadas das FFTs ao se variar a janela inferior de Hanning. Nesta figura, os círculos (losangos) indicam resultados extraídos das medidas realizadas na ausência (presença contínua) de iluminação.....	65
4.10	Representação esquemática da função de onda do estado fundamental de um poço quântico com uma dopagem modulada distante deste poço, tal que o fator determinante da mobilidade é a velocidade dos elétrons no nível de Fermi.....	67
4.11	Representação esquemática dos momentos e das energias dos elétrons no nível de Fermi das duas primeiras sub-bandas do poço quântico da Figura 4.10	67
4.12	Representação esquemática da função de onda do estado fundamental de um poço delta isolado.....	68
4.13	Representação esquemática de um sistema onde o poço quântico e o poço delta se apresentam simultaneamente.....	68
4.14	Centros DX de um plano de átomos dopantes de silício em GaAs. Figura extraída da referência 84.....	70
4.15	Influência da concentração de impurezas residuais de carbono no perfil de potencial da BC, e nas densidades de probabilidade associadas com as funções de onda eletrônicas, de uma estrutura do tipo δ -MDQW. O zero de energia foi fixado no ponto mais baixo da BC, que para esta estrutura localiza-se no poço de InGaAs.....	74
4.16	Representação do modelo dos aglomerados de Si, antes e depois da iluminação.....	76
4.17	Perfil de potencial da BC e densidades de probabilidade eletrônicas em função da fotoativação dos átomos de silício no plano- δ . $N_{Si} = n_s = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ descreve o sistema antes do processo de iluminação. $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ simula a estrutura depois de iluminada.....	79
4.18	Deslocamento dos máximos dos picos, aumento do entrelaçamento das distribuições eletrônicas com a região dos dopantes (42%), e aumento da porcentagem da distribuição eletrônica dentro do poço delta (13%), entre as situações antes e depois da iluminação, para o estado fundamental da amostra D20	81

4.19	Representação do modelo dos estados de superfície, antes e depois da iluminação.....	83
4.20	Perfil de potencial da BC e densidades de probabilidade eletrônicas em função da fotoativação dos estados de superfície. $V_S = 750$ meV representa a condição do sistema em $T_{\text{ilum}} = 0$ s. $V_S = 180$ meV simula a estrutura em $T_{\text{ilum}} = 1240$ s.....	84
4.21	Representação do modelo dos centros profundos, antes e depois da iluminação.....	87
4.22	Perfil de potencial da BC e densidades de probabilidade eletrônicas em função da concentração dos centros profundos (N_{CP}). Para descrever a estrutura eletrônica do sistema em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, utilizamos $N_{\text{CP}} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Para simular a fotoexcitação dos portadores capturados e o seu posterior <i>retorno</i> à região ativa ($T_{\text{ilum}} = 1240$ s) utilizamos $N_{\text{CP}} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	88
4.23	(a) Oscilações de SdH e (b) as correspondentes ocupações das sub-bandas determinadas a partir destas oscilações pelo método da transformada de Fourier, para a amostra D40 . Os diferentes traços são relativos aos diferentes tempos de iluminação da amostra.....	90
4.24	(a) Ocupações das sub-bandas (n_1, n_2) (b) e mobilidades quânticas dos portadores (μ_{q1}, μ_{q2}) nestas sub-bandas obtidas nas medidas de SdH em função do tempo de iluminação da amostra.....	91
4.25	Funções de distribuição eletrônicas, para a amostra D40 , de acordo com (a) o modelo dos aglomerados de silício, (b) com o modelo dos centros profundos e (c) com o modelo dos estados de superfície. A posição do plano dos dopantes ($z = 0$) foi indicada por uma linha tracejada vertical. A BC (da situação iluminada) foi acrescentada às figuras para uma melhor visualização das distribuições eletrônicas na região ativa.....	94
4.26	Deslocamento dos máximos dos picos, aumento do entrelaçamento das distribuições eletrônicas com a região de distribuição dos dopantes (40%), e aumento da porcentagem da distribuição eletrônica no poço delta (16%), entre as situações antes e depois da iluminação, para o estado fundamental da amostra D40	96

4.27	Relação entre as posições média e as larguras das distribuições eletrônicas antes e depois da iluminação, para o estado fundamental da amostra D40	99
4.28	(a) Oscilações de SdH e (b) as correspondentes concentrações de portadores determinadas a partir destas oscilações, pelo método da transformada de Fourier, para a amostra D100 . Os diferentes traços são relativos aos diferentes tempos de iluminação da amostra.....	103
4.29	Ocupação (n_2) e mobilidade quântica (μ_{q2}) dos portadores na segunda sub-banda obtidas nas medidas de SdH em função do tempo de iluminação da amostra D100 . Os círculos (losangos) indicam medidas na ausência (presença contínua) de iluminação.....	103
4.30	Funções de distribuição eletrônicas, para a amostra D100 , de acordo com o modelo dos aglomerados de silício. A posição do plano dos dopantes ($z = 0$) foi indicada por uma linha tracejada vertical. A BC (para a situação iluminada) foi acrescentada para uma melhor visualização das distribuições eletrônicas na região ativa.....	106
4.31	Perfil da banda de condução (BC), energia de Fermi (E_F), níveis de confinamento e as respectivas densidades de probabilidade eletrônicas (ϕ_{ei}) para estruturas δ -MDQWs com diferentes espessuras da camada de espaçamento D . Nestes cálculos utilizamos $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ e $V_s = 500 \text{ meV}$	108
4.32	Traços das oscilações de SdH e as respectivas FFTs para as amostras D20 , D40 e D100	110
4.33	Variação da magnetoresistência das amostras em $B = 0 \text{ T}$, em função do T_{ilum}	111
4.34	Perfil da BC e funções de distribuição eletrônicas dos cálculos que reproduziram as ocupações experimentais das sub-bandas para as diferentes amostras analisadas neste trabalho.....	115
4.35	Ocupações das sub-bandas (n_i) e n_{SdH} ($n_1 + n_2 + n_3$) em função da largura da camada de espaçamento. Os círculos (losangos) correspondem aos valores obtidos nas medidas de SdH (nos cálculos teóricos).....	116

Lista de Tabelas

2.1	Valores dos parâmetros de rede (a_0), dos potenciais de deformação (a, b) e das constantes elásticas (C_{ij}) para o GaAs e para o InAs. ^[70,75]	28
2.2	Valores para o $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ do <i>gap</i> relaxado (E_g^0), da variação do <i>gap</i> devido à componente hidrostática (ΔE_{Hidr}) e à componente de cisalhamento (ΔE_{Cis}), do <i>gap</i> tensionado para buracos pesados (E_g^{hh}) e para buracos leves (E_g^{lh}), e do <i>band offset</i> para a BC (ΔE_C), para alguns valores de x , na temperatura de 2K.....	29
2.3	Resumo das características principais das estruturas de δ -MDQWs analisadas em nosso trabalho.....	31
4.1	Resumo dos resultados das medidas de transporte obtidas por Babinski e colaboradores. ^[80] n_{Hall} e μ_{Hall} designam a concentração e a mobilidade de transporte dos portadores obtidas por medidas de efeito Hall, respectivamente. n_{SdH} representa a concentração de portadores do 2DEG obtida por medidas de SdH.....	54
4.2	Resumo dos resultados das medidas de transporte obtidas por Zervos e colaboradores. ^[81] n_{Hall} e μ_{Hall} designam a	

	concentração e a mobilidade de transporte dos portadores obtidas por medidas de efeito Hall, respectivamente. n_{SdH} representa a concentração de portadores do 2DEG obtida por medidas de SdH, e N_{Si} indica a concentração nominal de dopantes.....	55
4.3	Resumo dos resultados das medidas de SdH para a amostra D20 : ocupações das sub-bandas (n_1 , n_2 , n_3) e mobilidades quânticas (μ_{q1} , μ_{q2}) dos portadores em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa.....	65
4.4	Energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra D20 com diferentes valores de N_A . A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a Figura 4.15).....	74
4.5	Energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra D20 para dois diferentes valores de $N_{\text{Si}} = n_s$. A referência da escala de energia é ponto mais baixo da BC (veja a Figura 4.17).....	75
4.6	Valor da integral de sobreposição em função da iluminação da amostra, de acordo com o modelo dos aglomerados de silício. Na última coluna fornecemos o valor do deslocamento espacial do máximo local da distribuição eletrônica em relação ao plano- δ . Indicamos, também, se a distribuição aproxima-se ou afasta-se do plano dos átomos dopantes.....	79
4.7	Estudo sobre a influência dos estados de superfície nas energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra D20 , para dois diferentes valores de V_s . O valor $V_s = 180$ meV ($V_s = 750$ meV) simula a estrutura eletrônica do sistema no instante $T_{\text{ilum}} = 1240$ s ($T_{\text{ilum}} = 0$ s). A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a Figura 4.20).....	82
4.8	Valor da integral de sobreposição em função da iluminação da amostra, quando os elétrons são liberados dos estados de superfície. Na última coluna fornecemos o valor do deslocamento espacial do máximo local da distribuição eletrônica em relação ao plano- δ e indicamos também se a distribuição aproxima-se ou afasta-se do plano dos átomos dopantes.....	84
4.9	Estudo sobre a influência dos centros profundos (CP) nas energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra D20 . Para descrever a estrutura	

- eletrônica do sistema em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, utilizamos $N_{\text{CP}} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Para simular a fotoexcitação dos portadores capturados e o seu posterior *retorno* à região ativa ($T_{\text{ilum}} = 1240$ s) utilizamos $N_{\text{CP}} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a **Figura 4.22**).....86
- 4.10** Valor da integral de sobreposição em função da iluminação da amostra, de acordo com o modelo dos centros profundos. Na última coluna fornecemos o valor do deslocamento espacial do máximo local da distribuição eletrônica em relação ao plano- δ . Indicamos, também, se a distribuição aproxima-se ou afasta-se do plano dos átomos dopantes.....88
- 4.11** Resumo dos resultados das medidas de SdH para a amostra **D40**: populações (n_1, n_2) e mobilidades quânticas (μ_{q1}, μ_{q2}) em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa. $n_{\text{SdH}} = \sum n_i$92
- 4.12** Resumo dos resultados das simulações numéricas para a amostra **D40**. n_i e E_i indicam a ocupação e a energia de confinamento da i -ésima sub-banda, respectivamente. $n_s = \sum n_i$ é a concentração total do gás de elétrons. n_{sup} indica a concentração de elétrons capturados nos estados de superfície, e N_{A}^- indica a concentração de elétrons capturados pelas impurezas aceitadoras de carbono. $N_{\text{Si}} = n_s + N_{\text{A}}^- + n_{\text{sup}}$. Na última coluna, apresentamos o valor da integral de superposição. A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC, que em todas as simulações para a amostra **D40** é o fundo do poço de InGaAs. Estes resultados foram obtidos utilizando-se $\Delta z = 20 \text{ \AA}$93
- 4.13** Valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas ($z_{\text{médio}}$), das larguras das distribuições ($\Delta\psi$), das integrais de recobrimento ($\int_{-10}^{+10} \psi_i^* \psi_i dz$) e dos momentos dos portadores no nível de Fermi (k_F), para duas simulações das condições experimentais: antes de qualquer iluminação e depois da iluminação da amostra. Estes resultados estão relacionados com as informações apresentadas na **Tabela 4.12** para o modelo dos aglomerados de silício.....100
- 4.14** Valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas ($z_{\text{médio}}$), das larguras das distribuições ($\Delta\psi$), das integrais de

	recobrimento ($\int_{-10}^{+10} \psi_i^* \psi_i dz$) e dos momentos dos portadores no nível de Fermi (k_F), para duas simulações das condições experimentais: antes de qualquer iluminação e depois da iluminação da amostra. Estes resultados estão relacionados com as informações apresentadas na Tabela 4.12 para o modelo dos centros profundos.....	101
4.15	Resumo dos resultados das medidas de SdH para a amostra D100 : população (n_2) e mobilidade quântica (μ_{q2}) dos portadores na segunda sub-banda, em função do tempo de exposição da amostra à radiação.....	102
4.16	Resumo dos resultados das simulações numéricas para a amostra D100 , segundo o modelo dos aglomerados de silício. As definições das grandezas mostradas nesta tabela são as mesmas que aquelas apresentadas na Tabela 4.12 . A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC, que para esta amostra é o fundo do poço- δ . Estes resultados foram obtidos utilizando-se $\Delta z = 20 \text{ \AA}$	105
4.17	Valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas ($z_{\text{médio}}$), das larguras das distribuições ($\Delta\psi$), das integrais de recobrimento ($\int_{-10}^{+10} \psi_i^* \psi_i dz$) e dos momentos dos portadores no nível de Fermi (k_F), para duas simulações das condições experimentais: antes de qualquer iluminação e depois da iluminação da amostra.....	105
4.18	Resumo dos resultados das medidas SdH para todas as amostras analisadas neste trabalho: população (n_i) da i -ésima sub-banda e respectiva mobilidade quântica (μ_{qi}), em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa.....	112
4.19	Resumo dos resultados das simulações numéricas para todas as amostras, segundo o modelo dos aglomerados moleculares...	113

1 | Introdução Geral

Desde a idealização e fabricação das primeiras heteroestruturas semicondutoras^[1-3] (HS) na década de setenta, a produção destes materiais evoluiu rapidamente com o surgimento e o aprimoramento das técnicas de crescimento de materiais semicondutores. Por heteroestruturas semicondutoras entendemos um material artificialmente produzido, o qual se obtém pela superposição de camadas alternadas de semicondutores distintos.

As modernas técnicas de crescimento de materiais semicondutores tais como MBE^[4] (*Molecular Beam Epitaxy*), MOCVD^[5] (*Metalorganic Chemical Vapour Deposition*) e CBE^[6] (*Chemical Beam Epitaxy*) permitem atualmente a fabricação de estruturas formadas por camadas muito finas (alguns planos atômicos) de materiais semicondutores de alta qualidade, com interfaces abruptas e precisa incorporação de impurezas (concentração e localização espacial).

Heteroestruturas semicondutoras crescidas em diversas arquiteturas formam a base de uma série de dispositivos eletrônicos, ópticos e eletroópticos^[7-10] e representam sistemas extremamente interessantes do ponto de vista de física básica.^[7,11] O confinamento de portadores nestes sistemas dá origem a uma grande variedade de fenômenos, os quais têm sido intensivamente investigados tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental e amplamente utilizados na indústria da microeletrônica e da optoeletrônica, no sentido de melhorar o desempenho de dispositivos baseados em heteroestruturas semicondutoras.

Em relação a aspectos fundamentais da física moderna podemos citar, por exemplo, a recente descoberta do efeito Hall quântico inteiro por Klaus von Klitzing, em 1980, que o tornou merecedor do prêmio Nobel de Física de 1985^[12] e ainda, mais recentemente, a descoberta do efeito Hall quântico fracionário que agraciou R. B. Laughlin,^[13] H. L. Störmer^[14] e D. C. Tsui^[15] com o prêmio Nobel de Física de 1998. No que se refere às recentes novidades relacionadas com aplicações tecnológicas de heteroestruturas semicondutoras podemos destacar, por exemplo, a fabricação de LASERs (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) de poços quânticos de GaN que emitem luz azul e têm grande interesse comercial. A obtenção de lasers de GaN emitindo no azul desencadeou uma corrida no sentido de se aprimorar o conhecimento sobre este material, tanto no que se refere à otimização de parâmetros de crescimento quanto no que se refere ao estudo de suas propriedades estruturais e eletrônicas, visando um melhor aproveitamento de suas potencialidades em aplicações tecnológicas.^[16,17]

O crescimento de estruturas semicondutoras com altas densidades de portadores, altas mobilidades eletrônicas e de boa qualidade é imprescindível para a indústria da microeletrônica. Até 1978 a utilização de HS na fabricação de dispositivos envolvendo o transporte eletrônico ficou muito limitada, devido à baixa mobilidade dos portadores obtidas até então. A partir da introdução do conceito de dopagem modulada^[18] (MD, *Modulation Doped*) este quadro alterou-se significativamente. Este tipo de dopagem possibilita a obtenção de um gás bidimensional de portadores (2DCG, *Two-Dimensional Carrier Gas*), de alta mobilidade, confinado na(s) camada(s) de uma HS. Semicondutores com tais características são excelentes materiais para a construção de transistores de alta mobilidade eletrônica (HEMT, *High Electron Mobility Transistor*) empregados como chaves rápidas e dispositivos para operar em altas frequências.^[19,20]

Estruturas de poços quânticos com dopagem modulada^[21] (MDQWs, *Modulation Doped Quantum Wells*) são estruturas de poços quânticos convencionais, nas quais são introduzidas altas concentrações de dopantes no material com a maior largura da faixa proibida (maior *gap*). No sistema GaAs/InGaAs/GaAs, por exemplo, esta dopagem é feita no composto binário de arseneto de gálio. Devido à diferença de *gap* entre os materiais semicondutores constituintes da heteroestrutura, portadores de carga livres são transferidos para o semicondutor de menor *gap* (denominado canal da heteroestrutura).

Esta transferência de portadores de carga para o canal dá origem a um gás de elétrons bidimensional (2DEG, *Two-Dimensional Electron Gas*) no caso de dopagem do tipo *n*, ou um gás de buracos bidimensional (2DHG, *Two-Dimensional Hole Gas*), no caso de dopagem do tipo *p*, confinados no material de menor *gap*. Esta técnica de crescimento possibilita a obtenção de estruturas semicondutoras com altas densidades de portadores (até 10^{13} portadores/cm²) os quais estão espacialmente separados dos dopantes ionizados. Daí o grande interesse por estes sistemas, uma vez que a separação espacial entre os portadores do gás e os dopantes é responsável por uma grande redução no espalhamento coulombiano associado às impurezas ionizadas, resultando em semicondutores com altos valores de mobilidade (até 10^7 cm²/V.s a 4 K).^[22,23]

Desde a fabricação das primeiras heteroestruturas com dopagem modulada na década de setenta, até aproximadamente 1985, MDQWs eram obtidos dopando-se *uniformemente* uma determinada região da barreira (com a espessura de dezenas ou centenas de ângstrons). A eficiência de transferência de portadores de carga da região dopada para o canal depende, entre outros fatores, da largura do poço, da altura da barreira e da espessura da camada intrínseca que separa o poço da região dopada (*spacer layer*). Visando as aplicações práticas destes sistemas, grandes esforços foram realizados no sentido de otimizar os parâmetros associados com a própria arquitetura das amostras a fim de obter-se um compromisso entre altas concentrações de portadores sem a degradação de suas mobilidades. Como exemplo destes esforços podemos citar um dos primeiros cálculos autoconsistentes analisando a eficiência de transferência de carga da região de dopagem para o canal em função de parâmetros estruturais de poços quânticos de GaAs/GaAlAs.^[24]

Além das propriedades estruturais e elétricas dos poços quânticos com dopagem modulada, fenômenos físicos associados ao gás bidimensional de portadores de carga nestes sistemas têm sido intensivamente investigados. A presença dos portadores livres altera de maneira significativa as propriedades eletrônicas das HS. Por exemplo, ela causa a renormalização da largura da faixa proibida^[25-27] (*band gap renormalization*), deslocamento Moss-Burstein entre os espectros de emissão e absorção,^[25] o desaparecimento de estados excitônicos^[28] e um realce na intensidade de absorção (emissão) óptica associada com o processo de excitação (recombinação) de elétrons nas proximidades do nível de Fermi com buracos fotogerados^[29-32] (efeito este denominado *Fermi-edge singularity*).

A técnica da dopagem modulada abriu possibilidades inteiramente novas no que diz respeito ao planejamento da arquitetura de novas amostras e deu origem a estruturas semicondutoras com excelentes propriedades elétricas.^[33] Entretanto, nos poços quânticos com dopagem modulada, a densidade de carga no canal é fortemente limitada pela transferência parcial de carga da região dopada para o poço. Esta limitação é imposta devido ao alinhamento do nível de Fermi em toda a estrutura, que por sua vez é determinado pela energia de ionização da impureza dopante.

Em 1979 surge uma nova técnica de dopagem denominada técnica da dopagem planar ou delta (δ).^[34] O conceito da dopagem planar tem por princípio a deposição de dopantes em uma única monocamada do semicondutor hospedeiro, perpendicular à direção de crescimento. Na prática, a dopagem planar pode ser obtida interrompendo-se o crescimento do material hospedeiro.^[34,35] Esta técnica permite obter perfis de dopagem extremamente finos (algumas dezenas de ângstrons) com elevados níveis de dopagem (até 10^{13} átomos dopantes/cm²),^[10] e possibilita a obtenção de um gás bidimensional de elétrons ou buracos, confinado na direção de crescimento, no poço de potencial induzido pela dopagem planar. Este poço de potencial é também denominado na literatura como *poço- δ* .

Após a introdução do conceito da dopagem planar, esforços foram feitos no sentido de se obter perfis de dopagem extremamente abruptos, com altas densidades de átomos dopantes, otimizando-se os parâmetros de crescimento. Estes estudos foram

realizados com as técnicas experimentais de Espectroscopia de Massa de Íons Secundários^[36] (SIMS, *Secondary Ions Mass Spectroscopy*), Capacitância-Voltagem (CV),^[10] medidas de transporte,^[37,38] espectroscopia Raman^[39], Raios X,^[40] e fotoluminescência^[41-43] (PL, *photoluminescence*), por exemplo.

A partir de 1988 surgem os primeiros cálculos teóricos fornecendo detalhes sobre a forma do potencial induzido pela dopagem, as energias de confinamento dos elétrons e suas funções de onda.^[44-46] Estes cálculos foram realizados em função de parâmetros tais como a dispersão da distribuição e a concentração dos dopantes nos planos. Os sistemas analisados foram super-redes com dopagem planar do tipo n , poços quânticos com dopagem planar na parte central do poço, semicondutores maciços contendo um único plano de átomos dopantes, por exemplo. Inicialmente, os sistemas com dopagem planar do tipo n foram os mais estudados, devido à complexidade da banda de valência. Entretanto, nos últimos anos, começaram a surgir na literatura cálculos detalhados sobre a estrutura de bandas de sistemas com dopagem planar do tipo p .^[46-49] Simultaneamente ao desenvolvimento da teoria, pesquisas experimentais foram realizadas no sentido de se obter informações sobre as propriedades ópticas, elétricas e eletrônicas destes sistemas.^[41-43,50-53]

Os resultados teóricos e experimentais sobre super-redes com dopagem planar mostraram que o confinamento de dopantes em algumas monocamadas dá origem a um poço de potencial que confina os portadores majoritários. Em sistemas com dopagem planar do tipo n , a ionização dos átomos dopantes dá origem à formação de um potencial em forma de “V” para o fundo da banda de condução, bem como para o topo da banda de valência. Os elétrons liberados na ionização dos átomos dopantes permanecem próximos aos doadores ionizados dando origem a um gás bidimensional de elétrons, confinado na direção de crescimento, ocupando vários níveis de energia dentro do poço induzido pela dopagem, ou seja, o *poço- δ* .

No final da década de oitenta surgem também os primeiros estudos sobre poços quânticos com dopagem modulada, utilizando a dopagem planar nas *barreiras* dos poços quânticos. Devido ao excelente desempenho destas HS quanto às suas propriedades elétricas (como pode ser observado na **Figura 1.1**), a técnica da dopagem planar passa também a ser utilizada na composição de heteroestruturas semicondutoras, em substituição à dopagem volumétrica convencional.

Apesar de que, atualmente, a estrutura eletrônica dos portadores confinados nos poços induzidos pela dopagem planar seja bem conhecida, tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental, o conhecimento que se tem das propriedades ópticas e elétricas de poços quânticos com *dopagem planar nas barreiras* é ainda incipiente. Neste trabalho, utilizaremos a terminologia δ -MDQWs para distinguir os poços quânticos com dopagem *planar na barreira* daqueles obtidos com a dopagem volumétrica convencional.

Figura 1.1 - Descrição do desenvolvimento histórico da mobilidade eletrônica em poços quânticos de GaAs com dopagem modulada, em função da temperatura. As duas curvas superiores foram obtidas usando-se δ -MDQWs. Esta figura foi obtida na referência 23.

Nos δ -MDQWs, a transferência de carga da região δ -dopada para o canal dependerá não apenas da espessura da camada intrínseca que separa o plano de átomos dopantes do poço quântico, da altura da barreira, da largura do poço quântico, mas também da concentração dos dopantes, ou seja, da própria estrutura eletrônica associada com o poço de potencial induzido pela dopagem planar.

Nos δ -MDQWs, o poço induzido pela dopagem compete com o canal no compartilhamento dos portadores de carga livres, formando um canal de condutividade paralelo. Os auto-estados da região ativa (que compreende basicamente o canal e o *poço- δ*) podem ser classificados em estados do canal, estados do *poço- δ* ou estados híbridos (pertencentes tanto ao canal quanto ao *poço- δ*). Esta classificação é feita com base na probabilidade de se encontrar o portador associado a um determinado auto-estado predominantemente em uma ou outra região da camada ativa.

Neste trabalho, apresentaremos resultados sobre a estrutura eletrônica do gás de elétrons bidimensional, confinado em estruturas de poços quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs com dopagem planar na barreira. Informações sobre a estrutura eletrônica do 2DEG nestes sistemas foram obtidas através das técnicas de efeito Hall e Shubnikov–de Haas (SdH) para determinar a população dos estados eletrônicos e a mobilidade quântica dos portadores nestes estados. Além destas informações sobre os estados eletrônicos, obtivemos informações sobre a origem do efeito da fotocondutividade persistente (PPC, *Persistent Photoconductivity*) nestes sistemas. Na **Figura 1.2** mostramos uma representação esquemática da arquitetura das amostras que foram analisadas, juntamente com o perfil do potencial na região ativa da heteroestrutura (as barreiras, o poço quântico e a camada com a dopagem planar do tipo n), sendo D a distância entre o plano de dopagem e o poço, também denominada camada de espaçamento.

Estruturamos a apresentação de nossa tese na seguinte forma:

Capítulo 2 – Descrevemos o formalismo utilizado na elaboração do programa computacional para o cálculo numérico autoconsistente da estrutura eletrônica de poços quânticos com dopagem planar do tipo n na barreira. As informações teóricas provenientes destes cálculos auxiliar-nos-ão na interpretação dos nossos resultados experimentais.

Capítulo 3 – Apresentamos uma breve descrição das técnicas experimentais utilizadas em nossas investigações.

Capítulo 4 – Apresentamos os resultados das medidas de transporte para as estruturas analisadas neste trabalho e os resultados dos cálculos autoconsistentes.

Finalizamos a descrição do trabalho fazendo um resumo das principais conclusões e apresentando um projeto que será desenvolvido posteriormente, visando dar continuidade à investigação das propriedades destes sistemas.

Figura 1.2 - Representação esquemática da arquitetura das amostras analisadas neste trabalho e do perfil de potencial na região ativa. **D** é a distância entre o plano de átomos dopantes e o poço de InGaAs.

2 Estrutura Eletrônica de Poços Quânticos com Dopagem Planar do Tipo n na Barreira

2.1 – Introdução

Apesar dos δ -MDQWs serem sistemas de grande interesse tanto para a pesquisa básica quanto para a pesquisa aplicada, não existe na literatura um estudo detalhado sobre a estrutura eletrônica destas estruturas. Os resultados teóricos existentes dão informações sobre a estrutura eletrônica de δ -MDQWs baseados nos compostos semicondutores de GaAs/InGaAs/AlGaAs^[54] ou de GaAs/InGaAs/GaAs^[55,56] apenas para amostras com arquiteturas muito específicas. Com o intuito de contarmos com resultados teóricos adequados para a interpretação dos resultados das medidas de transporte das amostras analisadas neste trabalho, propusemos o problema ao professor Dr. Eduardo Kojy Takahashi, da Universidade Federal de Uberlândia, que elaborou um programa computacional para o cálculo numérico autoconsistente da estrutura eletrônica de poços quânticos com dopagem planar do tipo n na barreira. Este programa nos foi cedido pelo professor Eduardo para que realizássemos os estudos teóricos que aqui serão apresentados.

Neste capítulo, portanto, apresentaremos o formalismo utilizado na elaboração do programa computacional. Os resultados teóricos sobre a estrutura eletrônica serão apresentados no decorrer da exposição deste trabalho. Apresentaremos, também, neste capítulo, considerações gerais sobre a dopagem planar em semicondutores, considerações gerais sobre o composto ternário de InGaAs e a descrição da arquitetura das amostras e dos parâmetros utilizados nos nossos cálculos autoconsistentes.

2.2 – A dopagem planar em semicondutores

As amostras usadas nesta tese foram crescidas pela técnica de MBE. O crescimento de cristais semicondutores por MBE ocorre em uma câmara de ultra-alto vácuo, onde feixes de átomos ou moléculas incidem sobre um substrato (cristal semicondutor) aquecido. Elementos de alta pureza (Ga, In, Al, As, Si), colocados em células térmicas de efusão, são evaporados, gerando feixes moleculares que estão direcionados para o substrato. A abertura das células de efusão é controlada por obturadores mecânicos, que permitem iniciar ou cessar o fluxo destes elementos. A temperatura de cada célula é controlada individualmente, possibilitando o controle do fluxo dos diferentes elementos evaporados.

Estruturas com dopagem planar ou delta são sistemas formados pela deposição de estreitas camadas de dopantes (algumas monocamadas) sobre espessas camadas de um cristal semicondutor hospedeiro (dezenas ou centenas de ângstrons). Na prática, estas estruturas são obtidas interrompendo-se o crescimento do material hospedeiro durante a deposição do dopante.^[34,35] Por exemplo, a estrutura de GaAs contendo um *único* plano de átomos dopantes é obtida a partir de um substrato de GaAs sobre o qual efetua-se, inicialmente, o crescimento de uma camada de GaAs não dopada. Para a deposição da camada de átomos dopantes, interrompe-se o crescimento do cristal de GaAs fechando-se o obturador da célula de Ga, deixando-se a célula de As aberta para garantir a permanência deste elemento na estrutura cristalina. É então aberto o obturador da célula de efusão do dopante durante um certo intervalo de tempo, que pode chegar a alguns minutos para elevados níveis de dopagem (até 10^{13} ou 10^{14} átomos de dopante/cm²). Depois de atingida a concentração bidimensional de dopantes desejada, o obturador da célula de dopante é fechado e o da célula de gálio é novamente aberto, para completar o crescimento da camada de GaAs cercando o plano de átomos dopantes.

