

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

**Estudo de Poços Parabólicos Largos de
AlGaAs em Campos Magnéticos Altos**

Angela María Ortiz de Zevallos Márquez

Orientador: Prof. Dr. Guennadii M. Gousev

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

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Guennadii M. Gousev (IFUSP)
Prof. Dr. Nilo Mauricio Sotomayor Choque (UFT)
Prof. Dr. Fernando Iikawa (UNICAMP)
Prof. Dr. Antonio Carlos Seabra (POLI-USP)
Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta (IFUSP)

**São Paulo
2007**

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

Zevallos Márques, Angela María Ortiz de
Estudo de poços parabólicos largos de AlGaAs em
campos magnéticos altos. São Paulo, 2007.

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

Orientador: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Goussev

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Poço parabólico; 2. Efeito Hall ;
3. Heteroestruturas de AlGaAs; 4. Propriedades de
transporte.

USP/IF/SBI-038/2007

A mis padres Margot y Juan, mi
hermana Karina, a la mamá
Victoria.

Aos meus pais Margot e Juan,
minha irmã Karina e minha mãe
Victoria.

A Aneniske.

Proverbios y Cantares - XXIX

Caminante, son tus huellas
el camino y nada más;
Caminante, no hay camino,
se hace camino al andar.
Al andar se hace el camino,
y al volver la vista atrás
se ve la senda que nunca
se ha de volver a pisar.
Caminante no hay camino
sino estelas en el mar.

Antonio Machado (1875 - 1939)

Agradecimentos

Meus agradecimentos ao Prof. Guennadii M. Gusev, pela orientação e apoio dado para a realização deste trabalho. Mas especialmente tenho que lhe agradecer por ter me ajudado num momento muito difícil, conseguindo desenvolver um trabalho de doutorado nestes dois últimos anos.

Meus agradecimentos especiais também para a Profa. Euzi Conceição Fernandes da Silva e para Ewout ter Haar, sem os quais não teria sido possível concluir esta tese. Pois, não só me deram valiosas ajudas, mas se mostraram amigos numa fase difícil como é a da escrita.

Meus agradecimentos também aos Professores Eliermes Arraes Meneses, Fernando Cerdeira e Jaime Freitas os que participaram do início do meu doutoramento.

Ao Prof. Alain Quivy e ao Dr. Tomas Lamas que cresceram as amostras de poços parabólicos estudadas neste trabalho.

Aos Professores do departamento pela receptividade sempre mostrada.

Ao Sr. Paulinho e ao Geraldo pelo apoio técnico quando trabalhando no laboratório.

Á Mônica antiga secretaria, bem como a atual Tatiana.

Aos colegas de laboratório Luis, Niko, Thomas, Alvaro.

As amigas Daniele e Cibely pela sincera amizade dada desde que nos conhecemos. E que me ajudaram a sair de um grande problema e sem as quais não estaria aqui agora.

Ao Ivan pelas discussões semanais no IM nestes dois últimos meses.

Aos amigos Marcelo, Mauro, Marcia, Celso, Herbert e Jeverson, Mauricio, Charles, Thiago pelo bom convívio e por me ouvirem e dar força nos momentos difíceis.

Finalmente meus agradecimentos ao falecido Prof. Jose Roberto Leite, quem me orientou na primeira metade do doutoramento.

Resumo

Neste trabalho, apresentamos os resultados de estudos com poços quânticos parabólicos (PQW, *Parabolic Quantum Well*) de *AlGaAs* crescidos sobre substratos de *GaAs* pela técnica de epitaxia por feixe molecular.

Medidas de transporte em PQWs do tipo n e do tipo p com larguras de 1000 Å até 4000 Å em baixas temperaturas indicam um aumento abrupto do coeficiente Hall para um campo magnético crítico de aproximadamente 3 T. Nosso estudo concentra-se na interpretação deste aumento observado.

Com este propósito, estudamos através de cálculos autoconsistentes e de aproximações analíticas o processo de transferência de cargas em amostras com PQWs. Determinamos as densidades superficiais de cargas n_s e p_s , e comparamos estes resultados com os obtidos experimentalmente. Verificamos que os melhores resultados para a densidade de cargas (n_s) são aqueles determinados pelos cálculos autoconsistentes. No entanto, as aproximações analíticas se mostram importantes para descrever de forma qualitativa os resultados experimentais para amostras do tipo p .

Numa segunda parte do nosso trabalho, estudamos a influência da aplicação de campos magnéticos ao longo da direção de crescimento nas amostras com PQWs. Observamos uma diminuição na largura de densidade de cargas $n(z)$ e do potencial total $V(z)$. Estes resultados em combinação com o processo de transferência de cargas, levam a uma diminuição da densidade de portadores no poço, produto da redistribuição das cargas entre o poço e as camadas com dopagem de silício. Desta forma, atribuímos do aumento no coeficiente Hall como sendo oriundo de uma diminuição da densidade de cargas dentro do PQW.

Abstract

We present the results of experiments and calculations done on *AlGaAs* Parabolic Quantum Wells (PQWs) grown on *GaAs* by molecular beam epitaxial techniques.

Transport measurements in *n*-type and *p*-type samples with widths between 1000 Å and 4000 Å at low temperatures indicate an abrupt increase of the Hall coefficient at a critical field $B \approx 3$ T. Our study focuses on the interpretation of this observed increase.

To this end, we study by means of self-consistent numerical simulations and analytical approximations the charge transfer process in PQWs. We compare our results for the sheet densities with those observed experimentally. The best results are obtained for *n*-type samples for which we could numerical simulations. However, the analytical expressions we obtained also describe qualitatively the experimental results, and can be applied to *p*-type samples.

In the second part of this work we study the effect of a magnetic field applied perpendicular to the well. The simulations indicate a diminishing of the charge density and the total potential in the well. These results, combined with the charge transfer process, lead to a redistribution of charge between the well and the dopant layers. Therefore, we interpret the observed increase of the Hall coefficient as the result of a depletion of charge in the parabolic quantum well.

Sumário

1	Introdução Geral	1
2	Fundamentos Teóricos	5
2.1	Introdução	5
2.2	A teoria de Sommerfeld para o gás de elétrons livres	6
2.3	Gás de elétrons livres bidimensional	10
2.4	Gás de elétrons num campo magnético	12
2.4.1	Quantização das órbitas dos elétrons livres	12
2.4.2	Como contar os estados: degenerescência dos níveis de Landau	14
2.4.3	Gás bidimensional na presença de um campo magnético	17
2.5	Propriedades de transporte	18
2.5.1	Efeito Hall clássico	18
2.5.2	Efeito Hall quântico inteiro	20
3	Crescimento das amostras e técnicas de caracterização empregadas	25
3.1	Crescimento por MBE	25
3.2	Detalhes do crescimento dos poços quânticos parabólicos de $Al_xGa_{1-x}As$	28
3.3	Processamento das amostras	33
3.4	Caracterização dos poços parabólicos	34
3.4.1	Medidas de transporte	34
3.4.2	Densidades e mobilidades	37
4	Estrutura eletrônica dos poços parabólicos de $AlGaAs/GaAs$	39
4.1	Modelamento do potencial parabólico: fundamentos teóricos	39
4.2	Cálculos autoconsistentes: formalismo	43

4.3	Resultados dos cálculos autoconsistentes para poços parabólicos com larguras $W=1000 \text{ \AA}$ e $W=4000 \text{ \AA}$	46
4.4	Cálculo autoconsistente considerando o processo de transferência de cargas	51
4.4.1	Modelamento teórico modificado: incluindo a transferência de cargas no processo de autoconsistência	51
4.4.2	Aproximação analítica	54
4.4.3	Poço parabólico com uma única subbanda ocupada	55
4.4.4	Transferência de cargas em um poço com duas subbandas ocupadas	57
4.4.5	Transferência de cargas em poços do tipo p	59
4.4.6	Comparação entre os resultados experimentais e teóricos	61
5	Poços parabólicos em campos magnéticos	66
5.1	Resultados experimentais	68
5.1.1	Medidas da resistência Hall e da resistência longitudinal	70
5.2	Cálculos autoconsistentes na presença de campo magnético	77
5.2.1	Cálculos autoconsistentes com transferência de cargas	79
5.2.2	Resultados dos cálculos autoconsistentes	80
5.3	Cálculos analíticos na presença de campos magnéticos: transferência de cargas	86
5.4	Considerações finais	91

Lista de Figuras

2.1	(a) Representação esquemática do potencial cristalino visto por um elétron de condução no caso dos semicondutores ou de um elétron de valência no caso dos metais. Os círculos representam os caroços iônicos. (b) O complicado potencial visto pelo elétron foi substituído por um poço de potencial constante. Neste modelo, os elétrons estão confinados em uma <i>caixa</i> de profundidade W	6
2.2	Esquema da quantização para elétrons livres: na ausência ($B = 0$) e na presença de campo magnético ($B \neq 0$).	15
2.3	Esquema da quantização dos níveis de energia para elétrons livres: na ausência ($B = 0$) e na presença de campo magnético ($B \neq 0$).	16
2.4	Ilustração do efeito Hall clássico num semicondutor: (a) Barra Hall usada nas medidas do efeito Hall onde I_x é a corrente elétrica que flui na direção do eixo x e V_L é a diferença de potencial aplicada; (b) Movimento das cargas na direção do eixo y devido à presença do campo magnético B_z ; (c) Os elétrons acumulam-se num dos lados da barra gerando um campo elétrico E_y e conseqüentemente a voltagem Hall, V_H	19
2.5	Dependência da condutividade Hall (σ_{xy}) e da condutividade transversal (σ_{xx}) de uma amostra de <i>Si</i> -MOSFET na temperatura de 1,5 K e na presença de um campo magnético de 15 T para diferentes valores de tensão de porta: (a) 5,0; (b) 2,0; (c) 1,0; (d) 0,1 V/cm^{-1} . Figura extraída da referência [26].	21

2.6	Representação da variação da densidade de estados da resistência Hall R_{xy} e da magnetoresistência R_{xx} em função do campo magnético: (a) Nos sistemas ideais a densidade de estados é representada por funções delta, a resistência Hall varia linearmente com o campo, e a magnetoresistência assume valores nulos quando o nível de Landau $(m + 1)$ é totalmente desocupado e os demais m níveis totalmente preenchidos. (b) Nos sistemas reais, a densidade de estados apresenta um alargamento devido à presença de defeitos e impurezas no material, a resistência Hall passa a apresentar platôs, e na região onde são observados os platôs a magnetoresistência assume valores nulos na região dos estados localizados.	23
3.1	Representação esquemática do crescimento na técnica de MBE: (a) feixes de átomos direcionados para o substrato; (b) processo de condensação dos átomos sobre o substrato.	26
3.2	Esquema de um sistema típico de MBE utilizado no crescimento de heteroestruturas semicondutoras.	27
3.3	(a) Representação esquemática da seqüência das camadas semicondutoras que compõem as amostras dos PQWs analisadas neste trabalho. (b) Perfil da concentração de alumínio na liga de $AlGaAs$ que compõe a estrutura dos PQWs.	30
3.4	Diagrama das bandas de valência e de condução na interface entre o $GaAs$ e o $AlGaAs$. ΔE_c e ΔE_v são as discontinuidades das bandas de condução e valência entre o $Al_xGa_{1-x}As$ ($x < 0,45$) e o $GaAs$ respectivamente.	33
3.5	(a) Desenho da barra Hall usada nas amostras estudadas. (b) Ampliação da região central da barra Hall, onde o comprimento da barra L_B é $500\mu m$ e a largura W_B é $200\mu m$	34
3.6	(a) Diagrama do sistema para medidas de transporte no LNMS. (b) Configuração elétrica na região da amostra.	36
4.1	Esquema representativo que mostra o perfil de potencial e os parâmetros relacionados com a arquitetura de um poço parabólico.	41

4.2	Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 162,5 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 97,7 \text{ meV}$	48
4.3	Distribuição da densidade de cargas $n_s^{(n)} \phi_n(z) ^2$ para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Neste poço duas subbandas estão ocupadas, e a terceira subbanda se encontra quase vazia.	48
4.4	Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 223,9 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 36,2 \text{ meV}$	49
4.5	Distribuição da densidade de cargas $n_s^{(n)} \phi_n(z) ^2$ para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Quatro subbandas estão ocupadas e a distribuição total se mostra bastante homogênea.	49
4.6	(a) Resultados dos cálculos autoconsistentes para os potenciais $V_p(z)$ (vermelho), $V_H(z)$ (azul) e $V_{xc}(z)$ (verde) - veja a definição destes potenciais na Eq. 4.7. O potencial total (linha preta contínua) é praticamente constante no meio do poço. (b) Também mostramos detalhes dos níveis de energia ocupados e a energia de Fermi no poço.	50
4.7	Potenciais envolvidos no poço parabólico com dopagem modulada. A linha contínua representa o potencial total, a linha vermelha descreve o potencial parabólico e a linha azul representa o potencial resultante das interações eletrostáticas entre os elétrons no poço. Mostramos também as outras energias envolvidas na Eq. 4.15.	52

4.8	Densidade superficial n_s em função da largura do poço para uma camada espaçadora com largura fixa de 200 Å. Os quatro círculos sólidos são os dados experimentais, a linha preta (—) representa os resultados dos cálculos autoconsistentes, a linha vermelha representam os resultados da aproximação analítica quando considerando uma subbanda ocupada (—) e a linha azul representam os resultados da aproximação analítica quando considerando duas subbandas ocupadas (—). A descontinuidade para $W > 1500$ Å é dada por diferenças nos parâmetros de crescimento.	62
4.9	Densidade superficial n_s em função da largura da barreira para um poço de 1000 Å de largura. Os cinco círculos sólidos são os dados experimentais, a linha preta (—) representa os resultados dos cálculos autoconsistentes, a linha vermelha representam os resultados da aproximação analítica quando considerando uma subbanda ocupada (—) e a linha azul representam os resultados da aproximação analítica quando considerando duas subbandas ocupadas (—).	63
4.10	Densidade superficial n_s em função da largura do poço com uma camada espaçadora fixa de 200 Å. A linha preta (—) é o cálculo autoconsistente e a linha vermelha (—) mostra os resultados da aproximação analítica para uma subbanda ocupada.	64
4.11	Densidade superficial experimental (símbolos) em função da largura do poço com portadores do tipo p . As linhas representam resultados teóricos baseados na aproximação analítica para duas espessuras da camada espaçadora: $L_s=200$ Å (linha preta contínua —) e $L_s=150$ Å (linha vermelha pontilhada ---).	65
5.1	(a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo n de largura $W =1500$ Å com camada espaçadora de espessura $L_s =200$ Å em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T(mK): 850 (linha vermelha), 650 (linha azul), 50 (linha preta). A linha tracejada (---) corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos.	71

- 5.2 (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo n de largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 100 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T(mK): 850 (linha vermelha), 450 (linha azul), 50 (linha preta). A linha tracejada (---) corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos. 72
- 5.3 (a) Magnetoresistência e resistência Hall para um poço tipo p de $W = 1000 \text{ \AA}$ com largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$ em função do campo magnético na temperatura de 50 mK. A linha tracejada (---) corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos. (b) Magnetoresistência e (c) resistência Hall para um poço de $W = 1500 \text{ \AA}$ com largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$ em função do campo magnético nas temperaturas de 950 mK (linha vermelha) e 50 mK (linha preta). A linha tracejada corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos (até 1 T). . . . 74
- 5.4 (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo p de $W = 2000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 150 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T (mK) 1000 (linha preta), 950 (linha vermelha), 700 (linha verde), 360(linha azul), 200 (linha azul claro), 150 (linha magenta), 50 (linha púrpura). A linha tracejada corresponde a uma extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos. 75
- 5.5 (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo p de $W = 2500 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 150 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T (mK): 1000 (linha preta), 950 (linha vermelha), 700 (linha verde), 360(linha azul), 200 (linha azul claro), 150 (linha magenta), 50 (linha púrpura). A linha tracejada corresponde a uma extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos. 76

- 5.6 (a) Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$ com densidade superficial total $n_s = 4,34 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 162,5 \text{ meV}$, altura da barreira $\Delta_2 = 97,7 \text{ meV}$. As linhas contínuas referem-se ao potencial e densidade de cargas em $B = 0$. As linhas tracejadas representam os valores para $B = 13,6 \text{ T}$. (b) Visão ampliada do potencial total para quatro diferentes valores do campo magnético B : 0; 0,8; 3,2 e 13,6 T. 80
- 5.7 Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$ com densidade superficial total $n_s = 1,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 223,9 \text{ meV}$, altura da barreira $\Delta_2 = 36,2 \text{ meV}$. As linhas contínuas referem-se ao potencial e densidade de cargas em $B = 0$. As linhas tracejadas representam os valores para $B = 13,6 \text{ T}$. (b) Visão ampliada do potencial total para quatro diferentes valores do campo magnético B : 0; 0,8; 3,2 e 13,6 T. 81
- 5.8 (a) Energia de Fermi (linha preta) em função do campo magnético para um poço com largura $W = 1000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$. Neste cálculo, a densidade dos portadores $n_s = 4,34 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ foi mantida constante. As energias de alguns dos níveis de Landau em função do campo magnético também são representadas: E_{00} (linha vermelha), E_{10} (linha verde) e E_{20} (linha azul). (b) Largura da distribuição da densidade de cargas em função do campo magnético aplicado. 82
- 5.9 (a) Energia de Fermi (linha preta) em função do campo magnético para um poço com largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 100 \text{ \AA}$. Neste cálculo, a densidade de portadores $n_s = 1,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ foi mantida constante. As energias das subbandas em função do campo magnético também são representadas : E_{00} (linha vermelha), E_{10} (linha verde), E_{20} (linha azul) e E_4 (linha laranja). A energia da subbanda E_5 não foi incluída nesta figura por não estar ocupada para campos $> 0.1 \text{ T}$. (b) Largura da distribuição da densidade de cargas em função do campo magnético aplicado. 83

5.10	Variação da densidade de elétrons em função do campo magnético para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$	85
5.11	Variação da densidade de elétrons em função do campo magnético para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 100 \text{ \AA}$	85

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros de crescimento das amostras de PQW usadas neste trabalho.	34
3.2	Detalhes das etapas do processo de fotogravura das amostras para a implantação da barra Hall.	35
3.3	Densidade de portadores (n_s e p_s) e mobilidades (μ) medidas nas amostras estudadas.	38
4.1	Comparação dos nossos autovalores de energia com aqueles obtidos na Referência [59] (colunas 4 e 5). Em ambos os cálculos utilizou-se para a largura do poço parabólico $W = 2000 \text{ \AA}$ e para a densidade superficial de portadores $n_s = 3,9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	46
4.2	Autovalores e ocupação dos níveis de energia de um poço parabólico de largura $W = 1000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 162,5 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 97,7 \text{ meV}$	47
4.3	Energias e densidades de cargas para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 223,9 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 36,2 \text{ meV}$	47
4.4	Valores experimentais e calculados usando o método autoconsistente para a densidade superficial n_s nos poços quânticos parabólicos do tipo n . x e y são as concentrações de Al no poço de largura W com camada espaçadora de largura L_s (veja Capítulo 3).	61

5.1	Resumo das propriedades das amostras usadas para obter os resultados deste capítulo. Apresentamos o tipo de portador, a largura da camada espaçadora L_s , a densidade volumétrica necessária para “encher” o poço n^+ , a densidade superficial medida por efeito Hall em campo baixo n_s , a densidade superficial obtida nos cálculos autoconsistentes n_s^* (veja Capítulo 4), o parâmetro de densidade r_s , o fator de preenchimento do poço f , a largura efetiva do poço W_e , e a mobilidade μ medida em $T \approx 1$ K.	69
5.2	Valores experimentais e calculados pela aproximação analítica para a densidade superficial p_s nos poços quânticos parabólicos tipo p , para campo magnético nulo e para campos magnéticos onde o fator de preenchimento ν é igual a 1. As razões entre a densidade de portadores para campo magnético nulo e campos altos calculadas através dos cálculos analíticos são apresentadas. De forma semelhante apresentamos a razão entre o coeficiente da resistência Hall para campos magnéticos altos e campos magnéticos baixos.	89
5.3	Valores experimentais e calculados pela aproximação analítica para a densidade superficial n_s nos poços quânticos parabólicos tipo n , para campo magnético nulo e para campos magnéticos onde o fator de preenchimento ν é igual a 1. As razões entre a densidade de portadores para campo magnético nulo e campos altos, calculadas através dos cálculos analíticos e autoconsistentes são apresentadas. De forma semelhante apresentamos a razão entre o coeficiente da resistência Hall para campos magnéticos altos e campos magnéticos baixos.	90

Capítulo 1

Introdução Geral

Por heteroestruturas semicondutoras entendemos um material artificialmente produzido, o qual é formado pela superposição de camadas alternadas de semicondutores distintos. O ponto de partida para a idealização das heteroestruturas foi o trabalho de L. Esaki e R. Tsu em 1970 [1–3] onde propuseram o crescimento de super-redes para a observação do tunelamento ressonante. Além do grande avanço na área de Física Básica que este trabalho desencadeou, deu-se também o início de uma longa linha de pesquisa e desenvolvimento que resultou nos modernos dispositivos semicondutores usados atualmente na eletrônica e na optoeletrônica.

As primeiras heteroestruturas foram produzidas por Blakeslee e Aliotta [4] (1970) usando a técnica de CVD (*Chemical Vapor Deposition*) crescendo estruturas de $GaAlAs/GaAs_{1-x}P_x$. Posteriormente, A. Y. Cho [5] (1971) e W. P. Dumke [6] (1972) cresceram estruturas de $GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$ usando as técnicas de MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) e LPE (*Liquid Phase Epitaxy*), respectivamente. Estas novas técnicas de crescimento permitiram a produção de amostras monocristalinas contendo um número preciso de camadas atômicas, com interfaces abruptas entre materiais semicondutores distintos, perfis de dopagem sofisticados, alta pureza, e baixo número de defeitos estruturais.

Desde a idealização e fabricação das primeiras heteroestruturas semicondutoras na década de setenta, a produção destes sistemas evoluiu rapidamente com o aprimoramento das diversas técnicas de crescimento. Atualmente, heteroestruturas crescidas

em diversas arquiteturas formam a base de uma série de aparelhos que utilizam a tecnologia dos semicondutores. Amplamente utilizados em nosso cotidiano, podemos citar os computadores, televisões, carros, telefones celulares, e muitos outros dispositivos que têm como base para o seu funcionamento e desempenho a tecnologia das heteroestruturas semicondutoras. No que se refere às novas tecnologias baseadas nos efeitos quânticos podemos citar os diodos emissores de luz nos comprimentos de 0,9 até aproximadamente $0,7 \mu\text{m}$, diodos de efeito avalanche usados na amplificação de sinal em fotodetectores, lasers de poços quânticos usados no campo das comunicações, detectores na região do infravermelho usados para fins militares e médicos, transistores de tunelamento ressonante, e dispositivos de armazenamento de dados, entre outros. Do ponto de vista de Física Básica, entre os novos efeitos que foram observados devido ao aprimoramento das técnicas de crescimento, podemos citar a descoberta do efeito Hall quântico por K. von Klitzing [7] em 1980 e o descobrimento do efeito Hall fracionário por H. L. Stormer [8], D. C. Tsu [9] e R. B. Laughlin [10] que levaram seus descobridores a receber o prêmio Nobel em Física.

Mas voltemos a 1978. Naquela época, a utilização de heteroestruturas semicondutoras na fabricação de dispositivos envolvendo o transporte eletrônico era muitíssimo limitada por causa da baixa mobilidade dos portadores nas amostras disponíveis. Foi apenas após a introdução do conceito da dopagem modulada por Dingle [11] em 1978 que este quadro alterou-se significativamente. A técnica da dopagem modulada tem por princípio a inserção de uma camada de material não dopado entre a barreira dopada e o poço quântico. Devido à diferença de gap entre os materiais semicondutores constituintes da heteroestrutura, portadores de carga livres são transferidos para o semiconductor de menor gap (denominado canal da heteroestrutura). Esta transferência de portadores 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 dopagem possibilita a obtenção de estruturas semicondutoras com altas densidades de portadores (até 10^{13} portadores/cm²), os quais estão espacialmente separados dos átomos dopantes ionizados. Daí o grande interesse por estes sistemas, uma vez que a separação espa-

cial entre os portadores do gás e os átomos 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/Vs na temperatura $T = 4$ K) [11, 12].

Em 1979 surge uma outra técnica de dopagem denominada técnica da dopagem planar (ou dopagem do tipo delta) [13]. O conceito da dopagem planar tem por princípio a deposição dos dopantes em uma única monocamada do semicondutor hospedeiro, perpendicular à direção do crescimento. Na prática, a dopagem planar pode ser obtida interrompendo-se o crescimento do material hospedeiro [13–15]. Esta técnica permite obter perfis de dopagem extremamente finos (algumas camadas monoatômicas) com elevadas concentrações de dopantes e possibilita a obtenção de um gás bidimensional de elétrons ou buracos, confinados na direção de crescimento, no poço de potencial induzido pela dopagem planar. Este poço de potencial é também denominado na literatura como poço- δ .

Com o aprimoramento das técnicas de crescimento, começou-se a pensar no desenvolvimento de heteroestruturas onde o *gap* do material da região ativa pudesse ser controlado criando estruturas com perfis de potencial sofisticados. Isto foi possível utilizando-se as ligas ternárias e quaternárias ou mesmo a técnica da liga digital que foi utilizada no crescimento dos poços quânticos parabólicos (PQW, *Parabolic Quantum Wells*) analisados neste trabalho. Este tipo de estrutura foi proposta inicialmente por Miller e colaboradores [16] em 1984, mas foram Sundaram e colaboradores [17] e quase que simultaneamente Shayegan e colaboradores [18] os primeiros a reconhecer que este tipo de potencial era ideal para se obter um gás de elétrons quase-tridimensional de alta mobilidade. Desde os anos 60 as propriedades deste tipo de gás de elétrons despertava grande interesse do ponto de vista da Física Básica, mas ele não podia ser investigado em virtude das dificuldades da construção experimental dos poços parabólicos. Atualmente, a produção deste tipo de sistema evoluiu significativamente e já encontramos na literatura um número significativo de trabalhos dedicados à investigação das propriedades do gás de elétrons quase-tridimensional.

Entretanto, desde a concepção do conceito dos poços parabólicos, a grande maioria dos estudos relativos a este tipo de estrutura semicondutora foi realizada para dopagens do tipo n em parte devido à complexidade da banda de valência. Até meados de 1990, por exemplo, pouco se sabia sobre o comportamento dos buracos em heteroestruturas semicondutoras de poços quânticos convencionais e os cálculos autoconsistentes das propriedades eletrônicas desses portadores eram escassos na literatura. É apenas a partir desta época que as estruturas com dopagem planar do tipo p começam a ser investigadas com mais detalhes [19–22]. Devido à restrita quantidade de informações existentes sobre as propriedades dos buracos nos PQWs, interessamo-nos pela investigação deste tipo de sistema e o resultado de nossa pesquisa será apresentado neste trabalho. No **Capítulo 2** descrevemos as propriedades de gases bidimensionais e tridimensionais submetidos, ou não, à aplicação de campo magnético uniforme. Ainda neste capítulo apresentamos uma revisão de alguns fenômenos de transporte que nos auxiliarão na análise do comportamento dos gases confinados nos poços quânticos parabólicos. No **Capítulo 3** descrevemos a arquitetura das amostras analisadas neste trabalho, o processamento das barras Hall e o procedimento utilizado para a realização das medidas de transporte na presença de campo magnético paralelo à direção do crescimento. No **Capítulo 4** apresentamos o modelo teórico utilizado para descrever a estrutura eletrônica dos poços quânticos parabólicos. Ainda neste capítulo comparamos nossos resultados experimentais relativos ao estudo de estruturas com dopagem do tipo n e do tipo p com os resultados teóricos. No **Capítulo 5** apresentamos resultados experimentais dos poços quânticos parabólicos do tipo n e do tipo p sujeitos a campos magnéticos aplicados na direção do crescimento. Apresentamos também cálculos analíticos e numéricos para determinar a estrutura eletrônica de portadores de carga nos poços quânticos parabólicos sujeitos a campos magnéticos. Ainda neste Capítulo comparamos e analisamos os resultados teóricos e experimentais.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos

2.1 Introdução

No início do século quando as bases da Mecânica Quântica ainda não estavam bem estabelecidas, Drude [Annalen der Physik, **1**, 566 e **3**, 369 (1900)] elaborou um modelo onde o sólido é visto como um conjunto de íons, fixos em suas posições, e imersos num gás de elétrons livres. Ele considerou os elétrons como partículas clássicas vagando pelo interior do sólido e, ocasionalmente, colidindo com os caroços iônicos. A teoria clássica teve vários sucessos para a descrição das propriedades dos metais, principalmente na dedução da lei de Ohm, e na obtenção da relação entre as condutividades elétrica e térmica. Esta teoria clássica falha, no entanto, na explicação da capacidade térmica e da susceptibilidade magnética dos elétrons de condução. Posteriormente, o gás de elétrons recebeu de Sommerfeld um tratamento quântico, levando em conta que os elétrons são férmions e devem obedecer ao princípio da exclusão de Pauli. Sommerfeld utilizou a Mecânica Quântica para determinar as autofunções e autovalores do gás de elétrons e o princípio da exclusão de Pauli para preencher os estados quantizados. Neste capítulo apresentaremos a teoria de Sommerfeld uma vez que ela constitui a base para o assunto que abordaremos nesta tese. Apresentaremos também o formalismo que descreve o comportamento de um gás de elétrons livres tridimensional na presença de campo magnético, descrevendo o aparecimento dos níveis de Landau. Particularizaremos este formalismo para o caso de um gás de elétrons bidimensional. Finalizamos o capítulo apresentando os fundamentos teóricos relacionados com as medidas de trans-

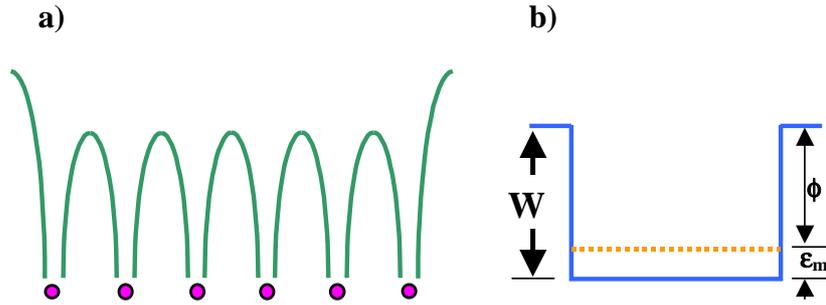


Figura 2.1: (a) Representação esquemática do potencial cristalino visto por um elétron de condução no caso dos semicondutores ou de um elétron de valência no caso dos metais. Os círculos representam os caroços iônicos. (b) O complicado potencial visto pelo elétron foi substituído por um poço de potencial constante. Neste modelo, os elétrons estão confinados em uma *caixa* de profundidade W .

porte na presença de campo magnético que foram utilizadas no desenvolvimento deste trabalho.

2.2 A teoria de Sommerfeld para o gás de elétrons livres

Na teoria de Sommerfeld, o complicado potencial visto pelo elétron no sólido (fortemente atrativo nas posições iônicas) é substituído por um poço de potencial constante, de profundidade W (veja Fig. 2.1). Este poço de potencial é utilizado para confinar os elétrons dentro do sólido de volume V , simulando a atração coulombiana exercida pelos íons sobre os elétrons. Neste contexto, a equação de Schrödinger para um elétron de massa m^* no poço de energia potencial $U(\mathbf{r})$ é dada por:

$$H\psi = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \psi = E\psi \quad (2.1)$$

onde $\nabla^2\psi = (\partial^2\psi/\partial x^2) + (\partial^2\psi/\partial y^2) + (\partial^2\psi/\partial z^2)$. Queremos resolver esta equação e determinar todas as autofunções ψ e autovalores de energia E para um elétron livre. Para isto, consideraremos que $U(\mathbf{r}) = 0$, isto é, que as interações elétron-íon¹ e elétron-

¹**Aproximação do elétron livre** \Rightarrow não considera a interação elétron-íon.

elétron² são nulas. Desta forma a equação de Schrödinger reduz-se a:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

Esta é a equação de Schrödinger de um elétron livre e independente. Para resolvê-la podemos utilizar como solução tentativa uma função de onda plana $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Substituindo esta função de onda tentativa na Equação 2.2 obtemos a seguinte relação de dispersão para os autovalores de energia

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{k} = k_x\mathbf{i} + k_y\mathbf{j} + k_z\mathbf{k}$, denominado vetor de onda, é um vetor que caracteriza o estado da partícula. Para achar a constante de normalização da função de onda devemos calcular $\int \psi^* \psi d\tau = 1$ onde $d\tau$ é um elemento de volume em qualquer sistema de coordenadas conveniente. Desta forma obtemos

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \quad (2.4)$$

onde V é o volume do sólido. Para conhecermos a função de onda devemos agora determinar os valores permitidos de \mathbf{k} . Para isto, impomos que os elétrons estão confinados em um cubo de lado L tal que $V = L^3 = L_x L_y L_z$, e que as funções de onda satisfazem as condições periódicas de Born-von Kármán: $\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$; $\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$; $\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$. Utilizando estas condições de contorno, obtemos que as componentes do vetor de onda devem satisfazer as seguintes condições:

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi}{L} n_x & \text{sendo } n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ k_y = \frac{2\pi}{L} n_y & \text{sendo } n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ k_z = \frac{2\pi}{L} n_z & \text{sendo } n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{cases} \quad (2.5)$$

Portanto, os vetores permitidos são da forma:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} n_x \mathbf{i} + \frac{2\pi}{L} n_y \mathbf{j} + \frac{2\pi}{L} n_z \mathbf{k} \quad (2.6)$$

²Aproximação do elétron independente \Rightarrow não considera a interação elétron-elétron.

sendo $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. A equação de onda de um elétron (Equação 2.1) foi resolvida: para cada número quântico espacial \mathbf{k} (ou orbital) conhecemos a sua autofunção e seu autovalor. Agora, devemos preencher os níveis de energia de um elétron, com os N elétrons do gás, obedecendo o princípio de exclusão de Pauli. Este princípio nos diz que dois elétrons não podem ter todos os seus números quânticos iguais. Desta forma, para cada número quântico orbital \mathbf{k} , apenas dois elétrons podem ser acomodados: um com spin para cima e outro com spin para baixo. Para distribuir os N elétrons nos estados de uma partícula, começamos preenchendo os níveis de mais baixa energia.

A discussão que estamos apresentando nesta seção aplica-se para o estado fundamental de um sistema na temperatura do zero absoluto ($T = 0$ K)³. Este estado é obtido quando os N elétrons confinados no volume V ocupam os estados permitidos de mais baixas energias, respeitando as restrições imposta pelo princípio de exclusão de Pauli. Para o gás de elétrons livres que tem a relação de dispersão $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, no estado fundamental os N elétrons devem estar distribuídos de forma a ocupar os $\frac{N}{2}$ estados⁴ com os menores valores de $|\mathbf{k}|$ deixando os demais vazios.

Para contar os $\frac{N}{2}$ estados de mais baixa energia é conveniente representar os estados permitidos como pontos no espaço \mathbf{k} . Note que estes pontos estão uniformemente distribuídos no espaço \mathbf{k} , cada ponto ocupando um volume $\frac{8\pi^3}{V}$ uma vez que a distância entre dois pontos consecutivos é dada por $\frac{2\pi}{L}$. À medida que $L \rightarrow \infty$, a distribuição de pontos torna-se praticamente contínua, mas permanece contável, uma vez que temos $\frac{V}{8\pi^3}$ estados permitidos \mathbf{k} por unidade de volume.

Como dissemos, para obter o estado fundamental devemos distribuir os elétrons nos $\frac{N}{2}$ estados com os menores valores de \mathbf{k} . Assim, começando a partir da origem, os estados ocupados estarão distribuídos em uma esfera de raio k_F , denominado vetor de onda de Fermi. O raio desta esfera é determinado impondo-se que o volume da esfera contenha os $\frac{N}{2}$ estados de menor módulo de \mathbf{k} . Vamos então obter agora a

³Não estamos preocupados com as excitações térmicas dos elétrons.

⁴Observe que por causa da degenerescência de spin apenas $\frac{N}{2}$ estados são necessários para acomodar os N elétrons.

relação entre a densidade de elétrons e o raio da esfera necessário para acomodar os N elétrons. Sabemos que 1 ponto ocupa o volume $(8\pi^3/V)$ no espaço \mathbf{k} , e que este ponto pode acomodar 2 elétrons. Assim, fazendo uma regra de três podemos achar a relação desejada:

$$\left. \begin{array}{l} \text{1 ponto } \mathbf{k} \\ (N/2) \text{ pontos } \mathbf{k} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \text{ocupação} \\ \text{2 elétrons} \\ \text{N elétrons} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \text{volume} \\ \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \\ \frac{4\pi}{3} k_F^3 \end{array} \right\} \Rightarrow \quad (2.7)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{número de estados } \mathbf{k} \\ \text{contidos na} \\ \text{esfera de raio } k_F \end{array} \right\} = \frac{N}{2} = \underbrace{\frac{4\pi}{3} k_F^3}_{\text{volume da esfera}} \times \underbrace{\frac{V}{8\pi^3}}_{\text{n}^\circ \text{ estados/unidade volume}} \quad (2.8)$$

Se o gás tem densidade eletrônica $n = N/V$, vemos que k_F depende da densidade na forma $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$. Substituindo este valor de k_F na Equação 2.3, podemos determinar a energia de um elétron no nível de Fermi denominada energia de Fermi (ε_F). Uma vez que estamos trabalhando em $T=0$ K, esta energia é escrita como:

$$\varepsilon_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (2.9)$$

Uma grandeza importante que descreve as propriedades elétricas dos sólidos é a densidade de estados $g(E)$, a qual é definida como o número de estados eletrônicos $N(E)$ num intervalo de energia entre E e $E + dE$. Para determinar $g(E)$ utilizamos o fato que:

$$\begin{aligned} N &= 2(\text{do } spin) \times \frac{\text{Volume da esfera de Fermi}}{\text{volume ocupado por um único estado}} \\ &= 2 \times \frac{4}{3} \pi k_F^3 \times \frac{V}{8\pi^3} = \frac{k_F^3 V}{3\pi^2} \end{aligned} \quad (2.10)$$

e reescrevemos a Equação 2.10 como função da energia E ,

$$N(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (2.11)$$

Assim, a densidade de estados será:

$$\begin{aligned}
 g(E) &= \frac{N(E + dE) - N(E)}{E + dE - E} \\
 &= \frac{1}{V} \frac{dN}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

2.3 Gás de elétrons livres bidimensional

Um gás bidimensional de elétrons ou buracos tem como principal característica o fato que o movimento destes portadores é livre em duas direções do espaço (por exemplo, no plano xy) sendo confinado na terceira direção espacial (por exemplo, na direção do eixo z)⁵. No caso do gás de Fermi, são os elétrons da banda de condução (no caso dos semicondutores com dopagem do tipo n) ou os buracos na banda de valência (no caso dos semicondutores do tipo p) ou, ainda, os elétrons de valência (no caso dos metais) os portadores que participam da condução. Portanto, em um sistema bidimensional, são os elétrons ou os buracos que estarão confinados por algum potencial do tipo $U(z)$, oriundo do crescimento alternado de materiais semicondutores com diferentes *gaps* de energia. Nestes sistemas de semicondutores bidimensionais, a equação de Schrödinger que descreve o movimento dos portadores de carga na direção do crescimento é dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U(z) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{2.13}$$

onde m^* é a massa efetiva do elétron ou do buraco. Já que o movimento dos elétrons ou dos buracos é livre no plano xy e confinado por um potencial $U(z)$ na direção do eixo z , vamos usar como função de onda tentativa a função:

$$\psi(\boldsymbol{\rho}, z)_{\mathbf{k},n} = \frac{1}{\sqrt{S}} \phi_n(z) \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) = \phi(z) \psi(\boldsymbol{\rho}) \tag{2.14}$$

onde $\boldsymbol{\rho}$ é o vetor (x, y) , k_x e k_y são as componentes do vetor de onda e $\frac{1}{\sqrt{S}}$ é uma constante de normalização para estas funções sendo S a área da amostra na direção perpendicular ao crescimento, isto é, $S = L_x L_y$. Substituindo a Equação 2.14 na

⁵A convenção utilizada na literatura é que os portadores são livres para mover-se no plano xy mas confinados na direção z (a direção de crescimento do cristal semiconductor).

Equação. 2.13 obtemos a relação de dispersão:

$$E_{\mathbf{k},n} = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (2.15)$$

onde E_n são as autoenergias devido ao potencial de confinamento na direção de crescimento e n denota o índice dos níveis de confinamento.

Para um gás bidimensional, as componentes k_x e k_y do vetor de onda devem satisfazer as condições de contorno que dependem das dimensões L_x e L_y da amostra. Procedendo de forma semelhante à apresentada na Seção 2.2 e impondo as condições de contorno adequadas, obtemos os valores permitidos para k_x e k_y :

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \quad (2.16)$$

onde $n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. O número N de elétrons que pode ocupar um nível n pode ser calculado como:

$$N = 2(\text{do spin}) \times \frac{\text{superfície da circunferência de Fermi}}{\text{superfície de um único estado}} \quad (2.17)$$

$$N = 2 \times \pi k_F^2 \times \frac{S}{4\pi^2} = \frac{k_F^2 S}{2\pi}$$

Reescrevendo a expressão anterior como função da energia obtemos:

$$N(E) = \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} (E_{\mathbf{k},n} - E_n) \quad (2.18)$$

Desta forma, a densidade de estados por subbanda será dada por:

$$g(E) = \frac{1}{S} \frac{dN}{dE} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \Theta(E_{\mathbf{k},n} - E_n) \quad (2.19)$$

onde Θ é a função degrau definida como:

$$\begin{cases} \Theta(X) = 0 & \text{se } X < 0 \\ \Theta(X) = 1 & \text{se } X > 0 \end{cases}$$

A relação (2.19) mostra que em um poço quântico a densidade de estados é uma função descontínua da energia e tem um incremento igual a $\frac{m^*}{\pi \hbar^2}$ cada vez que a energia E passa por um autovalor de energia E_n . Para cada valor consecutivo de E_n , uma

nova subbanda de energia começa e a densidade de estados dá um salto, o que resulta em uma função com a forma de degraus.

2.4 Gás de elétrons num campo magnético

Nesta Seção apresentamos inicialmente o formalismo que descreve o movimento de um gás de elétrons livres tridimensional na presença de campo magnético. Em seguida, fazemos considerações sobre a dependência da degenerescência dos níveis eletrônicos com o campo magnético. Finalizamos esta seção apresentando de forma sucinta o formalismo que descreve o movimento dos portadores de um gás bidimensional sujeito a um campo magnético aplicado na direção do crescimento da amostra.

2.4.1 Quantização das órbitas dos elétrons livres

Elétrons livres em um campo magnético satisfazem a equação de Schrödinger:

$$\frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \psi = E\psi \quad (2.20)$$

onde \mathbf{A} é o potencial vetor. Assumindo o “gauge” $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ onde $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ teremos o campo magnético na direção z , $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$, e podemos reescrever a Equação 2.20 como:

$$\frac{1}{2m^*} \left(-\hbar^2 \nabla^2 - \frac{2\hbar}{i} e \nabla \mathbf{A} + e^2 \mathbf{A}^2 \right) \psi = E\psi \quad (2.21)$$

$$\frac{1}{2m^*} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2}{i^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{2\hbar e}{i} \frac{\partial(Bx)}{\partial y} + e^2 (Bx)^2 \right) \psi = E\psi \quad (2.22)$$

$$\frac{1}{2m^*} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - eBx \right)^2 \right\} \psi = E\psi \quad (2.23)$$

Multiplicando por $(2m^*/\hbar^2)$ temos:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieB}{\hbar} x \right)^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m^* E}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (2.24)$$

Vamos tentar uma solução na forma $\psi(x, y, z) = \exp\{i(k_y y + k_z z)\}u(x)$, onde $u(x)$ é uma função de onda solução da equação 2.24. Como,

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieB}{\hbar}x\right)^2 \psi = \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieB}{\hbar}x\right) \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{ieB}{\hbar}x\right) \psi = \left(ik_y - \frac{ieB}{\hbar}x\right)^2 \psi \quad (2.25)$$

então teremos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \left(k_y - \frac{eBx}{\hbar}\right)^2 u + (ik_z)^2 u + \frac{2m^*E}{\hbar^2} u = 0 \quad (2.26)$$

ou reagrupando os termos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left\{ \frac{2m^*}{\hbar^2} \underbrace{\left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}\right)}_{E'} - \left(k_y - \frac{eBx}{\hbar}\right)^2 \right\} u = 0 \quad (2.27)$$

ou

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left\{ \frac{2m^*E'}{\hbar^2} - \left(k_y - \frac{eBx}{\hbar}\right)^2 \right\} u = 0 \quad (2.28)$$

com

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (2.29)$$

O movimento na direção z , isto é, paralelo a \mathbf{B} , é igual ao do elétron livre e sua contribuição para a energia cinética é a mesma. Mas para estudar o movimento no plano xy temos que resolver a equação de autovalores 2.28, que pode ser reescrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m^* \left(\frac{eB}{m^*} x - \frac{\hbar k_y}{m^*} \right)^2 u(x) = E' u(x) \quad (2.30)$$

ou

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m^* \left(\frac{eB}{m^*} \right)^2 \left(x - \frac{\hbar k_y}{m^* \omega_c} \right)^2 u(x) = E' u(x) \quad (2.31)$$

Ainda podemos escrever a expressão anterior como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (x - x_0)^2 u(x) = E' u(x) \quad (2.32)$$

onde

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (2.33)$$

$$x_0 = \frac{\hbar k_y}{m^* \omega_c} \quad (2.34)$$

A Equação 2.32 é a equação de um oscilador harmônico de frequência ω_c , centrado no ponto x_0 . Desta forma, os autovalores desta equação são dados por:

$$E' = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \quad (2.35)$$

e os níveis de energia serão dados por:

$$E = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2 \quad (2.36)$$

Portanto, a energia de um estado eletrônico é a soma da energia de translação ao longo do campo com a energia quantizada do movimento ciclotrônico no plano perpendicular ao campo.

2.4.2 Como contar os estados: degenerescência dos níveis de Landau

Vamos fazer agora uma discussão a respeito do número de níveis em um dado volume do espaço. Suponha o elétron em uma caixa de volume $V = L_x L_y L_z$. Evidentemente, pelas condições de contorno k_z está quantizado como de costume:

$$k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z, \quad -\infty < n_z < \infty \quad (2.37)$$

e k_y , também está quantizado como:

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y \quad (2.38)$$

Como a energia não depende de k_y poderíamos pensar que para um dado valor de m na Equação 2.36 teríamos qualquer valor para k_y . Isto não é verdade pois a função de onda depende de k_y por intermédio de x_0 . Para determinar os possíveis valores de k_y

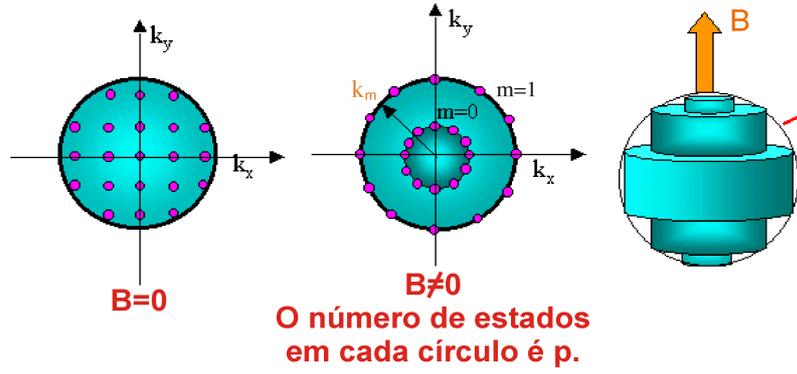


Figura 2.2: Esquema da quantização para elétrons livres: na ausência ($B = 0$) e na presença de campo magnético ($B \neq 0$).

impomos a restrição que $0 < x_0 < L_x$ uma vez que o centro do movimento ciclotrônico do elétron (x_0) deve “estar” dentro da caixa de volume V . Utilizando a relação 2.34, determinamos os valores permitidos de k_y :

$$0 < k_y < \frac{m^* \omega_c}{\hbar} L_x = \frac{eB}{\hbar} L_x \quad (2.39)$$

ou seja,

$$0 < n_y < \frac{m^* \omega_c}{2\pi\hbar} L_x L_y = p \quad (2.40)$$

Portanto, cada nível da Equação 2.36, correspondente a uma escolha de (m, k_z) , tem degenerescência p . Uma outra forma de interpretar este resultado é que cada função de onda $u_m(x)$ [$\propto H_m(x - x_0)$, onde H é o polinômio de Hermite] pode ser centrada em m -pontos diferentes.

Como vemos, o campo magnético quebra o esquema original de quantização: (k_x, k_y, k_z) não são mais bons números quânticos; apenas k_z se conserva e $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$ percorre um círculo com frequência ω_c . Podemos representar os m -novos níveis denominados níveis de Landau com um valor comum de energia sobre uma superfície correspondente à esta energia. Para o caso de elétrons livres, estas superfícies serão cilíndricas, como na Figura 2.2.

Esta quantização tem uma consequência importantíssima: a energia dos elétrons varia periodicamente com $\frac{1}{B}$. Vamos ilustrar isto para um caso simples, em $T = 0$ K.

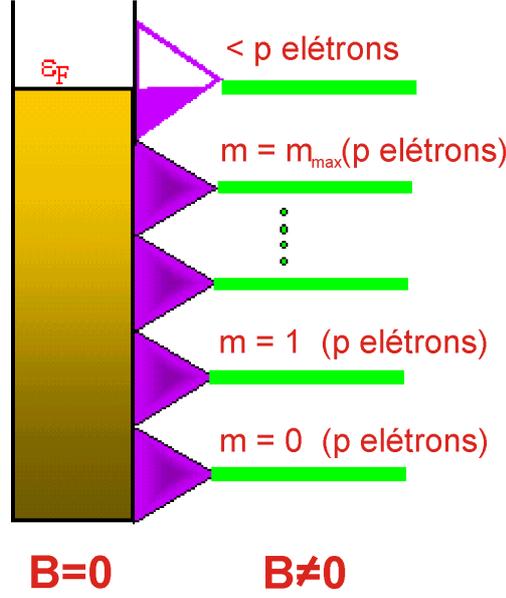


Figura 2.3: Esquema da quantização dos níveis de energia para elétrons livres: na ausência ($B = 0$) e na presença de campo magnético ($B \neq 0$).

Suponhamos $k_z = 0$. Assim, $E_m = \hbar\omega_c(m+1/2)$. Então teremos o esquema de energias como aquele representado na Figura 2.3. Podemos ver nesta figura que para $B \neq 0$, os elétrons se distribuem pelos níveis de Landau sendo que cada nível comporta, no máximo, p elétrons sendo:

$$p = \frac{eL_xL_y}{2\pi\hbar}B = \xi B \quad (2.41)$$

Podemos ainda observar na Figura 2.3 que existe um m_{max} tal que os níveis $0 \leq m \leq m_{max}$ estão cheios; o nível $m_{max}+1$ está parcialmente ocupado, isto é, $(1+m_{max})p+p' = N$. Neste caso, a energia total do gás de elétrons é:

$$E_{total} = \sum_{m=0}^{m_{max}} p\hbar\omega_c(m + \frac{1}{2}) + p'\hbar\omega_c(m_{max} + \frac{3}{2}) \quad (2.42)$$

Chamando $m_{max} = m_0$ a expressão anterior fica:

$$\begin{aligned} E_{total} &= \hbar\omega_c[\frac{p}{2}(m_0 + 1)^2 + N(m_0 + \frac{3}{2}) - p(m_0 + 1)(m_0 + \frac{3}{2})] \quad (2.43) \\ &= \hbar\omega_c[N(m_0 + \frac{3}{2}) - \frac{p}{2}(m_0 + 1)(m_0 + 2)] = \frac{e\hbar}{m^*}N(m_0 + \frac{3}{2})B - \frac{e\hbar}{2m^*}B^2(m_0 + 1)(m_0 + 2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2\mu_B B N m_0 - \mu_B \xi B^2 m_0^2 \Rightarrow \\
\epsilon &= \frac{E}{(\mu_B N^2 / \xi)} = 2 \left(\frac{m_0}{N} \right) \xi B - \left(\frac{m_0}{N} \right)^2 (\xi B)^2 \quad (2.44)
\end{aligned}$$

Quando o campo aumenta, o espaçamento entre os níveis aumenta ($= \hbar\omega_c$). Porém, também aumenta a capacidade de cada nível para acomodar elétrons e há uma redistribuição dos elétrons pelos níveis. Para um certo valor crítico do campo, o nível $(m_0 + 1)$ se esvazia completamente. Isto ocorre quando $m_{max} \rightarrow (m_{max} - 1)$, ou seja, quando $pm_{max} = N$ ou $\xi B m_{max} = N$. Para estes valores do campo, a energia é:

$$E = \frac{1}{2} p \hbar \omega_c m_{max}^2 = N \mu_B \left(\frac{N}{\xi} \right) = const. \quad (2.45)$$

Assim, a energia cai bruscamente, recomeçando a subir gradualmente à medida que o campo aumenta.

2.4.3 Gás bidimensional na presença de um campo magnético

Como vimos na Seção 2.3, o movimento de um gás bidimensional de elétrons (na ausência de campo magnético) é confinado na direção de crescimento (aqui considerada como sendo a direção z) e livre no plano xy . Na presença de um campo magnético aplicado paralelamente à direção z , os portadores do gás bidimensional descreverão órbitas circulares no plano xy e seu movimento será quantizado na direção do crescimento de acordo com o potencial imposto na direção z . Desta forma, a energia do elétron será dada por:

$$E = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + E_n \quad (2.46)$$

onde E_m são as energias de confinamento na direção z . Portanto, no caso do gás de elétrons bidimensional a energia de um estado eletrônico é a soma da energia de confinamento com a energia quantizada do movimento ciclotrônico no plano perpendicular ao campo.

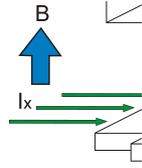
2.5 Propriedades de transporte

2.5.1 Efeito Hall clássico

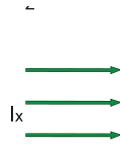
O efeito Hall clássico, que foi descoberto em 1879 por Edwin H. Hall [23,24], consiste no aparecimento de um campo elétrico transversal e uma diferença de potencial (V_H) num condutor (ou semicondutor) quando se aplica uma corrente elétrica paralela e um campo magnético perpendicular à superfície do condutor.

Para descrever este efeito com mais detalhes considere uma placa condutora retangular, na qual se aplica uma corrente I_x . Nesta situação, a amostra estará sujeita a uma diferença de potencial V_L , um campo elétrico E_x e uma densidade de corrente J_x ao longo do eixo x como está representado na Fig. 2.4a. Classicamente, a densidade de corrente obedece a lei de Ohm $J_x = \sigma E_x$, onde σ é a condutividade elétrica do material. Na presença de um campo magnético \mathbf{B} aplicado na direção do eixo $+z$, os portadores desta corrente sentem uma força (força de Lorentz), que os desloca na direção do eixo y (positivo para buracos e negativo para elétrons-veja a Figura. 2.4b). No caso de uma amostra com dimensão infinita na direção do eixo y , os elétrons movimentar-se-ão em uma direção que faz um ângulo relativo ao eixo x (ângulo Hall). No entanto, como as amostras são finitas na direção do eixo y , os portadores na presença do campo magnético acumular-se-ão num dos lados da amostra. Este acúmulo de cargas dá origem ao aparecimento de um campo elétrico $E_y = E_H$ (conhecido como campo Hall) e conseqüentemente a uma diferença de potencial V_H denominada voltagem Hall. O acúmulo dos portadores só cessa quando a intensidade do campo E_y é suficiente para dar origem a uma força elétrica capaz de balancear a força de Lorentz (Fig. 2.4c). Desta forma, com a força resultante nula na direção y , os portadores passarão a movimentar-se somente ao longo do eixo x .

É possível determinar o campo Hall, E_y , calculando-se a força de Lorentz que atua sobre os portadores. Assumindo que os portadores fluem na direção do eixo x , a força de Lorentz é igual a:



(a)



(b)



(c)

Figura 2.4: Ilustração do efeito Hall clássico num semiconductor: (a) Barra Hall usada nas medidas do efeito Hall onde I_x é a corrente elétrica que flui na direção do eixo x e V_L é a diferença de potencial aplicada; (b) Movimento das cargas na direção do eixo y devido à presença do campo magnético B_z ; (c) Os elétrons acumulam-se num dos lados da barra gerando um campo elétrico E_y e consequentemente a voltagem Hall, V_H .