Se os átomos nos planos de dopagem forem do tipo doador (átomos de silício em GaAs, por exemplo), darão origem às estruturas com dopagem planar do tipo *n*; se forem do tipo aceitador (átomos de berílio em GaAs, por exemplo), darão origem às estruturas com dopagem planar do tipo *p*. Para concentrações de dopantes doadores (N_D^{2D}) suficientemente altas, os elétrons oriundos destes átomos formam um gás bidimensional de elétrons. De forma semelhante, para concentrações de átomos dopantes aceitadores (N_A^{2D}) suficientemente altas, os buracos oriundos destes dopantes

formam um gás bidimensional de buracos. Teoricamente, a formação do gás ocorre quando as órbitas dos átomos dopantes superpõem-se, isto é, quando a concentração bidimensional de dopantes obedece à seguinte condição:^[10]

$$\left(\sqrt{N_{D(A)}^{2D}} \right)^{-1} < a_{D(A)}^* , \quad (2.1)$$

onde $a_{D(A)}^*$ é o raio de Bohr efetivo da impureza doadora (aceitadora) no material hospedeiro. O estudo de sistemas com dopagem planar pode ser realizado a partir de um modelo no qual assume-se que todos os átomos dopantes estão ionizados e dão origem a um potencial de confinamento (na direção do crescimento) para os portadores de carga majoritários (elétrons ou buracos), originados a partir da ionização dos átomos dopantes. Ao serem ionizados, os doadores dão origem a uma placa de cargas positivas (no caso de dopagem do tipo n), a qual é responsável pela formação de um potencial em forma de “V”. Devido à atração coulombiana, os elétrons liberados na ionização permanecem próximos aos doadores ionizados, dando origem ao gás bidimensional de elétrons. Este gás de elétrons blinda o potencial induzido pelos doadores ionizados alterando a profundidade do potencial “V”. Além da interação coulombiana, os portadores do gás bidimensional estão sujeitos às interações de troca e correlação.^[57] A estrutura eletrônica dos portadores do gás bidimensional (funções de onda, energias de confinamento, ocupações das sub-bandas) depende da forma e profundidade do potencial- δ , que por sua vez também depende da própria distribuição de cargas neste potencial. Em outras palavras, o cálculo da estrutura eletrônica do gás bidimensional confinado no poço- δ é um problema autoconsistente. A descrição que fizemos para uma HS com dopagem planar do tipo n é também adequada aos sistemas com dopagem planar do tipo p . A título de ilustração, mostramos na **Figura 2.1** uma representação esquemática da dopagem planar em um cristal de GaAs e o potencial autoconsistente induzido por uma dopagem planar do tipo n .^[58]

A representação da dopagem planar ilustrada na **Figura 2.1** é apenas uma idealização da realidade onde ignora-se o efeito da difusão dos dopantes do plano de dopagem para o material hospedeiro. Em 1985, as primeiras evidências da difusão dos dopantes foram relatadas por H. Lee e colaboradores.^[59] Uma vez que os átomos dopantes difundem-se, existe um limite máximo da largura da distribuição dos dopantes para que a dopagem seja considerada planar e não volumétrica. Uma dopagem é considerada planar quando a extensão da região dopada é menor do que a extensão espacial (z_0) da função de onda do estado fundamental dos portadores confinados no poço induzido pela dopagem. Utilizando um cálculo variacional, E. F. Schubert^[10]

Figura 2.1 - (a) Representação esquemática de um semiconductor contendo um único plano de átomos dopantes. (b) Perfil do potencial induzido pela dopagem planar do tipo n e as respectivas energias de confinamento para uma concentração de dopantes $N_D^{2D} = 3,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. O perfil de potencial e as energias estão desenhados na escala correspondente ao cálculo autoconsistente apresentado na referência 58. E_i indica a energia do fundo da i -ésima sub-banda eletrônica. A energia do quase-nível de Fermi E_F foi desenhada com linha tracejada.

estimou a extensão espacial da função de onda do estado fundamental dos portadores do gás bidimensional em função da densidade de dopantes como:

$$z_o = \left(\sqrt{2\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 N_{D(\Lambda)}^{2D} m^*} \right)^{1/3}, \quad (2.2)$$

onde e é a carga do elétron, $\epsilon = k \epsilon_o$ é a permissividade elétrica do meio, sendo k a constante dielétrica desse meio ($k = 13,16$ para o GaAs^[60]), ϵ_o é a permissividade do vácuo e m^* é a massa efetiva do portador confinado. Utilizando-se na expressão anterior $N_D^{2D} = 5,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ obtém-se que a extensão espacial da função de onda de um elétron no estado fundamental é $z_o \approx 50 \text{ \AA}$ para $(m_e^*/m_o) = 0,067$. Consequentemente, distribuições de dopantes doadores com extensões $< 50 \text{ \AA}$ podem ser consideradas como dopagens planares ou deltas. Para a mesma concentração de dopantes aceitadores, utilizando-se $(m_{hh}^*/m_o) = 0,34$ obtemos $z_o \approx 25 \text{ \AA}$, ou seja, para dopagens do tipo p , distribuições com extensões $< 25 \text{ \AA}$ são consideradas planares. Atualmente, resultados obtidos por SIMS e medidas de CV demonstram que perfis de dopagem de Si ou Be com larguras de linha variando de $10 \text{ \AA}$ a $30 \text{ \AA}$ têm sido obtidos com sucesso em GaAs, GaAlAs e InP.

Uma estrutura δ -MDQW pode ser obtida ao introduzirmos planos de átomos dopantes nas proximidades das heterointerfaces de um poço quântico convencional. A estrutura de um poço quântico convencional pode ser obtida intercalando-se uma camada de um semiconductor de menor *gap* (por exemplo, o composto ternário de InGaAs) entre duas camadas de um material semiconductor com maior *gap* (por exemplo, o composto binário de GaAs). O perfil do potencial formado por estas duas heterojunções está representado na **Figura 2.2**. A extensão da camada de InGaAs na direção de crescimento z é denominada largura do poço (L_w) enquanto a extensão de cada camada de GaAs é denominada largura da barreira (L_b). Este perfil de potencial é apenas uma idealização da realidade onde se assume um crescimento bidimensional perfeito (semicondutores perfeitos, interfaces abruptas e ajuste perfeito de parâmetros de rede).

Podemos descrever o potencial representado na **Figura 2.2** da seguinte forma: os semicondutores que compõem a heteroestrutura possuem diferentes larguras de faixas proibidas: E_g^{InGaAs} e E_g^{GaAs} . A diferença entre as energias do *gap* dos dois semicondutores (*band-edge discontinuity*), $\Delta E = E_g^{\text{GaAs}} - E_g^{\text{InGaAs}}$, é dividida em duas partes: uma, ΔE_c (*conduction-band offset*), que determina a altura do degrau associado à banda de condução (BC); outra, ΔE_v (*valence-band offset*), que determina a altura do degrau associado à banda de valência (BV). A variação ΔE_c (ΔE_v) é denominada altura

Figura 2.2 - Representação esquemática do perfil de potencial de um poço quântico de GaAs/InGaAs/GaAs. Os semicondutores GaAs e InGaAs têm a mesma estrutura cristalina e diferentes faixas de energia proibidas.

da barreira para os elétrons (buracos). A diferença ΔE é distribuída de forma não eqüitativa entre as bandas de condução e valência. Em geral assume-se que $\Delta E_c = 0,7\Delta E$ e $\Delta E_v = 0,3\Delta E$ para este sistema.^[61,62]

Definidos os valores de ΔE_c e ΔE_v , fica definido um perfil de potencial unidimensional $V_c(z)$ ($V_v(z)$) atrativo para os elétrons (buracos) na região $-L_w/2 \leq z \leq L_w/2$. Este potencial restringe o movimento dos elétrons e buracos na direção normal às interfaces (direção z), enquanto seus movimentos nas direções x e y são considerados livres. O movimento destes portadores na direção z é quantizado e suas energias de confinamento podem ser obtidas resolvendo-se a equação de Schrödinger unidimensional, encontrada em qualquer livro texto de Mecânica Quântica.^[63] Entretanto, se na heteroestrutura representada na **Figura 2.2** inserirmos um plano de átomos dopantes nas proximidades do poço de InGaAs, deveremos determinar a deformação, induzida pela dopagem, no perfil de potencial do poço de InGaAs, ou seja, na estrutura δ -MDQW.

O requerimento do alinhamento do nível de Fermi em toda a estrutura semicondutora dará origem a uma transferência de elétrons do poço- δ para o poço de InGaAs. Esta redistribuição espacial de cargas cria campos elétricos internos, que promovem a curvatura das bandas de condução e valência da heteroestrutura. O processo de transferência de carga termina quando o nível de Fermi está alinhado em toda a heteroestrutura semicondutora. Nesta condição de equilíbrio eletrostático,

podemos ter um gás de elétrons dentro do poço de InGaAs e/ou dentro do poço- δ . Se a espessura da camada de espaçamento (D) é suficientemente grande, o acoplamento das funções de onda dos portadores no poço de InGaAs e no poço- δ é desprezível, e os poços podem ser tratados como independentes (autofunções e auto-energias distintas). Para espessuras da camada de espaçamento da ordem de umas poucas dezenas de ângstrons, os poços são acoplados. Neste caso, as funções de onda associadas aos portadores confinados são híbridas, podendo estar preferencialmente localizadas no poço de InGaAs ou no poço- δ , ou em ambos, simultaneamente. Portanto, a estrutura eletrônica do poço de InGaAs é também um problema autoconsistente e dependerá, entre outros fatores, da quantidade de carga livre transferida do poço- δ para o canal. Na seção seguinte apresentaremos o formalismo utilizado para a resolução deste problema. Alguns resultados ilustrando o comportamento de δ -MDQWs serão apresentados no **Capítulo 4**.

2.3 – Formalismo do cálculo autoconsistente para δ -MDQWs

Nesta seção apresentaremos uma descrição do método autoconsistente usado para o cálculo das autofunções e autovalores de energia dos portadores de carga submetidos ao potencial de uma estrutura δ -MDQW com dopagem planar do tipo n .

Na representação esquemática da dopagem planar na **Figura 2.1**, consideramos que durante o crescimento do material hospedeiro é introduzida uma concentração planar N_{Si} de átomos de silício ($N_D^{2D} = N_{Si}$), os quais ocupam sítios de Ga, assumindo caráter doador dentro do cristal e configurando assim uma dopagem do tipo n . Embora incorporados inicialmente em uma monocamada atômica, os doadores de silício difundem-se termicamente em torno do plano dos átomos dopantes. Portanto, no modelo adotado neste trabalho, consideramos que a distribuição espacial dos átomos dopantes ionizados acomoda-se segundo uma distribuição gaussiana, centrada na posição nominal do plano da dopagem planar, de acordo com a seguinte expressão:

$$N_{Si}^+(z) = \frac{N_{Si}}{d} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{(-2z^2/d^2)} \quad (2.3)$$

onde $2d$ é a largura da região de dispersão (*spread*) dos átomos dopantes e N_{Si} é a concentração dos átomos dopantes por cm^2 .

Nossas amostras foram ainda dopadas, na região da cobertura, com uma concentração de doadores N_d (da ordem de 10^{17} átomos por cm^3). Em nossos cálculos, consideramos que estes átomos doadores estão homogeneamente distribuídos nesta região de largura $L_{\text{cobertura}}$. Desta forma, a concentração de doadores ionizados $N_d^+(z)$ na região da cobertura, para uma temperatura finita T , foi calculada de acordo com a expressão:

$$N_d^+(z) = \frac{N_d}{1 + 2e^{[E_F + E_D - V(z)]/k_B T}} \quad (2.4)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, E_D é a energia do nível doador (medida a partir do fundo da banda de condução), e E_F é a energia de Fermi no GaAs (no caso das estruturas analisadas neste trabalho). $V(z)$ é o potencial de um elétron e será definido na expressão 2.13.

A concentração bidimensional de doadores na cobertura é calculada como:

$$N_d^+ = \int_{-\infty}^{\infty} N_d^+(z) dz \quad (2.5)$$

No modelo adotado neste trabalho, consideramos que uma parte dos elétrons provenientes da ionização dos doadores atua na compensação de impurezas aceitadoras residuais de carbono, sempre presentes em camadas semicondutoras de GaAs crescidas pela técnica de MBE, com densidades da ordem de 10^{14} cm^{-3} .^[64] A compensação destas impurezas de carbono dá origem a uma densidade de aceitadores negativamente ionizados $N_A^-(z)$ em torno da camada δ dopada que pode ser calculada pela expressão:

$$N_A^-(z) = \frac{N_A}{1 + 4e^{[V(z) - E_g + E_A - E_F]/k_B T}} \quad (2.6)$$

onde N_A é a concentração volumétrica de aceitadores residuais uniformemente distribuídos no material, E_A é a energia do nível aceitador, e E_g é a largura da faixa proibida do GaAs.

A concentração bidimensional de aceitadores residuais ionizados é dada por:

$$N_A^- = \int_{-\infty}^{\infty} N_A^-(z) dz . \quad (2.7)$$

O valor aproximado da extensão da região de depleção ($2W$) devido a esta concentração pode ser obtido de:^[65]

$$N_A^- = 2W N_A \approx \left(\frac{2N_A \varepsilon E_g}{e^2} \right)^{1/2} . \quad (2.8)$$

Também consideramos em nosso estudo a presença de estados de superfície na heteroestrutura. Desta forma, uma outra fração dos elétrons livres foi utilizada na população destes estados de superfície, dando origem às densidades de cargas superficiais σ_1 e σ_2 . Os índices 1 e 2 referem-se, respectivamente, à superfície livre da região do substrato e à superfície livre da cobertura.

A concentração de elétrons livres n_s , que irá constituir o gás bidimensional na região ativa, é obtida através da equação de neutralidade de cargas, expressa no nosso caso como:

$$N_{Si} + N_d^+ = n_s + N_A^- + \sigma_1 + \sigma_2 \quad (2.9)$$

sendo que N_{Si} , N_d^+ , n_s , N_A^- , σ_1 e σ_2 representam, respectivamente, as concentrações bidimensionais de átomos dopantes de silício, de impurezas doadoras ionizadas na região da cobertura, de elétrons livres, de aceitadores residuais ionizados, de cargas na superfície livre do substrato (superfície 1) e de cargas na superfície livre da cobertura (superfície 2).

O potencial total em cada uma das superfícies livres da heteroestrutura é dado por:

$$\begin{cases} V_1(L_d) + V_2(L_d) + V_{b2} = \mu_2 \\ V_1(-L_e) + V_2(-L_e) + V_{b1} = \mu_1 \end{cases} \quad (2.10)$$

onde $V_i(L)$ ($i = 1, 2$) é a contribuição do potencial devido à densidade σ_i ao potencial total na superfície livre da cobertura ($L = L_d$) ou na superfície livre do substrato ($L = L_e$); V_{b1} e V_{b2} representam os valores dos potenciais nas superfícies 1 e 2,

respectivamente, devido às concentrações N_{Si} , N_d^+ , n_s , e N_A^- ; L_e e L_d designam as distâncias das superfícies livres ao plano da dopagem planar e μ_1 e μ_2 são as posições do nível de Fermi em cada superfície, medidos a partir do fundo da banda de condução.

Os potenciais $V_i(z)$ ($i=1,2$) que aparecem na expressão (2.10) são dados em termos das densidades de cargas nas superfícies como:

$$V_i(z) = \frac{e^2 \sigma_i}{2 \epsilon_0 \kappa_i} |z| \quad i = 1,2 \quad (2.11)$$

onde κ_i é a constante dielétrica do meio i .

Utilizando a expressão (2.11) e considerando fixos os níveis de Fermi nas superfícies (de tal forma que $\mu_1 = \mu_2 = \mu$), a expressão (2.10) pode ser escrita como:

$$\sigma_2 - \sigma_1 = \frac{2 \epsilon}{e^2 (L_e + L_d)} (V_{b1} - V_{b2}) . \quad (2.12)$$

As expressões (2.9) e (2.12) nos fornecem as concentrações de carga σ_1 e σ_2 em cada superfície da heteroestrutura.

Para efeito de trocas de cargas no processo autoconsistente, considera-se apenas aquelas que ocorrem entre a região ativa (formada basicamente pelo poço de InGaAs e o poço- δ) e a superfície mais próxima (a da cobertura), uma vez que a outra superfície (a do substrato) encontra-se muito distante (cerca de 10^4 Å) e pouco contribui para os processos físicos importantes que ocorrem na região ativa.

Não obstante a compensação de aceitadores e dos estados de superfície, a grande maioria dos elétrons contribui para a formação do gás bidimensional de elétrons de concentração n_s na região ativa da heteroestrutura. É principalmente este gás de elétrons, altamente concentrado, que promove o efeito da blindagem eletrônica sobre o potencial em forma de “V” gerado pelos átomos dopantes ionizados no plano da dopagem planar.

Adotamos em nosso cálculo o tratamento teórico baseado na aproximação da massa efetiva,^[66] no qual os efeitos do potencial cristalino são incluídos nos parâmetros efetivos do material. Desta forma, os elétrons do gás bidimensional são descritos como partículas com massa efetiva m_e^* sujeitos a potenciais de longo alcance (até milhares de ângstrons), quando comparados ao parâmetro de rede dos semicondutores que constituem a heteroestrutura. Com base no modelo recém descrito, o potencial de um elétron será escrito como:

$$V(z) = V_b(z) + V_H(z) + V_{XC}(z) \quad (2.13)$$

onde o primeiro termo (V_b) descreve a descontinuidade da variação espacial do *gap* dos semicondutores que formam a heteroestrutura, o segundo termo (V_H) descreve o potencial de Hartree decorrente da interação eletrostática dos elétrons entre si e com as impurezas ionizadas fixas na rede do cristal hospedeiro, e V_{XC} é o potencial de troca e correlação. No presente trabalho, adotamos a aproximação analítica de Hedin-Lundqvist^[67,68] para o potencial de troca-correlação:

$$V_{XC}(z) = -\frac{e^2}{2\kappa\epsilon_o a_o^*} \left[1 + \frac{0,7734r_s}{21} \ln \left(1 + \frac{21}{r_s} \right) \right] \left(\frac{2}{\pi\alpha r_s} \right) \quad (2.14)$$

onde

$$r_s = \left(\frac{4}{3} \pi (a_o^*)^3 n(z) \right)^{-1/3} \quad (2.15)$$

sendo $n(z)$ a densidade eletrônica (que será definida na **equação 2.23**) e a_o^* o raio de Bohr efetivo,

$$\left. \begin{aligned} a_o^* &= \kappa\epsilon_o a_o \frac{m_o}{m_e^*} \\ \alpha &= \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

sendo m_o a massa de repouso do elétron de massa efetiva m_e^* e a_o o raio de Bohr.

A função de onda de um elétron do gás pode ser escrita como:^[11,69]

$$\Phi_j(x, y, z) = u(x, y, z) e^{i(k_x x + k_y y)} \Psi_j(z) \quad (2.17)$$

onde $e^{i(k_x x)}$ e $e^{i(k_y y)}$ são funções de onda plana que descrevem o movimento livre dos elétrons nas direções x e y ; $u(x, y, z)$ é a função de Bloch do cristal hospedeiro (devido à

periodicidade da rede); $\Psi_i(z)$ é a função de onda envelope que descreve os efeitos do potencial de confinamento na direção z para um elétron na i -ésima sub-banda. No contexto da aproximação da massa efetiva, a função de onda envelope satisfaz a equação de Schrödinger unidimensional:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \Psi_i(z) = E_i \Psi_i(z) \quad (2.18)$$

onde $V(z)$ é a energia potencial dada por (2.13) e E_i é o autovalor de energia do elétron na i -ésima sub-banda. É importante mencionar que, como requer a Mecânica Quântica, a função envelope obedece à condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_i^*(z) \Psi_i(z) dz = 1 \quad (2.19)$$

Além disso, em cada interface I_{mn} separando as regiões m e n da heteroestrutura, a função envelope e sua derivada devem ser contínuas, ou seja, devem satisfazer as seguintes condições de contorno:^[69]

$$\left. \begin{aligned} \Psi_i(-\infty) &= \Psi_j(\infty) = 0 \\ \Psi_i(z) \Big|_{I_{mn}} &= \Psi_j(z) \Big|_{I_{mn}} \\ \frac{1}{m_e^*(z)} \frac{d\Psi_i(z)}{dz} \Big|_{I_{mn}} &= \frac{1}{m_e^*(z)} \frac{d\Psi_j(z)}{dz} \Big|_{I_{mn}} \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

O potencial eletrostático V_H é obtido por meio da solução da equação de Poisson unidimensional:

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon} \rho(z) \quad (2.21)$$

onde $\rho(z)$ é a densidade de carga total expressa como:

$$\rho(z) = -e[n(z) - N_{si}^+(z) - N_d^+(z) + N_A^-(z) + \sigma_1 \delta(z + L_e) + \sigma_2 \delta(z - L_d)] . \quad (2.22)$$

A densidade eletrônica é determinada como:

$$n(z) = \sum_i n_i |\Psi_i(z)|^2 \quad (2.23)$$

sendo que n_i e Ψ_i designam a ocupação e a autofunção envelope dos elétrons da i -ésima sub-banda, respectivamente. A soma é realizada em todas as sub-bandas ocupadas. Para uma temperatura finita (T), a ocupação da i -ésima sub-banda está relacionada com a energia do quase nível de Fermi dos elétrons do gás bidimensional (E_F) através da relação:^[69]

$$n_i = \frac{m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T} \right] . \quad (2.24)$$

Para $T = 0$ a equação (2.24) transforma-se em:

$$n_i = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) . \quad (2.25)$$

O potencial resultante da equação de Poisson (2.21) deve satisfazer às seguintes condições de contorno:^[69]

$$V(0) = 0 \quad \text{e} \quad V(L_d) = E_F + V_S ; \quad (2.26)$$

$$\left. \begin{aligned} V_i(z) \Big|_{I_{mn}} &= V_j(z) \Big|_{I_{mn}} \\ \kappa_i \frac{dV_i(z)}{dz} \Big|_{I_{mn}} &= \kappa_j \frac{dV_j(z)}{dz} \Big|_{I_{mn}} \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

em cada heterointerface I_{mn} do material, onde κ_γ representa a constante dielétrica no meio γ . V_S é a posição do nível de Fermi na superfície livre da cobertura em relação ao fundo da banda de condução.

A energia de Fermi (E_F) é obtida em cada caso, para T finito ou $T = 0$, respectivamente, da seguinte forma:

$$n_s = \frac{m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^n \ln \left[1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T} \right] \quad (2.28)$$

$$n_s = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} \left(n E_F - \sum_{i=1}^n E_i \right) \quad (2.29)$$

onde as somas são realizadas sobre todas as sub-bandas ocupadas.

Pelo formalismo que acabamos de apresentar, podemos observar que o potencial total depende, através do potencial eletrostático V_H e do potencial de troca e correlação V_{XC} , das autofunções envelope. A presença destes termos no potencial cria uma interdependência entre as equações (2.18) e (2.21). A solução simultânea destas equações torna o cálculo dos autovalores e autofunções um problema iterativo, até que ambas sejam satisfeitas simultaneamente dentro de certa precisão, quando se diz que o cálculo atingiu a autoconsistência.

Para a inicialização dos cálculos são fornecidas, juntamente com os principais parâmetros de entrada, as densidades das impurezas N_{Si} , N_d , N_A , com as quais gera-se um potencial inicial $V^0(z)$. Resolve-se a equação de Schrödinger (2.18) para as condições de contorno (expressões 2.20), obtendo-se os autovalores de energia e as respectivas autofunções. A seguir, utiliza-se os autovalores, autofunções e a densidade de portadores livres n_s e determina-se a energia de Fermi (pela expressão 2.28 ou 2.29), a população de cada estado (pela expressão 2.24 ou 2.25), a densidade eletrônica $n(z)$ (dada pela expressão 2.23), e uma densidade de carga total (dada pela expressão 2.22).

Com esta densidade total, resolve-se a equação de Poisson (2.21). Verifica-se, então, se este potencial satisfaz as condições de contorno dadas por (2.26) e (2.27). Caso isto não ocorra, realizam-se trocas de cargas entre a região ativa e a superfície, obedecendo-se a condição de neutralidade de carga (2.9), até se obter um novo potencial $V(z)$ que satisfaça essas condições de contorno.

Compara-se, então, este potencial $V(z)$ com o potencial de partida $V^0(z)$. Se a diferença entre estes dois potenciais for menor ou igual a um critério previamente

definido, considera-se atingida a convergência no cálculo. Do contrário, realiza-se uma mistura entre estes potenciais, obtendo-se um novo potencial da forma:

$$V_{\text{novo}}^o(z) = (1 - \beta) V^o(z) + \beta V(z) \quad (2.30)$$

onde β é um parâmetro de mistura arbitrário, menor ou igual à unidade. Na maioria dos casos, inicializamos os cálculos com $\beta = 0,3$. O valor de β deve ser alterado (para mais ou para menos, dependendo da situação), se problemas numéricos impedirem o programa de convergir. Este novo potencial será utilizado para realimentar a equação de Schrödinger, e reiniciar todas as etapas descritas, até que ocorra a convergência dos cálculos. Uma vez conseguida a convergência, obtém-se um nível de Fermi alinhado em toda a heteroestrutura e uma densidade de carga total $\rho(z)$ consistentes.

Os resultados convergidos obtidos são: as autofunções de energia, as funções de distribuição eletrônicas, os níveis de energia das sub-bandas, a energia do quase-nível de Fermi dos elétrons e o perfil do potencial na direção de crescimento. Também são extraídos destes cálculos, o número de sub-bandas ocupadas pelo gás de elétrons e suas respectivas populações.

2.4 - Considerações sobre o efeito da tensão na estrutura de bandas do InGaAs crescido sobre GaAs

Os semicondutores compostos binários formados pelos elementos dos grupos III e V (por exemplo, GaAs, InAs, AlAs, etc.) possuem a mesma estrutura cristalina (*zincblend*) mas diferentes parâmetros de rede. Por exemplo, os parâmetros de rede do GaAs (a_{GaAs}) e do InAs (a_{InAs}) são.^[70]

$$a_{\text{GaAs}} = 5,6533 \text{ \AA} \quad \text{e} \quad a_{\text{InAs}} = 6,0584 \text{ \AA} \quad (2.31)$$

Os semicondutores compostos ternários podem ser obtidos a partir dos compostos binários e da adição controlada de um terceiro elemento do grupo III, o qual substituirá proporcionalmente um dos elementos do composto binário. Por exemplo, no composto de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, átomos de In substituem átomos de Ga no GaAs em uma proporção que varia de 0 ($x = 0$, onde temos o GaAs) até 100% ($x = 1$, onde temos o InAs).

O parâmetro de rede do composto ternário de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ pode ser estimado por interpolação linear entre estes dois extremos.^[70]

$$\left. \begin{aligned} a_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}(x) &= a_{\text{GaAs}} + (a_{\text{InAs}} - a_{\text{GaAs}})x \\ a_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}(x) &= 5,6533 + 0,4051x \quad (\text{em \AA}) \end{aligned} \right\} \quad (2.32)$$

Como podemos observar, o parâmetro de rede do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (que aumenta com a concentração x de In) é sempre maior que o do GaAs. Como é bem documentado na literatura,^[71-73] o crescimento de InGaAs sobre GaAs, com ajuste perfeito do parâmetro de rede da camada epitaxial com o do substrato, ocorre através de uma compressão da célula unitária do InGaAs no plano xy (perpendicular à direção de crescimento) e de uma distorção tetragonal ao longo da direção de crescimento z . É interessante mencionar que estas deformações paralelas e perpendiculares alteram a camada epitaxial de forma a manter constante o volume da célula unitária, para a maioria dos materiais. Nestas condições, uma interface coerente é formada e a camada de InGaAs é denominada pseudomórfica (*i.e.*, apresenta-se com um parâmetro de rede diferente do que lhe é próprio).

O trabalho das forças que deformam o material é armazenado na forma de energia elástica na camada de InGaAs. Esta energia aumenta à medida que aumenta o

número de camadas tensionadas depositadas, até que se atinja uma espessura crítica h_c , quando a energia elástica é então liberada deformando a estrutura coerente. Para camadas mais largas que a espessura crítica h_c aparecerão deslocções, a partir das quais a camada de InGaAs apresenta-se com o seu próprio parâmetro de rede. Tais deslocções atuam como centros de recombinação não radiativos, diminuindo a intensidade da luminescência e, conseqüentemente, prejudicando a performance de dispositivos semicondutores.

Define-se, portanto, espessura crítica como sendo a espessura máxima que uma camada pode ter, quando crescida sobre outra com parâmetro de rede diferente, antes que sejam formadas as deslocções para a liberação da energia elástica armazenada devido à tensão.^[71] O valor desta espessura depende do grau de acoplamento entre os materiais, que por sua vez depende da composição da liga, da qualidade e espessura do substrato, e da temperatura de crescimento.^[70,71]

Podemos assumir que toda a energia, devido à deformação, armazena-se na camada de InGaAs da heteroestrutura InGaAs/GaAs, desde que consideremos que a camada de GaAs seja suficientemente espessa e que a espessura da camada de InGaAs seja inferior à espessura crítica. Como a camada de GaAs é muito mais espessa que a camada epitaxial de InGaAs, a tensão média sobre sua superfície tende a ser muito menor que aquela sobre a epicamada. Como a tensão é proporcional à deformação do meio, então a camada de GaAs deve se deformar muito menos que a camada de InGaAs. Assim, considera-se como uma boa aproximação que todo o desacordo entre os parâmetros de rede dos dois meios é acomodado por deformações apenas na camada de InGaAs, ao invés de deformações compartilhadas entre as duas camadas. Se multicamadas epitaxiais de espessuras semelhantes são crescidas sucessivamente, deve-se considerar a possibilidade das deformações ocorrerem nos dois materiais.

A **Figura 2.3** representa esquematicamente camadas de InGaAs e GaAs em diferentes condições: a) materiais isolados; b) camada perfeitamente tensionada, quando a espessura da camada de InGaAs é inferior à espessura crítica; c) uma região contendo deslocções, a partir da qual a camada de InGaAs apresenta-se com seu próprio parâmetro de rede. As situações (b) e (c) descrevem os casos extremos em que a camada de InGaAs apresenta-se tensionada e com parâmetro de rede igual ao do GaAs, ou totalmente relaxada e com o seu próprio parâmetro de rede, respectivamente.

A deformação lateral ($\varepsilon_{//}$) que a célula unitária sofre no plano xy , para o crescimento sobre substratos de GaAs com orientação cristalográfica (001), é definida como:^[71-73]

$$\varepsilon_{//} = \frac{a_{\text{GaAs}} - a_{\text{InGaAs}}}{a_{\text{InGaAs}}} \quad (2.33)$$

Figura 2.3 - Representação das camadas de InGaAs crescidas sobre GaAs: (a) material isolado, relaxado; (b) camada perfeitamente tensionada; (c) camada totalmente relaxada.

Como a camada de InGaAs está tensionada apenas na direção perpendicular ao plano de crescimento (plano xy), não existe tensão sendo aplicada na direção de crescimento (z). Desta forma, a camada epitaxial fica livre para se expandir verticalmente e a deformação nesta direção ($\varepsilon_{\perp}$) é: ^[71-73]

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{-2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{//} \quad (2.34)$$

onde C_{ij} são os coeficientes de elasticidade do meio.

Devido à deformação tetragonal da célula de InGaAs, o parâmetro de rede na direção do crescimento será dado por:^[72]

$$a_{\perp} = a_{\parallel} \left(\frac{1 + \frac{\varepsilon_{\perp}}{2}}{1 - \frac{\varepsilon_{\perp}}{2}} \right) \quad (2.35)$$

ou

$$a_{\perp} = a \left(1 - \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{\parallel} \quad (2.36)$$

onde a é o parâmetro de rede da célula convencional. Quando o material está perfeitamente tensionado $a_{\parallel} = a_{\text{GaAs}}$ (veja **Figura 2.3b**).

A tensão na célula convencional da camada epitaxial dá origem a modificações na estrutura de bandas do InGaAs. Esta tensão pode ser decomposta em duas componentes:

1. Uma componente hidrostática que é responsável pelo aumento do *gap* do InGaAs (ΔE_{Hidr});
2. Uma componente de cisalhamento ou uniaxial que é responsável pela quebra da degenerescência em energia no ponto $\mathbf{K} = 0$ da zona de Brillouin (ponto Γ) das bandas de buracos pesados e buracos leves (ΔE_{Cis}).

Na **Figura 2.4** mostramos uma representação esquemática do efeito destas componentes da pressão em uma célula convencional, assim como as alterações na estrutura de bandas do InGaAs em $\mathbf{K} = 0$.^[70]

As energias ΔE_{Hidr} e ΔE_{Cis} , que são responsáveis pela variação da energia do *gap*, são expressas em termos das constantes elásticas (C_{ij}), e dos potenciais de deformação hidrostático (a) e de deformação biaxial (b) através das relações.^[73]

Figura 2.4 – (a) Ilustração da estrutura de bandas do InGaAs não tensionado. Alterações nesta estrutura devido às componentes de pressão: (b) hidrostática e (c) uniaxial ou de cisalhamento.

$$\Delta E_{Hidr} = (\Delta E_{Hidr}^{BC} + \Delta E_{Hidr}^{BV}) = 2a\epsilon_{//} \left(\frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (2.37)$$

$$\Delta E_{Cis} = b\epsilon_{//} \left(\frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \right) \quad (2.38)$$

As energias do *gap* do material tensionado de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ para a banda de buracos pesados (E_g^{hh}) e para a banda de buracos leves (E_g^{lh}) são calculadas pelas expressões:^[73]

$$E_g^{\text{hh}}(x) = E_g^{\circ}(x) + \Delta E_{\text{Hidr}} - \Delta E_{\text{Cis}} \quad (2.39)$$

$$E_g^{\text{lh}}(x) = E_g^{\circ}(x) + \Delta E_{\text{Hidr}} + \Delta E_{\text{Cis}} \quad (2.40)$$

onde E_g° é o *gap* da camada relaxada de InGaAs. Neste trabalho estamos utilizando a seguinte expressão empírica para esta grandeza:^[74]

$$E_g^{\circ}(x) = 1,5192 - 1,5837x + 0,475x^2 \quad (\text{em eV}) \quad (2.41)$$

As equações 2.39 e 2.40, bem como a representação esquemática da estrutura de bandas na **Figura 2.4**, mostram que a degenerescência das bandas de buracos pesados e leves (no ponto Γ) é removida quando a estrutura cristalina está sob tensão. Esta tensão pode ocasionar uma separação entre as bandas de buracos pesados e leves de até 100 meV, valor este que altera de modo significativo as propriedades ópticas e elétricas do semiconductor sujeito à tensão interfacial.

Para calcular as energias ΔE_{Hidr} e ΔE_{Cis} precisamos dos valores dos parâmetros de rede (a_0), dos potenciais de deformação (a , b) e das constantes elásticas (C_{ij}) do GaAs e do InAs, que estão apresentados na **Tabela 2.1**.

Tabela 2.1 - Valores dos parâmetros de rede (a_0), dos potenciais de deformação (a , b) e das constantes elásticas (C_{ij}) para o GaAs e para o InAs.^[70,75]

Material	a_0 (Å)	a (eV)	b (eV)	$C_{11} \times 10^{11}$ (din/cm ²)	$C_{12} \times 10^{11}$ (din/cm ²)
GaAs	5,6533	-8,68	-1,7	11,88	5,38
InAs	6,0584	-5,9	-1,8	8,33	4,53

Os valores desses parâmetros, em função da concentração de In no composto de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, foram estimados por interpolação linear entre os valores apresentados na **Tabela 2.1**. As expressões obtidas estão apresentadas a seguir:

$$a(x) = -8,68 + 2,78 x \quad (\text{eV}) \quad (2.42)$$

$$b(x) = -1,7 - 0,1 x \quad (\text{eV}) \quad (2.43)$$

$$C_{11}(x) = 11,88 - 3,55 x \quad (10^{11} \text{ din/cm}^2) \quad (2.44)$$

$$C_{12}(x) = 5,38 - 0,85 x \quad (10^{11} \text{ din/cm}^2) \quad (2.45)$$

$$\varepsilon_{//} = \frac{-0,4051 x}{(5,6533 + 0,4051 x)} \quad (2.46)$$

Para quantificarmos o efeito da tensão na estrutura de bandas do $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, apresentamos na **Tabela 2.2** o *gap* do material relaxado (E_g^o), a variação do *gap* devido à componente hidrostática (ΔE_{Hidr}) e devido à componente de cisalhamento (ΔE_{Cis}), o *gap* tensionado para buracos pesados (E_g^{hh}) e para buracos leves (E_g^{lh}), e do *band offset* para a BC (ΔE_C), para alguns valores de x , na temperatura de 2 K.

Tabela 2.2 - Valores para o $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ do *gap* relaxado (E_g^o), da variação do *gap* devido à componente hidrostática (ΔE_{Hidr}) e à componente de cisalhamento (ΔE_{Cis}), do *gap* tensionado para buracos pesados (E_g^{hh}) e para buracos leves (E_g^{lh}), e do *band offset* para a BC (ΔE_C), para alguns valores de x , na temperatura de 2 K.

x	E_g^o (eV)	ΔE_{Hidr} (meV)	ΔE_{Cis} (meV)	E_g^{hh} (eV)	E_g^{lh} (eV)	$\Delta E_C=0,7\Delta E$ (meV)
0,14	1,307	88,58	32,76	1,363	1,428	109,6
0,15	1,292	94,40	35,12	1,352	1,422	117,3
0,16	1,278	100,15	37,49	1,341	1,416	125,0

Os valores do *gap* do InGaAs, mostrados na **Tabela 2.2**, serão utilizados nos cálculos autoconsistentes para definir a altura da barreira do poço de GaAs/InGaAs/GaAs.

2.5 – Descrição da arquitetura das amostras

Neste trabalho analisamos um conjunto de três amostras de poços quânticos de $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}/\text{GaAs}$ dopados na barreira. A arquitetura das amostras tem a sequência descrita a seguir, a qual está resumida na **Tabela 2.3** e representada esquematicamente na **Figura 2.5**:

- substrato semi-isolante de GaAs com orientação cristalográfica (100);
- camada de 10.000 Å de GaAs (*buffer-layer*);
Para evitar contaminantes provenientes do substrato e para melhorar a qualidade da superfície dos substratos comerciais.
- uma super-rede (SR) de AlAs/GaAs;
A super-rede que compõe a estrutura tem 10 períodos e cada um deles é formado por 5 monocamadas de AlAs e 10 monocamadas de GaAs [$10 \times (\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_{10}$]. Esta super-rede também tem por finalidade evitar contaminantes do substrato.
- uma camada de 1.000 Å de GaAs (barreira esquerda do poço quântico);
- uma camada de 150 Å de InGaAs (poço);
- uma camada de GaAs de espessura variável **D** (*spacer layer*);
Analisamos amostras com **D** variando de 20 a 100 Å. Neste trabalho estas amostras serão identificadas da seguinte forma: amostra **D20** indicará a amostra na qual a espessura da camada de espaçamento é 20 Å.
- um plano de átomos dopantes de silício (δ -layer);
A concentração nominal de átomos de silício depositados no plano de dopagem é $N_{\text{Si}} = 4,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$;
- uma camada de 500 Å de GaAs (barreira direita do poço quântico);
- e, finalmente, uma camada de 100 Å de GaAs (cobertura) uniformemente dopada com silício.
A concentração nominal de átomos de silício depositados na camada uniformemente dopada é $N_d = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Esta camada tem a finalidade de evitar a depleção de portadores da região ativa.

Tabela 2.3 - Resumo das características principais das estruturas de δ -MDQWs analisadas em nosso trabalho.

Camadas	Espessura (Å)	Denominação ou detalhes das camadas	Temperatura Crescimento (°C)
GaAs	Substrato semi-isolante (100)		
GaAs	10.000	<i>Buffer</i>	600
$10x(\text{AlAs})_5(\text{GaAs})_{10}$		Super-rede (SR)	600
GaAs	1.000	Barreira esquerda	520
InGaAs	150	$x = 0,15$	520
GaAs	D (20,40,100)	<i>Spacer layer</i>	520
δ -silício		$N_{\text{Si}} = 4,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$	600
GaAs	500	Barreira direita	600
GaAs:Si	100	$N_{\text{d}} = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	600

Figura 2.5 – Representação esquemática da arquitetura das amostras analisadas neste trabalho. Nesta figura não representamos a super-rede depositada depois da *buffer layer*.

2.6 – Descrição dos parâmetros utilizados nos cálculos autoconsistentes

Simular, computacionalmente, a estrutura eletrônica de δ -MDQWs requer o conhecimento prévio de um grande conjunto de grandezas experimentais, tais como: concentração de In; *band offset*; concentração de dopantes na camada δ e na cobertura; concentração de impurezas residuais; espessura da camada de espaçamento; larguras das camadas semicondutoras que compõem a heteroestrutura (poços, barreiras, cobertura, etc.); massas efetivas dos portadores nas diversas camadas. Nesta seção fornecemos os valores dos parâmetros utilizados nos cálculos autoconsistentes que serão apresentados neste trabalho.

Os parâmetros de entrada que utilizamos no programa computacional são informações sobre a arquitetura da heteroestrutura tais como: largura do poço ($L_w = 150 \text{ \AA}$), das barreiras ($L_b^{\text{esquerda}} = 1.000 \text{ \AA}$ e $L_b^{\text{direita}} = 500 \text{ \AA}$) e da cobertura ($L_{\text{cobertura}} = 100 \text{ \AA}$); concentração de In no composto ternário ($x = 0,15$); *gap* do material tensionado (para $x = 0,15$, $E_g^{\text{hh}} = 1,352 \text{ eV}$); altura da barreira para os elétrons ($\Delta E_C = 117,3 \text{ meV}$, que corresponde ao valor de *band offset* de 0,7 para a BC); densidade superficial de doadores de silício (N_{Si}) na camada δ , distribuídos em uma região de dispersão Δz ; concentração de silício na cobertura (N_d); energia de ligação ($E_A = 26 \text{ meV}$) e concentração (N_A) de aceitadores residuais; espessura da camada de espaçamento (D); e constante dielétrica do GaAs ($k_{\text{GaAs}} = 13,16$) e do InGaAs ($k_{\text{InGaAs}} = 13,44$). Também utilizamos $m_{e(\text{InGaAs})}^* = 0,060 m_o$ e $m_{e(\text{GaAs})}^* = 0,067 m_o$ para as massas efetivas dos elétrons no poço de InGaAs e nas barreiras de GaAs, respectivamente; para os buracos pesados utilizamos $m_{\text{hh}(\text{InGaAs})}^* = 0,35 m_o$ e $m_{\text{hh}(\text{GaAs})}^* = 0,34 m_o$.^[54] Além disso, ainda utilizamos como parâmetro a posição do nível de Fermi na superfície livre da cobertura (V_s).

Observe que, na estrutura da **Figura 2.5**, não incluímos a região da super-rede, a qual não foi considerada em nossos cálculos, apesar de fazer parte da estrutura de nossas amostras. A influência da tensão na estrutura foi considerada ao utilizarmos o *gap* do material tensionado. No programa foi adotado que o plano da dopagem planar localiza-se em $z = 0$ e consideramos que a barreira direita e a cobertura encontram-se na região $z \geq 0$ (vide **Figura 2.5**).

Os resultados fornecidos pelo programa são os perfis de potencial da BC e da BV, a energia de Fermi, as energias dos níveis de confinamento dos elétrons e buracos e as suas ocupações, assim como as funções de onda e as densidades de probabilidade para os elétrons em cada um destes níveis.

Para compararmos os resultados dos cálculos teóricos com os de nossas medidas de transporte é conveniente lembrar a dificuldade encontrada na determinação de diversos parâmetros experimentais, como por exemplo:

- Encontramos, para a massa efetiva do buraco pesado em GaAs, valores que vão desde 0,34 até 0,62 m_0 . Já para o InGaAs achamos tanto valores superiores quanto valores inferiores ao deste portador no GaAs. As massas efetivas dos portadores no composto ternário foram obtidas através da interpolação linear entre os valores das massas efetivas dos portadores nos compostos binários de GaAs e InAs. Utilizamos, para as massas dos elétrons, buracos pesados e leves nos compostos binários, valores que aparecem com razoável frequência na literatura.^[54] As expressões obtidas são:

$$m_c^*(x) = 0,067 - 0,044 x \quad (2.47)$$

$$m_{hh}^*(x) = 0,34 + 0,07 x \quad (2.48)$$

$$m_{lh}^*(x) = 0,08 - 0,053 x \quad (2.49)$$

- O *band offset* é requerido para cálculos da estrutura eletrônica, porém existe muita incerteza na literatura sobre o seu valor em poços quânticos de InGaAs. Em nossos cálculos utilizamos a proporção 0,7 para a BC e 0,3 para a BV, que é bastante utilizada na literatura, tanto em trabalhos experimentais quanto teóricos.^[55,61,62,76]
- O conhecimento, com boa precisão, da concentração de In é quase sempre requerido para comparações entre cálculos teóricos e dados experimentais. Como podemos perceber pela **Tabela 2.2**, uma variação de 0,01 em x (aproximadamente 7% para o composto de $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$) acarreta uma variação de ≈ 10 meV em E_g^{hh} . Este valor (10 meV), que é da mesma ordem de grandeza que as energias de confinamento dos portadores nos poços quânticos, pode induzir a falsas correlações entre resultados teóricos e experimentais. O procedimento usualmente utilizado é avaliar esta concentração através de comparações entre as energias das transições ópticas (observadas nos espectros de PL) de uma amostra (referência) de poço quântico não dopado com os autovalores de energia da solução exata da equação de Schrödinger (que simula a amostra referência). A concentração assim determinada, para esta amostra referência, é então adotada como sendo igual à de todas as outras amostras, crescidas em condições nominais idênticas.
- Não medimos a concentração de impurezas residuais em nossas amostras. Sabe-se, entretanto, que GaAs crescido por MBE apresenta uma concentração residual de carbono da ordem de 10^{14} cm^{-3} .^[55,64,76] Desta

forma, realizamos um estudo sobre a influência desta grandeza na estrutura eletrônica dos sistemas que estamos analisando.

- A imposição de que o nível de Fermi esteja alinhado em toda a estrutura, no equilíbrio térmico, força a transferência de uma quantidade de portadores do gás de elétrons da região ativa para regiões adjacentes. No entanto, a posição do nível de Fermi nas superfícies livres de semicondutores (V_s) é ainda assunto de debate e controvérsia na literatura.^[54,55,77] Desta forma, fizemos um estudo sobre a influência deste parâmetro na estrutura eletrônica dos sistemas aqui analisados. Variamos a posição deste nível na superfície livre da cobertura desde $V_s = 750$ meV (meio do *gap*) até 180 meV. Os resultados destes estudos serão apresentados no **Capítulo 4**.
- O programa também permite avaliarmos a influência da difusão dos dopantes para fora do plano de dopagem na estrutura eletrônica dos δ -MDQWs.^[78] Como mostrada no **item 2.3**, a função que descreve a distribuição espacial dos dopantes em nossos cálculos é gaussiana. Desta forma, variando a largura desta distribuição, podemos simular os efeitos da difusão. Realizamos algumas simulações para avaliar a influência deste parâmetro na descrição da estrutura eletrônica dos sistemas analisados. Nas demais situações, fixaremos $\Delta z = 20$ Å uma vez que pelas condições de crescimento acreditamos que o perfil de dopagem seja planar e não volumétrico (vide **expressão 2.2**).
- Apesar de serem fixas as concentrações nominais de dopantes em nossas amostras ($N_{Si} = 4,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d = 1,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), em nossos cálculos variamos a concentração dos dopantes no plano da dopagem planar para obter informações sobre o efeito da fotocondutividade persistente nos sistemas analisados neste trabalho.
- Ainda variamos a constante dielétrica do InGaAs em torno do valor ($k_{\text{InGaAs}} = 13,44$) que utilizamos como referência.

Por último, apresentamos os resultados para diferentes espessuras da camada de espaçamento ($D = 20, 40$ e 100 Å). Estes resultados permitir-nos-ão comparar os dados referentes às diferentes amostras do conjunto analisado neste trabalho.

3 | Descrição das Técnicas Experimentais

3.1 – Introdução

Apesar de δ -MDQWs constituírem sistemas extremamente interessantes para a Física Básica e Aplicada, a quantidade de informações existentes sobre estas estruturas é restrita e ainda restam muitas questões em aberto. Por exemplo, existe muita controvérsia sobre as transições que são observadas nos espectros de fotoluminescência^[54-56,76,79] e, também, sobre a origem do fenômeno da fotocondutividade que tem sido observado em medidas de Shubnikov-de Haas ou efeito Hall.^[80,81] Este fenômeno manifestou-se de formas variadas e diferentes modelos foram propostos para explicá-los. O efeito da fotocondutividade foi observado, também, em camadas semicondutoras de GaAs e InGaAs dopadas com um *único plano* de átomos de silício.^[82-84] É claro que se o fenômeno da fotocondutividade em camadas semicondutoras contendo um único plano de átomos dopantes é assunto de interesse e controvérsia, este efeito é ainda mais complexo e intrigante nas estruturas de δ -MDQWs. Neste trabalho, onde também observamos o efeito de fotocondutividade, realizamos medidas de efeito Hall e de Shubnikov-de Haas, para obter informações sobre as concentrações e as mobilidades dos portadores em nossas amostras. As medidas de transporte foram realizadas tanto na ausência como na presença de iluminação. Neste capítulo apresentaremos, de forma breve, os princípios básicos das medidas de transporte utilizadas na investigação de nossas amostras.

3.2 – O efeito Shubnikov-de Haas (SdH) e a ocupação das sub-bandas eletrônicas

As mudanças na densidade de estados de um sistema eletrônico na presença de campos magnéticos têm algumas manifestações muito importantes.^[85] Uma destas importantes manifestações é o efeito Shubnikov-de Haas que consiste no comportamento oscilatório da resistividade (condutividade) de um material na presença de campos magnéticos. Este efeito foi observado em 1920 por L. Shubnikov e W. de Haas e tem sido amplamente utilizado para a determinação da massa efetiva e da mobilidade de elétrons e, também, para a determinação da população de sub-bandas em heteroestruturas semicondutoras.

Para que as modificações na densidade de estados influenciem no comportamento da condutividade de um sistema físico, a condição $\hbar\omega_c > k_B T$ ($\omega_c = eB/m_e^*$ - frequência ciclotrônica) deve ser satisfeita. Esta condição em geral é satisfeita para altos campos, quase no limite dos valores obtidos nas bobinas supercondutoras encontradas na maioria dos laboratórios. Por exemplo, para um sistema eletrônico na temperatura $T = 12$ K, com elétrons de massa efetiva $m_e^* = 0,1m_0$, a condição $\hbar\omega_c > k_B T$ será satisfeita para campos maiores do que 10 T, ou seja, as oscilações da resistividade de um material serão observadas apenas em campos magnéticos altos.

Para entendermos melhor o efeito SdH, consideremos, por exemplo, a estrutura semicondutora que estamos analisando em nosso trabalho, que contém um gás de elétrons bidimensional confinado. Devido à geometria da amostra, o movimento destes elétrons é quantizado na direção de crescimento z . Quando um campo magnético (B) é aplicado paralelo a esta direção, surgirá uma nova quantização do movimento dos elétrons devido à presença deste campo: estes portadores passarão a movimentar-se em órbitas ciclotrônicas paralelas ao plano da dopagem planar (**Figura 3.1a**). A densidade de estados em forma de degraus, comum aos sistemas bidimensionais, passa a ser descrita por um conjunto de níveis de Landau, igualmente espaçados entre si, com espaçamento igual a $\hbar\omega_c$ e com degenerescência igual a $2eB/h$, representados na **Figura 3.1b**. Portanto, a quantização total do movimento dos elétrons será dada pela composição destas duas quantizações. Com a variação do campo magnético, tanto a degenerescência dos níveis de Landau quanto o espaçamento entre eles variam, conforme representado na **Figura 3.1b**. Idealmente, um espectro de PL apresentaria estes níveis na forma de deltas de Dirac, porém eles são, em geral, alargados pela presença de imperfeições e impurezas intrínsecas no material.

Figura 3.1 - Representação (a) das órbitas ciclotrônicas dos elétrons, paralelas ao plano da dopagem planar e (b) da variação da densidade de estados em função do aumento do campo magnético. Figura extraída da referência [86].

Uma vez que a degenerescência dos níveis de Landau é função de B , ocorrerá uma desocupação das sub-bandas de energias mais altas com o aumento do campo, redistribuindo os elétrons nas sub-bandas de energias mais baixas. Com o aumento da degenerescência destes níveis, cada vez menos níveis de Landau serão necessários para acomodar os elétrons do sistema, ou seja, diminui o número de estados ocupados abaixo da energia de Fermi. Este processo de desocupação dos níveis de Landau está representado esquematicamente na **Figura 3.2**.

A desocupação dos níveis de Landau, com o aumento do campo, ocasiona o cruzamento deles (níveis de Landau) com o nível de Fermi. O efeito deste cruzamento nas propriedades elétricas do sistema é fazer com que a sua resistividade apresente um comportamento oscilatório, devido à passagem dos vários níveis de Landau pelo nível de Fermi. Os estados de energia entre dois níveis de Landau consecutivos são estados localizados e não contribuem para a condução. Apenas os portadores em estados estendidos (níveis de Landau) nas proximidades do nível de Fermi é que participam do processo de condução. Desta forma, cada vez que os estados estendidos e localizados coincidem com o nível de Fermi, a resistividade apresenta máximos e mínimos, respectivamente.^[87] Um exemplo deste comportamento oscilatório em um experimento de SdH pode ser observado na **Figura 3.3**, onde mostramos as oscilações da magnetoresistividade em função do campo magnético de uma das amostras analisadas neste trabalho (amostra **D100**).

Figura 3.2 - Representação da desocupação dos níveis de Landau com o aumento do campo magnético. Figura extraída da referência [86].

A resistividade em função do campo pode ser dividida em duas partes: uma oscilatória (ρ_{osc}) e outra não oscilatória (ρ_{n-osc}), ou:

$$\rho_{xx} = \rho_{osc} + \rho_{n-osc} \quad (3.1)$$

É a parte oscilatória da resistividade que nos permite obter informações sobre a massa efetiva e a concentração dos portadores. A expressão típica para o comportamento oscilatório da resistividade de um sistema com uma única sub-banda ocupada é dada pela seguinte expressão:^[85]

$$\rho_{osc} = C \frac{2\pi^2 m^* k_B T / \hbar e B}{\sinh(2\pi^2 m^* k_B T / \hbar e B)} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau}\right) \cos\left(\frac{2\pi^2 \hbar n_i}{eB}\right) \quad (3.2)$$

onde τ é o tempo de espalhamento dos portadores com massa efetiva m^* , e as demais grandezas têm o significado usual. Podemos interpretar esta equação como uma amplitude (que cresce com o aumento do campo magnético e diminui com o aumento da temperatura) multiplicada por um termo oscilatório, cuja frequência de oscilação é determinada pela concentração dos portadores (n_i) e pelo campo. A equação (3.2) ainda nos mostra que a resistividade é periódica se for expressa em função de $(1/B)$.

Figura 3.3 – Oscilações da magnetoresistividade (ρ_{osc}) com o campo magnético, em um experimento de SdH, da amostra **D100**.

Desta forma, a informação sobre a concentração da i -ésima sub-banda (n_i) ocupada pode ser obtida se fizermos a transformada de Fourier (TF) em função do inverso do campo. A frequência (f) do pico na curva da transformada de Fourier está relacionada com a ocupação da sub-banda através da relação:

$$f_i \left(\frac{1}{B} \right) = \frac{h n_i}{2e} \quad (3.3)$$

No caso em que o gás bidimensional está distribuído em mais de uma sub-banda, observam-se tantas frequências quantas forem as sub-bandas ocupadas, devido às suas diferentes ocupações. Assim, cada frequência observada no gráfico de $\rho_{xx} \times (1/B)$ está associada à ocupação de uma dada sub-banda. A soma destas ocupações, fornece a densidade total do gás de elétrons ($n_{SdH} = \sum n_i$).

Para a determinação destas frequências, realiza-se o experimento denominado Shubnikov-de Haas que consiste na medida da variação da magnetoresistência R_{xx} em função do campo magnético. Conhecendo-se R_{xx} , determina-se ρ_{xx} .^[88,89] Com o gráfico de $\rho_{xx} \times (1/B)$, calcula-se a transformada de Fourier desta função utilizando-se,

por exemplo, o algoritmo Fast Fourier Transform (FFT), que determina as frequências das oscilações observadas na magnetoresistência. A partir destas frequências determinam-se as ocupações das sub-bandas, utilizando-se a **expressão (3.3)**. Substituindo os valores das constantes nesta expressão obtemos a relação utilizada para determinar a concentração dos portadores em um experimento de SdH:

$$n_i = 4,836 \times 10^{10} f_i \quad \text{cm}^{-2} \quad (3.4)$$

sendo que f_i tem a unidade de tesla.

Para ilustrar como a FFT fornece as frequências, considere a transformada de Fourier (**Figura 3.4a**) da função $G(x) = \cos[2\pi (3x)] + \sin[2\pi (7x)] - \cos[2\pi (11x)]$, representada na **Figura 3.4b**. Como podemos observar, esta transformada retorna as frequências (3, 7 e 11), que estão misturadas no gráfico de $G(x)$.

Ainda, para ilustrarmos o procedimento utilizado para o cálculo da concentração dos portadores, considere o espectro da resistividade de uma de nossas amostras (**Figura 3.5a**), obtido em uma medida de Shubnikov-de Haas. Representando este espectro em função do inverso do campo magnético (**Figura 3.5b**) e calculando a FFT (**Figura 3.5c**) determinamos a frequência $f = 28,1$ teslas. Utilizando a **expressão 3.4**, obtemos que a população desta sub-banda é $n = 1,36 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

3.3 - O efeito Shubnikov-de Haas e a mobilidade quântica das sub-bandas eletrônicas

Além das ocupações das sub-bandas, podemos determinar, através das FFTs dos traços da magnetoresistência, as mobilidades quânticas dos portadores nas diferentes sub-bandas. Em sistemas bidimensionais, a **expressão (3.1)** pode ser aproximada para:

$$\rho_{xx} \approx \rho_{n\text{-osc}} + K e^{(-\alpha/B)} \cos(\omega/B + \theta) \quad (3.5)$$

onde K é uma constante multiplicativa, $\omega = (2\pi^2 \hbar n / e)$, e θ é uma fase arbitrária. O parâmetro α está relacionado com a mobilidade quântica μ_q através da relação: $\alpha = (\pi m_e^* / e \tau) = \pi / \mu_q$, onde τ é o tempo de espalhamento do portador com massa efetiva m_e^* . O termo $\rho_{n\text{-osc}}$ corresponde à parte não oscilatória da magnetoresistividade.

Figura 3.4 – (a) Transformada Rápida de Fourier (FFT) **(b)** da função $G(x) = \cos[2\pi(3x)] + \sin[2\pi(7x)] - \cos[2\pi(11x)]$.

Figura 3.5 – (a) Espectro obtido em uma medida de Shubnikov-de Haas; **(b)** Este espectro em função de $(1/B)$; **(c)** Frequência obtida através da FFT.

Para reduzir a componente não oscilatória (por não apresentar interesse na determinação da mobilidade dos portadores) e enaltecer as oscilações da magnetoresistividade, a expressão anterior pode ser derivada n vezes em função de $1/B$. Desta forma, para $T \cong 0$ K, a n -ésima derivada da magnetoresistividade é dada por:

$$\frac{d^n}{d(1/B)^n}(\rho_{xx}) \approx KC_n e^{(-\alpha/B)} \cos\left(\omega \frac{1}{B} + n\phi + \theta\right) \quad (3.6)$$

onde

$$C_n = (\alpha^2 + \omega^2)^{n/2} \quad \text{e} \quad \tan\phi = \omega/\alpha \quad (3.7)$$

Como podemos observar, derivações sucessivas da magnetoresistividade não anulam a parte oscilatória e mudam apenas a amplitude e a fase das oscilações. A frequência e o decaimento da amplitude das oscilações permanecem inalterados, de forma que o espectro de frequências obtido através da FFT da função apresentada na **expressão (3.6)** não se altera em relação às posições dos picos. Como vimos anteriormente, são as posições destes picos da FFT das oscilações da magnetoresistividade que nos fornecem as concentrações dos portadores nas diferentes sub-bandas.

Depois de eliminarmos a parte não oscilatória da magnetoresistividade (através das derivadas sucessivas), podemos ainda utilizar o recurso de uma função janela para maximizarmos a separação dos picos obtidos (no caso de sistemas com múltiplas sub-bandas ocupadas) no espectro de frequências da FFT. Isto se faz necessário quando os picos superpõem-se. Uma função particularmente utilizada para este fim é a janela Hanning, definida como:^[90]

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < x_1 \\ \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(x - x_1)}{x_2 - x_1}\right) \right] & x_1 < x < x_2 \\ 0 & x > x_2 \end{cases} \quad (3.8)$$

onde x_1 é o limite inferior e x_2 é o limite superior da janela sendo $x = 1/B$. Esta função é nula fora do intervalo $[x_1, x_2]$ e possui amplitude máxima e igual a um para $x = \frac{x_1 + x_2}{2}$.