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \\ &= -eE_x \mathbf{e}_x - e(E_y - v_x B_z) \mathbf{e}_y - eE_z \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (2.47)$$

onde \mathbf{v} é velocidade das cargas e \mathbf{B} é o campo magnético aplicado. Uma vez que no estado de equilíbrio as forças se anulam no eixo y , o campo Hall será dado por:

$$E_y = v_x B_z \quad (2.48)$$

Sabemos também da Figura 2.4c que o campo Hall também pode ser definido como

$$E_y = \frac{V_H}{L_y} \quad (2.49)$$

e que por definição a densidade de corrente é

$$J_x = \frac{I_x}{L_y L_z} = -en v_x \quad (2.50)$$

onde n é o número de portadores por unidade de volume, v_x velocidade de arraste dos portadores e L_z profundidade da placa condutora, não descrita na Figura 2.4. O sinal negativo vem do fato de termos considerado os elétrons como sendo os portadores de carga. Podemos agora reescrever o campo Hall em função da densidade de corrente J_x .

$$E_y = -\frac{J_x}{en} B_z \quad (2.51)$$

Desta forma, a partir da definição de resistência obtemos a relação da resistência Hall em função da densidade superficial:

$$R_H = R_{xy} = \frac{V_y}{I_x} = \frac{E_y L_y}{J_x L_y L_z} = \frac{B_z}{en L_z} = \frac{B_z}{en_s} \quad (2.52)$$

2.5.2 Efeito Hall quântico inteiro

Vimos na descrição do efeito Hall clássico que a resistência Hall ($R_H = B/n_s e$) de um gás de elétrons bidimensional é diretamente proporcional (variação linear) ao campo magnético aplicado (\mathbf{B}) e inversamente proporcional à densidade superficial de portadores (Eq. 2.52). No entanto, na segunda metade da década de 70 os primeiros indícios do que seria chamado efeito Hall quântico começaram a aparecer tanto em trabalhos teóricos quanto em trabalhos experimentais [25–28]. Medidas da resistência longitudinal e do efeito Hall em estruturas de *Si*-MOSFET (*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*) mostravam um comportamento diferente daquele observado no efeito Hall clássico: começou-se a observar a presença de platôs (ainda não muito bem definidos) na resistência Hall. Nas regiões onde os platôs eram observados, a resistência longitudinal R_{xx} alcançava valores próximos de zero. Observe na Figura 2.5 os platôs na condutividade Hall (σ_{xy}).

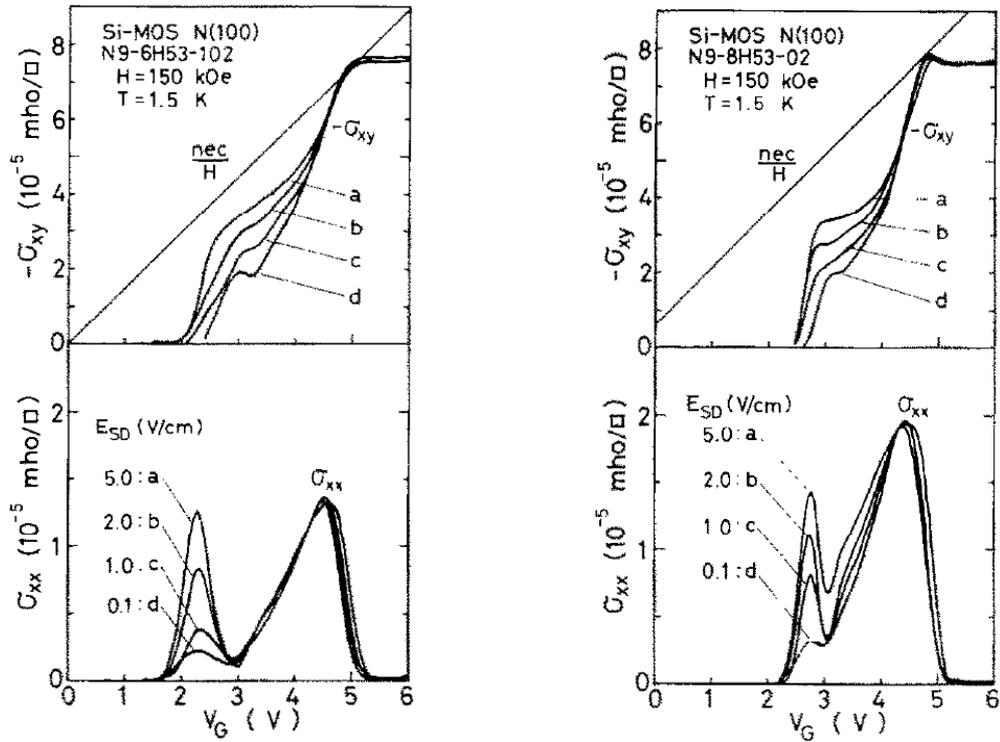


Figura 2.5: Dependência da condutividade Hall (σ_{xy}) e da condutividade transversal (σ_{xx}) de uma amostra de *Si*-MOSFET na temperatura de 1,5 K e na presença de um campo magnético de 15 T para diferentes valores de tensão de porta: (a) 5,0; (b) 2,0; (c) 1,0; (d) 0,1 V/cm^{-1} . Figura extraída da referência [26].

Os resultados mostrados na Figura 2.5 foram obtidos por Wakabayashi e Kawaji [26] em *Si*-MOSFET quando as medidas foram realizadas em campos magnéticos de 15 T na temperatura de 1,5 K. Um destes platôs apresentava valor igual a $2e^2/h$, mas não foi reconhecido como sendo oriundo da quantização da condutividade Hall [29]. Só no ano seguinte com o trabalho de K. von Klitzing e colaboradores [30] é que o efeito Hall quântico foi identificado. Estes autores realizaram seus estudos em estruturas de *Si*-MOSFET onde a densidade de portadores era variada enquanto o campo magnético era mantido constante. As principais observações provenientes destas medidas podem ser resumidas como a seguir:

- a) Observou-se nas medidas de efeito Hall regiões onde a resistência Hall não variava com o aumento (ou diminuição) da densidade de portadores, mas permanecia constante apresentando-se na forma de platôs. Nestas regiões a resistência longitudinal tomava valores próximos de zero.
- b) Nas regiões onde os platôs eram observados, a resistência Hall apresentava valores

de $h/\nu e^2$ (ν número inteiro).

- c) Os platôs não dependiam da amostra estudada e apresentavam sempre os mesmos valores da resistência Hall.

Com base nestes resultados, a quantização da resistência Hall (R_H) passa a ser expressa como:

$$R_H = \frac{1}{\nu(eB/h)} \frac{B}{e} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e^2} = \frac{R_K}{\nu} \quad (2.53)$$

onde denominou-se⁶ $R_K = (h/e^2) = 25812,807499(86)\Omega$ e ν é o fator de preenchimento dos níveis de Landau.

Quando descoberto o QHE (*Quantum Hall Effect*) em 1980, não havia uma teoria que o predissera. Um trabalho publicado anteriormente em 1975 por Ando e colaboradores [27], no qual foi estudado o efeito de impurezas nas propriedades de transporte de um gás bidimensional na presença de campos magnéticos altos, não levava à completa descrição dos resultados observados experimentalmente [29]. A explicação para a quantização de R_H só foi dada após a sua descoberta quando diversos trabalhos foram publicados. Nestes trabalhos se discutiu a origem dos platôs na resistência Hall como sendo resultado da presença de estados localizados [31].

Em amostras reais, defeitos e imperfeições estão sempre presentes produzindo efeitos de desordem que afetam as propriedades do material. Em particular, esta desordem altera o perfil da densidade de estados (DOS, *Density of States*) do gás de elétrons ao substituir o esquema da quantização dos níveis de Landau - representado por funções delta - para um esquema com níveis alargados pela presença das imperfeições e das impurezas intrínsecas do material, como representado na Figura. 2.6. As regiões próximas da DOS original correspondem aos estados estendidos, que participam efetivamente no transporte eletrônico. Já as regiões onde se deu o alargamento dos níveis de Landau correspondem aos estados localizados, que não participam no transporte eletrônico.

⁶A constante (h/e^2) é também chamada de constante von Klitzing em homenagem ao seu descobridor [7].

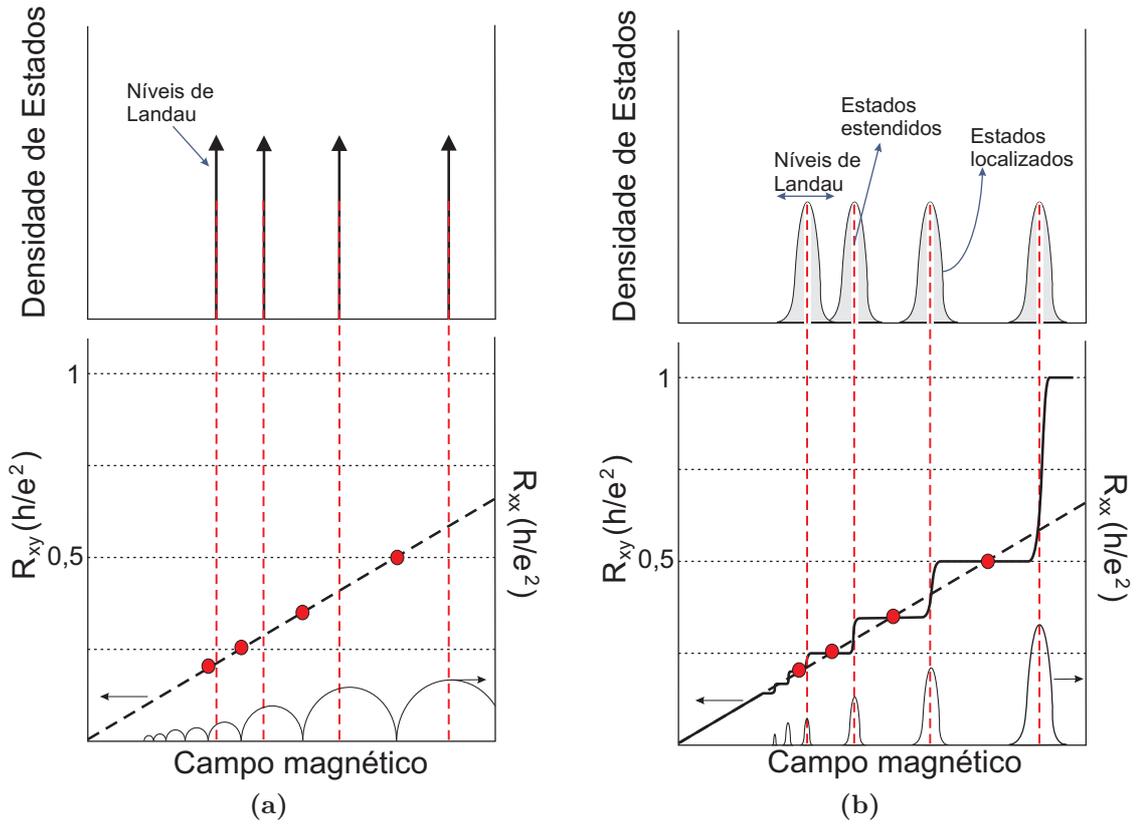


Figura 2.6: Representação da variação da densidade de estados da resistência Hall R_{xy} e da magnetoresistência R_{xx} em função do campo magnético: (a) Nos sistemas ideais a densidade de estados é representada por funções delta, a resistência Hall varia linearmente com o campo, e a magnetoresistência assume valores nulos quando o nível de Landau ($m+1$) é totalmente desocupado e os demais m níveis totalmente preenchidos. (b) Nos sistemas reais, a densidade de estados apresenta um alargamento devido à presença de defeitos e impurezas no material, a resistência Hall passa a apresentar platôs, e na região onde são observados os platôs a magnetoresistência assume valores nulos na região dos estados localizados.

Para entender a presença de platôs na resistência Hall, consideremos o gás bidimensional. A resistência Hall ($B/n_s e$) neste caso só assume valores quantizados quando os níveis de Landau estão totalmente cheios. Como vimos, com o aumento do campo magnético ocorre também um aumento da degenerescência dos níveis de Landau. Na medida que a intensidade do campo aumenta, os elétrons do gás passam a ocupar os estados de mais baixas energias desocupando aqueles de mais altas energias. Desta forma, por ocasião da transição dos elétrons de um nível de Landau a outro, a energia de Fermi muda de maneira descontínua pulando de um nível discreto a outro. Entretanto, quando consideramos a presença de estados localizados, a energia de Fermi passa a movimentar-se de maneira contínua por causa da existência da região dos estados localizados. É ao passar por esta região de estados localizados, onde os elétrons não

participam do transporte, que os platôs na resistência Hall aparecem e a resistência longitudinal R_{xx} toma valores próximos de zero. Por ocasião da passagem pela região de estados estendidos a energia de Fermi produz a desocupação de um nível de Landau aumentando assim a resistência Hall.

Capítulo 3

Crescimento das amostras e técnicas de caracterização empregadas

Neste capítulo descrevemos brevemente a técnica e o procedimento utilizados no crescimento das amostras, contendo os poços quânticos parabólicos estudados neste trabalho. Descreveremos também a tecnologia empregada no processamento das barras Hall fotogravadas nas amostras e o procedimento experimental utilizado para a realização das medidas de transporte para o estudo das propriedades do gás de elétrons ou buracos confinados nos poços quânticos parabólicos.

3.1 Crescimento por MBE

As amostras estudadas neste trabalho foram crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular [32] (MBE, *Molecular Beam Epitaxy*) que foi desenvolvida principalmente por A. Y. Cho e J. R. Arthur no final da década de 60 no *Bell Telephone Laboratories* [33]. Seu princípio baseia-se na evaporação térmica de materiais sólidos e a deposição do material evaporado sobre um substrato aquecido. Devido ao rápido processo de condensação do material evaporado, forma-se um filme fino que possui a estrutura do material sobre o qual o filme foi depositado.

No MBE, elementos ultra puros são aquecidos em células *Knudsen* até começarem a evaporar-se. O feixe de átomos ou moléculas, produto da evaporação, é colimado e direcionado para uma superfície aquecida (substrato) onde os elementos reagem e condensam-se (Fig. 3.1). Todo o processo de crescimento é feito em um ambiente de ultra-alto vácuo ($< 10^{-11}$ Torr) para garantir a integridade dos feixes durante o crescimento e limitar os níveis de impurezas. As condições acima descritas possibilitam produzir filmes com alta qualidade cristalina, imprescindível para a produção de diversas estruturas semicondutoras usadas na micro e optoeletrônica [34–36].

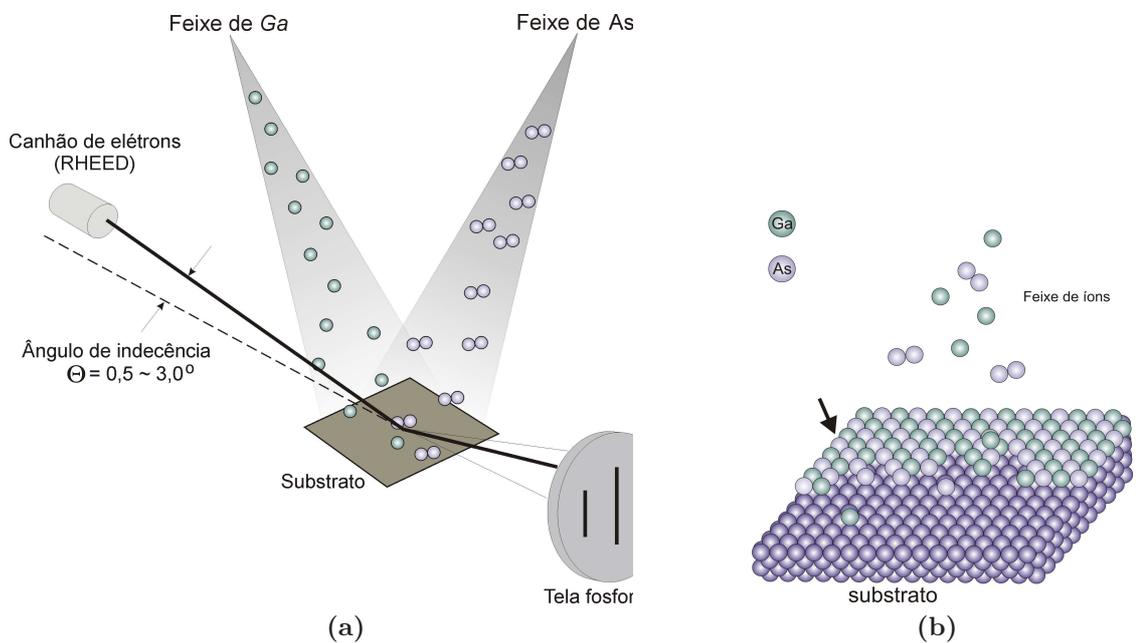


Figura 3.1: Representação esquemática do crescimento na técnica de MBE: (a) feixes de átomos direcionados para o substrato; (b) processo de condensação dos átomos sobre o substrato.

O crescimento da grande maioria das amostras usadas neste trabalho foi realizado no sistema MBE Varian GEN II do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores (LNMS) do Instituto de Física da Universidade de São Paulo (IFUSP). Este sistema é composto por três câmaras de ultra-alto vácuo isoladas entre si por válvulas do tipo gaveta (Fig. 3.2). A primeira câmara (não mostrada no desenho) é destinada à entrada e à saída das amostras. Na segunda câmara ou câmara intermediária é realizado um processo de degaseificação dos substratos antes de iniciar-se o crescimento. Na

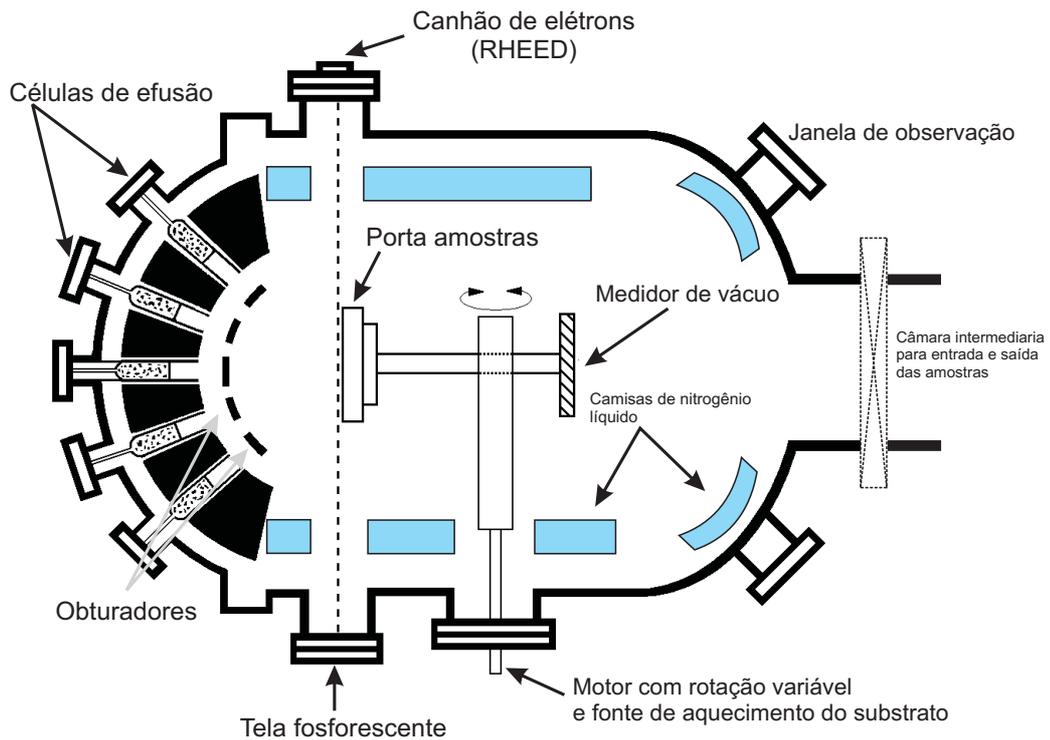


Figura 3.2: Esquema de um sistema típico de MBE utilizado no crescimento de heteroestruturas semicondutoras.

terceira câmara, onde é realizado o processo de crescimento propriamente dito, estão localizadas as células de efusão. No MBE do IFUSP as células de efusão contém os seguintes materiais sólidos: gálio (*Ga*), arsênio (*As*), alumínio (*Al*), índio (*In*), silício (*Si*) e carbono (*C*), todos com alto grau de pureza (99,99%). Um conjunto de obturadores localizados na frente de cada célula permite interromper-se o fluxo dos feixes de maneira quase imediata ($\approx 0,1$ s) o que possibilita o crescimento de estruturas com diferentes materiais semicondutores com interfaces abruptas entre eles.

A temperatura com que as células de efusão são aquecidas durante o crescimento é medida através de termopares e controlada por computador. Esta temperatura determina o fluxo com que os elementos são evaporados e por sua vez a taxa de crescimento. Nesta câmara também encontra-se uma fonte para o aquecimento do substrato e um motor que o faz girar de forma a garantir a uniformidade dos filmes durante o crescimento. A temperatura do substrato é monitorada por um termopar. O sistema possui também um conjunto de camisas de nitrogênio líquido. Elas agem como dissipadores térmicos evitando que a temperatura das células de efusão influencie

as vizinhas ao mesmo tempo que mantém a temperatura de crescimento do substrato constante. A câmara de crescimento está equipada com instrumentos que possibilitam a caracterização *in situ*, auxiliando e possibilitando o controle preciso das condições de crescimento. Estes instrumentos são: medidores de pressão, indicadores do fluxo das partículas, um espectrômetro de massa e um sistema de difração por feixe de elétrons. O espectrômetro de massa é utilizado na detecção das espécies químicas na câmara, possibilitando a análise da composição dos gases existentes na câmara durante o crescimento. O sistema de difração por feixe de elétrons RHEED (*Reflection High Energy Electron Diffraction*) permite obter informações sobre a estrutura cristalina das camadas crescidas através de um padrão de difração. Permite também calibrar o fluxo dos feixes e controlar a composição da liga e o número de camadas depositadas. [37].

3.2 Detalhes do crescimento dos poços quânticos parabólicos de $Al_xGa_{1-x}As$

As amostras que foram analisadas neste trabalho são estruturas de poços quânticos parabólicos de $Al_xGa_{1-x}As$ do tipo *n* e do tipo *p*. As heteroestruturas semicondutoras contendo os poços quânticos foram crescidas sobre substratos semi-isolantes de $GaAs$ com orientação cristalográfica (100) e (311)*A*. A razão de se utilizar substratos com diferentes orientações cristalográficas foi a de se aproveitar as propriedades anfotéricas do *Si* na dopagem dos compostos do grupo III-V.

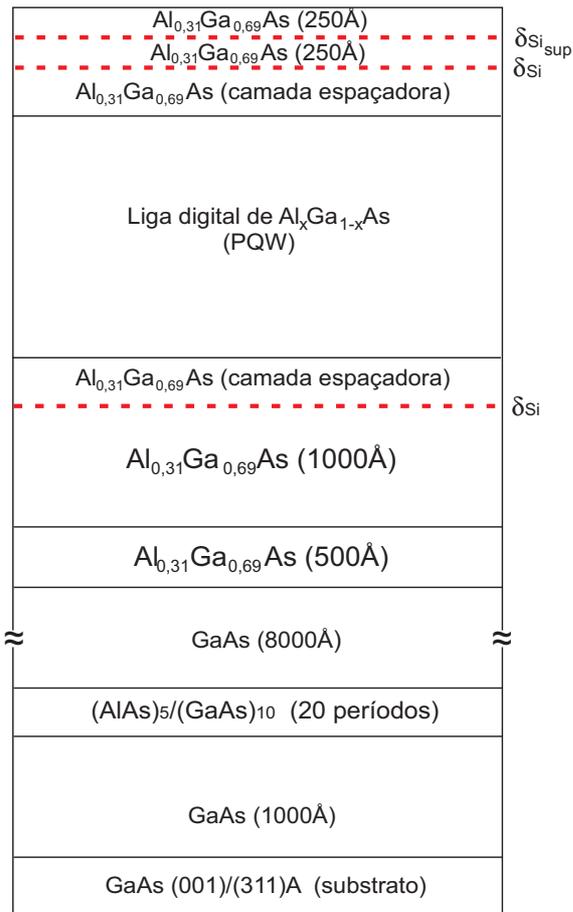
Uma forma muito utilizada para a obtenção de $AlGaAs$ ou de $GaAs$ com dopagem do tipo *p* consiste na utilização de berílio como dopante quando o crescimento é realizado sobre substratos de $GaAs$ com orientação cristalográfica (100). Entretanto, o sistema de crescimento epitaxial do LNMS não estava preparado para realizar dopagens com berílio. Assim sendo, para obtermos as amostras de interesse, utilizou-se um tipo de substrato que fornece camadas de $AlGaAs$ ou $GaAs$ com dopagem do tipo *p*, utilizando silício como dopante. [38–40]

O comportamento de silício (n ou p) em $GaAs$ ou em $AlGaAs$ pode ser definido pela orientação cristalográfica do substrato. Por exemplo, silício poderá ser um dopante

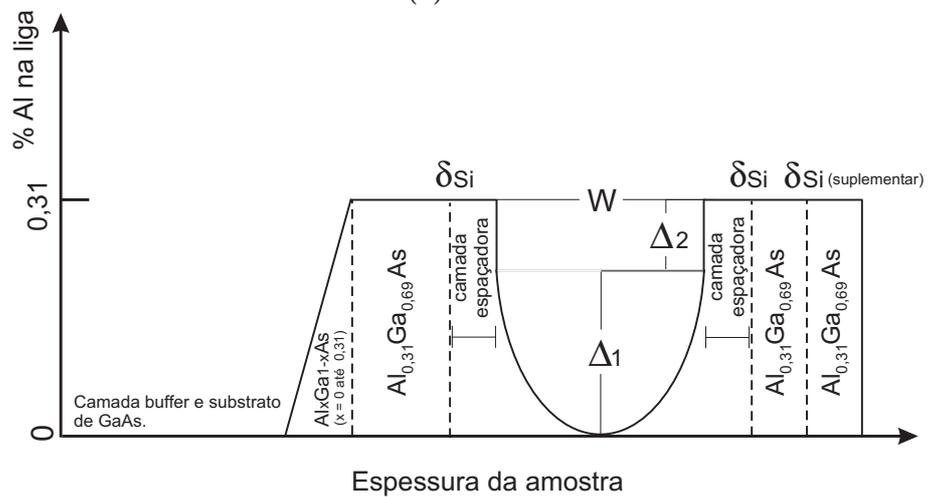
do tipo n , se utilizarmos um substrato com orientação (100) e o cristal for crescido em uma atmosfera rica em arsênio. Com esta orientação, e sob condições apropriadas de crescimento, átomos de silício incorporam-se preferencialmente nos sítios substitucionais de Ga dando origem a uma dopagem do tipo n . No entanto, planos de átomos perpendiculares às orientações cristalográficas (N11) ($N=1,2,3$ e 4) são formados exclusivamente por átomos de Ga ou As . Substratos que têm a sua superfície formada exclusivamente por átomos de gálio [arsênio] são denominados substratos do tipo (N11)A [(N11)B]. Efetuando-se a deposição de silício sobre um substrato do tipo (N11)A, os átomos dopantes ocuparão sítios substitucionais na sub-rede de arsênio, dando origem a uma dopagem do tipo p . [38]

Além das limitações do MBE do IFUSP em relação à utilização de berílio como dopante, diversos trabalhos na literatura mostraram que os poços quânticos de $AlGaAs$ e $GaAs$ (quadrados ou parabólicos) apresentam um gás de portadores de altíssima mobilidade, propriedade imprescindível para a descoberta de novos efeitos e fenômenos em Física Básica. Por estes motivos, isto é, o fato do MBE do IFUSP não conter berílio e a excelente qualidade das heteroestruturas reportadas na literatura utilizando silício como dopante do tipo n ou p , foi utilizado silício para a dopagem de nossas amostras.

A seguir, descrevemos a seqüência de camadas semicondutoras que compõem a estrutura das amostras analisadas neste trabalho. Uma representação esquemática da arquitetura das heteroestruturas é apresentada na Figura 3.3a. Previamente ao crescimento dos poços quânticos, uma camada *buffer* de 1000 Å de $GaAs$ é crescida, seguida de uma super-rede de 20 períodos de $(AlAs)_5/(GaAs)_{10}$ e de outra camada de 8000 Å de $GaAs$. Estas camadas são crescidas com a finalidade de melhorar a pureza e a qualidade cristalina da camada semicondutora adjacente ao substrato. A seguir, uma camada de 500 Å de $AlGaAs$ é crescida com concentração de alumínio variando linearmente de 0% a 31%, seguida de uma camada de $AlGaAs$ com a concentração uniforme de 31% de Al . Esta camada com a concentração constante de 31% constitui a barreira interna do poço e contém uma camada de dopagem planar de silício (δ_{Si}). Após a camada de dopantes, existe uma outra camada de $AlGaAs$ chamada



(a)



(b)

Figura 3.3: (a) Representação esquemática da seqüência das camadas semicondutoras que compõem as amostras dos PQWs analisadas neste trabalho. (b) Perfil da concentração de alumínio na liga de $AlGaAs$ que compõe a estrutura dos PQWs.

de camada espaçadora também com 31% na concentração de Al^1 . Esta camada tem por finalidade separar o gás de elétrons ou buracos confinado no poço parabólico dos

¹Durante o crescimento das amostras a temperatura do substrato é mantida a 580 °C

centros espalhadores coulombianos localizados na camada δ_{Si} . O PQW é então crescido, seguido de uma outra camada de espaçamento e uma outra camada planar de dopantes de Si . Finalmente é crescida uma camada de proteção (*cap layer*) de 500 Å de $AlGaAs$ com dopagem planar de Si no meio. A finalidade desta camada dopada é compensar a deficiência de cargas na superfície da amostra originada por ligações quebradas (*dangling-bonds*), o que melhora a qualidade elétrica da amostra.

O perfil de potencial parabólico dos poços quânticos é obtido através da técnica da liga digital. Nesta técnica, para obter o potencial parabólico a largura total do poço W é dividida em períodos de espessura L_p . Em cada período L_p , camadas finas de $GaAs$ e $AlAs$ são depositadas sendo que o percentual da quantidade do número de camadas de cada material definirá a composição média da liga de $AlGaAs$. Por exemplo, se quisermos ter uma liga de $AlGaAs$ com 30% de alumínio, podem ser crescidas 3 camadas de $AlAs$ e 7 camadas de $GaAs$ em um período L_p . Na média o conjunto de todos estes períodos com diferentes composições na liga produzirão o potencial parabólico. Nos nossos poços a largura L_p é de 20 Å uma vez que esta largura é considerada a mais adequada pois permite o tunelamento de elétrons e buracos [41].

A razão para se utilizar a técnica da liga digital é a mobilidade das cargas. Em sistemas crescidos através da técnica da liga analógica, onde a concentração de Al é variada de forma gradual, o espalhamento por desordem na liga se traduz numa baixa mobilidade dos portadores. Cálculos teóricos têm mostrado que o espalhamento por desordem é quem limita a mobilidade dos portadores em poços quânticos de ligas ternárias crescidas pela técnica da liga analógica. Entretanto, nos poços quânticos de liga digital este espalhamento é minimizado e como consequência obtêm-se portadores com maiores mobilidades [42,43]. O gráfico indicando a concentração de alumínio para a composição do perfil de potencial dos poços parabólicos está mostrado na Figura 3.3b.

Como mencionado inicialmente neste capítulo, as amostras estudadas neste trabalho foram crescidas no LNMS do Instituto de Física da USP e a amostra AG662 foi crescida no *Institute of Semiconductor Physics* em Novosibirsk na Rússia. Na Tabela 3.1 descrevemos os parâmetros importantes das amostras: W é a largura do poço, Δ_1

é a profundidade do poço, Δ_2 é a altura da barreira, L_s é a largura da camada de espaçamento e $n_{\delta Si}$ é a densidade de dopantes em cada uma das duas camadas delta de Si localizadas nas barreiras adjacentes ao poço. Δ_1 é função da concentração de Al na liga de $Al_xGa_{1-x}As$ do PQW (Eq. 3.1a) e varia de zero até 20% em poços quânticos com $W < 1500 \text{ \AA}$ e de zero até 27% em poços com $W > 1500 \text{ \AA}$. Δ_2 é definido como a diferença entre a concentração de Al na camada espaçadora e a concentração máxima de Al no PQW (Eq. 3.1b). Δ_1 e Δ_2 podem ser escritos em função da concentração de alumínio como:

$$\Delta_1 = 1000 \cdot Q_c(1.55x + 0.37x^2) \text{ meV} \quad (3.1a)$$

$$\Delta_2 = 1000 \cdot Q_c[1.55(y - x) + 0.37(y - x)^2] \text{ meV} \quad (3.1b)$$

onde x é a concentração de Al no poço quântico, y é a concentração de Al na camada espaçadora e Q_c^2 é um parâmetro adimensional que descreve a descontinuidade entre as bandas de condução (ou valência, Q_v) de dois semicondutores com diferentes energias de gap (Fig. 3.4). Este parâmetro foi determinado por Kopf e colaboradores [44] para poços parabólicos e triangulares de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ como sendo igual a $Q_c = 0,661$. Os poços estudados por ele, foram crescidos também através da técnica da liga digital, por esta razão e por ser um dos mais recentes valores achados na literatura temos adotamos este parâmetro para determinar as energias Δ_1 e Δ_2 nos poços do tipo n por nós estudados.

A seguir, na Tabela 3.1 apresentamos os parâmetros das amostras estudadas neste trabalho. As amostras são divididas em dois grupos: as com portadores elétrons (tipo n) e as com portadores buracos (tipo p).

² Q_c (Q_v) é definido como $Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g}$ ($Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_g}$) onde E_c (E_v) é a descontinuidade da banda de condução (valência) e ΔE_g é a diferença do gap entre o $Al_xGa_{1-x}As$ e o $GaAs$.

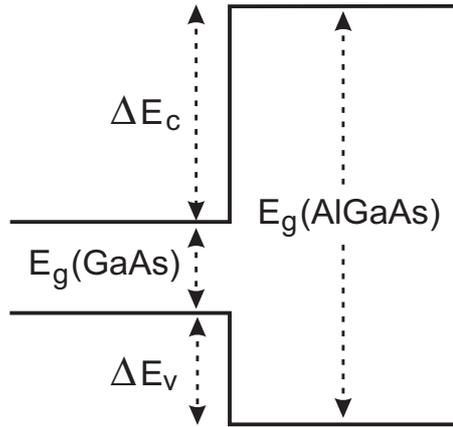


Figura 3.4: Diagrama das bandas de valência e de condução na interface entre o *GaAs* e o *AlGaAs*. ΔE_c e ΔE_v são as descontinuidades das bandas de condução e valência entre o $Al_xGa_{1-x}As$ ($x < 0,45$) e o *GaAs* respectivamente.

3.3 Processamento das amostras

Neste item descrevemos o procedimento utilizado para fotografar as amostras. Antes de fazer as medidas de magnetotransporte faz-se necessário produzir uma barra Hall nas amostras. Para isso, fizemos uso da técnica de fotolitografia que possibilita a transferência de padrões definidos de uma máscara para as amostras (Fig. 3.5). Primeiramente, deposita-se sobre a superfície da amostra uma camada de fotoresiste (resina fotosensível). Em seguida, coloca-se a máscara sobre a amostra e a expõe à luz ultravioleta. A região não protegida pela máscara sofre alterações em sua composição química. Mergulhando a amostra numa solução reveladora, a parte exposta do fotoresiste é eliminada restando sobre a superfície da amostra somente a parte não exposta do fotoresiste. Após a gravação da estrutura desejada, faz-se o ataque químico (*wet etching*) da região não protegida da amostra. A seguir, são colocados contatos ôhmicos nas áreas dos contatos da barra Hall. O processo para a realização da fotogravura das amostras foi realizado no LNMS, no LSI (Laboratório de Sistemas Integráveis), e no LME (Laboratório de Microeletrônica) da Escola Politécnica da USP. Detalhes de cada etapa do procedimento são apresentados na Tabela 3.2.

Tabela 3.1: Parâmetros de crescimento das amostras de PQW usadas neste trabalho.

Amostra	tipo de portador	Δ_1 (meV)	Δ_2 (meV)	L_s (Å)	W (Å)	$n_{\delta Si}$ (10^{11} cm^{-2})
2384	elétron	162,5	97,7	200	1000	5
2577	elétron	162,5	97,7	200	1000	5
2378	elétron	162,5	97,7	500	1000	5
2496	elétron	162,5	97,7	200	1500	5
2535	elétron	223,9	36,2	200	1700	5
2386	elétron	223,9	36,2	150	3000	10
AG662	elétron	223,9	36,2	100	4000	–
2384	buraco	83,3	50,1	200	1000	5
2496	buraco	83,3	50,1	200	1500	5
2385	buraco	114,9	18,6	150	2000	5
2500	buraco	114,9	18,6	150	2500	6,5
2518	buraco	114,9	18,6	150	2500	6,5
2386	buraco	114,9	18,6	150	3000	10

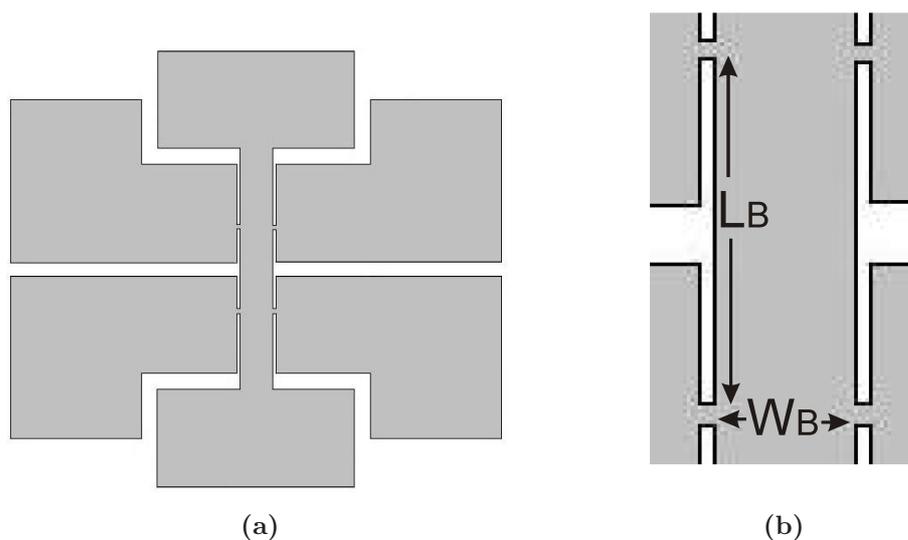


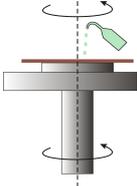
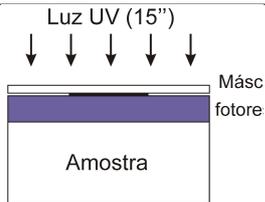
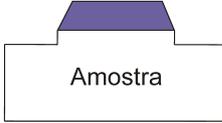
Figura 3.5: (a) Desenho da barra Hall usada nas amostras estudadas. (b) Ampliação da região central da barra Hall, onde o comprimento da barra L_B é $500\mu m$ e a largura W_B é $200\mu m$.

3.4 Caracterização dos poços parabólicos

3.4.1 Medidas de transporte

Os poços parabólicos foram caracterizados através de medidas de magnetoresistência (R_{xx} , resistência longitudinal) e resistência Hall (R_{xy} , resistência transversal). As medidas foram realizadas com campo magnético perpendicular à superfície das amostras e com variação da temperatura. Durante as medidas faz-se a variação do campo

Tabela 3.2: Detalhes das etapas do processo de fotogravura das amostras para a implantação da barra Hall.

Processos realizados	Descrição	
Limpeza	10 min em acetona a 80 °C. 10 min em isopropanol a 80 °C. Lavagem com água deionizada. Secagem com jato de gás N_2 .	
Aquecimento	Secagem da amostra a 200 °C durante 5 min.	
Aplicação do fotoresiste	Aplicação do fotoresiste AZ 3312 com <i>spinner</i> a 7000 rpm durante 30 seg.	
Cura	<i>Pré-bake</i> da amostra na temperatura de 110 °C durante 90 seg.	
Exposição à radiação UV	Gravação da barra Hall com fotoalinhadora. Tempo de exposição: 15 seg.	
Cura	<i>Pós-bake</i> da amostra na temperatura de 100 °C durante 90 seg.	
Revelação	Retirada do fotoresiste sensibilizado com revelador MIF 300. Tempo de revelação: 30 seg a 25 °C.	
Decapagem	Ataque químico da superfície exposta com solução de $3H_3PO_4 : H_2O_2 : 50H_2O$ na temperatura ambiente. Velocidade média de decapagem 1000 Å por min.	
Contatos ôhmicos	Difusão do <i>In</i> na temperatura de 400 °C por 3 min em atmosfera de N_2 , para amostras do tipo <i>n</i> . Difusão do <i>In:Zn</i> na temperatura de 420 °C por 5 min em atmosfera de N_2 para amostras do tipo <i>p</i> .	

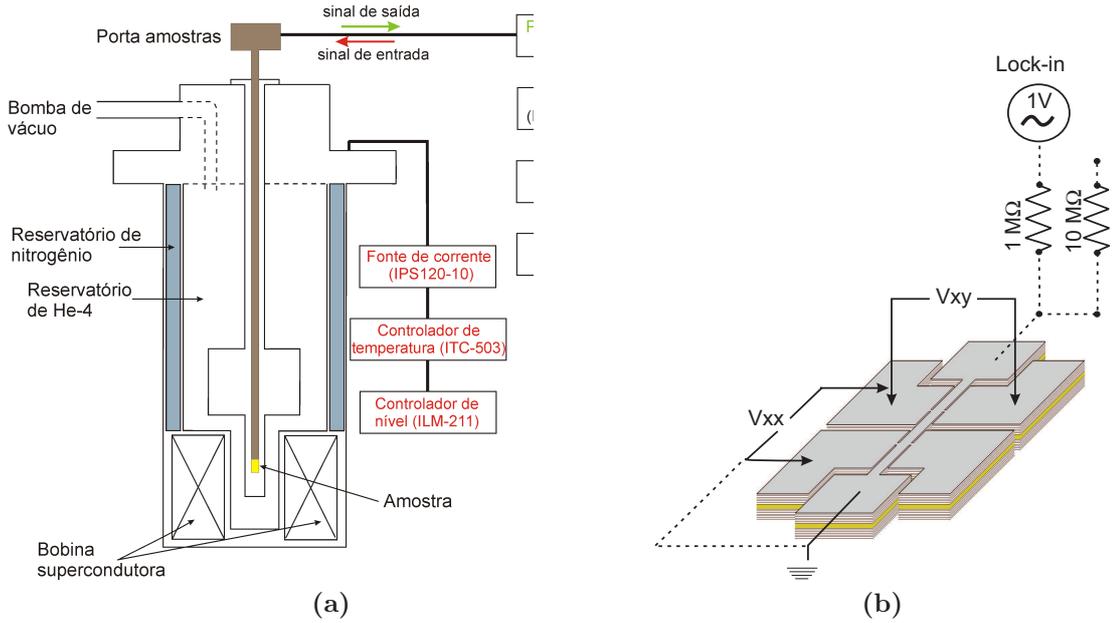


Figura 3.6: (a) Diagrama do sistema para medidas de transporte no LNMS. (b) Configuração elétrica na região da amostra.

magnético de zero até no máximos 13 T. As temperaturas alcançadas com o refrigerador de ${}^4\text{He}$ é de 1.6 K enquanto que com o refrigerador de diluição (que utiliza uma mistura de ${}^4\text{He}$ e ${}^3\text{He}$) é possível obter-se temperaturas de ≈ 50 mK. Durante as medidas faz-se variação de zero até no máximo 13 T para medidas com ${}^4\text{He}$. As medidas com o refrigerador de ${}^4\text{He}$ foram realizadas no LNMS e as medidas usando o refrigerador de diluição foram feitas no High Magnetic Field Laboratory de Grenoble na França.

O equipamento do LNMS (Fig. 3.6a) consiste de uma bobina supercondutora com capacidade de gerar campos até 15 T. Um sistema VTI (*Variable Temperature Insert*) da *Oxford Instruments* permite o controle da temperatura de 1,6 a 300 K. A sistema de medidas encontra-se equipado com um controlador de nível de hélio e nitrogênio, um controlador de temperatura, e uma fonte de corrente programável usada para o controle do campo magnético na bobina supercondutora. Para a manipulação das amostras existem dois tipos de porta amostras: um para medidas com campo magnético perpendicular (ou paralelo); um outro para as medidas onde é possível fazer uma variação do ângulo de inclinação do campo magnético em relação à superfície da amostra.

A aquisição dos dados é realizada com a configuração mostrada na Fig. 3.6b sendo que as resistências R_{xx} e R_{xy} podem ser medidas diretamente através das voltagens V_{xx} e V_{xy} :

$$R_{xx} = \frac{V_{xx}}{If}, \quad R_{xy} = \frac{V_{xy}}{I} \quad (3.2)$$

onde f é o fator geométrico da barra Hall definido como $f = L_B/W_B$ (Fig. 3.5b).

Para medir as voltagens (V_{xx} e V_{xy}) utiliza-se um pré-amplificador diferencial (EGG-5186 *Princeton Applied Research*) que envia o sinal medido para o *lock-in* o qual filtra o ruído do sinal recebido. Um multímetro envia o sinal da voltagem amplificado do *lock-in* ao computador para o armazenamento dos dados. Ao mesmo tempo que o *lock-in* serve para medir as ddp V_{xx} e V_{xy} , ele também fornece uma voltagem da ordem de 1 Volt à amostra. Esta voltagem utilizada no circuito elétrico apresentado na Figura 3.6b produz uma corrente da ordem de $1 \mu\text{A}$ na amostra.

3.4.2 Densidades e mobilidades

A densidade de portadores nos PQWs foi determinada através da resistência Hall usando-se a relação:

$$\frac{1}{qn_s} = \frac{R_{xy}(B_2) - R_{xy}(B_1)}{B_2 - B_1} \quad (3.3)$$

para campos de até $\sim 0,5$ T, onde efeitos da quantização ainda não são observados em baixas temperaturas.

Antes de iniciar as medidas com campo magnético medimos em geral a resistência R_{xy} e R_{xx} em campo nulo. O valor de R_{xx} em campo nulo é importante pois é usado para determinar as mobilidades dos portadores através da relação:

$$\mu = \frac{1}{R_{xx}(0)en_H} \quad (3.4)$$

Na Tabela 3.3 mostramos os valores obtidos para a densidade de portadores n_s , p_s e mobilidade μ das amostras estudadas neste trabalho.

Tabela 3.3: Densidade de portadores (n_s e p_s) e mobilidades (μ) medidas nas amostras estudadas.

Amostra	tipo de portador	L_s (Å)	W (Å)	n_s (10^{11} cm^{-2})	p_s (10^{11} cm^{-2})	μ ($10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)
2384	elétron	200	1000	4,6	—	170
2577	elétron	200	1000	4,2	—	353
2378	elétron	500	1000	2,3	—	153
2496	elétron	200	1500	3,5	—	140
2535	elétron	200	1700	3,2	—	220
2386	elétron	150	3000	2,9	—	118
AG662	elétron	100	4000	1,5	—	120
2384	buraco	200	1000	—	3,7	62
2496	buraco	200	1500	—	2,44	53
2496	buraco	200	1500	—	2,4	53
2385	buraco	150	2000	—	2,4	43
2500	buraco	150	2500	—	2,2	32
2518	buraco	150	2500	—	2,4	35
2386	buraco	150	3000	—	1,7	57

Capítulo 4

Estrutura eletrônica dos poços parabólicos de $AlGaAs/GaAs$

4.1 Modelamento do potencial parabólico: fundamentos teóricos

Poços quânticos parabólicos são sistemas nos quais é possível obter-se um gás de elétrons (ou buracos) com distribuição de cargas uniforme e de alta mobilidade. Os primeiros trabalhos onde este tipo de heteroestrutura foi proposto são os de Sundaram [17] e Shayegan [18] que tinham por objetivo obter o *jellium*, isto é, um gás de elétrons quase-tridimensional com altíssima mobilidade. [46] O *jellium* seria um sistema neutro, composto por um gás de elétrons que poderia movimentar-se na presença de uma distribuição uniforme de cargas positivas. De acordo com estes autores, tal sistema poderia apresentar novas propriedades tais como: ondas de densidade de cargas (*charge density waves* [48]), ondas de densidade de spins (*spin density waves* [49]) e cristalização de Wigner [50] quando em baixas temperaturas (na faixa de mili-Kelvin) e sob ação de campos magnéticos altos. Para obter os poços quânticos com os perfis de potencial desejados, eles utilizaram a liga ternária de $Al_xGa_{1-x}As$ e variaram gradualmente a composição de alumínio da liga de forma a obter o perfil parabólico desejado. Os elétrons envolvidos no processo de condução no interior do poço parabólico eram provenientes das barreiras dopadas localizadas em ambos os lados do poço. Uma camada de espaçamento era introduzida entre o gás confinado e as impurezas dopantes

de forma a minimizar o espalhamento coulombiano dos portadores pelas impurezas ionizadas de silício. Portanto, a espessura desta camada de espaçamento era escolhida de forma a obter-se um gás de elétrons com alta mobilidade.

Para obter experimentalmente estas cargas essencialmente livres dos potenciais, é preciso combinar dois ingredientes básicos. Uma idéia é compensar o potencial parabólico gerado por uma distribuição uniforme de cargas com um potencial parabólico confinador, criado artificialmente. A outra idéia é a da dopagem remota [11] que assegura a alta mobilidade dos portadores.

Vamos analisar qual é o perfil de potencial que precisamos fabricar para compensar, ou *blindar*, o potencial gerado por uma distribuição uniforme de cargas. Como as larguras dos poços que consideraremos são maiores do que 1000 Å, inicialmente vamos desprezar as energias de confinamento e o caráter ondular dos portadores. Assim, podemos considerar a distribuição das cargas como sendo uniforme e o potencial $V(z)$ por ela gerado como sendo dado pela solução da equação de Poisson:

$$\frac{d^2V(z)}{dz^2} = \frac{en(z)}{\epsilon}. \quad (4.1)$$

sendo ϵ a constante dielétrica do meio (que foi considerada constante em toda a heteroestrutura) e $n(z)$ a densidade volumétrica das cargas e . A solução desta equação para uma distribuição uniforme é imediata:

$$V(z) = \frac{e}{2\epsilon}n(z)(z - z_0)^2 \quad (4.2)$$

onde z_0 é o centro do poço.

Para compensar o potencial parabólico determinado pela distribuição $n(z)$ precisamos produzir um outro potencial parabólico, mas com sinal oposto, para compensar o potencial gerado pelo gás de elétrons. Isto pode ser feito através da variação da composição da liga ao longo do eixo z . Para muitos materiais compostos a variação do *gap* e as posições dos extremos das bandas de condução e valência têm uma dependência

linear com a composição da liga (Lei de Vegard)¹. Portanto, o potencial compensador pode ser obtido por meio de um perfil de composição parabólico. Como dissemos no Capítulo 3, em nosso trabalho utilizamos a técnica do crescimento digital para obter tais perfis de composição.

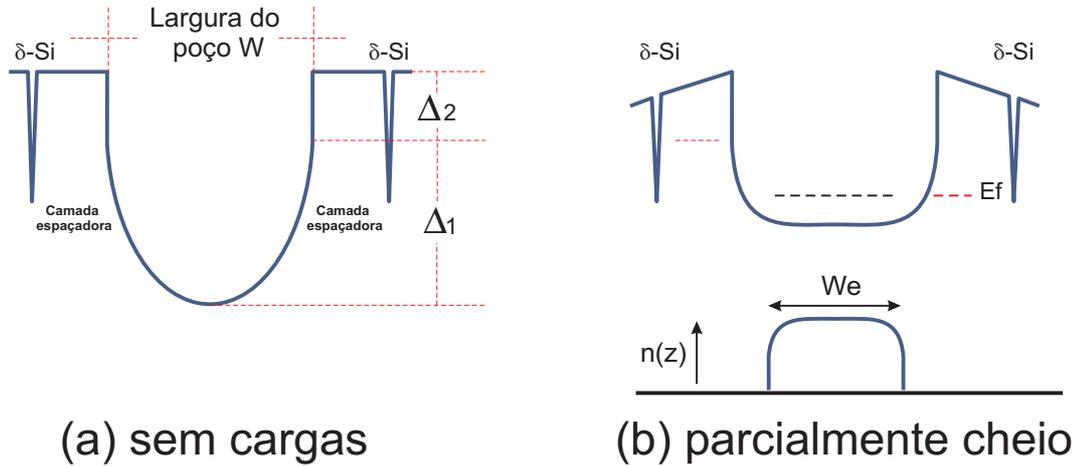


Figura 4.1: Esquema representativo que mostra o perfil de potencial e os parâmetros relacionados com a arquitetura de um poço parabólico.

Na Figura 4.1a mostramos o perfil do potencial para um poço típico sem cargas, *i.e.*, determinado apenas pela variação da composição da liga de $AlGaAs$. Este potencial consiste de uma parte parabólica e uma parte quadrada dada pela barreira. Para um poço com largura W e profundidade da parte parabólica Δ_1 o potencial é dado por:

$$V_p(z) = -\frac{1}{e} \frac{4\Delta_1}{W^2} z^2 \quad (4.3)$$

para um poço centrado na origem, isto é, para $-W/2 \leq z \leq W/2$. Este perfil de potencial é igual ao que seria produzido por uma camada uniforme de cargas positivas (veja Eq. 4.2). É conveniente introduzir o parâmetro n_+ que descreve uma densidade de cargas positivas fictícias que produzem o potencial descrito na Equação 4.3,

$$n_+ = \frac{8\Delta_1\epsilon}{e^2W^2} \quad (4.4)$$

¹Nas estruturas que estudamos utilizamos a liga de $Al_xGa_{1-x}As$ para obter o potencial parabólico. Para este material, a lei de Vegard é válida até $x \approx 0,45$.

A compensação total da parte parabólica do potencial do poço vazio ocorre quando enchemos o poço com $n = n_+$ cargas negativas. Este preenchimento total levaria a um poço de potencial quadrado (o potencial agora é dado somente pela barreira). Assim é possível atingir, em princípio, o nosso objetivo de obter um sistema de cargas uniformes interagindo apenas entre si, do tipo *jellium*.

Antes de continuar, vamos olhar com mais cuidado a suposição que fizemos ao usar uma densidade de cargas uniforme na equação de Poisson (Eq. 4.1). Se a largura do poço for pequena, comparável com o comprimento de onda de de Broglie dos elétrons, não mais podemos desprezar a quantização dos níveis de energia. Ao mesmo tempo, a função de onda dos elétrons e a distribuição da densidade de cargas não mais serão uniformes. Para poços muito profundos e estreitos teremos o usual gás quase-bidimensional. Nestes sistemas, os estados eletrônicos se dividem em subbandas que são preenchidas na medida que aumentamos a densidade de cargas no poço. Por exemplo, para um poço parabólico quase vazio, as energias serão as de um oscilador harmônico com as energias das subbandas igualmente espaçadas entre si e com as suas funções de onda características. Entretanto, na medida que aumentamos a densidade do gás de elétrons em um poço parabólico, o potencial confinador se modifica. Desta forma, uma descrição detalhada do perfil do potencial e da distribuição das cargas nas diversas subbandas requer um cálculo autoconsistente, já que o potencial total depende da distribuição de cargas e a distribuição das cargas por sua vez depende do potencial confinador.

Um preenchimento parcial do poço leva a um perfil intermediário (entre parabólico e quadrado) como mostrado na Figura 4.1b. Para descrever esta situação intermediária é útil introduzirmos novas definições. Definimos a densidade superficial de cargas como $n_s = n_+ W_e$ e a ocupação fracionária como sendo $f = n_s / n_+ W$. Quando o poço está parcialmente preenchido a distribuição das cargas não ocupa toda a largura do poço W . Desta forma, é útil considerar uma largura efetiva W_e (veja a Fig. 4.1b) dada por:

$$W_e = \frac{n_s}{n_+} = fW \quad (4.5)$$

Neste capítulo apresentaremos resultados experimentais da densidade superficial

de cargas para poços dopados com elétrons (n_s) e com buracos (p_s) e os comparemos com resultados de cálculos numéricos e analíticos. Veremos que os cálculos numéricos reproduzem os resultados experimentais e que as expressões analíticas que derivamos fornecem uma boa descrição qualitativa do comportamento da densidade n_s . As expressões analíticas são imprecindíveis no caso dos poços contendo um gás de buracos para os quais os cálculos numéricos autoconsistentes são mais complicados. Na próxima seção apresentamos o método usado para realizar os cálculos autoconsistentes para o caso mais simples de um poço isolado.

4.2 Cálculos autoconsistentes: formalismo

Para quantificar as considerações que acabamos de apresentar é necessário fazer cálculos mais detalhados. Nesta seção descrevemos o modelamento utilizado nos cálculos numéricos seguindo o procedimento proposto por Rimberg e Westervelt [47] para os PQW. Resumidamente, através da solução autoconsistente da equação de Schrödinger para a distribuição de cargas e da solução da equação de Poisson para o potencial eletrostático, podemos determinar o perfil do potencial total, os níveis de energia, e a densidade de cargas no poço. Nesta primeira parte consideraremos o poço como um sistema isolado, não levando em consideração o processo de transferência de cargas existente entre as diversas camadas semicondutoras que compõem a heteroestrutura, nem os efeitos produzidos pelo campo magnético.