Multiplicando a expressão resultante das derivadas sucessivas das oscilações da magnetoresistência (**expressão 3.6**) pela função janela (**expressão 3.8**), e lembrando que esta função é nula fora do intervalo $[x_1, x_2]$, a FFT deste produto será:

$$F_H(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} K C_n \int_{x_1}^{x_2} e^{-\alpha x} \cos(\omega x + n\phi + \theta) \left\{ \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(x - x_1)}{x_2 - x_1}\right) \right] \right\} e^{-ikx} dx \quad (3.9)$$

Escolhendo o intervalo de integração tal que $e^{-\alpha x_2} \approx 0$, considerando $k > 0$ (onde $k = \pm\omega$), e se $\omega \gg 0$, um termo pode ser desprezado (por ser muito menor que o outro) e a expressão torna-se:

$$|F_H(k)| = \frac{K\lambda^2 \left(\sqrt{\alpha^2 + \omega^2} \right)^n}{4\sqrt{2\pi}} e^{-\alpha x_1} \left\{ \frac{1}{\left[\alpha^2 + (k - \omega)^2 \right]^3} \right\}^{1/2} \quad (3.10)$$

onde

$$\lambda = \frac{2\pi}{(x_2 - x_1)} \quad (3.11)$$

A função $F_H(k)$ tem um máximo quando $k = \omega$. Fazendo esta substituição na **expressão (3.10)** encontramos a amplitude máxima $|F_{H(\text{máxima})}| = |F_H(k = \omega)|$, e verificamos que o logaritmo da amplitude máxima é uma função que varia linearmente com o parâmetro x_1 :

$$\ln(|F_{H(\text{máxima})}|) = -\alpha x_1 + \ln \left[\frac{K\lambda^2 \left(\sqrt{\alpha^2 + \omega^2} \right)^n}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\alpha^3} \right] \quad (3.12)$$

Como o único parâmetro que afeta a amplitude máxima da FFT é x_1 , o parâmetro α pode ser obtido através do coeficiente angular da reta obtida do ajuste linear do logaritmo dessas amplitudes máximas em função do limite inferior (x_1) da janela Hanning. Determinando o parâmetro α , a mobilidade quântica é encontrada através da seguinte relação:

$$\mu_q = \frac{\pi}{\alpha} \quad (3.13)$$

Na **Figura 3.6** apresentamos as diferentes etapas do procedimento utilizado na obtenção da mobilidade quântica:

- No item **(a)** desta figura mostramos as oscilações de SdH de uma das amostras analisadas neste trabalho.
- Em **(b)** mostramos esta mesma curva em função do inverso do campo magnético ($1/B$).
- Para reduzir a componente não oscilatória da resistividade (evidenciando as oscilações), calculamos a segunda derivada da curva apresentada em **(b)**, a qual está mostrada no item **(c)**.
- Multiplicamos a segunda derivada pela janela Hanning (**equação 3.8**) e depois calculamos a FFT do produto destas funções. O resultado deste procedimento está mostrado no item **(d)**. As diferentes curvas foram obtidas utilizando-se diferentes intervalos para as janelas.
- Os logaritmos dos máximos dos picos das FFTs mostradas em **(d)** foram plotados em função do limite inferior da janela Hanning (item **(e)**). A inclinação da reta (α) assim obtida permite-nos determinar a mobilidade quântica através da relação **(3.13)**.

O procedimento que acabamos de descrever pode ser utilizado apenas se o tempo de relaxação for maior do que o período ciclotrônico, isto é:

$$\omega_c \tau > 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{eB}{m_c^*} \tau > 1 \quad \Rightarrow \quad B > \frac{m_c^*}{e\tau} = \frac{\alpha}{\pi} = B_{\text{mínimo}} \quad (3.14)$$

Para os resultados apresentados na **Figura 3.6**, obtivemos:

$$B_{\text{mínimo}} = \frac{\alpha}{\pi} = \frac{15,576}{\pi} T \approx 5T \quad (3.15)$$

Figura 3.6 – (a) Traço das oscilações de SdH de uma das amostras analisadas neste trabalho. (b) A mesma curva plotada em função de $1/B$. (c) Segunda derivada da curva apresentada em (b). (d) Transformadas de Fourier da função resultante do produto da segunda derivada pela janela Hanning. As diferentes curvas estão relacionadas com as diferentes janelas ($[x_1, x_2]$) utilizadas. (e) Ajuste linear dos logaritmos das amplitudes máximas das FFTs apresentadas em (d), em função do limite inferior (x_1) da janela Hanning.

Utilizamos o procedimento apresentado nesta seção para determinar as mobilidades quânticas das sub-bandas eletrônicas do 2DEG confinado nas heteroestruturas analisadas neste trabalho.

3.4 – O efeito Hall

A ilustração de uma experiência de efeito Hall é mostrada esquematicamente na **Figura 3.7**. Nesta figura temos um sólido percorrido por uma corrente elétrica na direção y ($\vec{I} = I \vec{j}$), na presença de um campo magnético na direção z ($\vec{B} = B \vec{k}$). Considere que este sólido tem um único tipo de portador (elétrons).

Devido à presença do campo elétrico aplicado (na mesma direção da corrente, $\vec{E} = E \vec{j}$), os elétrons terão uma velocidade de arraste $\vec{v}_d$ em sentido contrário ao campo elétrico aplicado. Devido à presença do campo magnético, estes elétrons também ficarão sujeitos à ação da força magnética $\vec{F} = e[\vec{v}_d \times \vec{B}]$. Por causa do movimento induzido pela força magnética, haverá um acúmulo de elétrons em um lado do sólido enquanto que no outro lado existirá um déficit de elétrons. Desta forma, aparecerá um campo elétrico no sólido, induzido pelo movimento dos portadores (movimento paralelo ao eixo x). Este campo elétrico ($\vec{E}_{\text{Hall}}$) é denominado campo Hall e o fenômeno de seu aparecimento é denominado efeito Hall.

O sentido deste campo é determinado pelo sinal do portador de carga majoritário. No esquema apresentado na **Figura 3.7**, $\vec{E}_{\text{Hall}}$ terá o mesmo sentido do eixo x se os portadores forem os elétrons; terá sentido contrário ao do eixo x se os portadores forem os buracos.

O movimento de cargas na direção paralela ao eixo x não ocorre indefinidamente. Quando a intensidade da força elétrica ($\vec{F}_{\text{elétrica}} = e\vec{E}_{\text{Hall}}$) iguala-se à intensidade da força magnética, os portadores passam a deslocar-se como se estivessem sujeitos apenas à ação do campo elétrico aplicado. Suas trajetórias estarão alinhadas com o eixo y e a corrente será paralela ao campo elétrico aplicado. Neste regime estacionário, teremos uma diferença de potencial ao longo da direção x . Esta diferença de potencial, denominada V_{Hall} , é dada por:

$$V_{\text{Hall}} = b E_{\text{Hall}} \quad (3.16)$$

Figura 3.7 - Representação esquemática do efeito Hall.

onde b é a dimensão do sólido ao longo do eixo x . Em um experimento de efeito Hall, fazemos fluir a corrente I , mantida constante por uma fonte de corrente, e medimos V_{Hall} , com a amostra colocada no campo magnético perpendicular ao plano da amostra.

Define-se resistência de Hall (R_{Hall}) pela relação empírica:

$$R_{\text{Hall}} = R_{xy} = \frac{E_{\text{Hall}}}{JB} \quad (3.17)$$

sendo J a densidade de corrente (definida como $J = I/ab$, sendo a e b as dimensões do sólido ao longo dos eixos z e x , respectivamente).

Para um gás de elétrons livres temos:^[91]

$$R_{\text{Hall}} = \frac{1}{ne} \quad (\text{SI}) \quad (3.18)$$

onde n é dado em m^{-3} .

Portanto, R_{Hall} permite-nos obter a concentração dos portadores no sólido. Nós definimos a constante Hall em função de E_{Hall} , sendo que, em um experimento de efeito Hall, o que de fato medimos é a diferença de potencial V_{Hall} . Como $V_{\text{Hall}} = b E_{\text{Hall}}$, podemos reescrever a equação (3.17) como:

$$R_{\text{Hall}} = \frac{a V_{\text{Hall}}}{IB} \quad (3.19)$$

Desta forma, a concentração bidimensional de portadores ($n_{\text{Hall}} = a.n$), obtida através de uma experiência de efeito Hall, será dada por:

$$n_{\text{Hall}} = \frac{B}{e} \frac{I}{V_{\text{Hall}}} \quad (\text{S.I.}) \quad (3.20)$$

ou

$$n_{\text{Hall}} [\text{cm}^{-2}] = 6,25 \times 10^{14} \frac{B[\text{T}]}{V_{\text{Hall}}[\text{V}]} \frac{I[\text{A}]}{V_{\text{Hall}}[\text{V}]} \quad (3.21)$$

que é a expressão utilizada em um experimento de Hall para se determinar a densidade dos portadores, a partir da medida de V_{Hall} , com o campo magnético B e a corrente elétrica I mantidos fixos.

Podemos determinar também a mobilidade Hall (μ_{Hall}) definida por:

$$\mu_{\text{Hall}} = R_{\text{Hall}} \sigma_o = \frac{R_{\text{Hall}}}{\rho_o} = \frac{1}{e \rho_o n_{\text{Hall}}} \quad (3.22)$$

onde σ_o (ρ_o) é a condutividade (resistividade) da amostra em campo nulo.

A concentração Hall fornece a concentração total de portadores na amostra apenas quando existe uma única sub-banda ocupada. Quando mais de uma sub-banda está ocupada, a concentração e a mobilidade Hall dependerão da concentração e da mobilidade de cada sub-banda.^[91-93]

$$n_{\text{Hall}} = \frac{\left(\sum_i n_i \mu_{ti} \right)^2}{\sum_i n_i \mu_{ti}^2} \quad (3.23)$$

$$\mu_{\text{Hall}} = \frac{\sum_i n_i \mu_{ti}^2}{\sum_i n_i \mu_{ti}} \quad (3.24)$$

onde a soma é realizada sobre todas as sub-bandas, e n_i e μ_{ti} designam a densidade e a mobilidade de transporte dos portadores na i -ésima sub-banda, respectivamente. Observe que a concentração Hall coincide com a concentração dos portadores livres ($n_{\text{Hall}} = \sum_i n_i = n_{\text{sdH}}$) apenas quando as mobilidades dos portadores em todas as sub-bandas são idênticas (se, $\mu_{t0} = \mu_{t1} = \mu_{t2} = \dots = \mu_{ti}$). Na temperatura ambiente, quando o espalhamento por fônons afeta a mobilidade dos portadores nas diversas sub-bandas de maneira similar, a densidade Hall é, em boa aproximação, a verdadeira densidade dos portadores na amostra. Se as mobilidades das sub-bandas são diferentes, a densidade Hall sempre subestima a concentração dos portadores livres, isto é, $n_{\text{Hall}} \leq \sum_i n_i$. Os sistemas que estamos estudando têm, em geral, várias sub-bandas ocupadas e o modelo de múltiplas sub-bandas (descrito pelas equações 3.23 e 3.24) deve ser utilizado quando se quer analisar dados provenientes das medidas de efeito Hall.

Numa configuração de van der Pauw simétrica, com 4 contatos nos vértices de um quadrado imaginário na periferia da amostra (como foram usados em nossas amostras, conforme veremos na seção 4.2), a relação entre a magnetoresistividade (ρ_{xx}) e a magnetoresistência (R_{xx}) é dada por:^[88,89]

$$\rho_{xx} = \frac{\pi}{\ell n 2} R_{xx} \quad (3.25)$$

Portanto, a mobilidade Hall (μ_{Hall}) será dada por:

$$\mu_{\text{Hall}} = \frac{\ell n 2}{\pi} \frac{1}{e R_{xx}^{(B=0)} n_{\text{Hall}}} \quad (3.26)$$

Substituindo os valores, teremos:

$$\mu_{\text{Hall}} [\text{cm}^2/\text{V.s}] = 1,379 \times 10^{18} \frac{1}{R_{xx}^{(B=0)} [\Omega] n_{\text{Hall}} [\text{cm}^{-2}]} \quad (3.27)$$

4 Resultados das Medidas de Transporte em Poços de GaAs/InGaAs/GaAs com Dopagem Planar do Tipo n na Barreira

4.1 – Introdução

As propriedades de transporte de estruturas semicondutoras com dopagem planar têm sido intensivamente investigadas devido a sua importância para a tecnologia de dispositivos optoeletrônicos e eletrônicos.^[94] Em particular, um fenômeno que tem despertado o interesse dos pesquisadores relaciona-se com as modificações da resistividade destes sistemas quando sujeitos à ação de radiação eletromagnética, ou seja, com o efeito da fotocondutividade. Em muitos semicondutores compostos, tais como GaAlAs,^[95] GaAsP,^[96] CdZnTe,^[97] e em heteroestruturas semicondutoras,^[80-84,98-100] as modificações da resistividade dos sistemas persistem durante horas, ou dias, mesmo depois da remoção da excitação óptica. Este fenômeno, denominado efeito da fotocondutividade persistente, manifesta-se de formas variadas

(alterações na mobilidade e/ou variações na concentração de portadores confinados) e diferentes modelos têm sido propostos para explicá-los.

O efeito da fotocondutividade foi observado, por exemplo, em camadas semicondutoras de GaAs e InGaAs dopadas com um único plano de átomos de silício.^[82-84] As fortes alterações persistentes (um aumento de aproximadamente 10^{12} elétrons/cm² na concentração do 2DEG) observadas nas camadas de InGaAs foram atribuídas à presença de impurezas (centros DX^[101,102]), distribuídas em todo o volume do material hospedeiro.^[82] Em algumas amostras de GaAs com dopagem planar de silício, o efeito da fotocondutividade (que se manifestou como um aumento pouco significativo da concentração do 2DEG) foi atribuído à formação de aglomerados de silício nos planos dos átomos dopantes.^[83] Em um outro trabalho, medidas de SdH em amostras de GaAs com dopagem planar de silício, submetidas à pressão hidrostática, mostraram um decréscimo (de aproximadamente 8%) na concentração do 2DEG confinado no poço- δ , quando a pressão foi aumentada de 8 a 12 kbar.^[84] Esta manifestação do efeito da fotocondutividade foi atribuída à presença de centros DX localizados no plano dos átomos dopantes. Com o aumento da pressão, a distância em energia entre o nível doador do centro DX e o fundo da banda de condução diminui. Desta forma, elétrons livres são capturados pelos centros profundos e observa-se, então, o decréscimo na concentração do 2DEG.

Como podemos constatar, o fenômeno da fotocondutividade em camadas semicondutoras contendo um único plano de átomos dopantes é ainda assunto de interesse e controvérsia. A existência de um gás de elétrons confinado no poço de potencial- δ suscita importantes questões. Por exemplo, qual o tipo de impureza produzida pela dopagem planar e como ela influencia nas propriedades elétricas dos sistemas que a contém? Os átomos ionizados no plano da dopagem planar não capturam os elétrons livres do gás. Esta coexistência dos elétrons (ou buracos) do 2DEG (ou 2DHG) com as impurezas ionizadas sugere que o nível de impureza gerado pela dopagem planar tem características semelhantes às dos centros DX, que inibem o processo de recombinação em baixas temperaturas. Embora um número expressivo de investigações induza à presença de centros DX, trabalhos recentes propõem modelos alternativos para a origem do fenômeno da fotocondutividade em sistemas com dopagem planar.

Recentemente, modificações da resistividade de δ -MDQWs sujeitos à ação de radiação eletromagnética foram também observadas nos sistemas baseados nos poços quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs.^[80,81] Os modelos propostos para explicar os resultados observados são ainda motivo de recente controvérsia na literatura. Em 1997, Babinski e colaboradores^[80] investigaram as propriedades de transporte de uma única amostra com dopagem planar de Si ($N_{Si} = 2,3 \times 10^{12}$ cm⁻²) localizada na barreira inferior do poço quântico. A representação esquemática da arquitetura da amostra analisada está representada na **Figura 4.1**. Estes pesquisadores realizaram medidas detalhadas de SdH e efeito Hall em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa. Eles realizaram medidas na ausência de iluminação logo após a amostra ter sido esfriada

Figura 4.1 – Representação esquemática da arquitetura da amostra analisada por Babinski e colaboradores.^[80]

até a temperatura de 1,7 K; medidas no escuro, depois da amostra ter sido iluminada por alguns segundos; e medidas na presença de iluminação permanente.* Os resultados destas medidas em função do tempo de exposição da amostra à radiação estão mostrados na **Figura 4.2**. Alguns valores numéricos significativos da mobilidade e concentração Hall, assim como da concentração do 2DEG são apresentados na **Tabela 4.1**.

A curva da resistividade Hall (ρ_{xy}), obtida no escuro, logo após o esfriamento da amostra ($T = 1,7 \text{ K}$), apresentou um comportamento aproximadamente linear em função do campo magnético, no intervalo de 0 a 12 teslas. Este comportamento da resistividade indica a presença de um único tipo de portador na amostra, sob estas condições experimentais. Além disso, o baixo valor da mobilidade ($\mu_{\text{Hall}} = 760 \text{ cm}^2/\text{V.s}$) sugere que os portadores em questão estão confinados no poço- δ , uma vez que a mobilidade destes portadores é predominantemente determinada pela alta densidade de centros espalhadores (átomos de Si ionizados) nos planos dopantes.

Em um primeiro estágio, no início do processo de iluminação da amostra, os elétrons fotogerados são transferidos, em sua maioria, para o poço- δ . Este estágio pode ser observado na **Figura 4.2** no intervalo de valores de mobilidade variando de 760 a $\sim 1.500 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. A iluminação subsequente da amostra resulta em uma ocupação gradual das sub-bandas eletrônicas do poço de InGaAs. Devido à alta mobilidade dos

*Durante a apresentação de nossa dissertação, denominaremos as medidas de SdH na ausência (presença) de iluminação como medidas de *SdH no escuro (iluminadas)*. De forma semelhante, denominaremos as medidas de efeito Hall realizadas na presença (ausência) de iluminação como medidas de *efeito Hall no escuro (iluminadas)*.

portadores no poço de InGaAs, a magnetoresistência (R_{xx}) da amostra passa a apresentar oscilações em função do campo magnético, permitindo que a concentração do gás confinado no poço de InGaAs seja determinada (observe, por exemplo, os valores apresentados na 4ª coluna na **Tabela 4.1**). O decréscimo na concentração Hall é aparente e consequência da condução em diferentes canais (o poço- δ e o poço de InGaAs). Sob iluminação contínua, as densidades Hall e SdH atingem os valores $10,3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente, e um alto valor de mobilidade ($\mu_{\text{Hall}} = 18.750 \text{ cm}^2/\text{V.s}$). Medidas de efeito Hall em altos campos mostram que a concentração total de portadores livres na amostra é $19,3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, valor este comparável com a concentração de Si no plano de átomos dopantes ($N_{\text{Si}} = 23 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). A interpretação de Babinski e colaboradores para os resultados apresentados na **Tabela 4.1** é a seguinte: Na temperatura ambiente os elétrons do 2DEG estão armadilhados em centros profundos. Em baixas temperaturas, estes elétrons “*não podem ser vistos no escuro*”. Em um estágio inicial de iluminação, os elétrons são liberados dos centros profundos e injetados dentro do poço- δ . Desta forma, os elétrons do 2DEG “*são vistos*” primeiramente dentro do poço- δ (com baixa mobilidade). Em um estágio posterior de iluminação, elétrons são transferidos para o poço de InGaAs o que resulta em um aumento da mobilidade Hall. Devido ao confinamento dos portadores (tanto no poço- δ quanto no poço de InGaAs) os elétrons do 2DEG são impedidos de retornarem aos centros profundos. Segundo este trabalho, os centros profundos devem estar localizados nas interfaces mais internas da heteroestrutura uma vez que o poço- δ é ocupado antes do que o poço de InGaAs. Como acabamos de descrever, o modelo proposto baseia-se na posição do plano dos átomos dopantes dentro da heteroestrutura. Se invertermos a ordem de disposição das camadas da amostra, colocando o plano de átomos dopantes na barreira superior, por exemplo, os elétrons “*deverão ser vistos*” primeiramente dentro do poço de InGaAs (com maiores mobilidades) e não dentro do poço- δ ?

É justamente este ponto que é fortemente criticado por M. Zervos e colaboradores^[81] em um trabalho (publicado em abril de 1999) descrevendo as propriedades de transporte de dois conjuntos de amostras (cada conjunto com uma diferente concentração nominal de átomos dopantes de silício) de δ -MDQWs de GaAs/InGaAs/GaAs.*

Para testar o modelo proposto anteriormente por Babinski *et al.*, Zervos e colaboradores analisaram amostras nas quais o plano dos átomos dopantes era localizado em diferentes posições dentro da estrutura: 1) na barreira inferior; 2) em uma das interfaces do poço de InGaAs; 3) na parte central do poço; 4) na barreira superior. Baseados nos resultados de suas investigações, Zervos *et al.* criticam o trabalho de Babinski e colaboradores afirmando que o modelo proposto por estes pesquisadores não poderia explicar o efeito PPC observado em suas amostras.

*De fato, em 1995, Zervos e colaboradores já haviam observado o efeito da fotocondutividade nestes sistemas sem, entretanto, darem-se conta do fato. Após a publicação do trabalho de Babinski e colaboradores (em 1997), Zervos e co-autores analisaram novamente os dados publicados em 1995, interpretando-os, agora, sob o enfoque do efeito da fotocondutividade.

Figura 4.2 – Concentração Hall (O) e concentração dos elétrons do 2DEG (●) obtidas por medidas de SdH em função da mobilidade Hall, para a estrutura de GaAs/InGaAs/GaAs representada na figura anterior. Esta figura, que descreve o comportamento da mobilidade Hall em função das concentrações, foi obtida na **Ref. [80]**.

Tabela 4.1 – Resumo dos resultados das medidas de transporte obtidas por Babinski e colaboradores.^[80] n_{Hall} e μ_{Hall} designam a concentração e a mobilidade de transporte dos portadores obtidas por medidas de efeito Hall, respectivamente. n_{SdH} representa a concentração de portadores do 2DEG obtida por medidas de SdH.

	300 K	1,7 K no escuro antes da iluminação	1,7 K no escuro depois da iluminação	1,7 K iluminação contínua
$n_{\text{Hall}} (10^{11} \text{ cm}^{-2})$	7,2	8,9	8,0	10,3
$\mu_{\text{Hall}} (\text{cm}^2/\text{V.s})$	2.720	760	9.520	18.750
$n_{\text{SdH}} (10^{11} \text{ cm}^{-2})$	---	---	4,5	7,0

Os dados de Zervos e colaboradores mostram que, em algumas amostras, o valor da mobilidade dos portadores dobra na presença de iluminação enquanto que a concentração permanece inalterada. Eles atribuíram este efeito às modificações no perfil de potencial induzidas pela radiação luminosa. De acordo com estes autores, os elétrons fotogerados são capturados na região ativa enquanto os buracos neutralizam as impurezas residuais de carbono, sempre presentes nas amostras crescidas com a técnica de MBE. Esta nova distribuição de cargas altera o perfil de potencial da estrutura, causando um deslocamento das funções de onda eletrônicas em relação ao plano dos átomos dopantes. Uma vez mais distantes dos centros de espalhamento coulombiano, o gás de elétrons tem a sua mobilidade aumentada. Portanto, segundo estes autores, antes da iluminação da amostra, os elétrons do 2DEG estariam armadilhados nas impurezas residuais de carbono.

Neste trabalho não foram apresentados os espectros de FFT dos traços obtidos nas medidas de SdH. Apenas um resumo dos resultados foi apresentado. Selecionamos alguns destes resultados que poderão ser comparados com os nossos. Estes dados (resumidos na **Tabela 4.2**) referem-se a duas amostras com arquiteturas semelhantes às investigadas em nosso trabalho, isto é, com a camada δ localizada na barreira superior da heteroestrutura, mas com diferentes concentrações nominais de átomos dopantes de silício. Nas duas amostras, a espessura das camadas de espaçamento é $D = 40 \text{ \AA}$. As medidas de efeito Hall e SdH foram realizadas no escuro e apenas em duas diferentes condições experimentais: 1) antes de submeter a amostra à iluminação; 2) e depois que a amostra foi iluminada durante 5 minutos.

Tabela 4.2 – Resumo dos resultados das medidas de transporte obtidas por Zervos e colaboradores.^[81] n_{Hall} e μ_{Hall} designam a concentração e a mobilidade de transporte dos portadores, obtidas por medidas de efeito Hall, respectivamente. n_{SdH} representa a concentração de portadores do 2DEG obtida por medidas de SdH, e N_{Si} indica a concentração nominal de dopantes. Medidas realizadas em $T = 2 \text{ K}$.

Amostra	N_{Si} ($\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)	Condição experimental	n_{SdH} ($\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)	n_{Hall} ($\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$)	μ_{Hall} ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)
AL2445	2,0	Antes da iluminação	1,7	1,7	4300
		Depois da iluminação	1,7	1,7	3600
AL2446	4,5	Antes da iluminação	2,4	4,1	1400
		Depois da iluminação	2,8	5,6	1400

Como pode ser observado nesta tabela, a iluminação da amostra menos dopada altera a mobilidade dos portadores sem contudo alterar a concentração dos 2DEG. Para

a amostra mais dopada, apenas a metade dos portadores é detectada nas medidas de SdH enquanto que as medidas de efeito Hall conseguem detectar todos portadores do 2DEG.

Diferentemente dos dados apresentados no trabalho de Babinski e colaboradores,^[80] nossos resultados da amostra **D20** mostram que os portadores na região ativa da estrutura podem *ser vistos* (detectados por medidas de SdH) mesmo antes de submetermos a amostra à radiação luminosa. Contrariamente aos resultados de Zervos *et al.*,^[81] nossas medidas de SdH também mostram que ocorre um aumento significativo na concentração de elétrons na região ativa em função do tempo de iluminação da amostra. A apresentação destes resultados e um modelo para explicá-los é o assunto deste capítulo.

4.2 – Detalhes experimentais

As medidas elétricas foram realizadas utilizando-se contatos dispostos segundo a configuração de van der Pauw (quatro contatos localizados nos vértices de um quadrado imaginário na periferia da amostra). As amostras foram cortadas em quadrados (de aproximadamente 5 mm de lado) e submetidas a um tratamento químico com base em acetona e álcool metílico para a limpeza de suas superfícies. Posteriormente, foram feitos os contatos nos cantos das amostras. Em cada amostra, os contatos (obtidos em uma atmosfera de nitrogênio no interior de um forno Lindberg, pela difusão de índio a 400 °C, durante 4 minutos) ocupam uma área menor do que 1% de sua área total. Para a realização das medidas de transporte utilizamos um porta-amostra que nos permitiu o acesso aos contatos da amostra, que ficava imersa em um banho de hélio líquido para medidas em temperaturas inferiores a 4 K. As medidas foram efetuadas em uma bobina supercondutora capaz de fornecer campos de 0 a 14 teslas. O campo magnético foi aplicado na direção perpendicular ao plano dos átomos dopantes.

Para iniciarmos a coleta de dados, a amostra era esfriada em ambiente escuro (no interior da bobina). Logo após, fazíamos fluir na amostra (por dois dos contatos) uma corrente elétrica (da ordem de μA), mantida constante por uma fonte de corrente, enquanto a diferença de potencial era lida nos outros dois contatos. Os contatos para o fluxo de corrente e leitura da diferença de potencial eram selecionados de acordo com o tipo de experimento a ser realizado (SdH ou efeito Hall). Na **Figura 4.3**, mostramos as configurações típicas utilizadas para a realização destes dois experimentos.

Como estamos interessados na observação do efeito da fotocondutividade, após realizarmos medidas no escuro, iluminávamos a amostra com um LED (*Light Emitting Diode*) vermelho ($\lambda = 665 \text{ nm}$), por um determinado intervalo de tempo, e coletávamos novas medidas com o LED desligado. Este procedimento (iluminação da amostra por um intervalo de tempo, desligamento do LED, e coleta de novos dados) foi repetido sucessivas vezes.

Figura 4.3 - Ilustração das conexões utilizadas em medidas de (a) efeito Hall e (b) SdH.

4.3 – Resultados para a amostra D20

4.3.1 – Medidas de Shubnikov-de Haas

Iniciaremos a apresentação dos resultados, mostrando na **Figura 4.4a** os traços das medidas de SdH para a amostra **D20**. Eles foram obtidos após o resfriamento da amostra até a temperatura de 1,5 K, passando-se pelos contatos da mesma uma corrente elétrica constante $I = 10 \mu\text{A}$. Variamos o campo magnético de 2 a 10 teslas. As diferentes curvas mostradas nesta figura relacionam-se aos diferentes tempos de iluminação (T_{ilum}) utilizados:

- 1) Realizamos a primeira medida no escuro, logo após resfriá-la, antes de submetê-la a qualquer iluminação. Esta medida será denominada *medida inicial* e indicada por $T_{\text{ilum}} = 0$ s.
- 2) Em seguida, iluminamos a amostra com o LED durante 20 s e realizamos a segunda medida no escuro (com o LED desligado). O resultado obtido é a curva indicada por $T_{\text{ilum}} = 20$ s.
- 3) Na seqüência, iluminamos a amostra por mais 20 s. O resultado é a curva indicada por $T_{\text{ilum}} = 40$ s.
- 4) Do exposto, a curva designada por $T_{\text{ilum}} = 1240$ s indica que a amostra foi iluminada durante 1240 s desde a *medida inicial*.

- 5) Depois de realizarmos a medida em $T_{\text{ilum}} = 1240$ s, a amostra foi mantida no escuro, dentro do criostato por 27 horas. Depois deste intervalo de tempo, realizamos uma nova medida no escuro e obtivemos um traço de magnetoresistência semelhante àqueles medidos no intervalo $280 \leq T_{\text{ilum}} \leq 1240$ s.
- 6) Em seguida, para finalizar esta série, realizamos uma medida na presença de iluminação contínua e um novo decréscimo no valor de R_{xx} foi observado.
- 7) Fizemos uma outra série de tomada de dados, realizando diversas medidas no escuro, em diversos instantes após o LED ter sido desligado. Logo após àquela medida realizada na presença de iluminação contínua, verificamos que o traço obtido era novamente semelhante àqueles medidos no intervalo $280 \leq T_{\text{ilum}} \leq 1240$ s.

Podemos observar na **Figura 4.4a** que a magnetoresistência da amostra diminui em função do tempo de iluminação, até atingir um estágio de saturação (para $280 \leq T_{\text{ilum}} \leq 1240$ s). Para $B = 2$ T, a magnetoresistência da amostra varia desde 910Ω ($T_{\text{ilum}} = 0$ s) até o valor aproximado de 488Ω no regime de saturação ($280 \leq T_{\text{ilum}} \leq 1240$ s) para as medidas realizadas no escuro. O valor de R_{xx} decresceu ainda mais um pouco, quando a medida foi realizada na presença de iluminação (veja a curva inferior da **Figura 4.4a**). No entanto, ao desligarmos a luz e medirmos novamente no escuro, o valor de R_{xx} retornou àqueles medidos no regime de saturação. Estes resultados indicam que existem dois tipos diferentes de efeito fotocondutivo em nossa amostra: 1) um efeito persistente no intervalo $0 \leq T_{\text{ilum}} \leq 1240$ s, com uma persistência de pelo menos 27 horas; 2) e um efeito não persistente que ocorre apenas na presença de iluminação, e deve estar relacionado com o processo de excitação de portadores da banda de condução para a banda de valência, isto é, com a criação de pares elétron-buraco.