As funções de onda normalizadas $\phi_n(z)$ dos elétrons confinados na n -ésima subbanda do potencial parabólico são as soluções da equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} \phi_n(z) - eV(z)\phi_n(z) = E_n \quad (4.6)$$

onde E_n é a energia da n -ésima subbanda e $V(z)$ é o potencial total efetivo dentro do poço. O potencial total ou efetivo $V(z)$ inclui os seguintes termos:

$$V(z) = V_p(z) + V_H(z) + V_{xc}(z) \quad (4.7)$$

sendo $V_p(z)$ o potencial parabólico (Eq. 4.3) definido pela composição e pelo período

da liga digital, $V_H(z)$ descreve a repulsão eletrostática entre os portadores do gás e é obtido através da solução da equação de Poisson, e $V_{xc}(z)$ é o potencial de troca-correlação que leva em conta o caráter fermiônico dos elétrons. A equação de Poisson a ser resolvida junto com a equação de Schrödinger é:

$$\frac{d^2 V_H}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon} \left[\sum_n n_s^{(n)} |\phi_n(z)|^2 \right] \quad (4.8)$$

onde $\sum_n n_s^{(n)} |\phi_n(z)|^2 = n(z)$ é a densidade volumétrica do gás bidimensional e $\epsilon = \kappa \epsilon_0$ é a constante dielétrica no poço. A densidade superficial de elétrons na n -ésima subbanda na temperatura $T = 0$ K é dada por $n_s^{(n)} = m^*(\epsilon_F - E_n)/\pi \hbar^2$ sendo $(\epsilon_F - E_n)$ a diferença entre a energia de Fermi e a energia da n -ésima subbanda.

A contribuição do potencial de troca-correlação $V_{xc}(z)$ à energia dos elétrons é geralmente incluída através de uma aproximação local para a densidade de cargas [51–53]. Neste trabalho usamos a forma proposta por Hedin-Lundqvist: [54]

$$V_{xc}(z) = - \left[1 + 0.7734x \ln \left(1 + \frac{1}{x} \right) \right] \left(\frac{2}{\pi \alpha r_s} \right) R_y^* \quad (4.9)$$

$$\alpha = (4/9\pi)^{1/3}, \quad x \equiv x(z) = r_s/21$$

$$r_s \equiv r_s(z) = \left[\frac{4}{3} \pi a_B^*{}^3 n(z) \right]^{-1/3} \quad (4.10)$$

$$a_B^* = 4\pi \epsilon \hbar^2 / m^* e^2 \quad (4.11)$$

sendo $\epsilon \equiv \epsilon(z)$ a constante dielétrica do poço e $m^* \equiv m^*(z)$ a massa efetiva dos elétrons. O potencial acima descrito é dado em unidades da constante de Rydberg, $R_y^* \equiv e^2/2\epsilon a_B^*$ onde a constante a_B^* é o radio de Bohr.

Nas equações anteriores, a dependência da massa efetiva $m^* \equiv m^*(z)$ e da constante dielétrica $\epsilon \equiv \epsilon(z)$ com a concentração de Al na liga de $Al_x Ga_{1-x} As$ é dada por:

$$\begin{aligned} \epsilon(z) &= \epsilon_0 [12,9 - 2,84x(z)] \\ m^*(z) &= m_0 [0,067 + 0,0838x(z)] \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ F/m, $m_0 = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg e $x(z)$ é a concentração de Al em função da posição dentro do poço. Diversos trabalhos têm mostrado que variações nos valores da massa efetiva e da constante dielétrica não causam modificações apreciáveis na estrutura eletrônica dos poços. Por exemplo, das Sarma (1993) [55] mostrou que uma variação da ordem de 25% na massa $m^*(z)$ não introduz mudanças significativas nos resultados. Além disso, mostrou-se também que uma variação da ordem de $\sim 5\%$ na constante dielétrica resulta numa variação desprezível no resultado final. Em nosso trabalho consideramos a constante dielétrica $\epsilon = 12,9\epsilon_0$ [47] e a massa efetiva $m^* = 0,067$. [56]

Com base na teoria apresentada é possível achar de maneira autoconsistente a solução para a equação de Schrödinger e de Poisson, resolvendo as equações Eq. 4.6, 4.7, 4.8 e 4.9 numericamente e de forma iterativa [57]. Inicialmente calcula-se um potencial inicial ou potencial de prova $V_H^{inicial}$ usando, por exemplo, alguma aproximação analítica. Com este potencial podem ser determinadas numa primeira iteração as autofunções $\phi_n^0(z)$ e os autovalores E_n^0 da equação da Schrödinger (Eq. 4.6). Tendo determinado as autofunções, a distribuição da densidade de cargas inicial $n^0(z)$ pode ser calculada e, em seguida, pode-se determinar um novo potencial V_H^0 a partir da equação de Poisson. Se os potenciais de saída V_H^0 e de entrada $V_H^{inicial}$ se aproximam um do outro, dizemos que o cálculo converge. Inicia-se uma segunda iteração, onde o potencial usado no cálculo é uma *mistura* dos potenciais de entrada e saída (Eq. 4.13). Com o potencial V_H^0 são calculadas as autofunções $\phi_n^1(z)$ e auto-energias E_n^1 da equação de Schrödinger e um novo potencial V_H^1 na equação de Poisson. As iterações continuam até o sistema atingir a convergência entre os potenciais de entrada e de saída de acordo com um critério previamente estabelecido.²

A equação de mistura usada para os potenciais V_H é da forma:

$$V_H^{(n+1)} = V_H^{(n)} + f \left(V_H^{(n+1)} - V_H^{(n)} \right) \quad (4.13)$$

onde f é um fator independente de z que varia de 0 a 1. Para $f = 1$ a convergência pode ser rápida, mas também pode conduzir a uma divergência dos resultados. Já

²Nos nossos cálculos este erro se encontra na faixa de 1 a 2 %.

valores pequenos³ garantem uma melhor convergência ao custo de um maior tempo de processamento. De acordo com os resultados de C. A. Duarte, a técnica de misturar os potenciais oferece melhores resultados quando comparados com aqueles obtidos por outros autores [58].

4.3 Resultados dos cálculos autoconsistentes para poços parabólicos com larguras $W=1000 \text{ \AA}$ e $W=4000 \text{ \AA}$

Com o modelamento apresentado na seção anterior determinamos a estrutura eletrônica dos poços parabólicos usando os parâmetros que caracterizam nossas amostras. Estes cálculos dão acesso aos níveis de energia dos estados eletrônicos, à distribuição de cargas, e ao potencial total em que os elétrons se movem. A título de comparação, apresentamos na Tabela 4.1 os resultados obtidos neste trabalho com aqueles obtidos em um trabalho anterior [59]. Podemos observar nesta tabela que, ainda que usados métodos numéricos diferentes, existe uma excelente concordância entre ambos resultados, indicando que o nosso programa reproduz dados publicados anteriormente. Os parâmetros utilizados em ambos os cálculos foram: largura do poço $W = 2000 \text{ \AA}$, densidade superficial de portadores $n_s = 3,9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço parabólico $\Delta_1 = 155 \text{ meV}$, altura da barreira $\Delta_2 = 75 \text{ meV}$, $m^* = 0,075 m_0$ e $\epsilon = 12,67\epsilon_0$.

Tabela 4.1: Comparação dos nossos autovalores de energia com aqueles obtidos na Referência [59] (colunas 4 e 5). Em ambos os cálculos utilizou-se para a largura do poço parabólico $W = 2000 \text{ \AA}$ e para a densidade superficial de portadores $n_s = 3,9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Subbanda	Energia (meV)	$n_s^{(n)}$ 10^{11} cm^{-2}	Energia (meV)	$n_s^{(n)}$ 10^{11} cm^{-2}
1	0,12	1,14	0,12	1,15
2	0,50	1,04	0,47	1,05
3	1,15	0,85	1,05	0,87
4	2,06	0,60	1,88	0,61
5	3,24	0,27	2,94	0,22

³Os valores de f usados nos nossos cálculos têm variado de 0,01 a 0,1.

Vamos mostrar agora os nossos resultados para os poços com larguras $W = 1000 \text{ \AA}$ e $W = 4000 \text{ \AA}$. Estes valores foram escolhidos pois representam os limites superior e inferior da largura dos poços das amostras que estudamos experimentalmente. Para a densidade superficial de cargas n_s usamos o valor medido experimentalmente. Na Tabela 4.2 mostramos os resultados obtidos para o poço com largura $W = 1000 \text{ \AA}$ e densidade superficial de portadores $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, e na Tabela 4.3 mostramos os resultados obtidos para o poço com largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e densidade superficial de portadores $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Tabela 4.2: Autovalores e ocupação dos níveis de energia de um poço parabólico de largura $W = 1000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 162,5 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 97,7 \text{ meV}$.

Subbanda	Energia (meV)	$n_s^{(n)} \cdot 10^{11} (\text{cm}^{-2})$
1	1,643	2,67
2	5,805	1,52
3	11,404	0,01

Tabela 4.3: Energias e densidades de cargas para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 223,9 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 36,2 \text{ meV}$.

Subbanda	Energia (meV)	$n_s^{(n)} \cdot 10^{11} (\text{cm}^{-2})$
1	0,182	0,59
2	0,522	0,49
3	1,087	0,33
4	1,863	0,09

O número de subbandas com ocupação apreciável é menor para o poço de menor largura (compare os resultados das Tabelas 4.2 e 4.3). Também confirmando as considerações qualitativas feitas anteriormente temos que para o poço de maior largura a distribuição de cargas é mais homogênea, com o potencial total constante em uma distância relativamente maior (veja as Figuras 4.2 e 4.4). Observamos também nas Figuras 4.2 e 4.3 que o potencial original modifica-se relativamente menos ao se introduzir as cargas nos poços de menor largura. Vale ressaltar que as energias das subbandas são muito pequenas quando comparadas com a altura do poço, por esta razão na Figura 4.6 mostramos detalhes dos níveis de energia ocupados para o caso do poço de 1000 \AA .

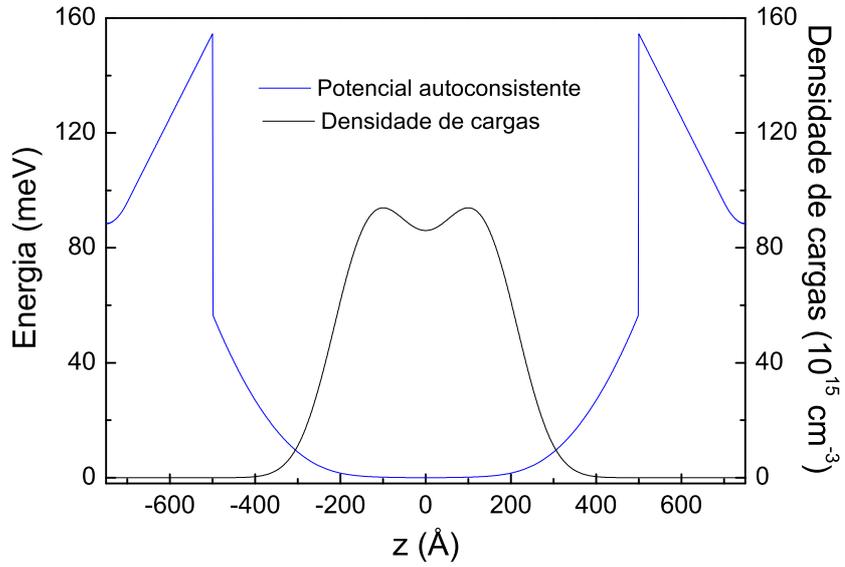


Figura 4.2: Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 162,5 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 97,7 \text{ meV}$.

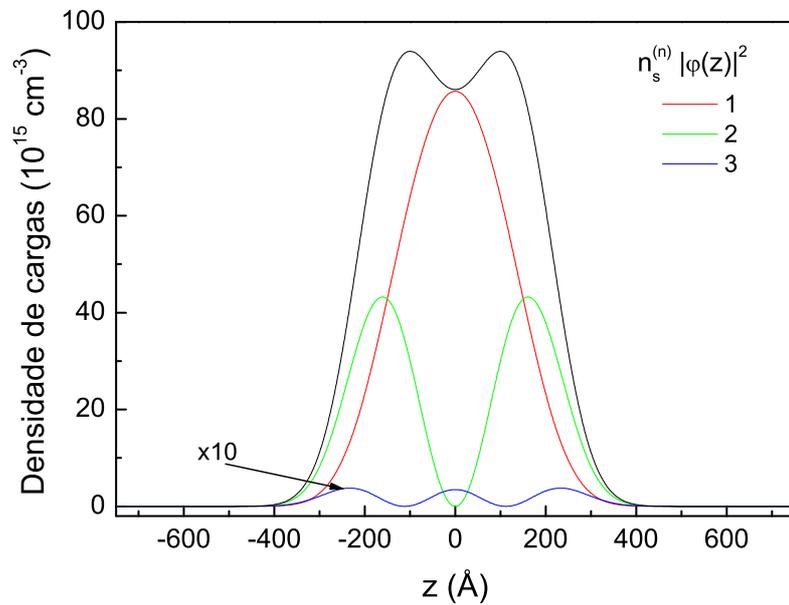


Figura 4.3: Distribuição da densidade de cargas $n_s^{(n)} |\phi_n(z)|^2$ para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 4,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Neste poço duas subbandas estão ocupadas, e a terceira subbanda se encontra quase vazia.

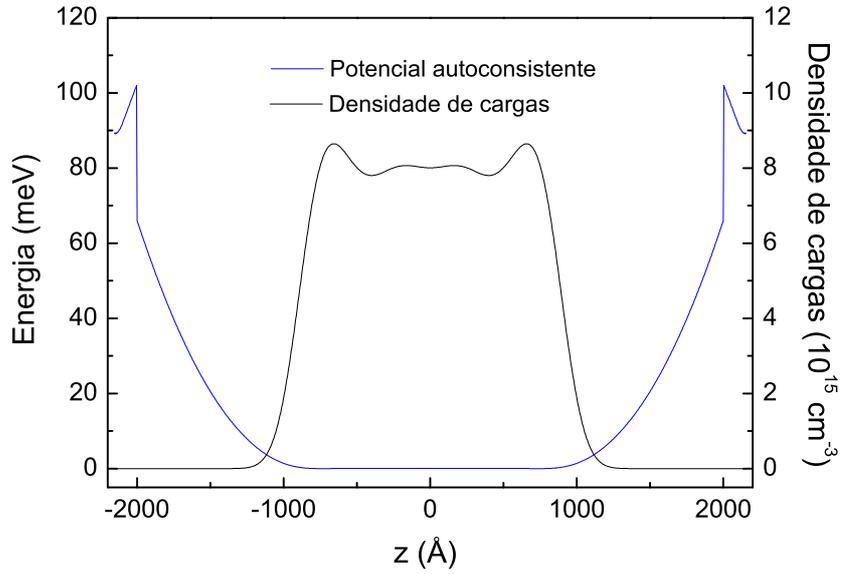


Figura 4.4: Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 223,9 \text{ meV}$, e altura da barreira $\Delta_2 = 36,2 \text{ meV}$.

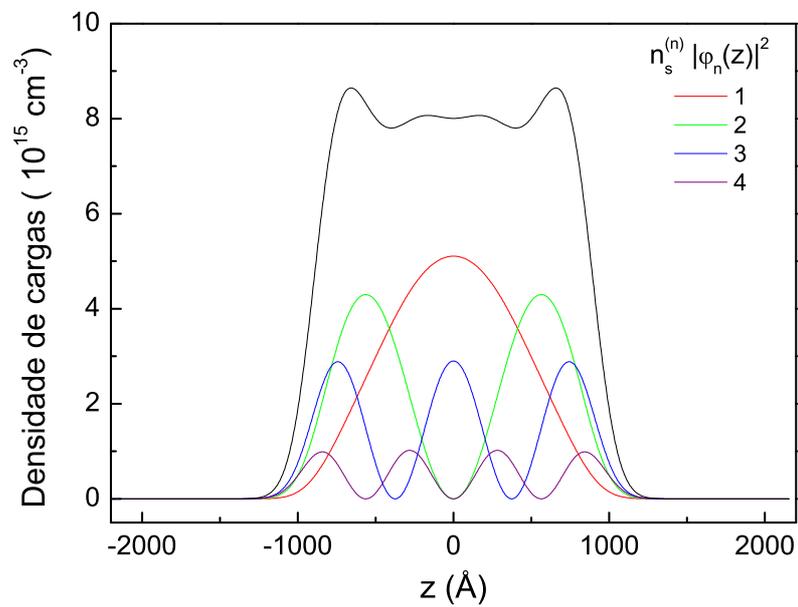


Figura 4.5: Distribuição da densidade de cargas $n_s^{(n)} |\phi_n(z)|^2$ para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$, com densidade superficial total $n_s = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Quatro subbandas estão ocupadas e a distribuição total se mostra bastante homogênea.

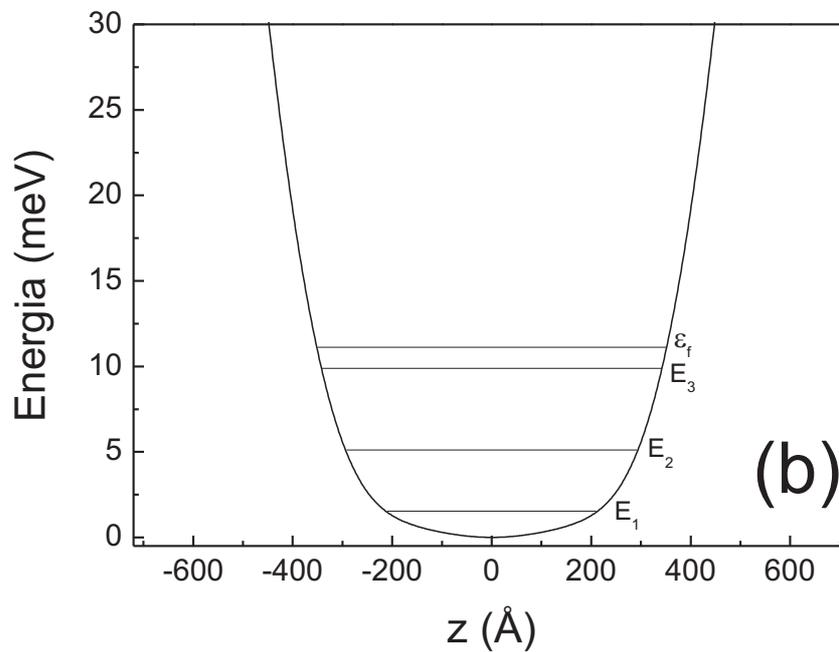
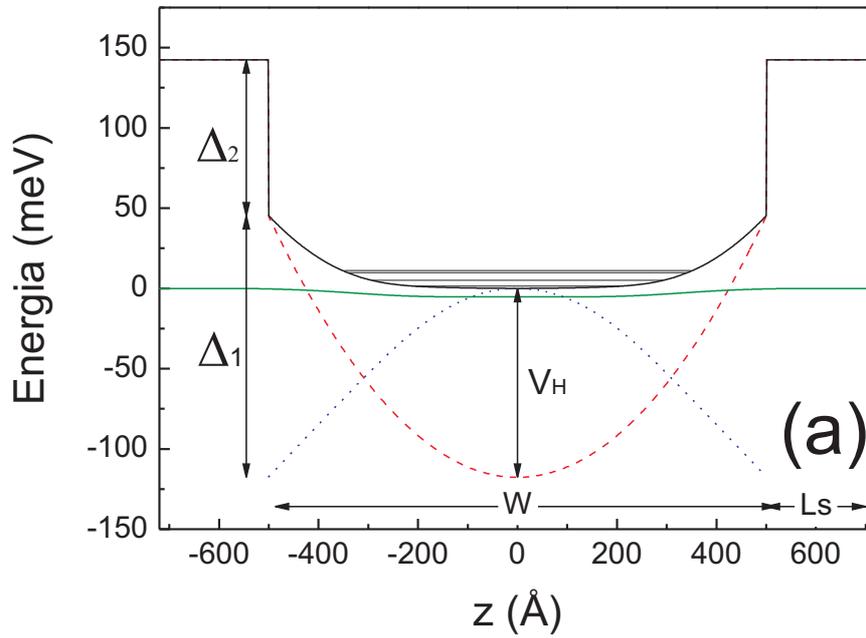


Figura 4.6: (a) Resultados dos cálculos autoconsistentes para os potenciais $V_p(z)$ (vermelho), $V_H(z)$ (azul) e $V_{xc}(z)$ (verde) - veja a definição destes potenciais na Eq. 4.7. O potencial total (linha preta contínua) é praticamente constante no meio do poço. (b) Também mostramos detalhes dos níveis de energia ocupados e a energia de Fermi no poço.

4.4 Cálculo autoconsistente considerando o processo de transferência de cargas

No modelamento que acabamos de descrever, consideramos o poço como um sistema isolado. Em particular, a densidade de cargas n_s foi imposta nas contas autoconsistentes. Na realidade, a quantidade de cargas no poço é determinada pelas propriedades geométricas (arquitetura) das amostras e dos materiais que compõem o poço e as barreiras. Podemos determinar a quantidade total de cargas que se encontrará dentro do poço, levando em conta também condições externas ao poço. A análise deste processo de transferência de cargas será feito de duas maneiras complementares: Primeiro vamos estender os cálculos numéricos autoconsistentes descritos anteriormente. Depois apresentaremos uma aproximação analítica que se mostrará muito útil principalmente no caso dos poços com portadores do tipo p .

4.4.1 Modelamento teórico modificado: incluindo a transferência de cargas no processo de autoconsistência

Agora, neste modelamento, temos que levar em conta a existência de cargas fora do poço e os potenciais gerados por elas em todo o sistema. Os portadores do gás de elétrons (ou buracos) no poço são oriundos das duas camadas δ -dopadas de Si localizadas simetricamente em ambos os lados do poço a uma distancia L_s . A barreira é de $Al_xGa_{1-x}As$ não dopado. Na Figura 4.7 ilustramos a variação dos potenciais no poço e as várias energias envolvidas no problema. A equação de Poisson adequada à nova distribuição de cargas é dada por:

$$\frac{d^2V_H}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon} \left[\sum n_s^{(n)} |\phi_n(z)|^2 + N_d^+(z) \right] \quad (4.14)$$

Observe que além da densidade de cargas dos elétrons $n_s^{(n)}$ agora estamos levando em conta a densidade de cargas (positivas) dos íons doadores N_d^+ . A quantidade de cargas transferidas da região dopada para o poço é determinada pela condição de equilíbrio eletrostático. Suponha que os elétrons das camadas dopadas sejam transferidos para a região do poço parabólico até que o sistema entre em equilíbrio eletrotático. Isto

Para as nossas amostras $\Delta_1 = 661(1,55x + 0,37x^2)$ meV e $\Delta_2 = 661[1,55(y - x) + 0,37(y - x)^2]$ meV (veja Capítulo 3). V_{Hmax} é a energia máxima para a energia de repulsão eletrostática e resulta da solução autoconsistente da equação de Poisson, e o mesmo vale para a energia E_c . A energia de Fermi é dada por:

$$\varepsilon_F = E_n + \frac{\pi\hbar^2}{m^*}n_s^{(n)}. \quad (4.16)$$

Para a dependência da energia de ativação com a concentração de alumínio na liga utilizamos a expressão determinada por Chand [56] e Willamowski [60]: $E_d = 707y - 146$ meV. Esta relação é válida para ligas de $Al_yGa_{1-y}As$ com concentrações de alumínio y que variam de 0,22 até 0,40 ⁴.

A energia V_s pode ser aproximada. Assumindo que não existe penetração da função de onda nas barreiras e considerando que a interação eletrostática entre as cargas positivas nas camadas dos dopantes ionizados e as cargas negativas no poço dê origem a um campo elétrico constante e, portanto, a uma energia que varia linearmente com z , podemos escrever:

$$V_s = \frac{e^2n_s}{2\epsilon}L_s \quad (4.17)$$

Para estimar a energia eletrostática criada por uma das camadas dos dopantes, assumimos que os íons doadores estão homogêneamente distribuídos em uma camada com uma certa espessura. Escolhemos esta largura de acordo com as medidas de Schubert e colaboradores [61] que mostraram que, para as condições de crescimento das nossas amostras, a camada delta-Si tem uma largura de até 50 Å. Deste modo temos:

$$V_h = \frac{e^2n_s^2}{8\epsilon\rho_d}L_s \quad (4.18)$$

sendo ρ_d a concentração volumétrica de átomos de silício em cada plano da dopagem delta. Para nossos poços com larguras menores que 3000 Å adotamos $\rho_d = 5,0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Para poços maiores de 3000 Å a concentração é de $\rho_d = 10,0 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

⁴O Al na liga de $Al_yGa_{1-y}As$ é representado pela letra y pois trata-se da região da barreira.

O procedimento para se realizar o cálculo autoconsistente é exatamente como descrito na seção anterior para um poço isolado. Continuamos impondo uma densidade superficial n_s e calculamos as funções de onda, a distribuição de cargas e as energias das subbandas. Com a condição de equilíbrio descrita na Eq. 4.15 podemos verificar se o valor de n_s que escolhemos é o correto. Caso contrário, inicia-se o processo iterativo para obter o n_s autoconsistente.

4.4.2 Aproximação analítica

Fazendo mais algumas aproximações é possível obter uma expressão analítica para a densidade superficial de cargas no poço em função dos parâmetros que caracterizam o poço, a barreira e as camadas dos dopantes. Primeiro, utiliza-se as funções de onda não-modificadas para um elétron no poço de potencial. Com esta distribuição de cargas calcula-se o potencial eletrostático (V_H) através da equação de Poisson e o potencial total. As energias das subbandas são corrigidas em primeira ordem por esta energia V_H e utilizando-se as condições de equilíbrio obtém-se n_s imediatamente. Numa primeira aproximação levamos em conta somente a ocupação da primeira subbanda, reproduzindo os resultados do trabalho da referência [62]. Em seguida, estendemos esta expressão para incluir a ocupação de duas subbandas.

As expressões desenvolvidas não devem funcionar para larguras do poço muito pequenas ou densidades superficiais grandes. Para larguras muito pequenas, a função de onda penetra muito na região da barreira invalidando a aproximação para as condições de equilíbrio que adotamos. Para densidades superficiais grandes é necessário considerar a ocupação de mais do que duas subbandas.

Funções envelope de um potencial parabólico

Na aproximação analítica usamos as autofunções de uma partícula de massa m^* movendo-se num potencial do tipo oscilador harmônico simples. Estas autofunções são conhecidas sendo da forma [63]:

$$\phi_n(z) = \left[\frac{a}{2^{2n} \pi (n!)^2} \right]^{1/4} H_n(\sqrt{a}z) e^{-\frac{az^2}{2}} \quad (4.19)$$

onde a constante $a = m^*\omega/\hbar$. A frequência de oscilação característica do oscilador harmônico é ω e H_n são os polinômios de Hermite.

Os autovalores de energia são dados por:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n=0,1,2\dots \quad (4.20)$$

O potencial harmônico de nossas amostras é descrito pela Equação 4.3 e podemos achar a frequência de oscilação ω em termos dos parâmetros deste potencial:

$$V_p(z) = -\frac{1}{e}4\Delta_1 \left(\frac{z}{W} \right)^2 = -\frac{1}{e} \frac{m^*\omega^2}{2} z^2 \quad (4.21)$$

onde ω depende apenas dos parâmetros relacionados com a geometria do poço parabólico e é dado por:

$$\omega = \sqrt{\frac{8\Delta_1}{m^*W^2}} \quad (4.22)$$

sendo Δ_1 a altura e W a largura do poço.

4.4.3 Poço parabólico com uma única subbanda ocupada

Nesta seção trataremos o caso de um poço parabólico com uma única subbanda ocupada. Nesta aproximação de ordem zero, a função de onda para a primeira subbanda do poço será dada pelo estado fundamental do oscilador harmônico:

$$\phi_0(z) = \left[\frac{a}{\pi} \right]^{1/4} e^{-az^2/2} \quad (4.23)$$

Conhecendo-se esta função de onda, é fácil determinar através da solução da equação de Poisson o potencial $V_H(z)$ originado pela repulsão eletrostática entre os elétrons:

$$\frac{d^2V_H}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon}n(z) = \frac{e}{\epsilon}n_0|\phi_0(z)|^2 \quad (4.24)$$

Novamente assumimos que a constante dielétrica ϵ não varia ao longo do poço. Assim a solução da equação de Poisson para uma única subbanda ocupada é dada por:

$$V_H(z) = \frac{en_s}{2\epsilon} \left\{ z \operatorname{erf}(\sqrt{a}z) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left[e^{-az^2} - 1 \right] \right\} \quad (4.25)$$

A altura do potencial da interação eletrostática $V_H(z)$ é definida como sendo $V_{Hmax} = V(\pm W/2)$, ou seja:

$$V_{Hmax} = \frac{en_s}{2\epsilon} \left\{ \frac{W}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-aW^2/4} - 1 \right) \right\} \quad (4.26)$$

Agora precisamos determinar o novo valor para a energia do nível $n = 0$ que consideramos ocupado. Isto é feito utilizando-se o formalismo de teoria de perturbação em primeira ordem onde o valor da energia corrigida é dado por:

$$E_c = E_0 - e \langle \phi_0 | V_H | \phi_0 \rangle \quad (4.27)$$

sendo $V_H(z)$ o potencial de perturbação.