Na **Figura 4.4b** mostramos a transformada de Fourier dos traços de magnetoresistência (apresentados na **Figura 4.4a**) em campo inverso. As oscilações, observadas nos traços da magnetoresistividade da amostra **D20**, indicam a presença de portadores confinados, isto é, dos elétrons do 2DEG na região ativa da heteroestrutura já na *medida inicial* (realizada no escuro, antes de submetermos a amostra a qualquer iluminação). Aparentemente, em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, encontramos apenas uma sub-banda ocupada, com densidade eletrônica $n_1 = 1,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Utilizamos a palavra aparentemente pois medidas de efeito Hall, na temperatura de 1,5 K, indicam a presença de pelo menos duas sub-bandas parcialmente ocupadas já na *medida inicial*. Em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, a concentração Hall obtida é de $2,50 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, enquanto que na FFT observamos a presença indubitável de apenas um pico, o qual corresponde à sub-banda com a concentração eletrônica de $1,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Portanto, é necessária a presença de pelo menos mais uma sub-banda para acomodar o restante da população dos elétrons detectados na *medida inicial* de efeito Hall (veja as **expressões 3.23 e 3.24**). Em $T_{\text{ilum}} = 20$ s, já se observa claramente a presença desta segunda sub-banda com uma concentração eletrônica $n_2 = 1,08 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. O processo de iluminação altera a ocupação

Figura 4.4 – (a) Oscilações de SdH e (b) as correspondentes ocupações das sub-bandas determinadas a partir destas oscilações, pelo método da transformada de Fourier, para a amostra D20. Os diferentes traços são relativos aos diferentes tempos de iluminação da amostra. Nestas medidas utilizamos $I_{\text{LED}} = 1\text{ }\mu\text{A}$.

das sub-bandas ocupadas e, em $T_{\text{ilum}} = 280$ s, já se observa o aparecimento de uma terceira sub-banda com uma concentração $n_3 = 0,43 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Uma vez que os picos da FFT estão superpostos, utilizamos o procedimento da janela Hanning para desacoplá-los e obter valores mais precisos das populações das diversas sub-bandas ocupadas. Os resultados deste procedimento estão apresentados na **Figura 4.5**. Observe que nesta figura não apresentamos a FFT para a *medida inicial*. Em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, mesmo utilizando o procedimento da janela Hanning, não foi possível separar os picos associados com a primeira e a segunda sub-bandas. Além disso, depois de utilizarmos o procedimento Hanning, o pico associado com a terceira sub-banda apresentou uma intensidade 100 vezes menor do que os picos relacionados com as outras duas sub-bandas ocupadas.

Extraímos das **Figuras 4.4 e 4.5** as populações das sub-bandas (n_1, n_2, n_3) para os diversos T_{ilum} , que estão mostradas na **Figura 4.6** juntamente com a concentração total de portadores do 2DEG ($n_{\text{SdH}} = \sum n_i$, onde a soma estende-se sobre todas as sub-bandas detectadas). Nesta figura, os círculos (losangos) indicam resultados extraídos das medidas realizadas na ausência (presença contínua) de iluminação.

As concentrações das duas primeiras sub-bandas (n_1, n_2) apresentam comportamentos semelhantes: aumentam com o T_{ilum} até atingirem a saturação. O valor inicial da concentração do 2DEG ($T_{\text{ilum}} = 0$ s) é $n_{\text{SdH}} = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (supondo que a concentração inicial da segunda sub-banda seja $1,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Após iluminarmos a amostra, esta concentração cresce significativamente até $T_{\text{ilum}} = 280$ s, quando apresenta o valor $n_{\text{SdH}} = 3,86 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. A iluminação subsequente da amostra praticamente não altera as populações das sub-bandas ocupadas. Depois de atingir a saturação, observa-se um acréscimo de $0,12 \times 10^{12}$ portadores por cm^2 na concentração do 2DEG, quando a medida é realizada na *presença contínua* de luz. Nesta condição, temos as seguintes ocupações: $n_1 = 2,11 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n_2 = 1,46 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_3 = 0,55 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, que fornecem uma concentração total de portadores $n_{\text{SdH}} = 4,12 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Este valor está em ótima concordância com o valor nominal da concentração dos átomos dopantes de silício ($N_{\text{Si}} = 4,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} + n_{\text{cobertura}} = 0,1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), estimado pela técnica de crescimento.

De acordo com as medidas de SdH, observamos durante todo o processo de iluminação o “*aparecimento de $1,31 \times 10^{12}$ elétrons por cm^2* ” que, possivelmente, estariam armadilhados em defeitos, impurezas, estados de superfície, ou estados de interface, antes de submetermos a amostra à radiação. É este aumento na concentração dos elétrons do 2DEG (**Figura 4.6**) que é responsável pelo decréscimo da magnetoresistência da amostra em função do tempo de iluminação (**Figura 4.4a**).

Figura 4.5 – Ocupações das sub-bandas determinadas pelo método da transformada de Fourier, utilizando a janela Hanning, para a amostra **D20**. Para ilustrarmos o efeito do tratamento utilizando a janela Hanning, incluímos a curva equivalente (tracejada) que não foi obtida por este método.

Figura 4.6 – Ocupações das sub-bandas (n_1 , n_2 , n_3) e n_{SdH} ($n_1+n_2+n_3$) obtidas nas medidas de SdH em função do tempo de iluminação da amostra. Nesta figura, os círculos (losangos) indicam resultados extraídos das medidas realizadas na ausência (presença contínua) de iluminação.

Como dissemos anteriormente, depois que a magnetoresistência atingiu o valor de saturação de $488 \, \Omega$, realizamos a medida na presença de iluminação contínua, onde ela continuou a decrescer até $419 \, \Omega$; em seguida desligamos o LED e realizamos novas medidas em diferentes momentos: logo após tê-lo desligado; depois de 1 h; depois de 2 h. As oscilações de SdH correspondentes estão apresentadas na **Figura 4.7**. Para facilitar a visualização das variações da magnetoresistência durante todo o processo, apresentamos na **Figura 4.8a** os valores de R_{xx} em função do tempo de iluminação, e na **Figura 4.8b** mostramos os valores de R_{xx} em diferentes momentos após o LED ter sido desligado. Os valores de R_{xx} apresentados nestas figuras foram obtidos em $B = 2 \, \text{T}$.

Figura 4.7 – Oscilações de SdH obtidas em diversos momentos após o LED ter sido desligado.

Figura 4.8 – Variação da magnetoresistência (R_{xx}), em $B = 2$ T: (a) em função do T_{ilum} . Valores extraídos da **Figura 4.4a**; (b) para diversos momentos após o LED ter sido desligado. Valores extraídos da **Figura 4.7**.

Podemos observar na **Figura 4.8b** que, ao medirmos a magnetoresistência da amostra logo após termos desligado o LED, encontramos praticamente o mesmo valor ($R_{xx} = 473 \, \Omega$) que aquele obtido no regime de saturação ($R_{xx} = 488 \, \Omega$). Deste comportamento conclui-se que os portadores que aparecem na região ativa na presença de iluminação ($0,12 \times 10^{12}$ elétrons/cm²) têm uma origem diferente daqueles ($1,19 \times 10^{12}$ elétrons/cm²) que são injetados no poço durante o processo de iluminação da amostra ($0 \leq T_{\text{ilum}} \leq 1240$ s). Os portadores injetados na presença de iluminação desaparecem da região ativa quase que instantaneamente depois de desligarmos o LED (R_{xx} retorna aos valores anteriores à iluminação contínua). São estes portadores ($0,12$ elétrons/cm²) que dão origem ao efeito fotocondutivo não persistente em nossa amostra. Mas, os elétrons que são injetados na região ativa, em algum momento até a saturação, lá permanecem durante dias, mesmo depois de retirada a iluminação. Estes portadores ($1,19$ elétrons/cm²) são os responsáveis pelo efeito da fotocondutividade persistente nesta amostra.

Para melhor compreendermos o comportamento deste sistema em função do tempo de iluminação, determinamos as mobilidades quânticas das sub-bandas (μ_{q1} , μ_{q2}), utilizando o método da variação do limite inferior da janela de Hanning nos cálculos da FFT (veja a seção 3.3). Os resultados estão apresentados na **Figura 4.9**. Os valores das populações e das mobilidades apresentadas nas **Figuras 4.6 e 4.9** estão resumidos na **Tabela 4.3**. Como o pico referente à terceira sub-banda praticamente desaparece após o tratamento com a janela Hanning, a sua mobilidade não foi determinada e a sua ocupação foi extraída da **Figura 4.4b**.

Em $T_{\text{ilum}} = 20$ s, a mobilidade da primeira sub-banda é maior do que a da segunda sub-banda, o que pode explicar a dificuldade de observarmos a segunda sub-banda na *medida inicial* (**Figura 4.4b**). Esta figura também mostra uma diminuição acentuada da mobilidade dos portadores na primeira sub-banda e, simultaneamente, um aumento da mobilidade dos elétrons na segunda sub-banda. Este aumento faz com que o pico da FFT associado com a segunda sub-banda possa ser observado logo após a iluminação da amostra ($T_{\text{ilum}} = 20$ s). O fato da terceira sub-banda não apresentar um pico de FFT com uma amplitude significativa pode ser devido à baixíssima população desta sub-banda.

A mobilidade dos portadores nas diferentes sub-bandas de um gás de elétrons bidimensional tem sido intensivamente analisada em vários tipos de heteroestruturas semicondutoras.^[103-105] Uma conclusão geral proveniente destes estudos é que a mobilidade dos portadores no estado fundamental é maior do que a mobilidade dos portadores nos estados excitados, em poços quânticos com dopagem modulada na barreira (MDQWs). Mais especificamente, a mobilidade diminui com o aumento do índice da sub-banda. No entanto, as amostras semicondutoras com dopagem planar (contendo um único plano de átomos dopantes ou super-redes) apresentam resultados com comportamento oposto: a mobilidade aumenta com o índice da sub-banda.

Figura 4.9 – Mobilidades quânticas (μ_{q1} , μ_{q2}) calculadas das FFTs ao se variar a janela inferior de Hanning. Nesta figura, os círculos (losangos) indicam resultados extraídos das medidas realizadas na ausência (presença) de iluminação.

Tabela 4.3 – Resumo dos resultados das medidas de SdH para a amostra **D20**: ocupações das sub-bandas (n_1 , n_2 , n_3) e mobilidades quânticas (μ_{q1} , μ_{q2}) dos portadores em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa.

T_{ilum} (s)	n_1 10^{12} cm^{-2}	n_2 10^{12} cm^{-2}	n_3^b 10^{12} cm^{-2}	n_{SdH} 10^{12} cm^{-2}	μ_{q1} $\text{cm}^2/\text{V.s}$	μ_{q2} $\text{cm}^2/\text{V.s}$
0	1,81	1,00 ^{a)}	---	2,81	---	---
20	1,85	1,08	---	2,93	995	546
40	1,94	1,18	---	3,12	556	608
60	2,02	1,24	---	3,26	408	680
100	2,05	1,30	---	3,35	353	725
160	2,04	1,38	---	3,42	367	724
280	2,05	1,38	0,43	3,86	370	725
640	2,10	1,42	0,48	4,00	377	786
1240	2,10	1,42	0,48	4,00	410	789
Iluminada	2,11	1,46	0,55	4,12	625	865

^{a)} Para $T_{\text{ilum}} = 0$ s, a população da segunda sub-banda eletrônica foi estimada por extrapolação numérica.

^{b)} Os valores de n_3 foram obtidos nas curvas apresentadas na **Figura 4.4b**.

Estas observações podem ser compreendidas em termos da competição de dois efeitos: (i) a extensão espacial da distribuição eletrônica e o seu distanciamento em relação aos doadores ionizados; (ii) a velocidade dos portadores no nível de Fermi. No caso dos poços quânticos com dopagem modulada, onde os portadores estão distantes dos centros espalhadores ionizados, é o segundo fator que usualmente determina a mobilidade das sub-bandas. No modelo de sub-bandas eletrônicas parabólicas, os elétrons no nível de Fermi das sub-bandas com os maiores índices apresentam menores valores de k_F (momento de Fermi). Conseqüentemente, a velocidade dos elétrons no nível de Fermi ($v_F = \hbar k_F$) das sub-bandas com os maiores índices é menor, o que explica o decréscimo da mobilidade dos portadores com o aumento do índice das sub-bandas. A **Figura 4.10** representa esquematicamente a função de onda do estado fundamental de um poço quântico cuja dopagem modulada se encontra distante deste poço, de forma que o fator determinante da mobilidade é a velocidade dos elétrons no nível de Fermi. A **Figura 4.11** representa esquematicamente os momentos (k_F) e as energias (E_F) dos elétrons no nível de Fermi das duas primeiras sub-bandas deste poço quântico.

No caso dos sistemas com dopagem planar, onde a distribuição eletrônica é fortemente localizada nas proximidades dos centros espalhadores ionizados, é o primeiro fator que determina a mobilidade dos portadores nas diferentes sub-bandas. A maior mobilidade dos elétrons nos estados excitados é decorrente da menor superposição das funções de onda destes elétrons com os centros de espalhamento no plano de dopagem. A **Figura 4.12** representa esquematicamente a função de onda do estado fundamental de um poço delta isolado.

Já a **Figura 4.13** representa esquematicamente a situação de nossas amostras, ou seja, as duas situações (poço quântico e poço delta) ocorrem simultaneamente, competindo entre si na determinação do comportamento da mobilidade. Logo, uma análise da mobilidade nessas amostras deve ser realizado caso a caso.

Mezrin e Shik^[106] calcularam as mobilidades de transporte das sub-bandas do 2DEG em uma estrutura de GaAs contendo um único plano de átomos dopantes. Desprezando a presença de centros que poderiam causar a depleção do 2DEG, e utilizando em seus cálculos uma concentração de elétrons igual a $3,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, eles obtiveram os seguintes valores para as mobilidades de transporte: $\mu_{t1} = 1.960 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, $\mu_{t2} = 4.300 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ e $\mu_{t3} = 6.860 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. Estes valores ilustram o comportamento da mobilidade de transporte com os índices das sub-bandas nos sistemas com dopagem planar. Neste mesmo trabalho, eles também calcularam a mobilidade quântica da primeira sub-banda e verificaram que seu valor é três vezes menor do que a mobilidade de transporte ($\mu_t/\mu_q = 3$). A razão entre a mobilidade de transporte e a mobilidade quântica também foi determinada experimentalmente para amostras de GaAs dopadas com um único plano de átomos de silício.^[107] Neste trabalho experimental observou-se que, para as diferentes amostras analisadas, $\mu_t/\mu_q \approx 2,5$, valor este em ótima concordância com o valor teórico. Levando em consideração o fator que relaciona as mobilidades quânticas e as mobilidades de transporte, obtemos para esta nossa amostra mobilidades com valores inferiores (aproximadamente metade) aos determinados no trabalho teórico de Mezrin e Shik.

Camada δ isolada

Figura 4.12 - Representação esquemática da função de onda do estado fundamental de um poço delta isolado.

Figura 4.13 - Representação esquemática de um sistema onde o poço quântico e o poço delta se apresentam simultaneamente.

Como podemos observar na **Figura 4.9**, no início do processo de iluminação da amostra, a mobilidade dos portadores na sub-banda do estado fundamental é maior do que a mobilidade dos portadores no estado excitado, $\mu_{q1} > \mu_{q2}$. Por exemplo, para $T_{ilum} = 20$ s, $\mu_{q1} = 995$ cm²/V.s e $\mu_{q2} = 546$ cm²/V.s. Se extrapolarmos este resultado para $T_{ilum} = 0$ s, também podemos afirmar que a mobilidade dos portadores no estado fundamental é maior do que a mobilidade dos elétrons no estado excitado antes de submetermos a amostra à iluminação. Para um período de iluminação suficientemente grande, esta relação inverte-se e os valores de μ_{qi} passam a ter o comportamento comumente observado nos sistemas com dopagem planar: a mobilidade aumenta com o índice (i) da sub-banda. Resta-nos, portanto, elaborar um modelo que explique os dados observados.

O mecanismo que dá origem ao efeito PPC na amostra analisada modifica sua estrutura de bandas alterando a extensão física e/ou a distância das distribuições eletrônicas em relação à camada δ -dopada. Como consequência destas modificações, observam-se também alterações na mobilidade quântica dos portadores nas sub-bandas ocupadas.

Com a finalidade de propor um modelo que explique o efeito fotocondutivo em nossa amostra, fizemos cálculos autoconsistentes baseados em diferentes modelos, que simulam o “aparecimento” dos elétrons na região ativa. A enorme quantidade de portadores que aparece durante o processo de iluminação sugere três possíveis candidatos para explicar o efeito da fotocondutividade persistente em nossa amostra: 1) centros DX localizados na estreita faixa δ -dopada,^[101,102] 2) centros profundos (com um nível de energia abaixo de nível de Fermi) espalhados nas camadas de GaAs vizinhas à região ativa,^[81] 3) aglomerados de átomos de silício na camada delta.^[83]

1) Estima-se que o nível de energia (ressonante na banda de condução) do centro DX em GaAs está aproximadamente 200 meV acima do fundo da banda de condução. Desta forma, para que este centro capture elétrons do 2DEG em amostras delta-dopadas com silício, é necessária uma concentração de dopantes superior a 7×10^{12} cm⁻².^[84] Representamos na **Figura 4.14** os centros DX de um plano de átomos dopantes de silício em GaAs. Esta figura foi extraída da referência **84**.

Como a concentração nominal de átomos de silício na camada delta de nossas amostras é apenas 4×10^{12} cm⁻², concluímos que os centros DX localizados na camada delta-dopada não são os responsáveis pelo efeito da fotocondutividade persistente em nossas amostras.

2) De acordo com Koenraad e colaboradores^[83] o aparecimento de elétrons em camadas de GaAs delta-dopadas, em função da iluminação, está associado com a presença de aglomerados de átomos de silício na camada delta. Estes pesquisadores acreditam que apenas uma fração dos átomos de silício está depositada em sítios eletricamente ativos, dando origem ao gás bidimensional. Com a iluminação, os átomos destes aglomerados são ionizados e os elétrons, assim liberados, passam a fazer parte do 2DEG. Para descrever esta situação, devemos adotar em nossos cálculos $N_{Si} \cong n_s$

$$(N_{\text{Si}} > 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2})$$

Figura 4.14 - Centros DX de um plano de átomos dopantes de silício em GaAs. Figura extraída da referência 84.

(onde, como foi definido anteriormente, N_{Si} é a concentração de íons de silício no plano da dopagem e n_s é a quantidade total de elétrons livres) e variá-los concomitantemente para simular o aparecimento simultâneo dos elétrons e dos íons de Si. Adotamos este procedimento e os resultados obtidos serão apresentados na seção seguinte. Observe que ao liberarmos elétrons com a iluminação, uma parte deles pode ser capturada por estados de superfície, ou impurezas aceitadoras residuais. Dito de outra forma,

$$N_{Si} = n_s + N_A^- + n_{sup}$$

onde N_A^- é a densidade de portadores capturados pelas impurezas aceitadoras residuais, n_{sup} é a densidade de elétrons capturados pelos estados de superfície.

3) Um outro mecanismo que pode alterar a mobilidade dos portadores é a não completa compensação da camada delta-dopada, decorrente da captura dos elétrons do 2DEG por centros profundos (com um nível de energia abaixo do nível de Fermi) nas camadas de GaAs vizinhas da região ativa. Uma partícula positivamente carregada atrai elétrons para a sua proximidade, criando assim uma região de excesso de carga negativa ao seu redor, o que diminui a intensidade do campo elétrico gerado pela carga positiva em regiões mais afastadas. A esta diminuição da intensidade do campo pelo acúmulo de cargas chama-se blindagem eletrostática. Nos sistemas com dopagem planar, os elétrons do 2DEG atenuam o potencial coulombiano gerado pelos íons de silício no plano dos dopantes. A ausência de elétrons na região ativa atenua a blindagem eletrostática dos íons de silício no plano δ -dopado, e poderá acarretar fortes modificações na mobilidade dos portadores nas diferentes sub-bandas. Para descrever esta situação devemos adotar em nossos cálculos uma concentração adequada de centros profundos que capturem os elétrons do 2DEG, criando um forte desequilíbrio de cargas na região ativa, isto é, tornando $N_{Si} \gg n_s$. Os resultados teóricos desta simulação serão apresentados na seção seguinte, juntamente com simulações numéricas que avaliam a influência do armadilhamento dos elétrons nos estados de superfície e nas impurezas aceitadoras de carbono.

4.3.2 – Simulações numéricas

a) Variando a concentração de impurezas residuais (N_A)

Realizamos, inicialmente, um estudo sobre a influência da presença das impurezas residuais de carbono na heteroestrutura. A espessura da camada de espaçamento utilizada foi $D = 20 \text{ \AA}$, ou seja, o plano dos átomos dopantes foi localizado a uma distância de $20 \text{ \AA}$ da interface superior do poço de InGaAs. Camadas de GaAs crescidas pela técnica de MBE apresentam comportamento do tipo p devido à contaminação de carbono e amostras com um *background* de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ podem ser consideradas como os piores espécimes crescidos por esta técnica. Variamos a concentração das impurezas de carbono no intervalo de $1 \times 10^{14} \leq N_A \leq 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Mantivemos fixa a condição de contorno em $z = 600 \text{ \AA}$ tal que, na superfície livre da cobertura, o nível de Fermi foi posicionado em $V_s = 180 \text{ meV}$.* Fora da região de depleção, o nível de Fermi foi considerado fixo no nível aceitador de carbono. As outras grandezas mantidas fixas foram: $\Delta z = 20 \text{ \AA}$; $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; *band offset* para a banda de condução $Q_C = 0,7$; $k_{\text{InGaAs}} = 13,44$; $x = 0,15$; e $m_c^* = 0,60 m_0$. A descrição detalhada do significado de todos estes parâmetros pode ser encontrada na **seção 2.6** deste trabalho.

Na **Figura 4.15** apresentamos os perfis de potencial da banda de condução e as densidades de probabilidade associadas com as funções de onda eletrônicas ($\phi_{ei} = \psi_i^* \psi_i$) para as duas concentrações extremas utilizadas nos cálculos. As funções ϕ_{ei} não estão representadas em escala, para que possam ser observadas com maior clareza. Podemos observar nesta figura que tanto os perfis de potencial quanto as densidades de probabilidade se sobrepuseram para todas as concentrações de carbono utilizadas. Nossos cálculos ainda mostram que para $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, apenas $0,05 \times 10^{12} \text{ elétrons/cm}^2$ do 2DEG são capturados pelas impurezas de carbono na região de depleção. Verificamos, portanto, que as impurezas residuais (em concentrações variando de $1 \times 10^{14} \leq N_A \leq 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) não ocasionam alterações consideráveis na concentração do 2DEG e que a presença destas impurezas não é responsável pelo efeito fotocondutivo persistente observado em nossas amostras. Esses cálculos ainda mostram a presença de mais $0,46 \times 10^{12} \text{ elétrons/cm}^2$ armadilhados nos estados de superfície.

Por outro lado, a estimativa teórica da concentração de elétrons capturados pelas impurezas de carbono sugere que o acréscimo observado na concentração do gás quando a amostra é iluminada continuamente está relacionado com a fotoneutralização

*A posição do nível de Fermi na superfície livre dos semicondutores é ainda uma incógnita. Especula-se que em GaAs o nível de Fermi na superfície livre esteja posicionado no meio do *gap* ($V_s \approx 750 \text{ meV}$). Como em nossas amostras as camadas de cobertura são dopadas com silício, acreditamos que a posição do nível de Fermi nestas estruturas tenha um valor inferior a 750 meV . Por isso utilizamos nestes cálculos, arbitrariamente, $V_s = 180 \text{ meV}$. Em nosso trabalho, V_s é a diferença em energia entre o nível de Fermi e o fundo da banda de condução do GaAs na superfície livre da amostra.

das impurezas aceitadoras residuais (veja na **Tabela 4.3** a concentração do 2DEG medida em $T_{\text{ilum}} = 1240$ s e na presença de iluminação). Na ausência de iluminação, as impurezas residuais capturam elétrons da região ativa tornando-se impurezas negativamente carregadas. Na presença de iluminação, os elétrons capturados pelas impurezas aceitadoras retornam para a região ativa e contribuem para o aumento da concentração do 2DEG ($0,12 \times 10^{12}$ portadores/cm²). Depois que a luz é removida, os elétrons são rapidamente recapturados pelos aceitadores e observamos um decréscimo de $0,12 \times 10^{12}$ cm⁻² na concentração do 2DEG. O comportamento aqui descrito pode ser observado nos resultados apresentados na **Figura 4.8**.

Em todo o intervalo de concentrações investigado, encontramos três níveis eletrônicos ocupados. Os valores numéricos das ocupações das sub-bandas e das energias de confinamento em função da concentração das impurezas residuais estão apresentados na **Tabela 4.4**. Como podemos observar, a influência das impurezas aceitadoras é desprezível: as energias de confinamento e as ocupações não se alteram mesmo se $N_A = 5 \times 10^{14}$ cm⁻³. Ou seja, a fotoneutralização das impurezas residuais de carbono não causa modificações significativas no perfil de potencial da região ativa nem na estrutura eletrônica do 2DEG. Entretanto, a neutralização destas impurezas diminui o número de centros de espalhamento coulombiano o que contribui para um aumento da mobilidade dos portadores em todas as sub-bandas do 2DEG.

Em seguida, realizamos cálculos variando alguns outros parâmetros relacionados com a arquitetura da amostra, por exemplo, a composição da liga de InGaAs, o *band offset*, a constante dielétrica, a largura da distribuição dos dopantes (*spread*) e a massa efetiva. Em todos os casos, as modificações observadas na estrutura eletrônica do sistema eram desprezíveis, quando utilizávamos valores realistas para estas grandezas.

Desta forma, ficamos com três parâmetros que podem ter influência significativa na estrutura eletrônica dos sistemas aqui analisados: 1) a concentração de centros ativos em nossas amostras (que aqui será denominado modelo dos aglomerados de silício ou modelo de Koenraad); 2) a presença de centros profundos (modelo dos centros profundos); e 3) a posição do nível de Fermi na superfície livre da cobertura (denominado neste trabalho como modelo dos estados de superfície). Variamos estes parâmetros e os resultados serão mostrados na sequência da apresentação deste trabalho.

Figura 4.15 – Influência da concentração de impurezas residuais de carbono no perfil de potencial da BC, e nas densidades de probabilidade associadas com as funções de onda eletrônicas, de uma estrutura do tipo δ -MDQW. O zero de energia foi fixado no ponto mais baixo da BC, que para esta estrutura localiza-se no poço de InGaAs.

Tabela 4.4 - Energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra **D20** com diferentes valores de N_A . A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a **Figura 4.15**).

N_A 10^{14} cm^{-3}	n_1 10^{12} cm^{-2}	n_2 10^{12} cm^{-2}	n_3 10^{12} cm^{-2}	E_1 meV	E_2 meV	E_3 meV	E_F meV
1	2,31	1,01	0,21	84,2	135,9	168,0	176,4
3	2,30	1,01	0,21	84,2	135,8	167,7	176,0
5	2,29	1,00	0,20	84,1	135,7	167,6	175,6

b) Variando concomitantemente $N_{Si} = n_s$ (modelo dos aglomerados de silício)

Realizamos estudos para avaliar a influência da ativação (pela radiação luminosa) dos aglomerados de silício no plano dos átomos dopantes na estrutura eletrônica da amostra **D20**, ou seja, tentamos simular o modelo proposto por Koenraad e colaboradores.^[83] Segundo este modelo, ao ser ativado, um átomo dopante pertencente ao aglomerado libera um átomo de silício positivamente carregado e um elétron, ambos na região ativa. Desta forma, variamos concomitantemente a concentração de íons no plano dos átomos dopantes e a concentração do 2DEG. Para simular a estrutura eletrônica do sistema antes de submetê-lo ao processo de iluminação utilizamos $N_{Si} = n_s = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Como pode ser verificado na **Tabela 4.3**, nesta condição experimental ($T_{ilum} = 0 \text{ s}$) a concentração de elétrons determinada nas medidas de SdH foi $n_{SdH} = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Depois do processo de iluminação (em $T_{ilum} = 1240 \text{ s}$), encontramos $n_{SdH} = 4,00 \times 10^{12} \text{ elétrons/cm}^2$ na região ativa. Para simular este instante de iluminação, utilizamos $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Estas situações (antes e depois da iluminação) estão representadas esquematicamente na **Figura 4.16**. Os resultados encontrados estão apresentados na **Tabela 4.5**. Utilizamos $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ e $V_s = 180 \text{ meV}$. Todos os outros parâmetros foram mantidos fixos.

Tabela 4.5 - Energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra **D20** para dois diferentes valores de $N_{Si} = n_s$. A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a **Figura 4.17**).

$N_{Si}=n_s$ 10^{12} cm^{-2}	n_1 10^{12} cm^{-2}	n_2 10^{12} cm^{-2}	n_3 10^{12} cm^{-2}	n_s 10^{12} cm^{-2}	E_1 meV	E_2 meV	E_3 meV	E_F meV
2,81	1,79	0,67	0,06	2,52	78,5	122,9	147,3	149,7
4,00	2,32	1,07	0,33	3,72	84,1	134,2	163,6	176,7

Apesar de termos utilizado $N_{Si} = n_s = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, encontramos apenas $2,52 \times 10^{12} \text{ elétrons/cm}^2$ na região ativa. Uma parte destes elétrons ($n_{sup} = 0,23 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) foi capturada pelos estados de superfície, e uma pequena quantidade ($N_A^- = 0,05 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) foi capturada pelas impurezas aceitadoras residuais. Quando fizemos os cálculos utilizando $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, os valores das concentrações das impurezas capturadas pelos estados de superfície e pelas impurezas residuais permaneceram constantes uma vez que a concentração de carbono e o valor do potencial de superfície foram mantidos fixos. Ou seja, ao fixarmos V_s , fixamos a quantidade de carga que é deslocada para a superfície livre da cobertura. O mesmo acontece quando fixamos a concentração de carbono.

Modelo dos aglomerados de silício

Antes da iluminação

$$N_{\text{Si}} = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$$

Depois da iluminação

$$N_{\text{Si}} = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$$

Figura 4.16 – Representação do modelo dos aglomerados de silício, antes e depois da iluminação.

Um outro fato que deve ser comentado é que não conseguimos reproduzir os dados experimentais das ocupações das sub-bandas mesmo que utilizássemos valores maiores para a concentração de átomos de silício e para a concentração eletrônica inicial, por exemplo, $N_{Si} = n_S = 3,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($= 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} + 0,24 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} + 0,05 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Variamos os parâmetros do cálculo de muitas maneiras e observamos que, mesmo que conseguíssemos obter a concentração da primeira sub-banda com um valor bem próximo ao experimental, a população da segunda sub-banda era sempre muito inferior à determinada pelas medidas de SdH. Depois de muitas tentativas para a amostra **D20**, repetimos o mesmo procedimento de cálculo para as outras amostras e constatamos que era possível descrever corretamente a ocupação das sub-bandas. Acreditamos que a descrição ruim da estrutura eletrônica da amostra **D20** está relacionada com o fenômeno da segregação de índio, que ocorre durante o crescimento do composto ternário de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Trabalhos experimentais demonstram que, durante o crescimento destes compostos, os átomos de índio tendem a segregar para o topo da superfície das camadas epitaxiais e são incorporados no GaAs numa razão de apenas 20% por monocamada de GaAs depositada.^[108] A segregação pode atingir até 20 Å, ou seja, aproximadamente 7 monocamadas de GaAs podem conter átomos de índio. O efeito da segregação no perfil de potencial das interfaces do poço quântico de InGaAs não foi levado em consideração nos cálculos que aqui apresentamos. Na estrutura da amostra **D20**, a extensão da região de segregação corresponde à própria largura da camada de espaçamento. Acreditamos que é o efeito de segregação que não nos permite descrever corretamente a estrutura eletrônica da amostra **D20** pois, nesta amostra, a camada dos átomos dopantes de silício (camada- δ) encontra-se muito próxima da região de segregação. Nas outras amostras, obtivemos melhores resultados provavelmente devido ao maior distanciamento do plano- δ em relação à camada de segregação.

Vamos verificar, agora, o que acontece com as distribuições eletrônicas de carga em função da iluminação da amostra. Estes resultados, que serão apresentados na **Tabela 4.6** e representados na **Figura 4.17**, fornecem subsídios para entendermos o comportamento das mobilidades eletrônicas durante o processo de iluminação da amostra. Antes porém, vamos explicar o tipo de informação que apresentaremos nesta tabela.

Cálculos teóricos realizados por Henriques^[109] demonstram que existe uma forte correlação entre a mobilidade quântica e a integral de sobreposição (ou recobrimento) da função de onda eletrônica com a função que descreve a distribuição espacial dos átomos dopantes ($g_d(z)$) na direção de crescimento (z). Henriques observou que, quando o valor da integral de recobrimento cresce, a mobilidade da sub-banda decresce, ou seja,

$$(\mu_{qi})^{-1} \propto \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_i(z)|^2 g_d(z) dz \quad (4.1)$$

onde ψ_i é a função envelope da i -ésima sub-banda eletrônica e g_d é a função que descreve o perfil da distribuição dos átomos dopantes na direção de crescimento. Henriques obteve resultados semelhantes utilizando perfis de distribuição gaussianos ou

retangulares. Para analisar o comportamento das distribuições eletrônicas em nosso trabalho, utilizamos a distribuição retangular proposta por Henriques:^[109]

$$g_d(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } z > W_d/2 \\ 1/W_d & \text{se } -W_d/2 < z < W_d/2 \\ 0 & \text{se } z < -W_d/2 \end{cases} \quad (4.2)$$

onde W_d é a largura da distribuição dos dopantes. Uma vez que, durante o processo de iluminação da amostra, a largura da distribuição dos dopantes permanece constante, a expressão (4.1) pode ser reescrita como:

$$(\mu_{qi})^{-1} \propto \frac{1}{W_d} \int_{-W_d/2}^{W_d/2} |\psi_i(z)|^2 dz \quad (4.3)$$

Portanto, em primeira aproximação, podemos avaliar a integral da função de onda eletrônica no intervalo referente à largura da distribuição dos dopantes para obtermos informações sobre a mobilidade da sub-banda. Na **Tabela 4.6** apresentamos os valores destas integrais. Nesta tabela, a largura da distribuição dos dopantes está apresentada nos limites da integral de sobreposição.

O aumento da concentração de centros ativos na região da dopagem planar acarreta um aumento na profundidade do poço delta (aproximadamente 50% de sua profundidade inicial) e desloca as funções de distribuição eletrônicas. Os resultados dos cálculos autoconsistentes mostram que, antes de iluminarmos a amostra, apenas 28%* da função de distribuição eletrônica da primeira sub-banda encontra-se dentro do

*Esta porcentagem foi calculada como: $\% = \frac{\int_{-D}^D |\psi_i|^2 dz}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_i|^2 dz}$ onde D é a largura da camada de espaçamento.

Figura 4.17 – Perfil de potencial da BC e densidades de probabilidade eletrônicas em função da fotoativação dos átomos de silício no plano- δ . $N_{Si} = n_S = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ descreve o sistema antes do processo de iluminação. $N_{Si} = n_S = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ simula a estrutura depois de iluminada.

Tabela 4.6 – Valor da integral de sobreposição em função da iluminação da amostra, de acordo com o modelo dos aglomerados de silício. Na última coluna fornecemos o valor do deslocamento espacial do máximo local da distribuição eletrônica em relação ao plano- δ . Indicamos, também, se a distribuição aproxima-se ou afasta-se do plano dos átomos dopantes.

Sub-banda	$T_{\text{illum}}(\text{s})$	$\int_{-10}^{+10} \psi_i ^2 dz$	Deslocamento (Å)
1	0	0,12	7 (aprox.)
	1240	0,17	
2	0	0,09	4 (afast.)
	1240	0,07	
3	0	0,01	6 (aprox.)
	1240	0,02	

poço- δ . Em $T_{\text{ilum}} = 1240$ s, 41% desta função encontra-se dentro do poço- δ . Além disso, ocorre um deslocamento espacial ($7 \text{ \AA}$) do máximo da distribuição em direção ao plano dos dopantes. Estes dois fatores, o aumento da função de distribuição eletrônica dentro do poço- δ e uma maior localização da função de onda do estado fundamental nas proximidades dos íons de silício, causam um aumento de 42% no valor da integral de recobrimento e, de acordo com a **expressão 4.3**, um decréscimo da mobilidade dos portadores deste estado, o que concorda com o comportamento experimental observado (veja a **Figura 4.9**). Estas quantificações para o estado fundamental estão representadas na **Figura 4.18**.

A função de distribuição da segunda sub-banda tem dois máximos locais: o primeiro, localizado nas proximidades do plano dos átomos dopantes; o segundo, localizado dentro do poço de InGaAs. Durante o processo de iluminação, aumenta (6%) a porcentagem da função de distribuição que ocupa a região do poço- δ . O primeiro máximo local (que se encontrava localizado nas proximidades do plano dos átomos dopantes) desloca-se para mais longe ($4 \text{ \AA}$) dos centros espalhadores coulombianos (íons de Si), enquanto que o outro máximo local desloca-se $21 \text{ \AA}$ em direção ao plano- δ . Como podemos observar na **Tabela 4.6**, o deslocamento da função de distribuição eletrônica é responsável por um decréscimo de 22% no valor da integral de sobreposição. Este decréscimo no valor da integral de sobreposição pode contribuir para o aumento da mobilidade da sub-banda, de acordo com o comportamento experimental observado. Apesar da aproximação do segundo máximo ($21 \text{ \AA}$) ser maior do que o afastamento do primeiro ($4 \text{ \AA}$), este último se encontra muito mais próximo dos centros espalhadores e pode determinar o comportamento da mobilidade dos portadores desta sub-banda.

Além da integral de recobrimento, devemos avaliar o que ocorre com a velocidade dos portadores no nível de Fermi. Para todas as sub-bandas, ocorre um aumento da velocidade dos portadores no nível de Fermi o que implicaria em um aumento da mobilidade dos elétrons em todas as sub-bandas. Desta forma, tanto o aumento de v_F quanto o decréscimo da integral de recobrimento contribuem para o aumento da mobilidade da segunda sub-banda. Entretanto, quando o estado eletrônico é fortemente localizado nas proximidades dos centros espalhadores, como é o caso do estado fundamental, a mobilidade será majoritariamente determinada pelo comportamento da integral de sobreposição. É por este motivo que observamos um decréscimo na mobilidade da primeira sub-banda em função da iluminação da amostra.

Portanto, de acordo com os resultados destas simulações, concluímos que o modelo dos aglomerados de silício pode dar origem ao efeito da fotocondutividade persistente observado na amostra **D20**.

Figura 4.18 – Deslocamento dos máximos dos picos, aumento do entrelaçamento das distribuições eletrônicas com a região de dopagem (42%), e aumento da porcentagem da distribuição eletrônica no poço δ (13%), entre as situações antes e depois da iluminação, para o estado fundamental da amostra D20.

c) Variando o nível de Fermi na superfície livre da cobertura (modelo dos estados de superfície)

Nestes cálculos utilizamos $V_s = 750$ meV para simular a estrutura eletrônica do sistema no *instante inicial* (antes de iluminar a amostra), e $V_s = 180$ meV para simulá-la no final do processo de iluminação. De nossos estudos sabemos que quanto maior o valor de V_s , maior será a quantidade de carga transferida da região ativa para a camada de cobertura da amostra. Se adotarmos a hipótese que, no *instante inicial*, os elétrons da região ativa estão armadilhados nos estados de superfície, devemos utilizar um alto valor para V_s (por isto adotamos o valor de 750 meV). Por outro lado, se durante o processo de iluminação estes elétrons forem *devolvidos* para a região ativa, devemos diminuir o valor deste parâmetro em nossas simulações. Na **Figura 4.19** representamos esquematicamente as características principais deste modelo (antes e depois da iluminação). Como anteriormente, utilizamos $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Todos os demais parâmetros foram mantidos fixos. Nas **Tabelas 4.7 e 4.8** apresentamos os resultados destas simulações.

Tabela 4.7 – Estudo sobre a influência dos estados de superfície nas energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra **D20**, para dois diferentes valores de V_s . O valor $V_s = 180$ meV ($V_s = 750$ meV) simula a estrutura eletrônica do sistema no instante $T_{\text{ilum}} = 1240$ s ($T_{\text{ilum}} = 0$ s). A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a **Figura 4.20**).

V_s (meV)	T_{ilum} (s)	n_1 10^{12} cm^{-2}	n_2 10^{12} cm^{-2}	n_3 10^{12} cm^{-2}	n_s 10^{12} cm^{-2}	E_1 meV	E_2 meV	E_3 meV	E_F meV
750	0	2,18	0,82	---	3,00	84,9	139,2	---	171,8
180	1240	2,32	1,07	0,33	3,72	84,1	134,2	163,6	176,7

Os resultados teóricos para $T_{\text{ilum}} = 0$ s fornecem um valor maior para a concentração do 2DEG ($n_s = 3,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) do que aquele determinado nas medidas de SdH ($n_{\text{SdH}} = 2,81 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Este valor superestimado da concentração pode ser decorrência do valor de V_s utilizado nas simulações. Como dissemos anteriormente, quanto maior V_s , maior será a quantidade de carga deslocada para a superfície. Para $T_{\text{ilum}} = 0$ s, os cálculos mostram que $0,95 \times 10^{12}$ elétrons/ cm^2 foram capturados nos estados de superfície. Quando abaixamos o valor de V_s até 180 meV, devolvemos para a região ativa da amostra $0,72 \times 10^{12}$ portadores/ cm^2 . De acordo com os nossos dados experimentais, deveríamos devolver à região ativa $1,19 \times 10^{12}$ portadores/ cm^2 . Isto poderia ser obtido diminuindo-se ainda mais o valor de V_s . Entretanto, não foi possível realizar estudos para valores de V_s menores do que 180 meV pois os cálculos não convergiram.

Modelo dos estados de superfície

Antes da iluminação

$$V_s = 750 \text{ meV}$$

Depois da iluminação

$$V_s = 180 \text{ meV}$$

Figura 4.19 – Representação do modelo dos estados de superfície, antes e depois da iluminação.

Figura 4.20 – Perfil de potencial da BC e densidades de probabilidade eletrônicas em função da fotoativação dos estados de superfície. $V_s = 750 \text{ meV}$ representa a condição do sistema em $T_{\text{illum}} = 0 \text{ s}$. $V_s = 180 \text{ meV}$ simula a estrutura em $T_{\text{illum}} = 1240 \text{ s}$.

Tabela 4.8 – Valor da integral de sobreposição em função da iluminação da amostra, quando os elétrons são liberados dos estados de superfície. Na última coluna fornecemos o valor do deslocamento espacial do máximo local da distribuição eletrônica em relação ao plano- δ e indicamos também se a distribuição aproxima-se ou afasta-se do plano dos átomos dopantes.

Sub-banda	$T_{\text{illum}}(\text{s})$	$\int_{-10}^{+10} \psi_i ^2 dz$	Deslocamento (Å)
1	0	0,15	2 (aprox.)
	1240	0,17	
2	0	0,11	15 (afast.)
	1240	0,07	
3	0	--	--
	1240	0,02	

iluminação da amostra. Vamos agora analisar o comportamento das distribuições eletrônicas.

Embora os valores teóricos das ocupações das sub-bandas (**Tabela 4.7**) não reproduzam os resultados das medidas de SdH (**Tabela 4.3**), estes resultados teóricos descrevem corretamente a ocupação da terceira sub-banda decorrente da

Assim como no modelo dos aglomerados de silício, ao variarmos V_s ocorre uma transferência da distribuição eletrônica do poço de InGaAs para o poço- δ (**Figura 4.20**). Para o estado fundamental, observa-se um aumento (7%) da porcentagem da função de distribuição que ocupa a região do poço- δ e um deslocamento espacial (2 Å) do máximo desta distribuição em direção ao plano dos dopantes, durante o processo de iluminação da amostra. Para a segunda sub-banda, as modificações em função de V_s são mais expressivas: ocorre um aumento de 13% da função de distribuição dentro do poço- δ , e um deslocamento de 15 Å do máximo local para mais longe dos centros espalhadores no plano de átomos dopantes.

Ainda como no modelo dos aglomerados de silício, os resultados teóricos sobre os deslocamentos espaciais das distribuições eletrônicas em relação ao plano dos átomos dopantes também prevêem corretamente o comportamento experimental das mobilidades das sub-bandas. Mas, como mostraremos posteriormente, para a amostra **D40** este modelo falha na previsão da ocupação das sub-bandas. Desta forma, descartamos este mecanismo como sendo o responsável pelo efeito fotocondutivo em nossa amostra. Entretanto, é interessante ressaltar a importância deste parâmetro (V_s) nas simulações numéricas e no projeto da arquitetura de amostras para dispositivos que dependem da alta concentração de elétrons livres. Os estados de superfície são centros que podem capturar elétrons em grandes concentrações, *esvaziando* a região ativa da amostra. Daí a necessidade de finalizar as amostras com camadas dopadas para evitar este processo de depleção.

d) Variando a concentração de centros profundos (modelo dos centros profundos)

Também realizamos estudos para avaliar a influência dos centros profundos na estrutura eletrônica de nossa amostra. Não temos informações sobre o tipo de centro (aceitador ou doador), sua energia de ativação, ou mesmo a sua densidade volumétrica (N_{CP}). Desta forma, tentamos simular a presença destes centros utilizando as impurezas aceitadoras residuais só que agora em altas concentrações. O intuito era retirar uma quantidade significativa de elétrons da região ativa (a mesma quantidade que é liberada durante o processo de iluminação do sistema) e aprisioná-los nas impurezas residuais.

Observe que utilizando baixas concentrações de impurezas residuais (simulando a presença das impurezas de carbono, como fizemos no início desta seção) observamos que uma fração insignificante de elétrons do 2DEG é capturada na região de depleção (apenas $0,05 \times 10^{12}$ elétrons/cm², quando utilizamos $N_A = 5 \times 10^{14}$ impurezas/cm³).

Agora, queremos que estas mesmas impurezas capturem aproximadamente 1×10^{12} elétrons/cm². Para descrever a estrutura eletrônica do sistema antes de iluminá-lo ($T_{\text{ilum}} = 0$ s), utilizamos para a concentração de centros profundos $N_{\text{CP}} = 1 \times 10^{16}$ cm⁻³ (valor este duas ordens de grandeza maior do que a das impurezas residuais de carbono). Para simular a situação de fotoexcitação dos portadores capturados e o seu posterior *retorno* à região ativa ($T_{\text{ilum}} = 1240$ s), diminuimos a concentração dos centros profundos para $N_{\text{CP}} = 5 \times 10^{14}$ cm⁻³. Na **Figura 4.21** representamos esquematicamente as características principais deste modelo (antes e depois da iluminação). Todos os demais parâmetros do cálculo foram mantidos fixos. Nas **Tabelas 4.9** e **4.10** apresentamos os resultados destes estudos.

Tabela 4.9 – Estudo sobre a influência dos centros profundos (CP) nas energias de confinamento (E_i) e populações das sub-bandas eletrônicas (n_i) para a amostra **D20**. Para descrever a estrutura eletrônica do sistema em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, utilizamos $N_{\text{CP}} = 1 \times 10^{16}$ cm⁻³. Para simular a fotoexcitação dos portadores capturados e o seu posterior *retorno* à região ativa ($T_{\text{ilum}} = 1240$ s) utilizamos $N_{\text{CP}} = 5 \times 10^{14}$ cm⁻³. A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC (veja a **Figura 4.22**).

N_{CP} 10^{14} cm ⁻³	T_{ilum} (s)	n_1 10^{12} cm ⁻²	n_2 10^{12} cm ⁻²	n_3 10^{12} cm ⁻²	n_s 10^{12} cm ⁻²	E_1 meV	E_2 MeV	E_3 meV	E_F meV
100	0	1,91	0,74	0,07	2,72	80,8	127,4	154,2	157,0
5	1240	2,32	1,07	0,33	3,72	84,1	134,2	163,6	176,7

De acordo com nossos cálculos, em $T_{\text{ilum}} = 0$ s, $1,06 \times 10^{12}$ elétrons/cm² estão capturados nos centros profundos quando utilizamos uma concentração de centros profundos $N_{\text{CP}} = 1 \times 10^{16}$ cm⁻³. Após a iluminação da amostra ($T_{\text{ilum}} = 1240$ s), estes elétrons retornam em sua maioria para a região ativa. Esta simulação teórica está em ótima concordância com o resultado experimental, apesar da ocupação de cada sub-banda diferir daquelas obtidas por SdH. Como já comentamos, acreditamos que esta discrepância tem sua origem no efeito da segregação dos átomos de índio.

Os resultados de nossas simulações indicam que todos os modelos aqui analisados (aglomerados de silício, estados de superfície e centros profundos) apresentam resultados semelhantes quanto às ocupações das sub-bandas e descrevem corretamente o comportamento experimental das mobilidades. Entretanto, a seguir, veremos que o modelo dos estados de superfície não consegue descrever a ocupação experimental das sub-bandas para a amostra **D40**. Mostraremos também que, para esta amostra, os outros dois modelos prevêm com excelente concordância a ocupação das sub-bandas.

Antes da iluminação

$$N_{CP} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

Depois da iluminação

$$N_{CP} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

Figura 4.21 – Representação do modelo dos centros profundos, antes e depois da iluminação.

Figura 4.22 - Perfil de potencial da BC e densidades de probabilidade eletrônicas em função da concentração dos centros profundos (N_{CP}). Para descrever a estrutura eletrônica do sistema em $T_{ilum} = 0$ s, utilizamos $N_{CP} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Para simular a fotoexcitação dos portadores capturados e o seu posterior *retorno* à região ativa ($T_{ilum} = 1240$ s) utilizamos $N_{CP} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Tabela 4.10 – Valor da integral de sobreposição em função da iluminação da amostra, de acordo com o modelo dos centros profundos. Na última coluna fornecemos o valor do deslocamento espacial do máximo local da distribuição eletrônica em relação ao plano- δ . Indicamos, também, se a distribuição aproxima-se ou afasta-se do plano dos átomos dopantes.

Sub-banda	$T_{ilum}(s)$	$\int_{-10}^{+10} \psi_i ^2 dz$	Deslocamento (Å)
1	0	0,15	4 (aprox.)
	1240	0,17	
2	0	0,09	1 (afast.)
	1240	0,07	
3	0	0,02	3 (aprox.)
	1240	0,02	

4.4 – Resultados para a amostra D40

4.4.1 – Medidas de Shubnikov-de Haas

Na **Figura 4.23a**, mostramos os traços de magnetoresistência obtidos nas medidas de SdH, e na **Figura 4.23b** as correspondentes transformadas de Fourier destes traços, para diversos tempos de iluminação da amostra. O procedimento utilizado para a realização destas medidas foi o mesmo que aquele descrito na **seção 4.3.1** para a amostra **D20**. Os resultados de SdH para a amostra **D40** são semelhantes aos da amostra **D20**: a magnetoresistência da amostra diminui em função do tempo de iluminação ($0 \leq T_{\text{ilum}} \leq 800$ s), até atingir um estágio de saturação ($T_{\text{ilum}} > 800$ s). Novamente, estes resultados indicam que existe um efeito persistente, como para a amostra **D20**.

Como dissemos anteriormente, o efeito da fotocondutividade persistente permanece durante dias em nossas amostras. Nos resultados da amostra **D40** existem duas curvas para $T_{\text{ilum}} = 300$ s. Elas foram obtidas da seguinte forma: Após iluminarmos a amostra por 300 s, medimos a magnetoresistência da amostra (que em $B = 0$ T apresentou o valor $R_{xx} = 533 \Omega$). Interrompemos a série de medidas, mas mantivemos a amostra em baixa temperatura. Depois de 27 h, ao retornarmos, medimos novamente a magnetoresistência (que em $B = 0$ T apresentou o valor $R_{xx} = 550 \Omega$). Isto quer dizer que, mesmo depois de 27 horas no escuro, a magnetoresistência praticamente não se alterou, e permaneceu com um valor bem inferior àquele determinado antes de iluminarmos a amostra ($T_{\text{ilum}} = 0$ s, $R_{xx} = 878 \Omega$). Em outras palavras, mesmo depois de 27 h, os elétrons que foram *injetados* na região ativa ainda estavam lá.

Extraímos da **Figura 4.23b** as concentrações das sub-bandas e, utilizando o método da variação do limite inferior da janela Hanning, determinamos as mobilidades quânticas das sub-bandas observadas. Os resultados obtidos estão apresentados na **Figura 4.24** e resumidos na **Tabela 4.11**.

Na **Figura 4.23b**, onde mostramos a transformada de Fourier dos traços de magnetoresistência, observamos a presença de um pico que está relacionado com a ocupação da segunda sub-banda. Além desta sub-banda, durante todo o processo de iluminação da amostra, pode-se observar uma outra estrutura (pico) que pode estar relacionada com a ocupação da primeira sub-banda.

Em geral, a intensidade deste pico é 10 a 20 vezes menor do que a intensidade do pico da segunda sub-banda. Apesar da intensidade deste pico ser dezenas de vezes

Figura 4.23 – (a) Oscilações de SdH e (b) as correspondentes ocupações das sub-bandas determinadas a partir destas oscilações pelo método da transformada de Fourier, para a amostra **D40**. Os diferentes traços são relativos aos diferentes tempos de iluminação da amostra.

menor do que a do pico da segunda sub-banda, pode-se constatar que as mobilidades encontradas através deste pico apresentam um comportamento sistemático (não aleatório, como seria de se esperar se esses picos fossem ocasionados por artefatos de medidas). Este comportamento nos estimula a considerar esse pico como estando relacionado com a primeira sub-banda e a elaborarmos um modelo que explique o seu comportamento em função da iluminação.

Assim como para a amostra **D20**, as sub-bandas (n_1 , n_2) apresentam comportamentos semelhantes em função do tempo de iluminação: suas ocupações aumentam até atingirem a saturação. É este aumento da concentração do 2DEG que é o responsável pelo decréscimo da magnetoresistência da amostra. O aumento da ocupação das sub-bandas acarreta modificações nas mobilidades dos portadores. Enquanto que a

Figura 4.24 – (a) Ocupações das sub-bandas (n_1, n_2) e **(b)** mobilidades quânticas dos portadores (μ_{q1}, μ_{q2}) nestas sub-bandas obtidas nas medidas de SdH em função do tempo de iluminação da amostra.

Tabela 4.11 – Resumo dos resultados das medidas de SdH para a amostra **D40**: populações (n_1 , n_2) e mobilidades quânticas (μ_{q1} , μ_{q2}) em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa. $n_{\text{SdH}} = \sum n_i$.

$T_{\text{ilum}}(\text{s})$	n_1 10^{12}cm^{-2}	n_2 10^{12}cm^{-2}	n_{SdH} 10^{12}cm^{-2}	μ_{q1} $\text{cm}^2/\text{V.s}$	μ_{q2} $\text{cm}^2/\text{V.s}$
0	1,69	1,01	2,70	249	848
2	1,74	1,05	2,79	347	897
10	1,79	1,08	2,87	733	935
50	1,83	1,12	2,95	493	996
100	1,87	1,17	3,04	525	1038
300	1,91	1,27	3,18	536	1076
500	1,91	1,27	3,18	543	1079
800	1,95	1,28	3,23	563	1083
1100	1,99	1,26	3,25	536	1089

mobilidade da segunda sub-banda cresce de forma monotônica durante os instantes iniciais do processo de iluminação, a mobilidade da primeira sub-banda cresce nos primeiros instantes de iluminação ($0 \leq T_{\text{ilum}} \leq 10$ s), tem seu valor reduzido em $T = 50$ s, e a partir deste instante ($T \geq 50$ s) a mobilidade volta a crescer com uma taxa menor do que anteriormente. Para entendermos estes comportamentos das mobilidades das sub-bandas, realizamos algumas simulações numéricas que serão apresentadas na sequência.

4.4.2 - Simulações numéricas

Como anteriormente, realizamos alguns cálculos para simular as modificações na estrutura eletrônica deste sistema, induzidas pela iluminação. Os resultados destas simulações de acordo com o modelo dos aglomerados de silício, dos centros profundos e dos estados de superfície estão apresentados na **Tabela 4.12**. Escolhemos, arbitrariamente, $\Delta z = 20$ Å para todos os cálculos. Os parâmetros relacionados com a arquitetura da amostra, por exemplo, a composição do composto ternário, o *band offset*, a constante dielétrica, e a massa efetiva, foram mantidos constantes em todos os cálculos. Para cada modelo, os parâmetros foram variados adequadamente para simular a situação desejada e reproduzir (da melhor maneira possível) a ocupação experimental das sub-bandas. Na **Figuras 4.25** apresentamos as densidades de probabilidade eletrônicas relativas aos cálculos apresentados na **Tabela 4.12**.

Tabela 4.12 – Resumo dos resultados das simulações numéricas para a amostra **D40**. n_i e E_i indicam a ocupação e a energia de confinamento da i -ésima sub-banda, respectivamente. $n_s = \sum n_i$ é a concentração total do gás de elétrons. n_{sup} indica a concentração dos elétrons capturados nos estados de superfície, e N_A^- indica a concentração dos elétrons capturados pelas impurezas aceitadoras de carbono. $N_{Si} = n_s + n_{sup} + N_A^-$. Na última coluna, apresentamos o valor da integral de superposição. A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC, que em todas as simulações para a amostra **D40** é o fundo do poço de InGaAs. Estes resultados foram obtidos utilizando-se $\Delta z = 20 \text{ \AA}$.

Sub-banda	n_i 10^{12}cm^{-2}	E_i (meV)	$n_s=\sum n_i$ 10^{12}cm^{-2}	n_{sup} 10^{12}cm^{-2}	N_A^- 10^{12}cm^{-2}	E_F (meV)	$\int_{-10}^{+10} \psi_i ^2 dz$
Modelo dos aglomerados de silício (antes da iluminação) Parâmetros das simulações: $N_{Si} = n_s = 3,20 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_S = 250 \text{ meV}$							
1	1,73	64,7	2,89	0,29	0,02	133,7	0,15
2	1,00	93,8					0,08
3	0,16	127,3					0,02
Modelo dos centros profundos (antes da iluminação) Parâmetros das simulações: $N_{Si} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_{CP} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $V_S = 250 \text{ meV}$							
1	1,71	64,9	2,81	0,27	1,02	133,3	0,15
2	1,00	94,7					0,08
3	0,10	129,5					0,03
Modelo dos estados de superfície (antes da iluminação) Parâmetros das simulações: $N_{Si} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_S = 750 \text{ meV}$							
1	1,99	65,1	3,14	0,94	0,02	144,6	0,18
2	1,09	101,2					0,11
3	0,06	142,2					0,01
Resultados depois da iluminação Parâmetros das simulações: $N_{Si} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_S = 250 \text{ meV}$							
1	2,15	61,4	3,80	0,28	0,02	147,2	0,21
2	1,28	96,3					0,05
3	0,37	132,4					0,03

Figura 4.25 – Funções de distribuição eletrônica, para a amostra **D40**, de acordo com (a) o modelo dos aglomerados de silício, (b) com o modelo dos centros profundos e (c) com o modelo dos estados de superfície. A posição do plano dos dopantes ($z = 0$) foi indicada por uma linha tracejada vertical. A BC (da situação iluminada) foi acrescentada às figuras para uma melhor visualização das distribuições eletrônicas na região ativa.

Primeiramente vamos analisar os dados teóricos relacionados com as ocupações das sub-bandas. Podemos verificar que tanto o modelo dos aglomerados como o modelo dos centros profundos descrevem bem as ocupações da 1° e 2° sub-bandas. Os resultados teóricos ainda prevêm a existência de uma terceira sub-banda que não foi observada nas medidas de SdH (possivelmente por causa de sua baixa ocupação e, conseqüentemente, devido à baixa velocidade dos portadores no nível de Fermi). Nas simulações relacionadas com os estados de superfície, não conseguimos reproduzir os resultados experimentais das ocupações. Podemos observar que para o modelo dos estados de superfície, antes da iluminação, as concentrações teóricas das sub-bandas ($n_1 = 1,99 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n_2 = 1,09 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) são maiores do que os valores experimentais ($n_1 = 1,69 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n_2 = 1,01 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Observe que realizamos os cálculos utilizando $N_{Si} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, o que pode superestimar estes valores. Para esclarecer esta dúvida, diminuimos a concentração dos átomos dopantes. Utilizamos $N_{Si} = n_s = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e obtivemos $n_1 = 1,97 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_2 = 1,06 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Ainda, a ocupação da 1° sub-banda continua maior do que o valor experimental. Se diminuirmos ainda mais N_{Si} , acabamos conseguindo descrever a ocupação da 1° sub-banda mas não a ocupação da 2°. Observe que ao utilizarmos $N_{Si} = n_s < 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ estaremos misturando o modelo dos aglomerados + o modelo dos estados de superfície, o que também é uma possibilidade. Verificamos, desta forma, que os modelos dos aglomerados e dos centros profundos descrevem igualmente bem a ocupação das sub-bandas e que o modelo dos estados de superfície não descreve corretamente a ocupação das sub-bandas. Por este motivo, a partir daqui, começaremos a analisar o comportamento dos sistemas apenas segundo os modelos dos aglomerados e dos centros profundos. Como também podemos perceber na **Tabela 4.12** e **Figura 4.25**, estes dois modelos fornecem uma descrição muito semelhante da estrutura eletrônica da amostra **D40**. Realizamos outras simulações e verificamos que isto também acontece para todas as outras amostras analisadas neste trabalho. Não é possível distinguir através desta descrição fenomenológica qual dos dois modelos dá origem ao efeito da fotocondutividade persistente. Dada a semelhança dos resultados teóricos obtidos com estes dois modelos, realizaremos o restante de nossas análises baseando-nos apenas nas informações sobre a estrutura eletrônica provenientes do modelo dos aglomerados de silício.