Uma vez que já determinamos as autofunções não perturbadas, fazendo a integral do terceiro termo na Equação 4.27 ($\langle \phi_0 | V_H | \phi_0 \rangle$) no intervalo de $-W/2$ até $W/2$ (não considerando a penetração da função de onda nas barreiras) obtemos o seguinte valor para a energia E_c :

$$E_c = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{e^2 n_s}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right) - \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) \left(e^{-aW^2/4} + 1 \right) \right\} \quad (4.28)$$

onde ω , n_s e o parâmetro a já foram definidos anteriormente. No formalismo da aproximação analítica utilizamos a mesma expressão para o equilíbrio eletrostático (Eq. 4.15). Agora, a energia do nível de Fermi para uma única subbanda ocupada é calculada como $\epsilon_F = \frac{\pi\hbar^2}{m^*} n_s$. O potencial V_s é definido da mesma forma que no cálculo autoconsistente (Eq. 4.17) e a energia V_h é desprezada por assumir valores pequenos quando comparada com as outras energias envolvidas na Equação 4.15.

Finalmente, substituindo todas estas energias na Equação 4.15 que descreve as condições de equilíbrio, obtemos uma expressão para n_s :

$$n_s = \frac{\Delta_1 + \Delta_2 - \frac{\hbar\omega}{2} - E_d}{\frac{e^2}{\epsilon} \left(\frac{W \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right)}{4} + \frac{e^{-aW^2/4} - 1}{2\sqrt{a\pi}} - \frac{\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right)}{\sqrt{2a\pi}} + \frac{\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) (e^{-aW^2/4} + 1)}{2\sqrt{a\pi}} + \frac{L_s}{2} \right) + \frac{\pi\hbar^2}{m^*}} \quad (4.29)$$

4.4.4 Transferência de cargas em um poço com duas subbandas ocupadas

Quando duas subbandas são ocupadas a densidade total é $n_s = n_0 + n_1$ e a equação de Poisson é dada por:

$$\frac{d^2V_H}{dz^2} = \frac{e}{\epsilon}n(z) = \frac{e^2}{\epsilon} \{n_0\phi_0(z) + n_1\phi_1(z)\} \quad (4.30)$$

Como no caso de um potencial parabólico com uma única subbanda ocupada, as funções de onda $\phi_0(z)$ and $\phi_1(z)$ são as de um oscilador harmônicos nos estados $n = 0$ e $n = 1$:

$$\begin{aligned} \phi_0(z) &= \left[\frac{a}{\pi}\right]^{1/4} e^{-az^2/2} \\ \phi_1(z) &= \left[\frac{a}{\pi}\right]^{1/4} \sqrt{2az} e^{-az^2/2} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Integrando a Equação 4.30 obtemos o potencial da interação eletrostática V_H :

$$V_H(z) = \frac{en_s}{2\epsilon} \left\{ z \operatorname{erf}(\sqrt{a}z) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-az^2} - 1 \right) \right\} - \frac{e^2n_1}{2\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-az^2} - 1 \right) \right\} \quad (4.32)$$

A altura máxima deste potencial V_{Hmax} é obtida substituindo-se $z = \pm W/2$ na Equação 4.32:

$$\begin{aligned} V_{Hmax} &= \frac{en_s}{2\epsilon} \left\{ \frac{W}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{a}W}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-aW^2/4} - 1 \right) \right\} \\ &\quad - \frac{e^2n_1}{2\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-aW^2/4} - 1 \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Novamente, utilizando teoria de perturbação em primeira ordem, podemos determinar os novos autovalores de energia dos dois primeiros estados do oscilador harmônico, resolvendo o sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} E_0 + \delta E_0 & V_{01} \\ V_{01} & E_1 + \delta E_1 \end{bmatrix} \phi_n = E_n \phi_n \quad (4.34)$$

onde

$$\delta E_n = -e \langle \phi_n | V_H | \phi_n \rangle \quad (4.35)$$

$$V_{nj} = V_{jn} = -e \langle \phi_n | V_H | \phi_j \rangle$$

Os elementos não-diagonais são nulos porque as funções de onda ϕ_n e ϕ_j têm paridades diferentes. Resolvendo o sistema de equações resultante obtemos para as energias da primeira e segunda subbanda:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{e^2 n_s}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right) - \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) (e^{-aW} + 1) \right\} \\ - \frac{e^2 n_1}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right) - \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) \right\} \quad (4.36)$$

e

$$E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2} \\ - \frac{e^2 n_s}{\epsilon} \left\{ \frac{3}{2\sqrt{2\pi a}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) \left(\sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{W^2}{4} e^{-aW^2/4} + \frac{e^{-aW^2/4}}{\sqrt{\pi a}} + \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \right) \right\} \\ + \frac{e^2 n_s}{\epsilon} \left\{ \frac{W}{2\pi} e^{-aW^2/4} (e^{-aW^2/4} - 1) \right\} - \frac{e^2 n_1}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{4\sqrt{2\pi a}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right) - \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) \right\} \\ + \frac{e^2 n_1}{\epsilon} \left\{ \frac{W}{2\pi} e^{-aW^2/4} (e^{-aW^2/4} - 1) \right\} \quad (4.37)$$

A energia de Fermi no caso da ocupação de duas subbandas é dada por:

$$\epsilon_F = \frac{\pi \hbar^2}{2m^*} (n_0 + n_1) - \frac{E_1 - E_0}{2} \quad (4.38)$$

Como antes, consideramos a energia V_s como no cálculo autoconsistente (Eq. 4.17) e, de novo, não consideramos V_h .

Usamos também a Equação 4.15 para obter uma expressão para a densidade superficial de cargas. Entretanto no caso das duas subbandas ocupadas, as energias dependem das densidades superficiais em cada uma das subbandas (n_0 e n_1). Portanto precisamos fazer mais uma aproximação para fazer progressos. Considerando $n_1 \ll n_0$ podemos finalmente escrever:

$$n_s = \frac{\Delta_1 + \Delta_2 - \hbar\omega - E_d}{\frac{\epsilon^2}{\epsilon} A + \frac{\pi\hbar^2}{2m^*}} \quad (4.39)$$

onde

$$A = \frac{W \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{a}W}{2}\right)}{4} - \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} + \frac{5 \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2a}W}{2}\right)}{2\sqrt{2a\pi}} - \frac{\operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{2aW}{2}}\right)}{\sqrt{a\pi}} + \frac{W}{\pi} e^{-aW^2/4} \left(e^{-aW^2/4} - 1 \right) + \frac{L_s}{2} \quad (4.40)$$

4.4.5 Transferência de cargas em poços do tipo p

Como mencionamos, o cálculo autoconsistente em poços parabólicos do tipo p é um problema de difícil solução devido à degenerência da banda de valência na liga de $AlGaAs$ e à necessidade de se levar em conta mais do que um tipo de portador: buracos pesados, buracos leves e, em princípio, também os buracos “*split-off*” numa terceira banda. Para poder atacar este problema usamos a aproximação analítica levando em consideração duas subbandas: uma com buracos de massa pesada m_{HH} e outra com buracos de massa leve m_{LH} . Em nosso cálculo consideramos ambas as subbandas com sendo independentes uma da outra dentro do poço. Entretanto, devemos considerar que os buracos transferidos dos dopantes de silício para o poço são distribuídos nas duas subbandas, ou seja, que a densidade total de buracos é distribuída entre as bandas de buracos leves e pesados. Este vínculo devido à transferência de cargas é descrito como $p_s = p_{HH} + p_{LH}$ onde p_s é a densidade superficial total de buracos dentro do poço, p_{HH} é a densidade dos buracos pesados e p_{LH} é a densidade dos buracos leves.

Usando a equação do balanço das energias podemos achar uma relação entre as concentrações de portadores p_{HH} e p_{LH} e as propriedades poço. As condições de equilíbrio eletrostático e neutralidade de cargas agora levam ao seguinte balanço de energia:

$$\Delta_1 + \Delta_2 = | - e \cdot V_{Hmax}^{HH} | + E_c^{HH} + \epsilon_F^{HH} + E_d + V_s \quad (4.41)$$

e

$$\Delta_1 + \Delta_2 = | - e \cdot V_{Hmax}^{LH} | + E_c^{LH} + \epsilon_F^{LH} + E_d + V_s \quad (4.42)$$

A energia de depleção $V_s = \frac{e^2 p_s L_s}{2\epsilon}$ nas equações 4.41 e 4.42 depende da quantidade total de portadores. Se igualamos as equações de balanço de energia 4.41 e 4.42 temos:

$$|-e \cdot V_{Hmax}^{HH}| + E_c^{HH} + \varepsilon_F^{HH} = |-e \cdot V_{Hmax}^{LH}| + E_c^{LH} + \varepsilon_F^{LH} \quad (4.43)$$

Substituindo as energias ficamos com:

$$\frac{e^2 p_{HH}}{\epsilon} A + \frac{\hbar\omega_{HH}}{2} + \frac{\pi\hbar^2 p_{HH}}{m_{HH}} = \frac{e^2 p_{LH}}{\epsilon} B + \frac{\hbar\omega_{LH}}{2} + \frac{\pi\hbar^2 p_{LH}}{m_{LH}} \quad (4.44)$$

com A e B foram definidos como:

$$A = \frac{e^2 p_{HH}}{2\epsilon} \left\{ \frac{W}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a_{HH}W}}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-a_{HH}W^2/4} - 1 \right) \right\} \\ - \frac{e^2 p_{HH}}{2\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2a_{HH}\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a_{HH}W}}{2} \right) - \frac{1}{\sqrt{a_{HH}\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a_{HH}W}}{2} \right) \left(e^{-a_{HH}W^2/4} + 1 \right) \right\} \quad (4.45)$$

$$B = \frac{e^2 p_{LH}}{2\epsilon} \left\{ \frac{W}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a_{LH}W}}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-a_{LH}W^2/4} - 1 \right) \right\} \\ - \frac{e^2 p_{LH}}{2\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2a_{LH}\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a_{LH}W}}{2} \right) - \frac{1}{\sqrt{a_{LH}\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a_{LH}W}}{2} \right) \left(e^{-a_{LH}W^2/4} + 1 \right) \right\} \quad (4.46)$$

Logo a razão entre p_{HH} e p_{LH} é:

$$\frac{p_{HH}}{p_{LH}} = \frac{\left[\frac{e^2}{\epsilon} B + \frac{\pi\hbar^2}{m_{LH}} \right] + \frac{\hbar}{2} (\omega_{LH} - \omega_{HH})}{\frac{e^2}{\epsilon} A + \frac{\pi\hbar^2}{m_{LH}}} \quad (4.47)$$

Usando esta relação nas equações 4.41 e 4.42 obtemos uma expressão para as densidades p_{HH} e p_{LH} :

$$p_{HH} = \frac{\Delta_1 + \Delta_2 - E_d - \frac{\hbar\omega_{HH}}{2} - \frac{\hbar(\omega_{LH} - \omega_{HH})}{2} \frac{e^2}{D} \frac{L_s}{2\epsilon}}{\frac{e^2}{\epsilon} \left[A + \frac{L_s}{2} \left(1 + \frac{C}{D} \right) \right] + \frac{\pi\hbar^2}{m_{LH}}} \quad (4.48)$$

e

$$p_{LH} = \frac{\Delta_1 + \Delta_2 - E_d - \frac{\hbar\omega_{LH}}{2} - \frac{\hbar(\omega_{LH}-\omega_{HH})}{2} \frac{e^2 L_s}{C}}{\frac{e^2}{\epsilon} \left[B + \frac{L_s}{2} \left(1 + \frac{D}{C} \right) \right] + \frac{\pi\hbar^2}{m_{LH}}} \quad (4.49)$$

com

$$C = \frac{e^2}{\epsilon} A + \frac{\pi\hbar^2}{m_{HH}} \quad (4.50)$$

$$D = \frac{e^2}{\epsilon} B + \frac{\pi\hbar^2}{m_{LH}} \quad (4.51)$$

4.4.6 Comparação entre os resultados experimentais e teóricos

Na Tabela 4.4 comparamos os nossos resultados experimentais com os resultados dos nossos cálculos autoconsistentes para os PQWs do tipo n .

As densidades superficiais n_s foram determinadas por medidas de efeito Hall, como descrito em Capítulo 3. Vemos que na maioria dos casos conseguimos uma boa concordância, dentro de 10%, indicando que os resultados autoconsistentes descrevam corretamente os estados eletrônicos dos PQWs.

Tabela 4.4: Valores experimentais e calculados usando o método autoconsistente para a densidade superficial n_s nos poços quânticos parabólicos do tipo n . x e y são as concentrações de Al no poço de largura W com camada espaçadora de largura L_s (veja Capítulo 3).

Amostra	x	y	L_s (Å)	W (Å)	n_s (10^{11} cm^{-2}) (experimental)	n_s^* (10^{11} cm^{-2}) (autoconsistente)
2384	0,200	0,310	200	1000	4,6	4,33
2577	0,200	0,310	200	1000	4,2	4,33
2579	0,200	0,310	300	1000	4,0	3,65
2580	0,200	0,310	400	1000	3,4	3,17
2378	0,200	0,310	500	1000	2,3	2,80
2496	0,270	0,310	200	1500	3,5	3,52
2535	0,270	0,310	200	1700	3,2	2,96
2534	0,270	0,310	150	2200	3,1	2,63
2386	0,270	0,310	150	3000	2,2	2,07
AG662	0,270	0,310	100	4000	1,5	1,71

Na Figura 4.8 comparamos os dados experimentais com os resultados dos cálculos numéricos e analíticos em função da largura do poço. Os cálculos levam em conta que

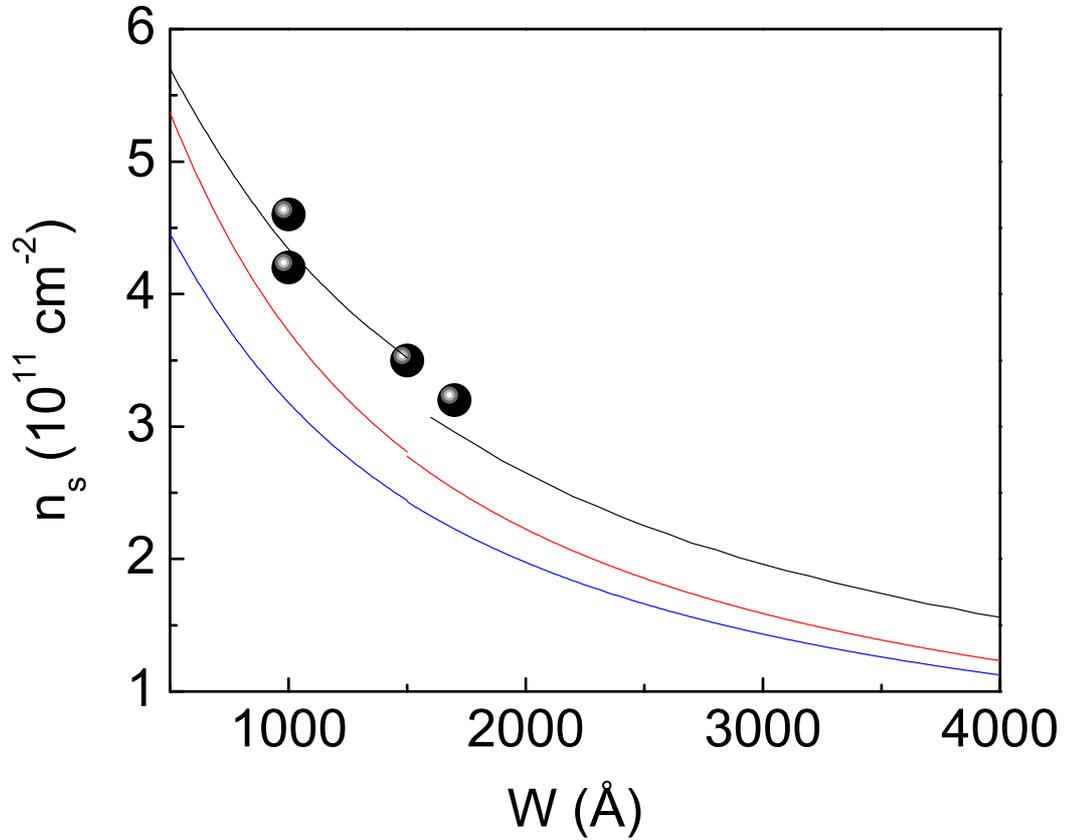


Figura 4.8: Densidade superficial n_s em função da largura do poço para uma camada espaçadora com largura fixa de 200 Å. Os quatro círculos sólidos são os dados experimentais, a linha preta (—) representa os resultados dos cálculos autoconsistentes, a linha vermelha representam os resultados da aproximação analítica quando considerando uma subbanda ocupada (—) e a linha azul representam os resultados da aproximação analítica quando considerando duas subbandas ocupadas (—). A descontinuidade para $W > 1500$ Å é dada por diferenças nos parâmetros de crescimento.

para larguras > 1500 Å os parâmetros de crescimento mudam (veja Capítulo 3), o que ocasiona uma descontinuidade nas curvas apresentadas na figura. A aproximação analítica subestima a densidade superficial, como esperado, porque nos poços analisados temos mais do que duas subbandas ocupadas, o que faz com que a aproximação analítica tenha validade limitada. Mesmo assim, esta aproximação é capaz de reproduzir qualitativamente o comportamento da densidade com a largura do poço (Fig. 4.8) e com a largura da barreira (Fig. 4.9).

Estas figuras ainda mostram que a aproximação analítica, levando em conta duas subbandas, não melhora o resultado porque para os poços que estudamos não é verdade que a ocupação da segunda banda é muito menor do que a ocupação da primeira subbanda, como assumimos. Esta aproximação pode ser útil para poços mais estreitos onde uma única subbanda é ocupada, como observado na Figura 4.10.

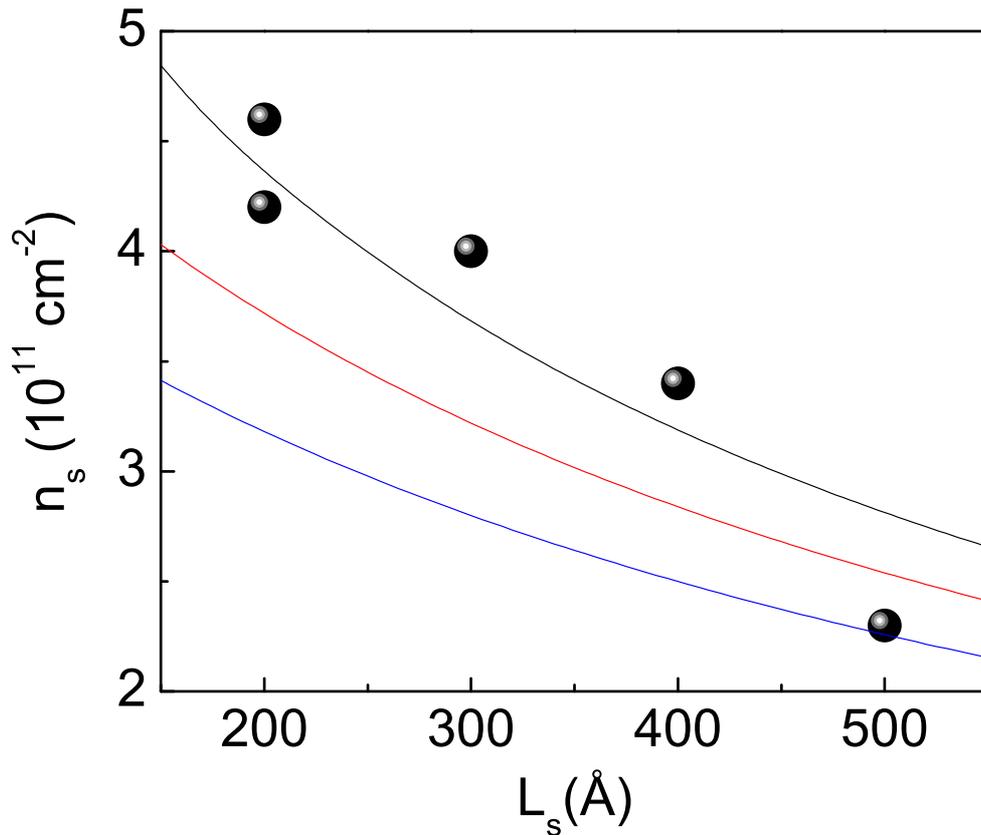


Figura 4.9: Densidade superficial n_s em função da largura da barreira para um poço de 1000 Å de largura. Os cinco círculos sólidos são os dados experimentais, a linha preta (—) representa os resultados dos cálculos autoconsistentes, a linha vermelha representam os resultados da aproximação analítica quando considerando uma subbanda ocupada (—) e a linha azul representam os resultados da aproximação analítica quando considerando duas subbandas ocupadas (—).

Na Figura 4.11 mostramos os resultados para os poços do tipo p . Para este sistema os cálculos numéricos são complexos e a aproximação analítica se torna essencial. Esta aproximação que leva em conta as subbandas com buracos pesados e leves reproduz

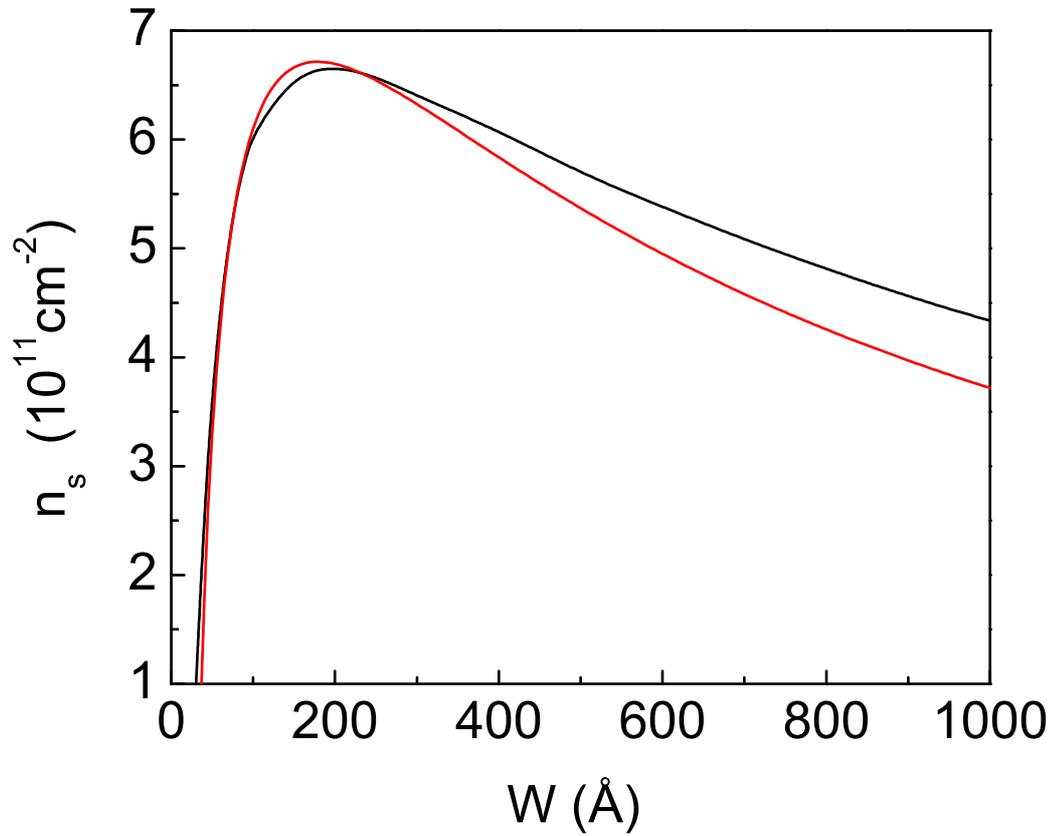


Figura 4.10: Densidade superficial n_s em função da largura do poço com uma camada espaçadora fixa de 200 Å. A linha preta (—) é o cálculo autoconsistente e a linha vermelha (—) mostra os resultados da aproximação analítica para uma subbanda ocupada.

qualitativamente o comportamento observado da densidade em função da largura do poço, como no caso dos poços do tipo n . A limitação da aproximação analítica impede uma concordância quantitativa.

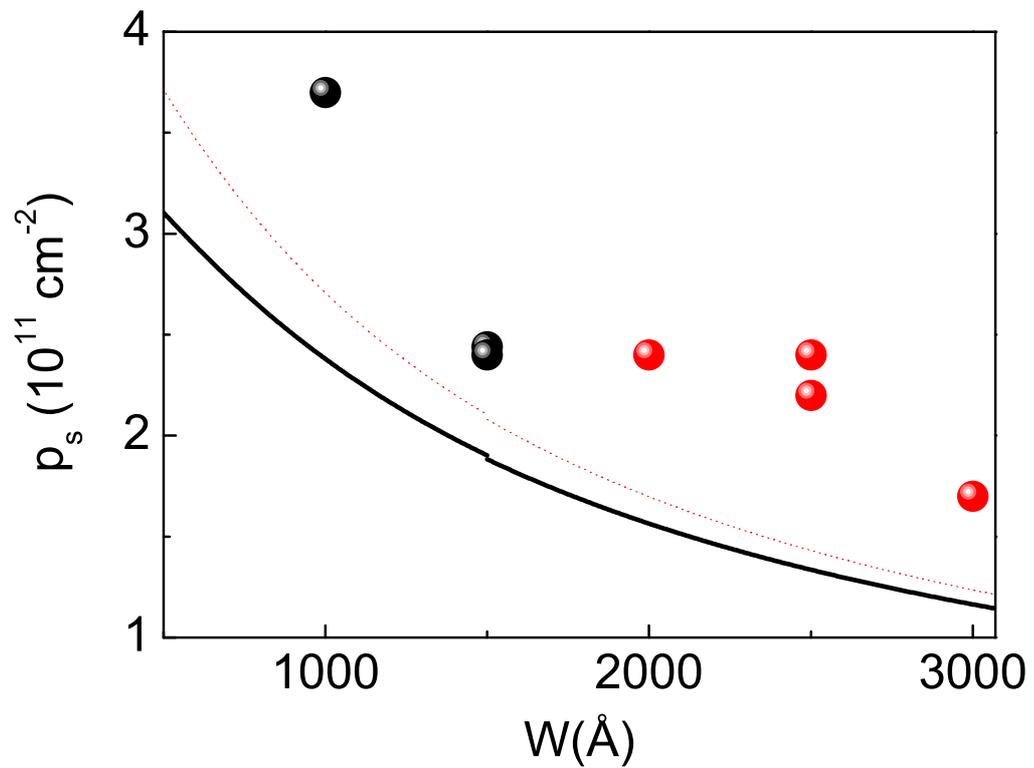


Figura 4.11: Densidade superficial experimental (símbolos) em função da largura do poço com portadores do tipo p . As linhas representam resultados teóricos baseados na aproximação analítica para duas espessuras da camada espaçadora: $L_s=200 \text{ Å}$ (linha preta contínua —) e $L_s=150 \text{ Å}$ (linha vermelha pontilhada ---).

Capítulo 5

Poços parabólicos em campos magnéticos

Neste Capítulo apresentamos resultados experimentais e de cálculos analíticos e numéricos para poços quânticos parabólicos em campos magnéticos altos. Como mencionamos na introdução do Capítulo 4, PQWs foram desenvolvidos visando o estudo experimental de efeitos de muitos-corpos.

Para sistemas de elétrons 2D o exemplo mais conhecido de um efeito de muitos-corpos é o efeito Hall quântico fracionário, que demonstrou a importância das interações de Coulomb entre os elétrons ocupando o último nível de Landau [64]. Um outro exemplo é a formação de uma onda de densidade de cargas (CDW, *Charge Density Wave*) [65, 66]. Em sistemas 3D como os PQWs, eventuais transições de fase ou transições de estado com quebra da simetria têm despertado muito interesse na comunidade científica [67, 68]. Já faz mais de uma década que Brey [69] propôs um estado fundamental do tipo CDW em PQWs largos quando sujeitos a campos magnéticos altos. Outras previsões teóricas de efeitos de muitos-corpos incluem excitações magneto-plasmon [70] e estados fundamentais exóticos como fases do tipo *skyrmion stripe phase* [71].

Em contraste aos sistemas 2D (poços estreitos ou heterojunções), em sistemas quase-tridimensionais como são os PQWs largos este tipo de transição de fase nunca foi observada. As possíveis explicações para a falta de uma onda do tipo CDW em

$Al_xGa_{1-x}As$ do tipo n são as seguintes: interação elétron-elétron fraca, baixa mobilidade dos portadores, e uma distância inter-elétron r_s pequena. Para sistemas do tipo p acredita-se que por causa da grande massa efetiva alta dos buracos (r_s grande), efeitos de muitos-corpos podem ser extremamente importantes com maiores probabilidades de se encontrar ondas do tipo CDW [72].

Neste Capítulo apresentamos os resultados de medidas da resistência Hall em PQWs largos na presença de campos magnéticos altos aplicados paralelamente à direção do crescimento. O principal resultado por nós observado é que acima de um campo magnético crítico ($B > 3$ T) e em temperaturas suficientemente baixas, o coeficiente Hall aumenta acima do coeficiente extrapolado para baixos campos. Atribuímos este aumento à mudança da densidade de portadores no poço induzida pelo campo magnético.