Vamos agora analisar as informações relacionadas com as mobilidades das sub-bandas. De acordo com os dados da **Tabela 4.12**, podemos verificar que a integral de superposição relacionada com a primeira sub-banda cresce em função da iluminação da amostra, para todos os modelos aqui analisados, o que ocasionaria um decréscimo da mobilidade quântica dos portadores nesta sub-banda, contrariamente ao resultado experimental observado. A **Figura 4.26** representa esquematicamente o deslocamento dos máximos dos picos sofridos pelas funções de onda (antes e depois da iluminação), o entrelaçamento destas funções com a região de dopagem (o entrelaçamento aumentou em 40% com a iluminação), e a porcentagem da função de onda que se deslocou para dentro do poço delta (16%) com a iluminação da amostra. Entretanto, a integral de recobrimento não é o único parâmetro que deve ser considerado na análise, como explicaremos a seguir: A função de distribuição eletrônica do estado fundamental possui dois máximos locais bem definidos (veja a **Figura 4.25**), indicando o início do processo de desacoplamento do poço de InGaAs e do poço- δ . Um dos máximos desta

Figura 4.26 – Deslocamento dos máximos dos picos, aumento do entrelaçamento das distribuições eletrônicas com a região de distribuição dos dopantes (40%) e aumento da porcentagem da distribuição eletrônica no poço delta (16%), entre as situações antes e depois da iluminação, para o estado fundamental da amostra **D40**.

plano dos átomos de silício enquanto que, o outro máximo, localiza-se a uma distância de aproximadamente 50 Å do plano dos átomos dopantes. A pergunta que se impõe neste momento é: devemos analisar o estado fundamental da amostra **D40** como uma função do poço- δ (onde o espalhamento dos elétrons pelos íons de silício determina a mobilidade da sub-banda) ou um estado do poço de InGaAs (onde a velocidade dos elétrons no nível de Fermi é o fator que determina a mobilidade das sub-bandas)?

A resposta a esta pergunta é que devemos considerar em nossas análises não só as variações nas integrais de sobreposição mas também as variações das velocidades dos elétrons no nível de Fermi e das distâncias médias das distribuições eletrônicas em relação à camada dos átomos dopantes, em função da iluminação da amostra. É ainda interessante ressaltar que para uma dada amostra, com várias sub-bandas ocupadas, cada efeito separadamente poderá determinar a mobilidade de cada sub-banda. Podemos ter uma situação onde a função de onda do estado fundamental localize-se predominantemente no poço- δ , a função do primeiro estado excitado localize-se predominantemente no poço de InGaAs, e a do segundo estado excitado seja um estado delocalizado (híbrido) pertencente a ambos os poços simultaneamente. Este é o caso quando ocorre o desacoplamento total dos dois poços. Para a amostra **D40**, temos uma situação intermediária: estamos no início do processo de desacoplamento dos poços e o comportamento da mobilidade do estado fundamental em função da iluminação indica-nos que este estado também deve ser considerado como um estado do poço de InGaAs e não exclusivamente do poço- δ .

A grandeza que fornece a distância média da distribuição eletrônica em relação ao plano dos átomos dopantes pode ser calculada como:

$$z_{\text{médio}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* z \psi \, dz \quad (4.4)$$

onde $z = 0$ indica a posição do plano dos átomos dopantes (veja, por exemplo, na **Figura 4.25**, a escala adotada para descrever o perfil de potencial das estruturas aqui analisadas.)

Outra grandeza relevante neste contexto é a largura da distribuição eletrônica definida como:

$$\Delta\psi = \sqrt{\langle z^2 \rangle - z_{\text{médio}}^2} \quad (4.5)$$

sendo

$$\langle z^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* z^2 \psi dz \quad (4.6)$$

Para analisar o comportamento da mobilidade da amostra **D40** apresentamos na **Tabela 4.13**, os valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas, dos momentos dos portadores no nível de Fermi, das larguras das distribuições e das integrais de recobrimento para duas simulações das condições experimentais: antes e depois da iluminação da amostra. Estes resultados estão relacionados com as informações sobre a estrutura eletrônica da amostra **D40** apresentadas na **Tabela 4.12**.

Os cálculos indicam que as velocidades dos portadores no nível de Fermi das três sub-bandas aumentam em função da iluminação da amostra e, portanto, devem contribuir para o aumento das mobilidades destas sub-bandas. Entretanto, enquanto a distribuição eletrônica da segunda sub-banda afasta-se (8 Å) do plano- δ , a distribuição eletrônica do estado fundamental aproxima-se (15 Å) deste plano (observe os valores de $z_{\text{médio}}$ apresentados na **Tabela 4.13**). Além disso, em virtude do aumento da concentração do 2DEG na região ativa devido à iluminação, verifica-se, também, um maior confinamento dos estados eletrônicos (veja os valores da largura média das distribuições, $\Delta\psi$). Na **Figura 4.27** vemos uma representação esquemática destes valores para o estado fundamental.

Observe que para a primeira sub-banda, a velocidade de Fermi contribui para o aumento da mobilidade enquanto que a aproximação da distribuição aos centros espalhadores contribui para o decréscimo desta mobilidade. Existem portanto, dois fatores competitivos que atuam no comportamento da mobilidade em sentidos contrários. O mecanismo que pode explicar o comportamento da mobilidade do estado fundamental é o seguinte: Nos primeiros instantes de iluminação da amostra quando se observa um aumento expressivo na concentração do 2DEG, o aumento da velocidade dos elétrons no nível de Fermi determina o comportamento da mobilidade. Observa-se, então, no intervalo $0 \leq T_{\text{ilum}} \leq 10$ s um aumento da mobilidade. Em seguida, o deslocamento da distribuição eletrônica em direção ao poço- δ e o aumento da integral de superposição começam a tornar-se significativos e observa-se um decréscimo na mobilidade ($T_{\text{ilum}} = 50$ s). A partir deste instante, a mobilidade continua crescendo indicando que apesar da função distribuição aproximar-se dos centros espalhadores durante o processo de iluminação, é o aumento da velocidade dos portadores no nível de Fermi que determina a mobilidade deste estado. Dito de outra forma, este estado é predominantemente um estado do poço de InGaAs e comporta-se como os estados dos poços quânticos com dopagem modulada *convencional*.

Mas se assim for (o fator velocidade de Fermi equiparar-se ao fator espalhamento na determinação da mobilidade do estado fundamental da amostra **D40**), por quê a equiparação destes fatores também não ocorreu para a amostra **D20**? Porque na amostra **D20** os estados eletrônicos da região ativa estão tão próximos dos íons de silício no plano- δ que o fator de espalhamento coulombiano é realçado em relação ao aumento da velocidade de Fermi, determinando o comportamento da mobilidade.

Figura 4.27 – Relação entre as posições média e as larguras das distribuições eletrônicas antes e depois da iluminação, para o estado fundamental da amostra **D40**.

Tabela 4.13 - Valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas ($z_{\text{médio}}$), das larguras das distribuições ($\Delta\psi$), das integrais de recobrimento ($\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$) e dos momentos dos portadores no nível de Fermi (k_F), para duas simulações das condições experimentais: antes de qualquer iluminação e depois da iluminação da amostra. Estes resultados estão relacionados com as informações apresentadas na **Tabela 4.12** para o modelo dos aglomerados de silício.

Amostra D40 Modelo dos aglomerados de silício					
Parâmetros dos cálculos (antes da iluminação) $N_{\text{Si}} = n_s = 3,20 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $V_s = 250 \text{ meV}$ Parâmetros dos cálculos (depois da iluminação) $N_{\text{Si}} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $V_s = 250 \text{ meV}$					
Sub-banda	Condição experimental	$z_{\text{médio}}(\text{\AA})$	$\Delta\psi(\text{\AA})$	$\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$	k_F $10^6(\text{cm}^{-1})$
1	Antes	-32,6	45,0	0,15	3,30
	Depois	-17,5	40,9	0,21	3,68
2	Antes	-34,1	73,8	0,08	2,51
	Depois	-42,1	68,0	0,05	2,83
3	Antes	-31,9	109,4	0,02	1,00
	Depois	-14,6	107,9	0,03	1,53

Para a segunda sub-banda, tanto o aumento de v_F quanto o maior distanciamento da distribuição eletrônica em relação aos centros espalhadores (e o decréscimo no valor da integral de superposição) contribuem para o aumento da mobilidade desta sub-banda. Embora os cálculos indiquem a existência da terceira sub-banda, não observamos em nossas medidas um pico relacionado com esta sub-banda, possivelmente devido à sua baixa ocupação e velocidade dos portadores no nível de Fermi.

Na **Tabela 4.14** apresentamos os resultados relativos ao modelo dos centros profundos. Podemos constatar que todos os parâmetros que influenciam o comportamento da mobilidade das sub-bandas (embora com valores absolutos ligeiramente diferentes daqueles apresentados na **Tabela 4.13**) também descrevem o mesmo comportamento que o previsto pelo modelo dos aglomerados de silício. Em outras palavras, ambos os modelos descrevem adequadamente tanto as ocupações das sub-bandas quanto o comportamento de suas mobilidades em função da iluminação da amostra.

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3589
ex. 1

Tabela 4.14 – Valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas ($z_{\text{médio}}$), das larguras das distribuições ($\Delta\psi$), das integrais de recobrimento ($\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$) e dos momentos dos portadores no nível de Fermi (k_F), para duas simulações das condições experimentais: antes de qualquer iluminação e depois da iluminação da amostra. Estes resultados estão relacionados com as informações apresentadas na **Tabela 4.12** para o modelo dos centros profundos.

Amostra D40 Modelo dos centros profundos					
Parâmetros dos cálculos (antes da iluminação) $N_{Si} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $V_s = 250 \text{ meV}$, $N_{CP} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ Parâmetros dos cálculos (depois da iluminação) $N_{Si} = n_s = 4,10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $V_s = 250 \text{ meV}$, $N_{CP} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$					
Sub-banda	Condição experimental	$z_{\text{médio}}(\text{\AA})$	$\Delta\psi(\text{\AA})$	$\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$	k_F $10^6(\text{cm}^{-1})$
1	Antes	-30,7	44,5	0,15	3,28
	Depois	-17,5	40,9	0,21	3,68
2	Antes	-32,6	72,5	0,08	2,46
	Depois	-42,1	68,0	0,05	2,83
3	Antes	-23,2	108,6	0,03	0,77
	Depois	-14,6	107,9	0,03	1,53

4.5 – Resultados para a amostra D100

Na **Figura 4.28** mostramos os traços de magnetoresistência e as correspondentes transformadas de Fourier, para os diversos tempos de iluminação da amostra **D100**. Como as outras amostras, esta também apresentou um efeito fotocondutivo persistente que se manifestou através de um pequeno acréscimo na concentração do 2DEG e alterações na mobilidade quântica da sub-banda observada. Utilizando o procedimento já descrito anteriormente, determinamos através das medidas de SdH as concentrações das sub-bandas e as suas respectivas mobilidades quânticas. Os resultados obtidos estão apresentados na **Figura 4.29** e resumidos na **Tabela 4.15**.

Tabela 4.15 – Resumo dos resultados das medidas de SdH para a amostra **D100**: população (n_2) e mobilidade quântica (μ_{q2}) dos portadores na segunda sub-banda, em função do tempo de exposição da amostra à radiação.

$T_{\text{ilum}}(\text{s})$	Harmônico 10^{12} cm^{-2}	n_2 10^{12} cm^{-2}	μ_{q2} $\text{cm}^2/\text{V.s}$
0	1,23	0,51	1829
10	1,34	0,66	2106
50	1,43	0,71	3240
100	1,49	0,74	4021
200	1,49	0,74	4367
500	1,49	0,74	4664
800	1,49	0,74	4656
1100	1,49	0,74	4656
Ilum.	1,50	0,74	4992

Observamos nas FFTs apresentadas na **Figura 4.28b** um pico, de baixa intensidade, em torno de $1,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. A concentração relacionada com este pico é sempre aproximadamente o dobro da concentração associada com o pico de maior intensidade. Este pico de baixa intensidade é o primeiro harmônico do pico de alta intensidade. Portanto, para a amostra **D100** estamos observando uma única sub-banda em nossas medidas de SdH. Como mostraremos nas simulações numéricas em função da largura da camada de espaçamento (**Seção 4.6**), para uma espessura da camada de espaçamento igual a 100 Å, os dois poços estão praticamente desacoplados. Temos um estado fundamental fortemente localizado no poço- δ , um estado fortemente localizado no poço de InGaAs, e um terceiro estado eletrônico que é compartilhado por ambos os poços. Devido à forte localização do estado fundamental no poço- δ e, conseqüentemente, devido à baixa mobilidade dos portadores neste estado, não foi possível detectar as oscilações relacionadas com esta sub-banda. Resta-nos, ainda, decidir se estamos observando a segunda ou a terceira sub-banda.

Figura 4.28 – (a) Oscilações de SdH e (b) as correspondentes concentrações de portadores determinadas a partir destas oscilações, pelo método da transformada de Fourier, para a amostra **D100**. Os diferentes traços são relativos aos diferentes tempos de iluminação da amostra

Figura 4.29 – Ocupação (n_2) e mobilidade quântica (μ_{q2}) dos portadores na segunda sub-banda obtidas nas medidas de SdH em função do tempo de iluminação da amostra **D100**. Os círculos (losangos) indicam medidas na ausência (na presença contínua) de iluminação.

Os portadores da segunda sub-banda têm um alto valor de v_F (relativamente aos da 3ª sub-banda) e a distribuição eletrônica deste estado encontra-se dentro do poço de InGaAs (que está muito longe dos centros espalhadores no poço- δ). Estes dois fatores contribuem para uma boa mobilidade dos portadores da 2ª sub-banda. Já o terceiro estado, apesar de bem delocalizado, tem baixo valor de v_F e sua distribuição eletrônica encontra-se espalhada por todo o poço- δ . Por estes motivos acreditamos que estamos observando apenas as oscilações relacionadas com a segunda e não com a terceira sub-banda. Além disso, como mostraremos a seguir, as simulações numéricas que tentam reproduzir as ocupações obtidas experimentalmente para esta amostra não indicam a existência de uma terceira sub-banda.

Como anteriormente, realizamos cálculos para simular as modificações na estrutura eletrônica deste sistema, induzidas pela iluminação. Os resultados para o modelo dos aglomerados de silício estão apresentados nas Tabelas 4.16 e 4.17 e na Figura 4.30. Podemos verificar que, com o aumento da concentração de elétrons na região ativa, além do aumento da velocidade dos elétrons no nível de Fermi, a distribuição eletrônica da segunda sub-banda distancia-se dos íons de silício, o que resulta no aumento da mobilidade dos portadores desta sub-banda.

Para que conseguíssemos reproduzir o valor experimental da ocupação da segunda sub-banda no final do processo de iluminação da amostra, foi necessário realizar o cálculo autoconsistente com uma concentração de átomos de silício menor ($N_{Si} = n_S = 3,52 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) do que o valor nominal dos átomos dopantes. Não temos uma explicação definitiva para este fato, mas nossos estudos indicam que, à medida que aumentamos a espessura da camada de espaçamento, uma maior quantidade de carga é deslocada para a superfície e uma maior quantidade de elétrons permanece armadilhada nos aglomerados de silício.

Realizamos também cálculos autoconsistentes baseados no modelo dos centros profundos. Assim como para as outras amostras, os resultados mostraram-se muito semelhantes aos dos aglomerados moleculares. Conseguimos reproduzir os resultados experimentais da ocupação da segunda sub-banda (antes da iluminação da amostra) utilizando uma concentração de centros profundos ligeiramente menor ($0,95 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) do que nos cálculos anteriores. Como no modelo dos aglomerados moleculares, uma quantidade significativa de elétrons livres teve que ser transferida para a superfície livre da amostra (utilizamos no cálculo $V_S = 750 \text{ meV}$). Este resultado também reforça a hipótese que com o aumento de D , o equilíbrio eletrostático do sistema é atingido com uma maior transferência de carga para a superfície livre da estrutura.

Tabela 4.16 – Resumo dos resultados das simulações numéricas para a amostra **D100**, segundo o modelo dos aglomerados de silício. As definições das grandezas mostradas nesta tabela são as mesmas que aquelas apresentadas na **Tabela 4.12**. A referência da escala de energia é o ponto mais baixo da BC, que para esta amostra é o fundo do poço- δ . Estes resultados foram obtidos utilizando-se $\Delta z = 20 \text{ \AA}$.

Sub-banda	n_i 10^{12}cm^{-2}	E_i (meV)	$n_s=\sum n_i$ 10^{12}cm^{-2}	n_{sup} 10^{12}cm^{-2}	N_A^- 10^{12}cm^{-2}	E_F (meV)
Modelo dos aglomerados de silício (antes da iluminação)						
Parâmetros das simulações: $N_{Si} = n_s = 2,28 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_S = 750 \text{ meV}$						
1	0,75	47,7	1,26	0,97	0,05	77,8
2	0,51	57,4				
Resultados na presença de iluminação						
Parâmetros das simulações: $N_{Si} = n_s = 3,52 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_S = 750 \text{ meV}$						
1	1,71	58,5	2,45	1,02	0,05	126,6
2	0,74	97,0				

Tabela 4.17 – Valores das distâncias médias das distribuições eletrônicas ($z_{\text{médio}}$), das larguras das distribuições ($\Delta\psi$), das integrais de recobrimento ($\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$) e dos momentos dos portadores no nível de Fermi (k_F), para duas simulações das condições experimentais: antes de qualquer iluminação e depois da iluminação da amostra.

Amostra D100 Modelo dos aglomerados de silício					
Parâmetros dos cálculos (antes da iluminação) $N_{Si} = n_s = 2,28 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_s = 750 \text{ meV}$					
Parâmetros dos cálculos (depois da iluminação) $N_{Si} = n_s = 3,52 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $V_s = 750 \text{ meV}$					
Sub-banda	Condição experimental	$z_{\text{médio}}(\text{\AA})$	$\Delta\psi(\text{\AA})$	$\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$	k_F $10^6(\text{cm}^{-1})$
1	Antes	-31,0	59,2	0,21	2,17
	Depois	-2,0	29,4	0,30	3,27
2	Antes	-119,8	68,7	0,06	1,79
	Depois	-133,3	44,8	0,01	2,16

Figura 4.30 – Funções de distribuição eletrônicas, para a amostra **D100**, de acordo com o modelo dos aglomerados de silício. A posição do plano dos dopantes ($z = 0$) foi indicada por uma linha tracejada vertical. A BC (para a situação iluminada) foi acrescentada para uma melhor visualização das distribuições eletrônicas na região ativa.

4.6 - Simulações numéricas em função da largura da camada de espaçamento **D**

Continuando a apresentação deste trabalho, faremos uma descrição teórica geral da estrutura eletrônica dos sistemas aqui analisados, sem nos preocuparmos com o efeito da fotocondutividade. Para isto, realizamos cálculos nos quais todos os parâmetros foram mantidos fixos e variamos apenas a espessura da camada de espaçamento **D**. Os parâmetros relacionados com a arquitetura das amostras são os mesmos que os descritos na página 68, mas utilizamos $V_s = 500$ meV. Os resultados destas simulações estão apresentados na **Figura 4.31**. Como descrevemos anteriormente, o estado fundamental da amostra **D20** está confinado predominantemente no poço de InGaAs. Quando a espessura da camada de espaçamento aumenta para 40 Å este estado apresenta dois máximos locais bem definidos caracterizando perfeitamente um estado híbrido (onde a função de onda divide-se igualmente entre o poço- δ e o poço de InGaAs). Para a estrutura **D70** observa-se um forte desacoplamento dos dois poços: O estado fundamental é um estado do poço- δ , o primeiro estado excitado é um estado do poço de InGaAs e o segundo estado excitado é híbrido, pertencendo a ambos os poços simultaneamente. Quando o espaçamento é aumentado para 100 Å, a densidade eletrônica da terceira sub-banda concentra-se ainda mais no poço- δ . Observe também que em função do aumento da espessura da camada de espaçamento, o poço- δ torna-se mais e mais profundo. Para a estrutura **D20**, o poço- δ é menos profundo que o poço de InGaAs. Para a amostra **D40**, ambos os poços têm praticamente a mesma profundidade. Para a estrutura **D70**, já ocorre uma inversão: o poço- δ é mais profundo que o poço de InGaAs e o estado fundamental passa a ser predominantemente um estado do poço- δ . Temos nesta situação um desacoplamento quase total dos dois poços (observe que a função do primeiro estado excitado tem um nó, indicando que os poços ainda não estão completamente desacoplados). A profundidade do poço- δ aumenta ainda mais quando o espaçamento é aumentado. Este aprofundamento do poço- δ está relacionado com o processo de desacoplamento do poço- δ e do poço de InGaAs. Com o aumento da espessura da camada de espaçamento, ocorre uma transferência efetiva de elétrons para o poço de InGaAs, que passam a participar menos efetivamente na blindagem eletrostática dos íons de Si na camada delta. Isto faz com que a profundidade do poço- δ cresça em função de **D** (mesmo que a quantidade de carga transferida diminua com **D**). Este é o comportamento teórico geral destas estruturas.

Em seguida, apresentaremos um resumo dos dados experimentais e teóricos obtidos para as diferentes amostras e faremos uma comparação entre elas.

Figura 4.31 – Perfil da banda de condução (BC), energia de Fermi (E_F), níveis de confinamento e as respectivas densidades de probabilidade eletrônicas (ϕ_{ei}) para estruturas δ -MDQWs com diferentes espessuras da camada de espaçamento **D**. Nestes cálculos utilizamos $N_{Si} = n_S = 4,00 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_A = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ e $V_S = 500 \text{ meV}$.

4.7 – Resumo e comparação entre as amostras

Para facilitar a comparação entre os resultados obtidos para as diversas amostras do conjunto analisado (**D20**, **D40** e **D100**), fizemos uma figura onde os resultados são apresentados lado a lado. Na **Figura 4.32** reapresentamos os traços das oscilações de SdH, e as respectivas FFTs desses traços. Na **Tabela 4.29** estão resumidos todos os valores experimentais extraídos destas figuras.

As magnetoresistências de todas as amostras apresentaram o mesmo comportamento: decresceram com o T_{ilum} até atingirem a saturação. Esse decréscimo da magnetoresistência representa o efeito fotocondutivo que persistiu por dias em todas as amostras. O responsável por esse efeito foi o aumento da concentração do 2DEG na região ativa de todas as heteroestruturas. A variação da magnetoresistência das amostras (em baixo campo, em função do tempo de iluminação) foi quantificada na **Figura 4.33**. Observa-se nesta figura que a resistividade da amostra **D100** é menor do que a das outras duas amostras por causa do desacoplamento do poço de InGaAs e do poço- δ . Na amostra **D100**, a função de distribuição eletrônica ϕ_{e2} encontra-se predominantemente dentro do poço de InGaAs o que lhe atribui o menor valor de resistividade e as melhores propriedades condutivas.

As amostras ainda apresentaram um efeito fotocondutivo de curta duração, presente apenas com iluminação contínua, que desaparecia logo que a luz era desligada. Esse efeito fotocondutivo não persistente foi relacionado à fotoexcitação de pares elétron-buraco e ao processo de neutralização das impurezas residuais de carbono.

Estado fundamental antes do processo de iluminação

Observamos na **Tabela 4.18** que a mobilidade do estado fundamental da amostra **D20** é maior do que a da amostra **D40**, antes do início do processo de iluminação. Este resultado pode ser compreendido ao analisarmos os resultados dos cálculos autoconsistentes apresentados na **Tabela 4.19**. Nesta tabela constatamos que a distância média da distribuição eletrônica do estado fundamental diminui com o aumento de **D**:

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -37,8 \text{ \AA}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -32,6 \text{ \AA}$
- para $D = 100 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -31,0 \text{ \AA}$

Este decréscimo da distância média da distribuição em função de **D**, é responsável por uma maior integral de superposição da função eletrônica do estado fundamental com os centros espalhadores no plano- δ e, conseqüentemente, por um decréscimo da

Figura 4.32 - Traços das oscilações de SdH e as respectivas FFTs para as amostras D20, D40 e D100.

Figura 4.33 – Variação da magnetoresistência das amostras em $B = 0$ T, em função do T_{illum} .

mobilidade dos portadores no estado fundamental das diferentes amostras quando aumentamos a espessura da camada de espaçamento. No início do processo de iluminação das amostras obtivemos:

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $\mu_{q1} = 995 \text{ cm}^2/\text{V.s}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $\mu_{q1} = 249 \text{ cm}^2/\text{V.s}$

Observe também na **Tabela 4.19** que, para esta condição experimental (antes do processo de iluminação das amostras), os valores de k_F para o estado fundamental também decrescem com o aumento de D :

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $k_F = 3,35 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $k_F = 3,30 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$
- para $D = 100 \text{ \AA}$ $k_F = 2,17 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$

e este comportamento também atua no sentido de diminuir a mobilidade dos portadores do estado fundamental com o aumento de D . Não foi possível detectar as oscilações relacionadas com o estado fundamental da amostra **D100** por causa da combinação destes dois fatores: o estado fundamental desta amostra é o que está mais próximo dos centros espalhadores e seus elétrons no nível de Fermi têm a menor velocidade v_F (quando comparada com as velocidades dos portadores das amostras **D20** e **D40**).

Tabela 4.18 - Resumo dos resultados das medidas SdH para todas as amostras analisadas neste trabalho: população (n_i) da i -ésima sub-banda e respectiva mobilidade quântica (μ_{qi}), em função do tempo de exposição da amostra à radiação luminosa.

Amostra	Γ_{lum} (s)	n_1 10^{12}cm^{-2}	n_2 10^{12}cm^{-2}	n_3 10^{12}cm^{-2}	n_{sdH} 10^{12}cm^{-2}	μ_{q1} $\text{cm}^2/\text{V.s}$	μ_{q2} $\text{cm}^2/\text{V.s}$
D20	0	1,81	1,00	---	2,81	---	---
	20	1,85	1,08	---	2,93	995	546
	40	1,94	1,18	---	3,12	556	608
	60	2,02	1,24	---	3,26	408	680
	100	2,05	1,30	---	3,35	353	725
	160	2,04	1,38	---	3,42	367	724
	280	2,05	1,38	0,43	3,86	370	725
	640	2,10	1,42	0,48	4,00	377	786
	1240	2,10	1,42	0,48	4,00	410	789
	Ilum.	2,11	1,46	0,55	4,12	625	865
D40	0	1,69	1,01		2,70	249	848
	2	1,74	1,05		2,79	347	897
	10	1,79	1,08		2,87	733	935
	50	1,83	1,12		2,95	493	996
	100	1,87	1,17		3,04	525	1038
	300	1,91	1,27		3,18	536	1076
	500	1,91	1,27		3,18	543	1079
	800	1,95	1,28		3,23	563	1083
	1100	1,99	1,26		3,25	536	1089
D100	0		0,51		0,51		1829
	10		0,66		0,66		2106
	50		0,71		0,71		3240
	100		0,74		0,74		4021
	200		0,74		0,74		4367
	500		0,74		0,74		4664
	800		0,74		0,74		4656
	1100		0,74		0,74		4656
	Ilum.		0,74		0,74		4992

Tabela 4.19 – Resumo dos resultados das simulações numéricas para todas as amostras, segundo o modelo dos aglomerados moleculares.

Amostra	Sub-Banda	Condição Experimental	$z_{\text{médio}} (\text{\AA})$	$\Delta\psi (\text{\AA})$	$\int_{-10}^{10} \psi_i^* \psi_i dz$	$k_F 10^6 \text{ cm}^{-1}$
D20	1	Antes	-37,8	36,1	0,115	3,35
		Depois	-26,5	34,2	0,174	3,82
	2	Antes	-30,1	77,7	0,085	2,06
		Depois	-23,4	71,5	0,073	2,59
	3	Antes	-12,8	106,3	0,010	0,62
		Depois	-18,3	104,3	0,020	1,43
D40	1	Antes	-32,6	45,0	0,147	3,30
		Depois	-17,5	40,9	0,207	3,68
	2	Antes	-34,1	73,8	0,084	2,51
		Depois	-42,1	68,0	0,052	2,83
	3	Antes	-31,9	109,4	0,019	1,00
		Depois	-14,6	107,9	0,030	1,53
D100	1	Antes	-31,0	59,2	0,213	2,17
		Depois	-2,0	29,4	0,300	3,27
	2	Antes	-119,8	68,7	0,057	1,79
		Depois	-133,3	44,8	0,006	2,16

Estado fundamental depois do processo de iluminação (na saturação)

Durante o processo de iluminação das amostras, as funções de distribuição eletrônicas do estado fundamental de todas as amostras aproximam-se do plano dos átomos dopantes. E, na situação de saturação, temos:

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -26,5 \text{ \AA}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -17,5 \text{ \AA}$
- para $D = 100 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -2,0 \text{ \AA}$,

o que contribuiria para que observássemos um decréscimo da mobilidade dos portadores no estado fundamental com o aumento de **D**. Entretanto encontramos:

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $\mu_{q1} = 410 \text{ cm}^2/\text{V.s}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $\mu_{q1} = 536 \text{ cm}^2/\text{V.s}$,

ou seja, apesar da distribuição eletrônica da amostra **D40** estar mais próxima dos centros espalhadores (quando comparada com a da amostra **D20**), a mobilidade dos seus portadores é maior. Isto é devido ao início do processo de desacoplamento do poço de InGaAs e do poço- δ quando a velocidade dos portadores no nível de Fermi passa a competir com o espalhamento coulombiano na determinação do comportamento da mobilidade do estado fundamental da amostra **D40**. Para a amostra **D20**, assim como para os semicondutores contendo um único plano de átomos dopantes, a mobilidade dos portadores desta sub-banda é predominantemente determinada pela integral de superposição.

Primeiro estado excitado

A função de distribuição eletrônica do primeiro estado excitado (ϕ_{e2}) é híbrida em todas as amostras, como pode ser observado na **Figura 4.34**. Devido ao seu caráter híbrido, a mobilidade dos portadores nesta sub-banda sofre tanto a influência das variações do espalhamento coulombiano quanto das variações da velocidade dos portadores no nível de Fermi em função da iluminação das amostras.

Podemos observar na **Tabela 4.18** um aumento significativo da mobilidade dos portadores no primeiro estado excitado, em função do aumento da espessura da camada de espaçamento. Por exemplo, na condição de saturação obtivemos:

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $\mu_{q2} = 789 \text{ cm}^2/\text{V.s}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $\mu_{q2} = 1089 \text{ cm}^2/\text{V.s}$
- para $D = 100 \text{ \AA}$ $\mu_{q2} = 4656 \text{ cm}^2/\text{V.s}$

Figura 4.34 – Perfil da BC e funções de distribuição eletrônicas dos cálculos que reproduziram as ocupações experimentais das subbandas para as diferentes amostras analisadas neste trabalho.

Figura 4.35 - Ocupações das sub-bandas (n_i) e n_{SdH} ($n_1 + n_2 + n_3$) em função da largura da camada de espaçamento. Os círculos (losangos) correspondem aos valores obtidos nas medidas de SdH (nos cálculos teóricos).

Este expressivo aumento da mobilidade é devido ao desacoplamento dos poços na região ativa e ao maior distanciamento das distribuições eletrônicas ϕ_{e2} em relação ao plano dos átomos dopantes. Para a condição de saturação nossos cálculos autoconsistentes forneceram os seguintes resultados:

- para $D = 20 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -23,4 \text{ \AA}$
- para $D = 40 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -42,1 \text{ \AA}$
- para $D = 100 \text{ \AA}$ $z_{\text{médio}} = -133,3 \text{ \AA}$,

ou seja, o aumento da distância média das distribuições com o aumento de D ocasiona o aumento da mobilidade dos portadores deste estado excitado.

Para finalizarmos a apresentação de nossos resultados, apresentamos na **Figura 4.35** o comportamento da concentração total do 2DEG (n_{SdH}) em função da largura da camada de espaçamento. Como não detectamos o estado fundamental da amostra **D100**, utilizamos o valor teórico para a ocupação desta sub-banda com o propósito de determinarmos a concentração total dos portadores nesta amostra. Podemos observar que a concentração do 2DEG na região ativa decresce com o

aumento do espaçamento **D**. Esta observação reforça novamente a hipótese que com o aumento de **D**, o equilíbrio eletrostático do sistema exige que uma maior quantidade de elétrons livres seja transferida para a cobertura livre das amostras. Esta hipótese é baseada apenas nas análises referentes à amostra **D100**. Em futuro próximo, temos o propósito de investigar esta hipótese utilizando um conjunto maior de amostras.

4.8– Projetos futuros

Para obter uma resposta mais definitiva quanto à hipótese que acabamos de formular, pretendemos investigar vários conjuntos de amostras. Em cada conjunto manteremos **D** fixo e utilizaremos diferentes concentrações de silício nos planos dos átomos dopantes. Com isso pretendemos analisar o equilíbrio eletrostático do sistema no que se refere à quantidade de elétrons transferida para a superfície livre da amostra.

Também investigaremos um conjunto de amostras com diferentes concentrações de dopantes na camada de cobertura. Queremos com isso obter maiores informações sobre a posição do nível de Fermi nesta superfície livre, para este tipo de sistema.

Ainda deveremos realizar experimentos que nos permitam determinar as massas efetivas dos portadores nas diferentes sub-bandas dos poços. Este problema nos apareceu durante o desenvolvimento deste projeto. Como pudemos observar, alguns estados eletrônicos são híbridos e a massa efetiva dos portadores nestes estados é desconhecida. Daí, talvez, a dificuldade de reproduzirmos em nossas simulações todas as ocupações observadas. No programa computacional utilizado para os cálculos consideramos que todos os portadores tinham a mesma massa efetiva, independentemente da localização da função de onda (no poço de InGaAs ou no poço- δ).

Como as medidas de fotoluminescência (PL) e fotoluminescência de excitação (PLE) são realizadas com a incidência de luz sobre a amostra e o efeito da fotocondutividade tem sido observado nestes sistemas, devemos acoplar essas caracterizações ópticas à caracterização elétrica para obtermos informações complementares que nos permitam realizar uma descrição mais completa destes sistemas.

Um outro experimento interessante seria repetir os experimentos aqui realizados iluminando a amostra com radiação de outra frequência (bem menor do que o *gap* do GaAs). Espera-se com isto verificar a presença dos centros profundos.

Conclusões

Neste trabalho investigamos a estrutura eletrônica de poços quânticos de GaAs/InGaAs/GaAs com dopagem planar do tipo n na barreira. Analisamos amostras com arquiteturas semelhantes, exceto pela espessura da camada de espaçamento D . Realizamos medidas de Shubnikov-de Haas para determinar a ocupação das sub-bandas e suas mobilidades quânticas. Estas medidas foram feitas em função do tempo de iluminação das amostras e, em todas elas, observamos efeitos fotocondutivos persistentes, que perduram, pelo menos, por 27 horas. Este efeito fotocondutivo evidenciou-se através de um aumento (às vezes pronunciado) na concentração do gás de elétrons confinado na região ativa das amostras e alterações na mobilidade quântica dos portadores nas sub-bandas ocupadas.

Uma descrição fenomenológica dos comportamentos das mobilidades das sub-bandas do 2DEG em função do tempo de iluminação das amostras foi realizada com o auxílio de cálculos autoconsistentes. Verificamos que os comportamentos das mobilidades das sub-bandas dependem de suas localizações em relação ao plano- δ : se as funções de distribuição eletrônicas estão muito próximas dos átomos dopantes, são as interações dos elétrons do 2DEG com os íons de Si que determinam as mobilidades dos portadores nestes estados; se, por outro lado, as funções localizam-se nas proximidades do poço de InGaAs é o aumento da velocidade dos elétrons no nível de Fermi que determinará o comportamento da mobilidade dos portadores.

Este é um trabalho pioneiro. Não existem na literatura trabalhos sobre a mobilidade quântica dos elétrons de um gás de elétrons bidimensional em função do tempo de exposição da amostra à radiação. Encontramos apenas alguns trabalhos que reportam sobre as mobilidades Hall (que fornece um valor médio da mobilidade dos portadores) dos sistemas em função do tempo de iluminação da amostra. Os resultados provenientes deste tipo de medida nem sempre conseguem fornecer uma descrição realista destes sistemas. As medidas realizadas em nosso trabalho, no entanto, evidenciaram os principais elementos que determinam o comportamento da estrutura eletrônica das heteroestruturas aqui analisadas.

Artigos realizados durante o período de doutoramento:

1. *Effects of thermally activated hole escape mechanism on the optical and electrical properties in p-type Si δ -doped GaAs(311)A layers*, M. Frizzarini, E. C. F. da Silva, A. A. Quivy, A. Cavaleiro, J. R. Leite and E. A. Meneses, Phys. Rev. B **61**, 13923(2000).
2. *Influence of illumination on the electronic structure of a Si δ -doped GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As quantum well*, A. Cavaleiro, E. C. F. da Silva, E. K. Takahashi, A. A. Quivy, J. R. Leite and E. A. Meneses, (submetido ao Phys. Rev. B).
3. *The influence of the spacer thickness on the quantum mobility of a two dimensional electron gas in Si δ -doped GaAs/InGaAs/GaAs quantum wells*, E. C. F. da Silva, A. Cavaleiro, E. K. Takahashi, A. A. Quivy, J. R. Leite and E. A. Meneses, (em fase de preparação, a ser submetido ao Phys. Rev. B).

Referências*

Referências do Capítulo 1

1. *Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors*, L. Esaki e R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
2. *Growth of a GaAs-GaAlAs Superlattice*, L. L. Chang, L. Esaki, W. E. Howard e R. Ludeke, J. Vac. Sci. Technol. **10**, 11 (1973).
3. *New Transport Phenomenon in a Semiconductor Superlattice*, L. Esaki e L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. **33**, 495 (1974).
4. *The Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy*, editado por E. H. C. Parker (Plenum Press, New York, 1985).
5. *Current Status Review and Future Prospects of CBE, MOMBE and GSMBE*, W. T. Tsang, J. Crystal Growth **107**, 960 (1991).
6. J. B. Mullin, S. J. C. Irvine, R. H. Moss, P. N. Robson e D. R. Wight em *Metalorganic Vapor Phase Epitaxy* (North-Holland, Amsterdã, 1994).
7. S. M. Sze em *Physics of Semiconductor Devices* (John Wiley & Sons, Singapura, 1981).

*As referências foram separadas por capítulos. As especificações das referências citadas em mais de um capítulo são apresentadas apenas na seção da primeira citação.

8. Jasprit Singh em *Semiconductor Optoelectronics: Physics and Technology*, editado por George T. Hoffman (McGraw-Hill, Singapura, 1995).
9. *Applications of Multiquantum wells, Selective Doping and Superlattices*, editado por Raymond Dingle, *Semiconductors and Semimetals*, v. 24 (1987).
10. E. F. Schubert em *Delta-Doping of Semiconductors: Electronic, Optical and Structural Properties of Materials and Devices*, *Semiconductors and Semimetals*, editado por Arthur C. Gossard (Academic, New York, 1994), v. 40, p.1.
11. Gerald Bastard em *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Éditions de Physique, Paris, 1988).
12. *The Quantized Hall Effect*, Klaus von Klitzing, *Reviews of Modern Physics* **58**, 519 (1986).
13. *Nobel Lecture: Fractional Quantization*, R. B. Laughlin, *Reviews of Modern Physics* **71**, 863 (1999).
14. *Nobel Lecture: The Fractional Quantum Hall Effect*, Horst L. Störmer, *Reviews of Modern Physics* **71**, 875 (1999).
15. *Nobel Lecture: Interplay of Disorder and Interaction in Two-Dimensional Electron Gas in Intense Magnetic Fields*, Daniel C. Tsui, *Reviews of Modern Physics* **71**, 891 (1999).
16. *Superbright Green InGaN Single-Quantum-Well-Structure Light-Emitting Diodes*, S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, T. Yamada e T. Mukai, *Japan. J. Appl. Phys.* **34**, L1332 (1995).
17. *Nitride-Based Semiconductors for Blue and Green Light-Emitting Devices*, F. A. Ponce e D. P. Bour, *Nature* **386**, 351 (1997).
18. *Electron Mobilities in Modulation-Doped Semiconductor Heterojunction Superlattices*, R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard e W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* **33**, 665 (1978).
19. *Compound-Semiconductor Transistors*, L. F. Eastman, *Physics Today* **39**, 77 (1986).
20. M. Abe, T. Mimura, K. Nishiuchi, A. Shibatami, M. Kobayashi e T. Misugi em *Fundamental Properties of III-V Semiconductor Two-Dimensional Quantized Structures: the Basis for Optical and Electronic Device Applications*, *Semiconductors and Semimetals*, v. 24, 249 (1987).
21. *Frequency and Density Dependent Radiative Recombination Processes in III-V Semiconductor Quantum Wells and Superlattices*, Roberto Cingolani e Klaus

Ploog, *Advances in Physics*, v. 40, 535 (1991). Neste artigo de revisão é apresentado um resumo dos trabalhos teóricos e experimentais mais relevantes sobre heteroestruturas semicondutoras fortemente dopadas, com especial atenção para poços quânticos com dopagem modulada.

22. *Electron Mobilities in Modulation-Doped Semiconductor Heterojunction Superlattices*, R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard e W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* **33**, 665 (1978).
23. *Electron Mobilities Exceeding 10^7 cm²/V.s in Modulation-Doped GaAs*, L. Pfeiffer, H. L. Störmer, K. K. West e K. W. Baldwin, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 1888 (1989).
24. *Self-Consistent Calculations of the Two-Dimensional Electron-Density in Modulation-Doped Superlattices*, V. M. S. Gomes, A. S. Chaves, J. R. Leite e J. M. Worlock, *Phys. Rev. B* **35**, 3984 (1987).
25. *Optical Processes of 2D Electron-Plasma in GaAs/GaAlAs Heterostructures*, A. Pinczuk, Jagdeep Shah, R. C. Miller, A. C. Gossard e W. Wiegmann, *Solid State Commun.* **50**, 735 (1984).
26. *Many-Body Effects in a Modulation-Doped Semiconductor Quantum Well*, C. Delalande, G. Bastard, J. Organasi, J. A. Brum, H. W. Liu e M. Voos, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2690 (1987).
27. *Band-Gap Renormalization in Semiconductor Quantum Wells*, S. Das Sarma, R. Jalabert e S. R. Eric Yang, *Phys. Rev. B* **41**, 8288 (1990).
28. *Carrier-Induced Transition from Excitonic to Free-Carrier-Like Radiative Recombination in a Semiconductor Quantum Well Studied by Magnetoluminescence*, Hisao Yoshimura e Horoyuki Sakaki, *Phys. Rev. B* **39**, 13024 (1989).
29. *Fermi-Edge Singularities from Modulation Doped GaAs Quantum Wells*, S. A. Brown, Jeff F. Young, Z. Wasilewski e P. T. Coleridge, *Phys. Rev. B* **56**, 3937 (1997).
30. *Observation of Many-Body Edge Singularity in Quantum-Well Luminescence*, M. S. Skolnick, J. M. Rorison, K. J. Nash, D. J. Mowbray, P. R. Tapster, S. J. Bass e A. D. Pit, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2130 (1987).
31. *Fermi-Energy-Edge Singularity in Quantum-Wells Containing more than One Occupied Subband*, M. S. Skolnick, D. M. Whittaker, P. E. Simmonds, T. A. Fisher, M. K. Saker, J. M. Rorison, R. S. Smith, P. B. Kirby e C. R. H. White, *Phys. Rev. B* **43**, 7354 (1991).
32. *Strong Effects of Carrier Concentrations on the Fermi-Edge Singularity in Modulation-Doped InP/InGaAs Heterostructures*, I. A. Buyanova, T.

- Lundström, A. V. Buyanov, W. M. Chen, W.G. Bi e C. W. Tu, Phys. Rev. B **55**, 7052 (1997).
33. E. F. Schubert em *Delta-Doping of Semiconductors: Electronic, Optical and Structural Properties of Materials and Devices*, Semiconductors and Semimetals, editado por Arthur C. Gossard (Academic, New York, 1994), v. 40, p.92.
 34. *Silicon and Germanium Doping of Epitaxial Gallium-Arsenide Grown by Trimethylgallium-Arsine Method*, S. J. Bass, J. Cryst. Growth **47**, 613 (1979).
 35. *Complex Free-Carrier Profile Synthesis by Atomic-Plane Doping of MBE GaAs*, C. E. C. Wood, G. M. Metze, J. D. Berry e L. F. Eastman, J. Appl. Phys. **51**, 383 (1980).
 36. *Delta Doping of III-V Compound Semiconductors: Fundamental and Device Applications*, E. F. Schubert, J. Vac. Sci. Technol. A **8**, 2980 (1990).
 37. *Subband Physics for a Realistic Delta-Doping Layer*, A. Zrenner, F. Koch e K. Ploog, Surf. Sci. **196**, 671 (1988).
 38. *Investigation of Silicon-Delta-Doped Gallium-Arsenide Using the Shubnikov-de Haas Effect and Theoretical Modeling*, S. P. Wilks, A. E. Cornish, M. Elliot, D. A. Woolf, D. I. Westwood e R. H. Williams, J. Appl. Phys. **76**, 3583 (1994).
 39. *Lattice Locations of Silicon Atoms in Delta-Doped Layers in GaAs at High Doping Concentrations*, R. C. Newman, M. J. Ashwin, M. R. Fahy, L. Hart, S. N. Holmes, C. Roberts, X. Zhang e J. Wagner, Phys. Rev B **54**, 8769 (1996).
 40. *X-Ray Characterization of Si Delta-Doping in GaAs*, L. Hart, M. R. Fahy, R. C. Newman e P. F. Fewster, Appl. Phys. Lett. **62**, 2218 (1993).
 41. *Photoluminescence of the Two-Dimensional Hole Gas in p-Type Delta-Doped Si Layers*, I. A. Buyanova, W. M. Chen, A. Henry, W. -X. Ni, G. V. Hansson e B. Monemar, Phys. Rev. B **53**, 9587 (1996).
 42. *Spatially Direct Recombinations Observed in Multiple δ -Doped GaAs Layers*, A. Levine, E. C. F. da Silva, L. M. R. Scolfaro, D. Beliaev, A. A. Quivy, R. Enderlein e J. R. Leite, Superlattices and Microstructures **23**, 301 (1998).
 43. *Band-Edge Modifications due to Photogenerated Carriers in Single p-Type δ -Doped GaAs Layers*, A. Levine, E. C. F. da Silva, G. M. Sipahi, A. A. Quivy, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, I. F. L. Dias, E. Lauretto, J. B. B. de Oliveira, E. A. Meneses e A. G. de Oliveira, Phys. Rev. B **59**, 4634 (1999).
 44. *Thomas-Fermi Theory of Delta-Doped Semiconductor Structures: Exact Analytical Results in the High-Density Limit*, L. Ioriatti, Phys. Rev. B **41**, 8340 (1990).

45. *Electronic Properties of Multiple Si Delta Doping in GaAs*, Marcos Degani, J. Appl. Phys. **70**, 4362 (1991).
46. *Two-Dimensional Hole Gas in Acceptor Delta-Doped GaAs*, F. A. Reboredo e C. R. Proetto, Phys. Rev. B **47**, 4655 (1993).
47. *Band Structure of Holes in p-Type δ -Doping Quantum Wells and Superlattices*, G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Solfaro e J. R. Leite, Phys. Rev. B **53**, 9930 (1996).
48. *Density Functional Theory for Holes in Semiconductors*, R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Solfaro e J. R. Leite, Phys. Rev. Lett. **79**, 3712 (1997).
49. *Theory of Luminescence Spectra from δ -Doping Structures: Application to GaAs*, G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Solfaro, J. R. Leite, E. C. F. da Silva e A. Levine, Phys. Rev. B **57**, 9168 (1998).
50. *Raman-Scattering from Electronic Excitations in Periodically Delta-Doped GaAs*, A. C. Maciel, M. Tatham, J. F. Ryan, J. M. Worlock, R. E. Nahory, J. P. Harbison e L. T. Florez, Surface Science **228**, 251 (1990).
51. *Radiative Transitions Associated with Hole Confinement at Si δ -Doped Planes in GaAs*, M. L. Ke, J. S. Rimmer, B. Hamilton, J. H. Evans, M. Missous, K. E. Singer e P. Zalm, Phys. Rev. B **45**, 14114 (1992).
52. *Evidence of a Two-Dimensional to Three-Dimensional Transition in Si δ -Doped GaAs Structures*, C. A. C. Mendonça, F. Plentz, J. B. B. de Oliveira, E. A. Meneses, L. M. R. Solfaro, D. Beliaev, S. M. Shibli e J. R. Leite, Phys. Rev. B **48**, 12316 (1993).
53. *2-Dimensional Hole Gas and Fermi-Edge Singularity in Be Delta-Doped GaAs*, D. Richards, J. Wagner, H. Schneider, G. Hendorfer, M. Maier, A. Fischer e K. Ploog, Phys. Rev. B **47**, 9629 (1993).

Referências do Capítulo 2

54. *Free Electron Distribution on δ -Doped InGaAs/AlGaAs Pseudomorphic High Electron Mobility Transistor Structures*, B. Jogai, P. W. Yu e D. C. Streit, J. Appl. Phys. **75**, 1586 (1994).
55. *Theoretical and Experimental Investigations of the Electronic Structure for Selectively δ -Doped Strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Quantum Wells*, Mao-long Ke, D. Westwood, R. H. Williams e M. J. Godfrey, Phys. Rev. B **51**, 5038 (1995).
56. *State Coupling Effects in GaAs/InGaAs/GaAs Modulation-Doped Quantum Wells*, M. L. F. Abbade, F. Iukawa, J. A. Brum, T. Troster, A. A. Bernussi, R. G. Pereira e G. Borghs, J. Appl. Phys. **80**, 1925 (1996).

57. *The Density Functional Formalism, its Applications and Prospects*, R. O. Jones e O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61**, 689 (1989).
58. *Electronic States of n-Type δ -Doping in GaAs Heterostructures*, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, C. A. C. Mendonça, D. Beliaev, S. M. Shibli, E. C. F. da Silva e E. A. Meneses, Materials Sci. Forum **143-147**, 669 (1994).
59. H. Lee, W. J. Schaff, G. W. Wicks, L. F. Eastman e A. R. Calawa, Inst. Phys. Conf. Ser. **74**, 321 (1985).
60. S. M. Sze em *Physics of Semiconductors Devices* (John Wiley & Sons, New York, 1981), p. 850.
61. *Properties of Strained $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ Superlattices with Various Barrier Thickness*, M. Hovinen, A. Salokatve e H. Asonen, J. Appl. Phys. **69**, 3378 (1991).
62. *The Calculation and the Photoluminescence Characterization of Energy Levels in a Strained $\text{GaAs}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ Quantum Well Heterostructure for the Application of Light-Emitting Real-Space Transfer Devices*, Y. H. Yeh e J. Y. Lee, J. Appl. Phys. **81**, 6921 (1997).
63. L. D. Landau e E. M. Lifshitz em *Quantum Mechanics*, Pergamon Press Ltd. p.50 (1977).
64. *Structure and Stechiometry of (100)-GaAs Surfaces During Molecular-Beam Epitaxy*, J. H. Neave e B. A. Joyce, J. Cryst. Growth **44**, 387 (1978).
65. *Electronic-Properties of Two-Dimensional Systems*, T. Ando, A. B. Fowler e F. Stern, Rev. Modern Physics **54**, 437 (1982).
66. Veja por exemplo J. P. McKelvey em *Solid State and Semiconductor Physics* (Harper & Row, New York, 1966), p. 217.
67. *Explicit Local Exchange-Correlations Potentials*, L. Hedin e B. I. Lundqvist, J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, 2064 (1971).
68. *Electron Energy Levels in $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ Heterojunctions*, Frank Stern e Sankar Das Sarma, Phys. Rev. B **30**, 840 (1984).
69. *Superlattice Band Structure in the Envelope-Function Approximation*, G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981).
70. *Stresses and Strains in Epilayers, Stripes and Quantum Structures of III-V Compound Semiconductors*, S. C. Jain, M. Willander e H. Maes, Semicond. Sci. Technol. **11**, 641 (1996).

71. J. Singh em *Physics of Semiconductors and their Heterostructures* (McGraw-Hill Editions, New York, 1993), caps. 7 e 18.
72. *Band Lineups and Deformation Potentials in the Model-Solid Theory*, C. G. V. Walle, Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
73. *Photoluminescence Study of $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ -GaAs Strained-Layer Superlattices*, H. Kato, N. Iguchi, S. Chicka, M. Nakayama e N. Sano, J. Appl. Phys. **59**, 588 (1986).
74. *Optical and Crystallographic Properties and Impurity Incorporation of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ ($0.44 < x < 0.49$) Grown by Liquid Phase Epitaxy, Vapor Phase Epitaxy, and Metal Organic Chemical Vapor Deposition*, K. H. Goetz, D. Bimberg, H. Jürgensen, J. Selders, A. V. Solomonov, G. F. Glinskii e M. Razeghi, J. Appl. Phys. **54**, 4543 (1983).
75. *Observations and Calculations of the Exciton Binding Energy in (In,Ga)As/GaAs Strained-Quantum-Well Heterostructures*, Karen J. Moore, Geoffrey Duggan, Karl Woodbridge e Christine Roberts, Phys. Rev. B **41**, 1090 (1990).
76. *Optical and Electrical Properties of Selectively Delta-Doped Strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs Quantum Wells*, Mao-long Ke, X. Chen, M. Zervos, R. Nawaz, M. Elliott, D. I. Westwood e P. Blood, J. Appl. Phys. **79**, 2627 (1996).
77. *The Continuing Drama of the Semiconductor Interface*, J. M. Woodall, P. D. Kirchner, J. L. Freeouf, D. T. McInturff, M. R. Melloch e F. H. Pollak, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A **344**, 521 (1993).
78. *Silicon Spreading in δ -Doped GaAs(100): A High-Resolution Electron-Energy-Loss-Spectroscopy Study*, V. M. Polyakov, A. Elbe, J. Wu, G. J. Lapeyre e J. A. Schaefer, Phys. Rev. B **54**, 2010 (1996).

Referências do Capítulo 3

79. *Photoluminescence Characterization of Gated Pseudomorphic AlGaAs/InGaAs/GaAs Modulation Doped Field-Effect Transistor*, J. M. Gilperez, Appl. Phys. Lett. **61**, 1225 (1992).
80. *The Persistent Photoconductivity Effect in Modulation Si δ -Doped Pseudomorphic $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ /GaAs Quantum Well Structure*, A. Babinski, G. Li e C. Jagadish, Appl. Phys. Lett. **71**, 1664 (1997).
81. *Light-Induced Mobility Enhancement in Delta-Doped GaAs/InGaAs/GaAs Quantum Wells Grown by Molecular Beam Epitaxy on GaAs(001)*, M. Zervos, M. Elliot e D. I. Westwood, Appl. Phys. Lett. **74**, 2026 (1999).

82. *Magnetotransport of Delta-Doped $\text{In}_{0.57}\text{Ga}_{0.43}\text{As}$ on $\text{InP}(001)$ Grown Between 390 and 575 °C by Molecular Beam Epitaxy*, Mathew Zervos, Adam Bryant, Martin Elliot, Mathias Beck e Marc Illegems, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2601 (1998).
83. *Observation of High Mobility and Cyclotron Resonance in 20 Å Silicon δ -Doped GaAs Grown by MBE at 480 °C*, P. M. Koenraad, F. A. P. Perenboom, J. Singleton, S. J. R. M. Spermon, W. C. van der Vleuten, A. P. J. Voncken e J. H. Wolter, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 861 (1990).
84. *Saturation of the Free-Electron Concentration in δ -Doped GaAs: the DX Centre in Two Dimensions*, A. Zrener, F. Koch, R. L. Williams, R. A. Stradling, K. Ploog e G. Weigmann, *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 1203 (1988).
85. Jasprit Singh em *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*, editado por Anne T. Brown (McGraw-Hill, New York, 1993), cap. 17, p. 669.
86. Estas figuras foram extraídas do artigo intitulado *Quantum Hall Effect* de autoria de D. R. Leadley (Warwick University, 1997), obtido na homepage (www.warwick.ac.uk/~phsbn/)
87. *The quantum Hall effect*, 2ª edição, editado por R. E. Prange e S. M. Girvin (Springer, New York, 1990).
88. *A Method of Measuring Specific Resistivity and Hall Effect of Discs of Arbitrary Shape*, L. J. van der Pauw, *Philips. Res. Repts.* **13**, 1 (1958).
89. *Review of Hall Effect and Magnetoresistance Measurements in GaAs Materials and Devices*, David C. Look, *J. Electrochem. Soc.* **137**, 260 (1990).
90. Esta função pode ser encontrada no manual do usuário do Origin, um programa computacional que oferece como opção para o cálculo de FFT's diversas janelas (além da Hanning): *Origin User's Manual*, v.4.0, p. 270 (1995).
91. *Determination of Electrical Transport Properties Using a Novel Magnetic Field-Dependent Hall Technique*, W. A. Beck e J. R. Anderson, *J. Appl. Phys.* **62**, 541 (1987).
92. *Theory of an Experiment for Measuring the Mobility and Density of Carriers in the Space-Charge Region of a Semiconductor Surface*, R. L. Petritz, *Phys. Rev.* **110**, 1254 (1958).
93. E. F. Schubert em *Delta-Doping of Semiconductors: Electronic, Optical and Structural Properties of Materials and Devices*, Semiconductors and Semimetals, editado por Arthur C. Gossard, (Academic, New York, 1994), v. 40, p.77.

Referências do Capítulo 4

94. Para uma revisão completa das propriedades de sistemas com dopagem planar e suas potencialidades para fabricação de dispositivos de alto desempenho veja o livro, recentemente publicado, *Delta-Doping of Semiconductors*, editado por E. F. Schubert (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
95. *Long-Lifetime Photoconductivity Effect in n-Type GaAlAs*, R. J. Nelson, Appl. Phys. Lett. **31**, 351 (1977).
96. *Effect of Donor Levels on the Properties of GaAsP Near Direct-Indirect Transition*, M. G. Craford, G. E. Stillman, J. A. Rossi e N. Holonyak Jr., Phys. Rev. **168**, 867 (1968).
97. *Persistent Photoconductivity in Donor-Doped $Cd_{1-x}Zn_xTe$* , B. C. Burkey, R. P. Khosla, J. R. Fischer e D. L. Losee, J. Appl. Phys. **47**, 1095 (1976).
98. *Persistent-Photoconductivity Effect in δ -Doped $Al_{0.48}In_{0.52}As/Ga_{0.47}In_{0.53}As$ Heterostructures*, Ikai Lo, D. P. Wang, K. Y. Hsieh, T. F. Wang, W. C. Mitchel, M. Ahoujja, J. -P. Cheng, A. Fathimulla e H. Hier, Phys. Rev. B **52**, 14671 (1995).
99. *Shubnikov-de Haas Effect and Persistent Photoconductivity in InAlAs*, E. Skuras, C. R. Stanley, A. R. Long, E. A. Johnson, A. MacKinnon, H. Yaguchi, M. van der Burgt and J. Singleton, J. Appl. Phys. **86**, 6593 (1999).
100. *Magnetotransport in a Pseudomorphic GaAs/GaInAs/GaAlAs Heterostructure with a Si δ -Doping Layer*, M. van der Burgt, V. C. Karavolas, F. M. Peeters, J. Singleton, R. J. Nicholas, F. Herlach, J. J. Harris, M. Van Hove e G. Borghs, Phys. Rev. B **52**, 12218 (1995).
101. *Large-Lattice-Relaxation Model for Persistent Photoconductivity in Compound Semiconductors*, D. V. Lang e R. A. Logan, Phys. Rev. Lett. **39**, 635 (1977).
102. Para uma revisão veja *Deep Donor Levels (DX Centers) in III-V Semiconductors*, P. M. Mooney, J. Appl. Phys. **67**, R1 (1990).
103. *Observation of Intersubband Scattering in a Two-Dimensional Electron-System*, H. J. Stormer, A. C. Gossard e W. Wiegmann, Solid State Commun. **41**, 707 (1982).
104. *Magnetoresistance in a GaAs/AlGaAs Heterostructure with Double Subband Occupancy*, H. van Houten, J. G. Williamson, M. E. I. Broekaart, C. E. Foxon e J. J. Harris, Phys. Rev. B **37**, 2756 (1988).

105. *Persistent Photoconductivity and 2-Band Effects in GaAs/GaAlAs Heterojunctions*, R. Fletcher, E. Zaremba, M. D' Iorio, C. T. Foxon e J. J. Harris, Phys. Rev. B **41**, 10649 (1990).
106. *Theory of Single Delta-Layer*, O. Mezrin, A. Shik, Superlattice and Microstructures **10**, 107 (1991).
107. *Quantum and Transport Electron Mobility in the Individual Subbands of a Two-Dimensional Electron Gas in Si- δ -Doped GaAs*, 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, Physica B **177**, 485 (1992).
108. *Intermixing at InAs/GaAs and GaAs/InAs interfaces*, C. Guillé, F. Houzay, J. M. Moison and F. Barthe, Surf. Sci. **189/190**, 1041 (1987).
109. *Quantum and Transport Mobilities in δ -Doped Semiconductors*, A. B. Henriques, Phys. Rev. B **53**, 16365 (1996).