Numa tentativa de entender os resultados experimentais implementamos o formalismo dos cálculos autoconsistentes e analíticos para incluir o efeito do campo magnético na estrutura eletrônica dos sistemas aqui analisados. Argumentamos que as observações feitas experimentalmente podem ser explicadas satisfatoriamente pelo efeito do campo no potencial total, na largura efetiva da camada de portadores, e na densidade de cargas no poço. Incluir a transferência de cargas no modelo teórico mostrou-se essencial para explicar as nossas observações, já que o campo magnético efetua uma importante redistribuição de cargas entre o poço e a camada dos dopantes de silício. A variação da largura da camada de portadores no poço havia sido prevista teoricamente [73, 74], mas este efeito ainda não havia sido comprovado até o presente momento. Nossas análises e resultados experimentais confirmam esta previsão teórica. Além disso, as nossas observações demonstram a importância dos efeitos de muitos-corpos nos PQWs na presença de campos altos. Achamos que a mudança abrupta no coeficiente Hall pode ser um precursor de uma instabilidade do tipo CDW, como foi previsto ocorrer nos poços parabólicos largos.

5.1 Resultados experimentais

Na Tabela 5.1 resumimos mais uma vez as propriedades nominais e medidas das amostras analisadas neste trabalho. As técnicas de crescimento e de caracterização foram descritas no Capítulo 3. Lembraremos aqui o que discutimos no Capítulo 4 a respeito do preenchimento dos poços parabólicos. Para preencher completamente um poço parabólico e compensar por meio do potencial eletrostático o potencial oriundo da liga digital precisamos colocar

$$n_+ = \frac{8\Delta_1\epsilon}{q^2W^2} \quad (5.1)$$

cargas no poço. Se a transferência de cargas das camadas dopadas não é suficiente para preencher o poço, definimos um fator de preenchimento $f = n_s/n_+W$ e uma largura efetiva do poço $W_e = \frac{n_s}{n_+} = fW$.

Como vimos no Capítulo 4, para as nossas amostras, as densidades n_s e as energias das subbandas são tais que várias subbandas são ocupadas. Mesmo para $f \approx 0,3$ ou $0,4$ podemos usar a estimativa usual em 3D comparando a distância entre cargas com o raio de Bohr na aproximação da massa efetiva,

$$r_s = \frac{m^*e^2}{4\pi\epsilon\hbar^2} \left(\frac{3}{4\pi n_+} \right)^{1/3}. \quad (5.2)$$

Um valor alto deste parâmetro indica que efeitos de muitos-corpos podem ser importantes no sistema. Vemos na Tabela 5.1 que por causa da alta massa efetiva dos buracos, o fator r_s pode ter altos valores nos sistemas do tipo p mesmo que a concentração de portadores não seja tão baixa. O maior valor de r_s para elétrons é ≈ 3 para o poço de 4000 Å, mas para os poços preenchidos com buracos temos r_s da ordem de 15 para concentrações ainda maiores.

Tabela 5.1: Resumo das propriedades das amostras usadas para obter os resultados deste capítulo. Apresentamos o tipo de portador, a largura da camada espaçadora L_s , a densidade volumétrica necessária para “encher” o poço n^+ , a densidade superficial medida por efeito Hall em campo baixo n_s , a densidade superficial obtida nos cálculos autoconsistentes n_s^* (veja Capítulo 4), o parâmetro de densidade r_s , o fator de preenchimento do poço f , a largura efetiva do poço W_e , e a mobilidade μ medida em $T \approx 1$ K.

Amostra	orientação	tipo de portador	Δ_1 (meV)	Δ_2 (meV)	L_s (Å)	W (Å)	n_+ (10^{16} cm $^{-3}$)	n_s (10^{11} cm $^{-2}$) experimental	n_s^* (10^{11} cm $^{-2}$) autoconsistente	r_s	f	W_e (Å)	μ (10^3 cm 2 /Vs)
2384	100	elétron	162,5	97,7	200	1000	9,25	4,6	4,33	1,34	0,5	497	170
2384	(311)A	buraco	83,3	50,1	200	1000	4,75	3,7	-	10,0	0,78	788	62
2577	100	elétron	162,5	97,7	200	1000	9,25	4,2	4,33	1,34	0,45	454	353
2378	100	elétron	162,5	97,7	500	1000	9,25	2,3	2,8	1,34	0,25	249	153
2496	100	elétron	162,5	97,7	200	1500	4,11	3,5	3,52	1,76	0,57	851	140
2496	(311)A	buraco	83,3	50,1	200	1500	2,11	2,44	-	13,0	0,77	1157	53
2496	(311)A	buraco	83,3	50,1	200	1500	2,11	2,4	-	13,0	0,76	1138	53
2535	100	elétron	223,9	36,2	200	1700	4,41	3,2	2,96	1,72	0,43	725	220
2385	(311)A	buraco	114,9	18,6	150	2000	1,64	2,4	-	14,3	0,73	1468	43
2499	(311)A	buraco	114,9	18,6	150	2000	1,64	2,4	-	14,3	0,73	1468	37
2500	(311)A	buraco	114,9	18,6	150	2500	1,05	2,2	-	16,6	0,84	2102	32
2518	(311)A	buraco	114,9	18,6	150	2500	1,05	2,4	-	16,6	0,92	2293	35
2386	100	elétron	223,9	36,2	150	3000	1,42	2,9	3,07	2,51	0,68	2046	118
2386	(311)A	buraco	114,9	18,6	150	3000	0,73	1,7	-	18,7	0,78	2339	57
AG662	100	elétron	223,9	36,2	100	4000	0,8	1,5	1,71	3,04	0,47	1881	120

5.1.1 Medidas da resistência Hall e da resistência longitudinal

As medidas neste estudo foram feitas na geometria da barra Hall com o campo magnético paralelo à direção do crescimento (perpendicular à superfície da amostra). Para as amostras do tipo p a corrente estava na direção $[\bar{2}23]$ e $[01\bar{1}]$. As medidas em baixas temperaturas foram feitas num refrigerador de diluição do tipo “top-loading” com temperatura de base de 50 mK. As resistências longitudinal e Hall foram medidas com correntes AC de frequências da ordem de 10 Hz e amplitudes menores que 10^{-7} A para evitar auto-aquecimento.

Na Figura 5.1 mostramos os resultados para as resistências R_{xx} e R_{xy} para um poço de elétrons de 1500 Å de largura. Os elétrons demonstram um comportamento do efeito Hall quântico convencional: platôs largos com uma resistência Hall $h/\nu e^2$ acompanhados por mínimos na resistência longitudinal. Baixando a temperatura os platôs e os mínimos ficam melhor resolvidos. Note que R_{xy} é linear para campos baixos e que os platôs em campos altos são simétricos em volta da resistência extrapolada, como esperado.

Mostramos também nesta figura e nas figuras seguintes o fator de preenchimento dos níveis de Landau $\nu = n_s h/Bq$. Note que este fator foi calculado com a densidade de carga superficial n_s (ou p_s para buracos) inferida pelas medidas da resistência Hall em baixos campos, $n_s = B/qR_{xy}$.

Várias outras amostras do tipo n mostraram o mesmo comportamento convencional. É na amostra com largura 4000 Å que começamos a ver estruturas anômalas em campos magnéticos altos. Esta amostra foi iluminada para aumentar a densidade de cargas no poço. Na Figura 5.2 vemos que a resistência R_{xy} média desvia da linearidade e que os platôs e mínimos em R_{xx} ocorrem em campos menores do que aqueles esperados pela extrapolação do R_{xy} em campo baixo. Este comportamento é observado somente em temperaturas baixas. Para $T > 2$ K a linearidade de R_{xy} é recuperada e compatível com o efeito Hall ordinário. Aqui já temos os primeiros indícios que a densidade de cargas nos poços pode mudar em campos magnéticos altos. Os platôs do efeito Hall quântico devem ocorrer em fatores de preenchimento $\nu = n_s h/Bq$ inteiros. Nesta

Fator de preenchimento ν

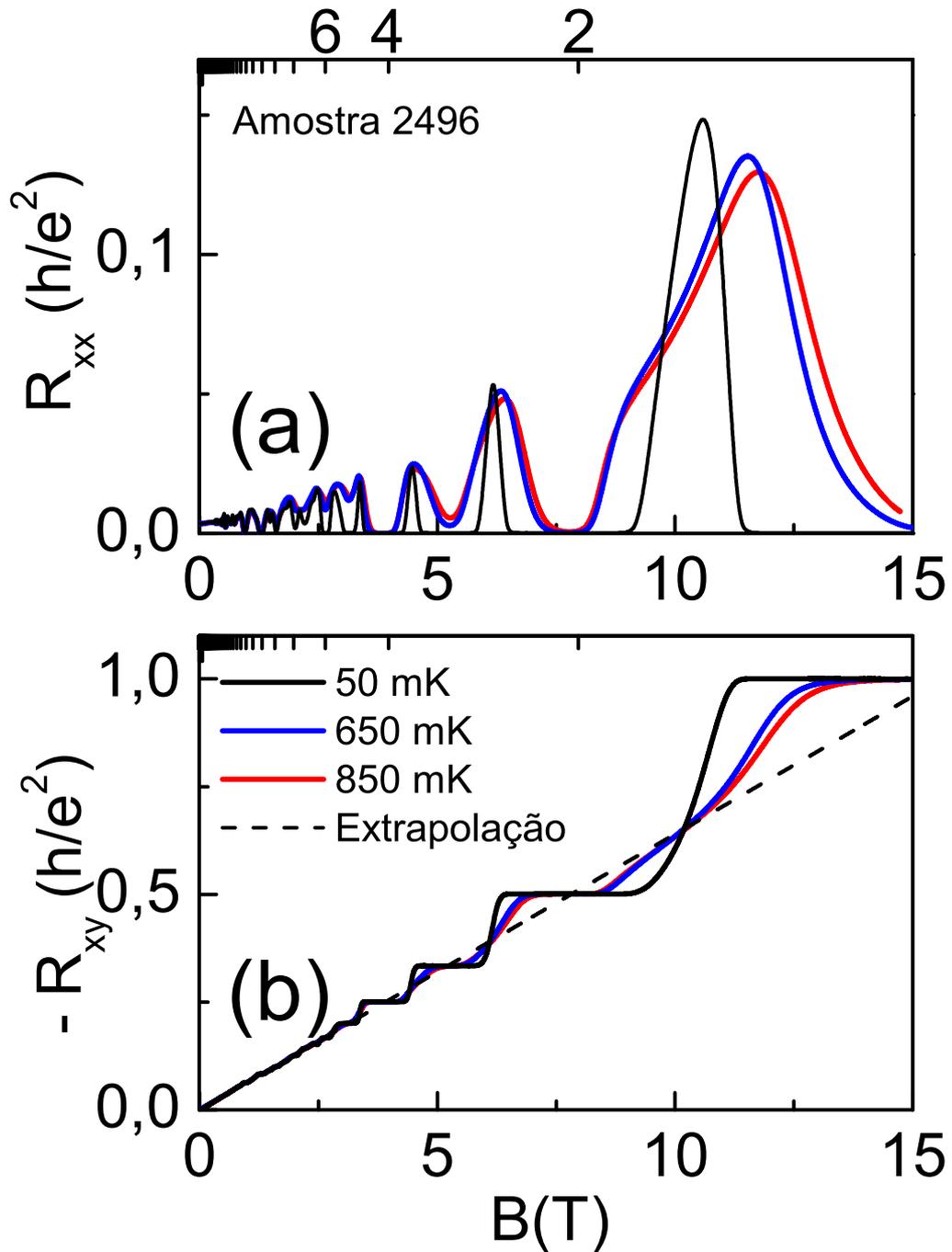


Figura 5.1: (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo n de largura $W = 1500 \text{ \AA}$ com camada espaçadora de espessura $L_s = 200 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T (mK): 850 (linha vermelha), 650 (linha azul), 50 (linha preta). A linha tracejada (---) corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos.

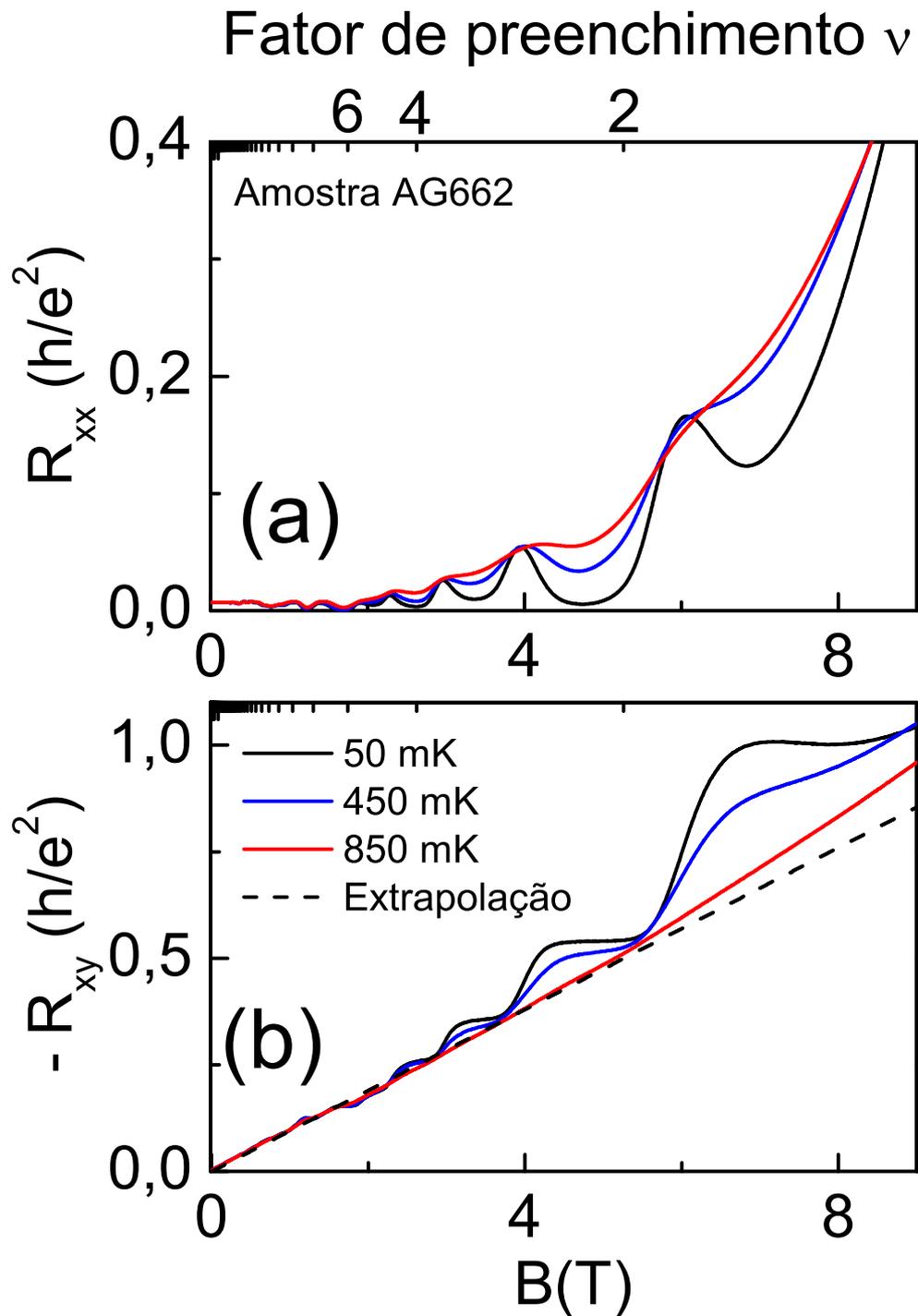


Figura 5.2: (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo n de largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 100 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. $T(\text{mK})$: 850 (linha vermelha), 450 (linha azul), 50 (linha preta). A linha tracejada (---) corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos.

amostra os fatores de preenchimento inteiros são atingidos em campos magnéticos menores do que o esperado, o que pode ser explicado por uma variação da densidade de cargas n_s com o campo magnético.

Passemos às amostras do tipo p , onde em algumas amostras observamos anomalias do tipo que acabamos de descrever, ainda mais pronunciadas. Na Figura 5.3 apresentamos os resultados para dois poços com portadores do tipo p de 1000 e 1500 Å. É na amostra de 1500 Å que vemos novamente o desvio da resistência R_{xy} para valores do campo acima de 4 T. As Figuras 5.4 e 5.5 mostram o aumento abrupto da resistência Hall para um campo crítico $B = 3.2$ T para os poços do tipo p de 2000 e 2500 Å. O excesso do coeficiente Hall comparado com o coeficiente em campos baixos é mais pronunciado para temperaturas baixas e atinge até um fator 2 para $T = 50$ mK.

A característica saliente destes dados é a abrupta mudança do coeficiente Hall em $B = 3.2$ T, que dificilmente poderá ser explicada por meio de algo como congelamento magnético gradual [75,76]. De uma maneira geral, a resistência Hall R_{xy} é inversamente proporcional à densidade superficial de cargas no poço. Em princípio poderíamos descrever o comportamento observado por uma equação simples do tipo

$$R_{xy} = A \times (B - B_0)/ep_s \quad (5.3)$$

sendo A uma constante que depende da temperatura. Pela expressão 5.3 vemos que o aumento da resistência Hall seria explicado por meio de uma perda de cargas do poço.

De fato esta hipótese é reforçada pelo comportamento da resistência longitudinal. Já mencionamos que para poços eletrônicos no regime do efeito Hall quântico inteiro, os fatores de preenchimento eram atingidos em campos magnéticos menores do que aqueles esperados usando a densidade superficial n_s inferida em campo baixo, indicando uma dependência de n_s com o campo. Nos poços do tipo p o efeito Hall quântico inteiro não é observado claramente. Mas na Figura 5.5 ($W = 2500$ Å) vemos um mínimo em R_{xx} bem pronunciado em $B = 12$ T, com um platô em R_{xy} de valor $3h/e^2$, correspondendo ao efeito Hall quântico fracionário com $\nu = 1/3$. A observação do efeito Hall fracionário nesta amostra confirma resultados vistos anteriormente em

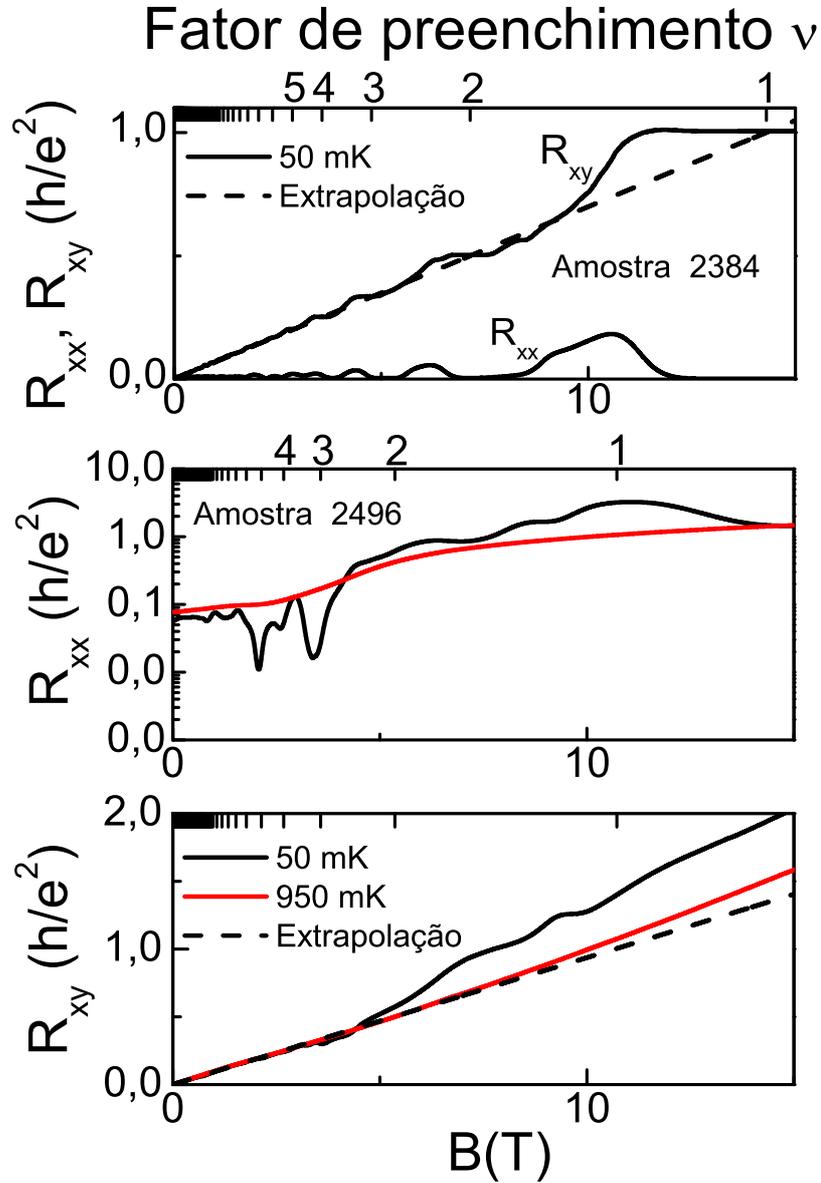


Figura 5.3: (a) Magnetoresistência e resistência Hall para um poço tipo p de $W = 1000 \text{ \AA}$ com largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$ em função do campo magnético na temperatura de 50 mK. A linha tracejada (---) corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos. (b) Magnetoresistência e (c) resistência Hall para um poço de $W = 1500 \text{ \AA}$ com largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$ em função do campo magnético nas temperaturas de 950 mK (linha vermelha) e 50 mK (linha preta). A linha tracejada corresponde à extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos (até 1 T).

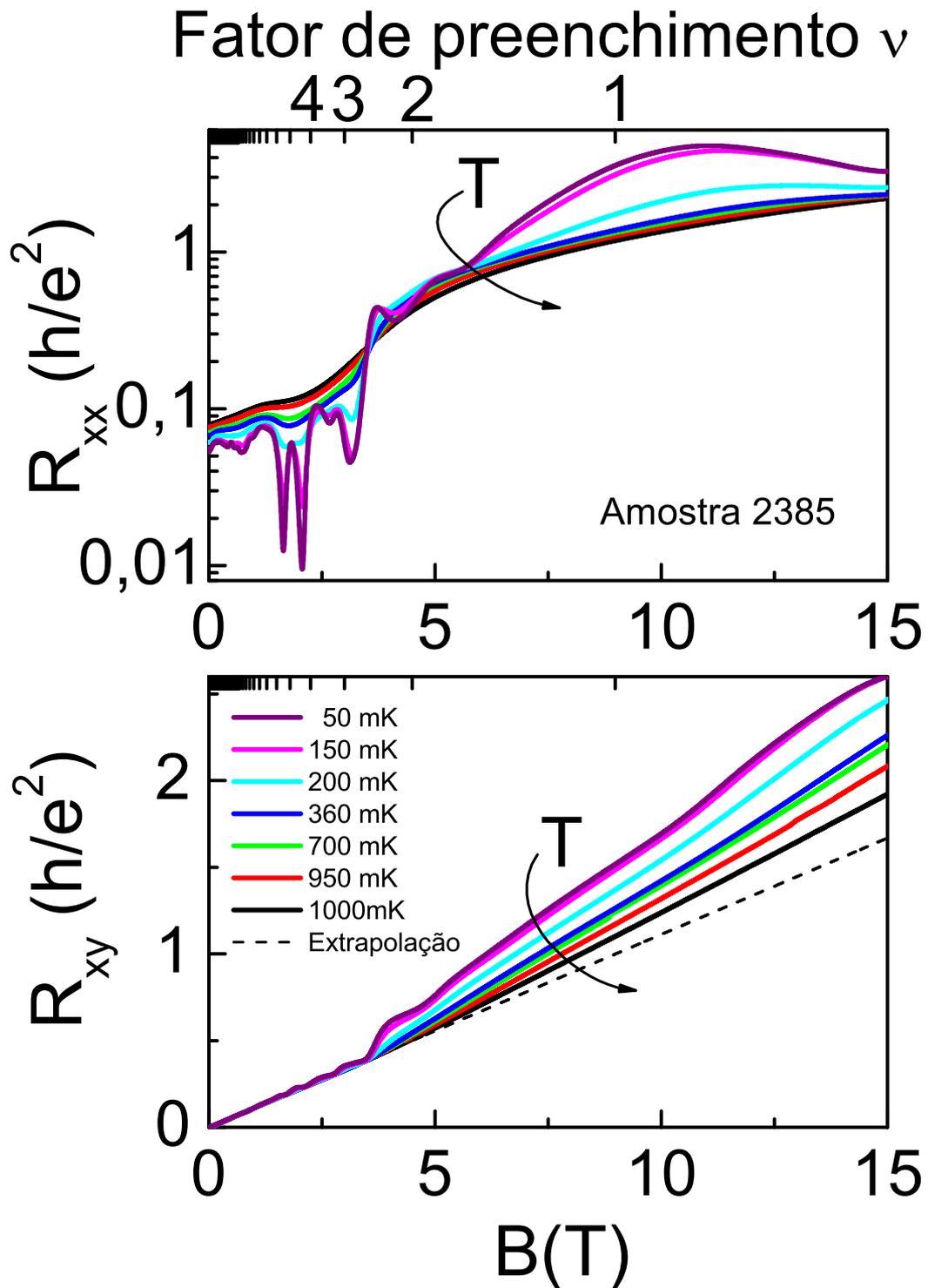


Figura 5.4: (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo p de $W = 2000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 150 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T (mK) 1000 (linha preta), 950 (linha vermelha), 700 (linha verde), 360 (linha azul), 200 (linha azul claro), 150 (linha magenta), 50 (linha púrpura). A linha tracejada corresponde a uma extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos.

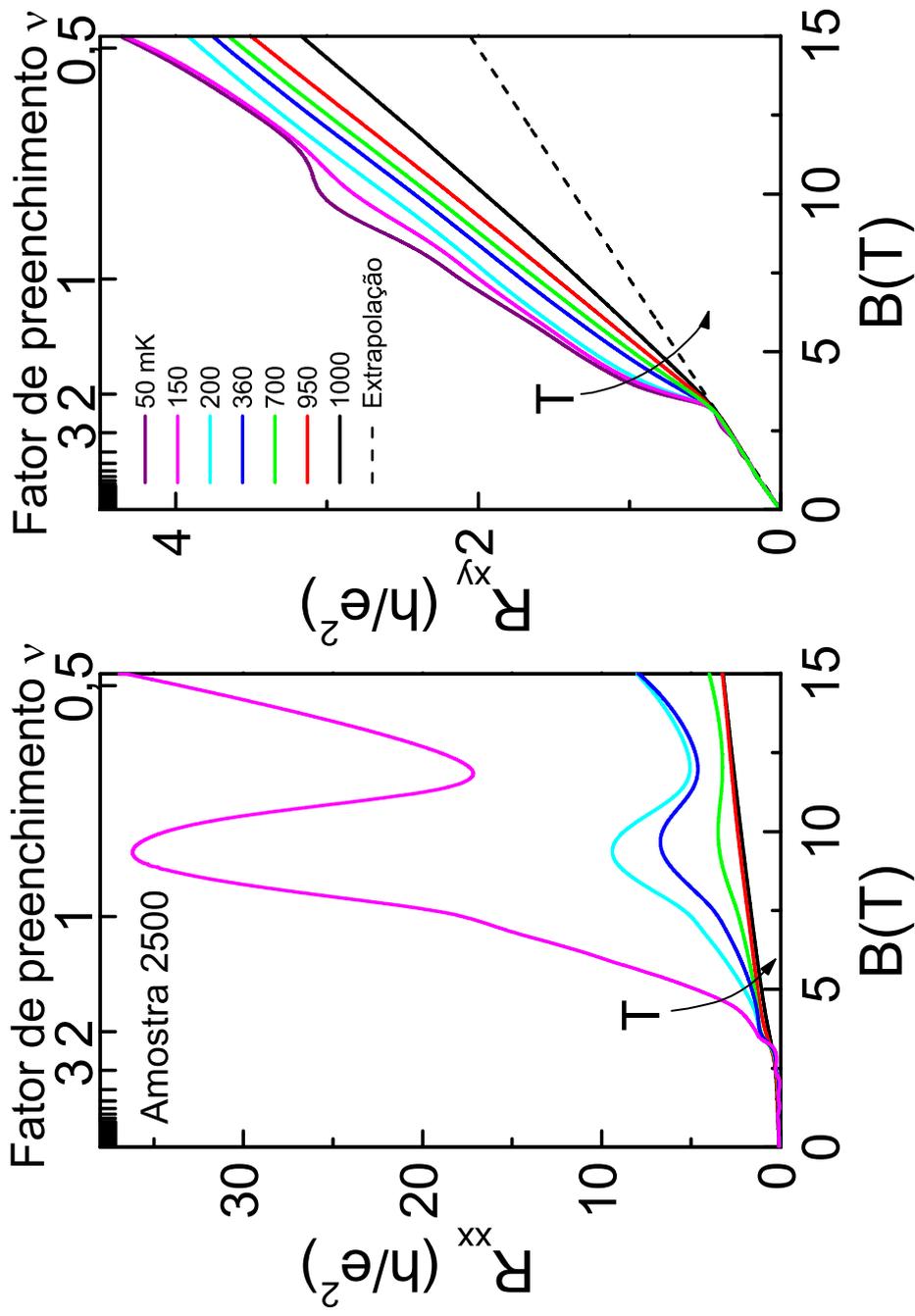


Figura 5.5: (a) Magnetoresistência e (b) resistência Hall para um poço tipo p de $W = 2500 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 150 \text{ \AA}$ em função do campo magnético para diferentes temperaturas. T (mK): 1000 (linha preta), 950 (linha vermelha), 700 (linha verde), 360 (linha azul), 200 (linha azul claro), 150 (linha magenta), 50 (linha púrpura). A linha tracejada corresponde a uma extrapolação linear da resistência Hall para campos magnéticos baixos.

heteroestruturas do tipo p de $Al_xGa_{1-x}As$ [77] e poços quânticos de $AlAs$ para elétrons de alta massa efetiva [78]. No entanto, o campo magnético previsto para obter um fator de preenchimento $\nu = 1/3$ usando a densidade obtida pelo coeficiente Hall em campo baixo ($p_s = 2,4 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$) é 25 T. A ocorrência de um platô com $\nu = 1/3$ sendo $B = 12$ T pode ser explicada mais uma vez por uma perda de cargas do poço no regime de altos campos.

A seguir, mostramos por meio dos cálculos autoconsistentes e analíticos que, de fato, há uma redistribuição de cargas entre o poço e as camadas doadoras ao variar o campo magnético.

5.2 Cálculos autoconsistentes na presença de campo magnético

Nesta Seção estendemos os cálculos autoconsistentes da distribuição de cargas em PQWs para o caso de um campo magnético aplicado paralelo à direção do crescimento. Como descrito no Capítulo 4, o cálculo é realizado considerando-se a massa efetiva m^* e a constante dielétrica ϵ como sendo constantes em toda a heteroestrutura.

Quando um campo magnético \mathbf{B} é aplicado na direção do crescimento z , a equação de Schrödinger que descreve o movimento de uma partícula movimentando-se num potencial $V(z)$ se torna:

$$\frac{1}{2m^*} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + V(z) \right] \Psi_{n,m,k_y}(r) = \epsilon_n^m \Psi_{n,m,k_y}(r) \quad (5.4)$$

onde $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$ é o potencial vetor e $V(z)$ é o potencial total do sistema descrito na equação Equação 4.7 do Capítulo 4. Nestes cálculos, não consideramos o efeito Zeeman que produz um desdobramento nas subbandas da ordem de $g^* \mu_B \mathbf{B}$ onde g^* é o fator de Landé e μ_B é o magneton de Bohr.

Na geometria de campo perpendicular ao poço que consideramos, temos que o campo magnético não afeta diretamente o movimento dos portadores ao longo do eixo z ¹. A equação de Schrödinger (Eq. 5.4) pode ser decomposta em duas equações independentes

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \phi_n(z) = E_n \phi_n(z) \quad (5.5a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} - qBx \right)^2 \right] \varphi_m(x - k_y l_B^2) = (\varepsilon_n^m - E_n) \varphi_m(x - k_y l_B^2) \quad (5.5b)$$

e a função de onda $\Psi_{n,m,k_y}(r)$ pode ser decomposta na forma [64]

$$\Psi_{n,m,k_y}(r) = e^{ik_y y} \varphi_m(x - k_y l_B^2) \phi_n(z), \quad (5.6)$$

onde $\phi_n(z)$ é a função de onda na direção z a ser calculada no processo autoconsistente e $\varphi_m(x - k_y l_B^2)$ é a função de onda de um oscilador harmônico descrevendo o movimento no plano xy . As energias das subbandas do poço são determinadas via Equação 5.5a da mesma maneira como foi descrito na Seção 4.2 do Capítulo 4. Já a Equação 5.5b que descreve o comportamento dos portadores no plano xy corresponde a de um oscilador harmônico centrado em $k_y l_B^2$ e com raio de ciclotron $l_B = \sqrt{\hbar/qB}$. As energias deste oscilador harmônico são dadas por:

$$\varepsilon_n^m - E_n = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c, \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (5.7)$$

sendo $\omega_c = qB/m^*$ a frequência de ciclotron.

O cálculo autoconsistente dos potenciais, das funções de onda, e da distribuição de cargas na presença de um campo magnético pode ser desenvolvido de forma semelhante à descrita no Capítulo 4. Começamos o cálculo usando um potencial inicial ou potencial de prova $V_H^{inicial}$. Com este potencial calculamos numa primeira iteração as autofunções $\phi_n^0(z)$ e os autovalores E_n^0 da Equação 5.5a². Uma vez calculadas as autofunções passamos a determinar a distribuição da densidade inicial de cargas $n^0(z)$.

¹No Capítulo 2 fizemos uma descrição detalhada da quantização do movimento dos elétrons livres num campo magnético $\mathbf{B} = (0, 0, B)$.

²Nesta primeira iteração o campo magnético ainda não é considerado.

Esta densidade agora depende do número de níveis de Landau ocupados. A densidade volumétrica $n(z)$ no caso da presença de campo magnético pode ser escrita em termos da ocupação dos níveis de Landau:

$$\begin{aligned} n(z) &= \sum_{n,i} n_s |\phi_n^m(z)|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_{n,m} \bar{\nu}(n,m) |\phi_n^m(z)|^2, \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde é definido o fator de preenchimento *por sub-banda* $\bar{\nu} = \frac{n_s^{(n)} h}{qB}$. O valor máximo de $\bar{\nu}(n,m)$ é 1 e o fator de preenchimento total do sistema é calculado como $\nu = \sum_n \bar{\nu}(n,m)$ [64]. Determinada a distribuição da densidade de cargas pode-se determinar um novo potencial V_H^0 a partir da equação de Poisson (Eq. 4.1). Feito isso, começamos a segunda iteração: Usamos um novo potencial que é uma mistura do potencial de entrada $V_H^{inicial}$ e do potencial de saída V_H^0 . Com o potencial obtido são calculadas as autofunções $\phi_n^1(z)$ e os autovalores E_n^1 (Eq. 5.7) e o novo potencial V_H^1 na equação de Poisson. As iterações continuam até o sistema atingir a convergência.

5.2.1 Cálculos autoconsistentes com transferência de cargas

O interesse principal é entender a variação da densidade de cargas no poço (n_s) na presença de campo magnético. Precisamos relaxar a condição de n_s fixa como foi adotado na seção anterior, e agora devemos levar em conta o processo de transferência de cargas dos íons doadores N_d^+ para dentro do poço. A quantidade de cargas transferida para dentro do poço é dada pela condição de equilíbrio eletrostático, o que significa que o potencial químico ou a energia de Fermi deve ser alinhada em toda a heteroestrutura. A densidade da cargas dentro do poço é determinada pelo balanço da energia

$$V_p = \Delta_1 + \Delta_2 = V_{Hmax} + E_c + \varepsilon_F + E_d + V_h + V_s \quad (5.9)$$

onde as energias tem o mesmo significado como descrito no Capítulo 4. Seguindo Sanchez-Dehesa [79] podemos considerar que a energia de ativação das impurezas doadoras E_d é independente do campo magnético. Esta mesma suposição é feita para a energia eletrostática V_h gerada pelas cargas ionizadas na camada dopante, e

para a energia de depleção das cargas ionizadas V_s . Estas energias são determinadas autoconsistentemente como foi descrito na seção anterior.

5.2.2 Resultados dos cálculos autoconsistentes

Primeiramente consideramos o caso de um PQW isolado em um campo magnético perpendicular, como foi feito por Hembree e colaboradores [73]. Nestes cálculos usamos o valor calculado de n_s em campo $B = 0$ (e não aquele medido por efeito Hall) para a densidade de cargas. Nas Figuras 5.6a e 5.7a mostramos o efeito do campo magnético sobre o potencial autoconsistente para os poços de 1000 e 4000 Å. O campo magnético estreita o potencial total o que leva a uma distribuição de cargas mais estreita. Este efeito é mais pronunciado para o poço mais largo porque a modificação do potencial da repulsão eletrostático na presença de campo magnético é maior neste caso, como mostramos nas Figuras 5.6b e 5.7b. A largura da distribuição da densidade de cargas no poço fica mais estreita ao aumentar o campo magnético e como veremos na seqüência deste trabalho, este estreitamento terá grande influência na densidade de cargas do poço quando levarmos em conta a transferência de cargas.

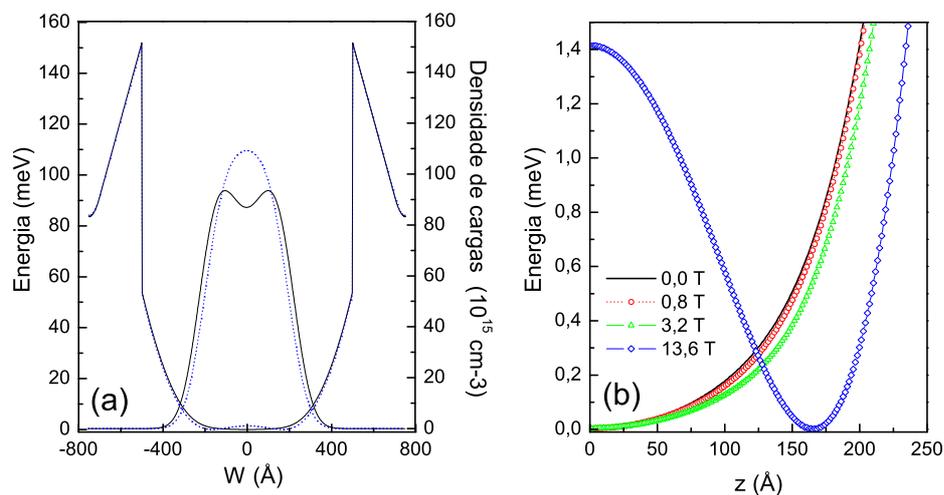


Figura 5.6: (a) Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 1000$ Å com densidade superficial total $n_s = 4,34 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 162,5$ meV, altura da barreira $\Delta_2 = 97,7$ meV. As linhas contínuas referem-se ao potencial e densidade de cargas em $B = 0$. As linhas tracejadas representam os valores para $B = 13,6$ T. (b) Visão ampliada do potencial total para quatro diferentes valores do campo magnético B : 0; 0,8; 3,2 e 13,6 T.

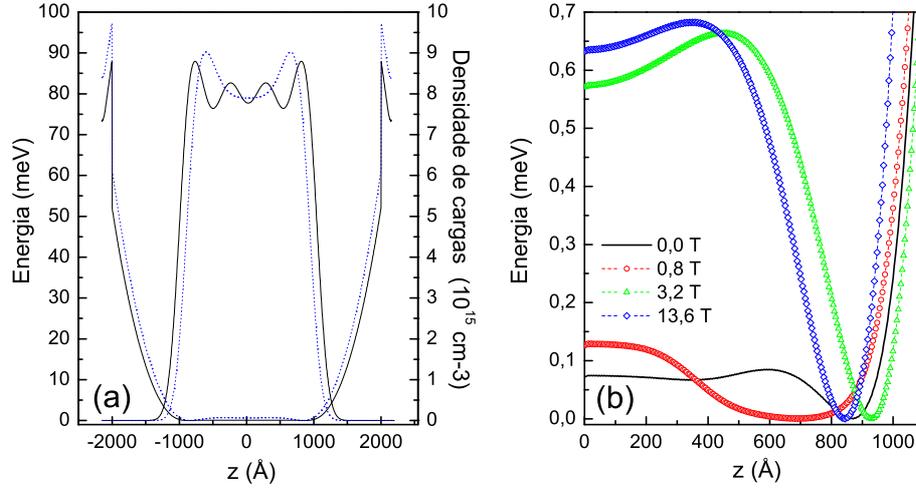


Figura 5.7: Potencial total e densidade de cargas para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$ com densidade superficial total $n_s = 1,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, altura do poço $\Delta_1 = 223,9 \text{ meV}$, altura da barreira $\Delta_2 = 36,2 \text{ meV}$. As linhas contínuas referem-se ao potencial e densidade de cargas em $B = 0$. As linhas tracejadas representam os valores para $B = 13,6 \text{ T}$. (b) Visão ampliada do potencial total para quatro diferentes valores do campo magnético B : 0; 0,8; 3,2 e 13,6 T.

Investigando mais detalhadamente a largura da distribuição da densidade de cargas Δz , vemos que há oscilações de pequenas amplitudes para campos até 5 T para o poço de 1000 Å e até 1 T para o poço de 4000 Å (Figuras 5.8b e 5.9b). O esquema de níveis de energia do poço parabólico em campo magnético é muito mais complexo do que o diagrama costumeiro dos níveis de Landau para um sistema bidimensional (Fig. 5.8a e 5.9a). A razão é que em um sistema 2D uma única subbanda é ocupada enquanto que nos PQWs os espaçamentos entre as energias das subbandas são comparáveis com o espaçamento dos níveis de Landau. Isto leva a uma grande variedade de maneiras para os elétrons minimizarem as suas energias. Nas Figuras 5.8 e 5.9 mostramos as energias das subbandas ocupadas e a energia de Fermi ε_F em função do campo magnético para poços de largura $W = 1000 \text{ \AA}$ e $W = 4000 \text{ \AA}$. Para maior clareza mostramos somente as energias dos três primeiros níveis de Landau. Mostramos também a evolução da energia de Fermi em função do campo magnético. Para campos de até 1 T, a energia de Fermi oscila perto do valor em campo nulo. Com o aumento do campo magnético os níveis de Landau ficam desocupados originando oscilações maiores da energia de Fermi,

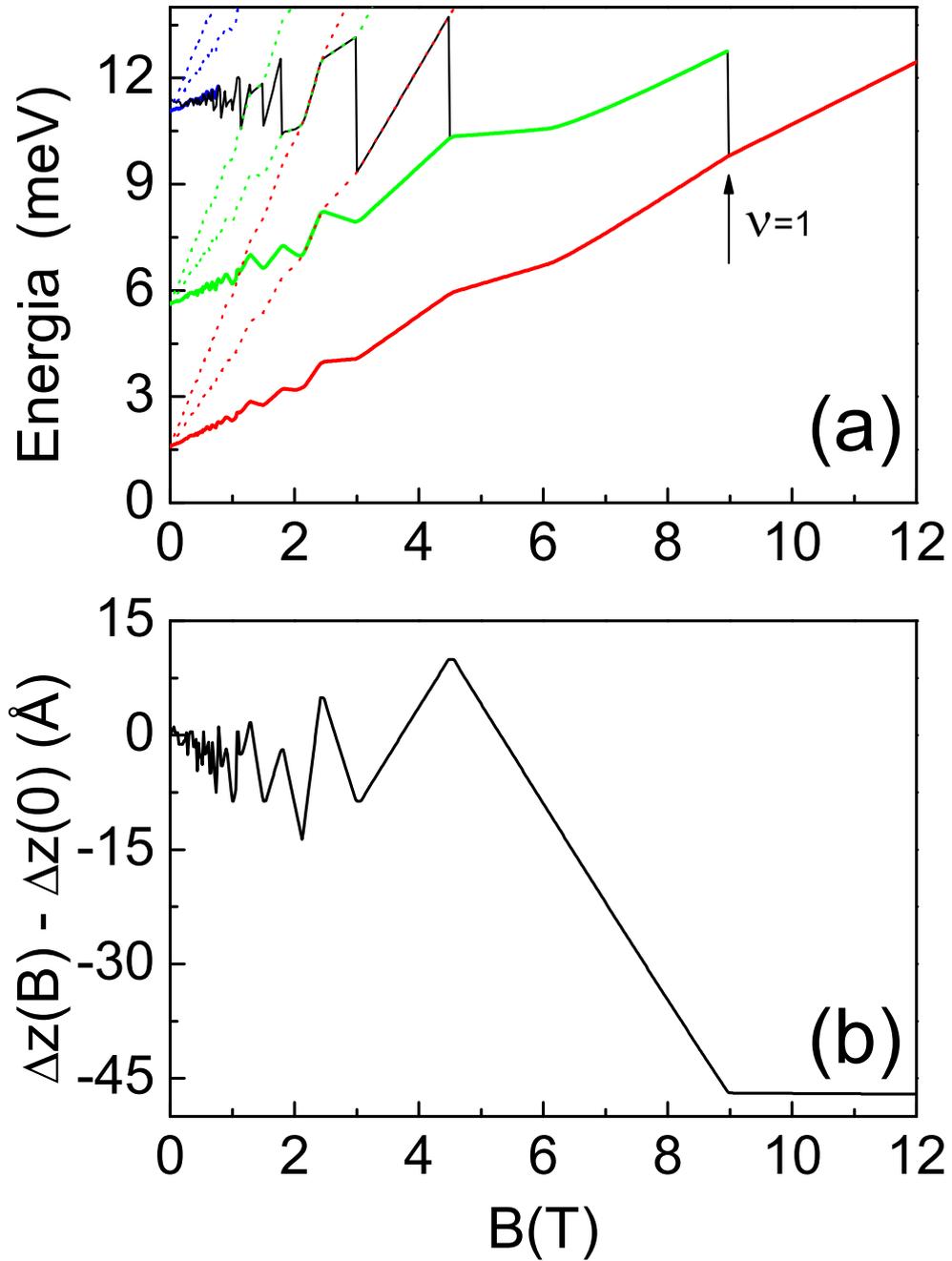


Figura 5.8: (a) Energia de Fermi (linha preta) em função do campo magnético para um poço com largura $W = 1000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$. Neste cálculo, a densidade dos portadores $n_s = 4,34 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ foi mantida constante. As energias de alguns dos níveis de Landau em função do campo magnético também são representadas: E_{00} (linha vermelha), E_{10} (linha verde) e E_{20} (linha azul). (b) Largura da distribuição da densidade de cargas em função do campo magnético aplicado.

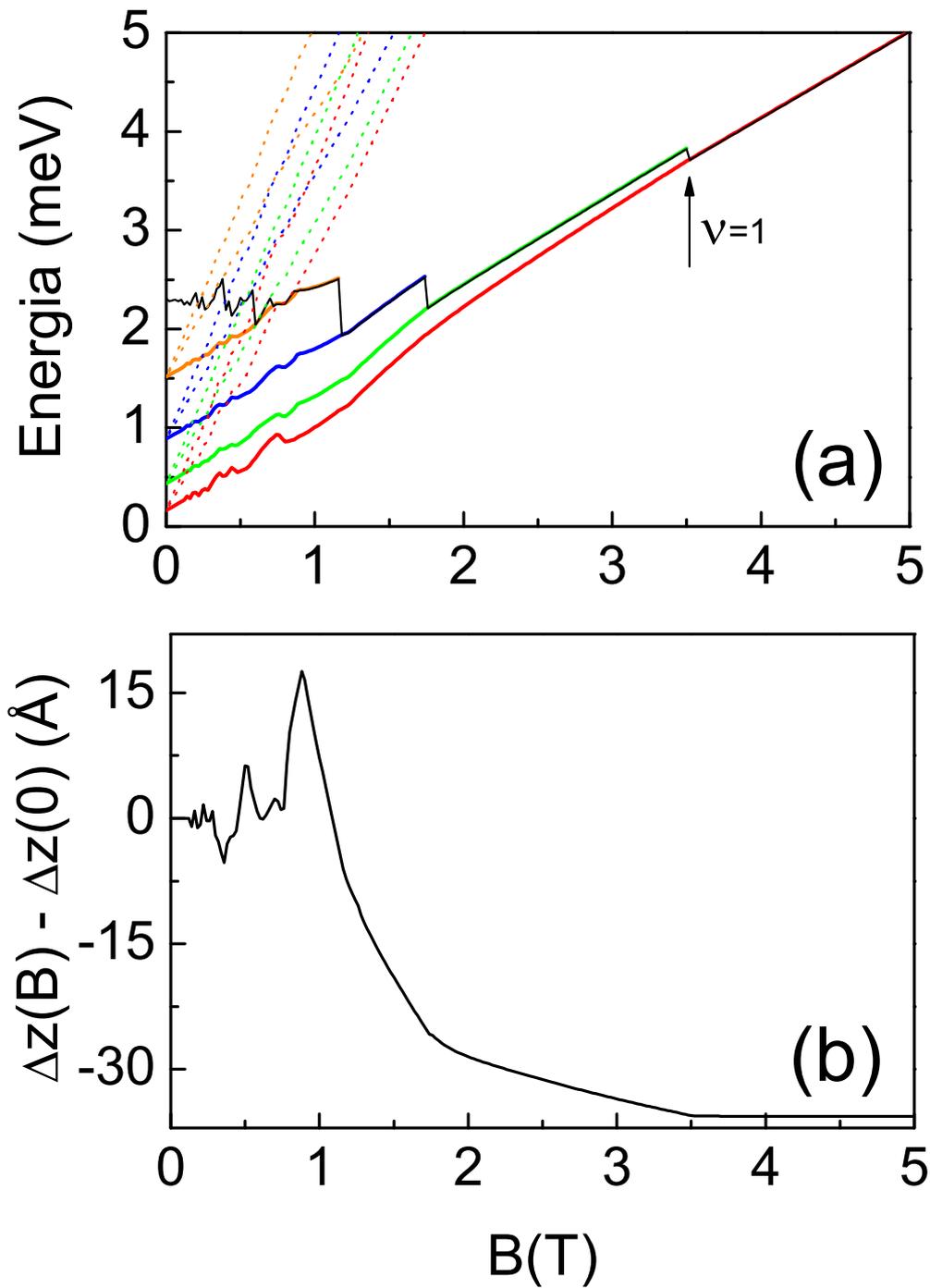


Figura 5.9: (a) Energia de Fermi (linha preta) em função do campo magnético para um poço com largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 100 \text{ \AA}$. Neste cálculo, a densidade de portadores $n_s = 1,7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ foi mantida constante. As energias das subbandas em função do campo magnético também são representadas: E_{00} (linha vermelha), E_{10} (linha verde), E_{20} (linha azul) e E_4 (linha laranja). A energia da subbanda E_5 não foi incluída nesta figura por não estar ocupada para campos $> 0.1 \text{ T}$. (b) Largura da distribuição da densidade de cargas em função do campo magnético aplicado.

levando por sua vez a oscilações nas funções de onda autoconsistente e na largura da distribuição de cargas no poço, ver Figuras 5.8b e 5.9b. Para campos altos, somente o primeiro nível de Landau é ocupado não havendo mais oscilações.

O comportamento complexo das energias e da largura da distribuição de cargas calculado para o poço isolado tem implicações importantes para o caso onde levamos em conta a transferência de carga. O estreitamento do potencial aumenta a distância entre as cargas e as camadas dos dopantes que fornecem cargas para o poço, o que leva a uma queda no número de cargas no poço. Assim, levando em conta o processo de transferência de cargas, esperamos ver oscilações e uma queda em campos altos da densidade superficial n_s em função do campo.

Nas Figuras 5.10 e 5.11 mostramos os resultados teóricos da variação da densidade n_s em função do campo magnético para poços de largura entre 1000 e 4000 Å. Para o poço estreito a diminuição de n_s e as oscilações são pequenas (da ordem de $\approx 1\%$). Para o poço de 4000 Å vemos uma diminuição de n_s de até 8% para campos altos. Note que a densidade é constante para campos $B < 4$ T, o que concorda com a linearidade da resistência Hall observada nesta região de campo (Fig. 5.2b).

Estes cálculos foram feitos para elétrons e reproduzem qualitativamente o comportamento observado experimentalmente. No poço estreito, que experimentalmente não mostra desvios no coeficiente Hall, nós também não observamos variações na densidade de cargas n_s através do cálculo autoconsistente (Tab. 5.1). No poço de 4000 Å um aumento de um fator de 1,33 no coeficiente Hall é observado o que implica numa queda da densidade de elétrons por um fator de 0,75.

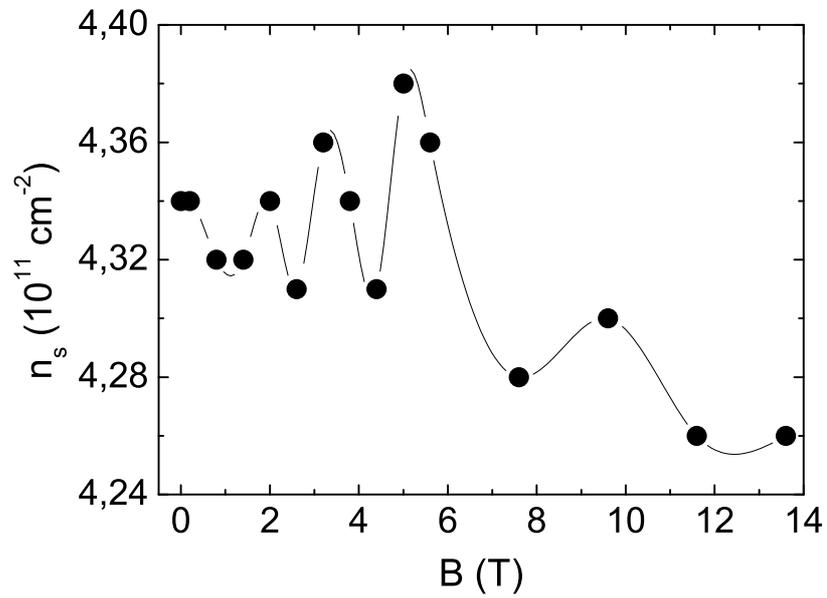


Figura 5.10: Variação da densidade de elétrons em função do campo magnético para um poço de largura $W = 1000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 200 \text{ \AA}$.

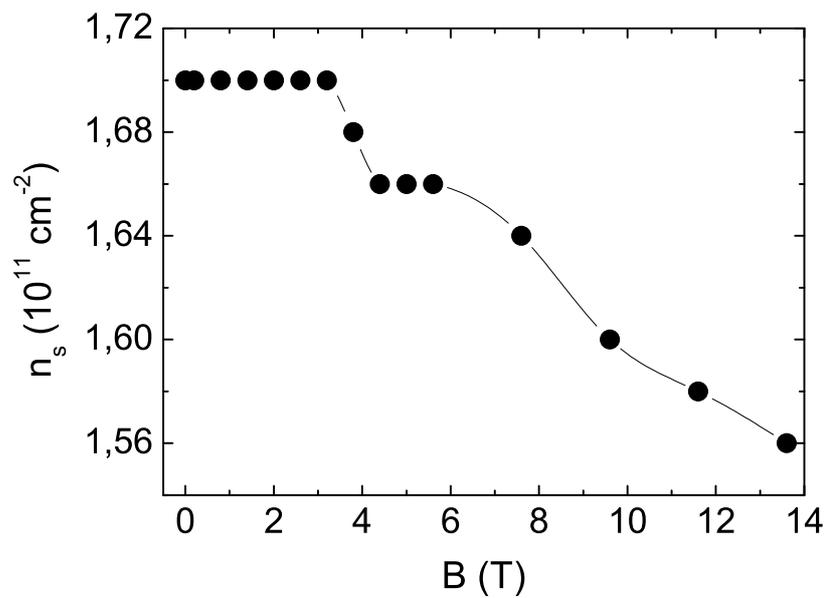


Figura 5.11: Variação da densidade de elétrons em função do campo magnético para um poço de largura $W = 4000 \text{ \AA}$ e largura da camada espaçadora $L_s = 100 \text{ \AA}$.

5.3 Cálculos analíticos na presença de campos magnéticos: transferência de cargas

Devido a complexidade dos cálculos numéricos autoconsistentes para poços com portadores tipo p fizemos de maneira semelhante a como apresentado no Capítulo 4 uma aproximação analítica para estes poços. Como foi mostrado no Capítulo 4 esta aproximação é melhor para o caso de uma única subbanda ocupada.

Nesta Seção apresentaremos uma expressão analítica para a densidade de cargas para campos o suficientemente altos para que um único nível de Landau seja ocupado. Uma vez que consideramos uma única subbanda, a expressão será válida tanto para poços do tipo n como para poços do tipo p . Nos poços do tipo p o aumento do campo magnético deve fazer com que a subbanda dos buracos leves p_{LH} seja desocupada. É preciso considerar somente a subbanda dos buracos pesados p_{HH} .

Procedemos de maneira semelhante àquela descrita na aproximação analítica para uma subbanda sem campo magnético. Escrevemos a densidade superficial em termos dos fatores de preenchimento dos níveis de Landau

$$n_s = \frac{1}{2\pi l_B} \sum_{n,m} \bar{\nu}(n, m) \quad (5.10)$$

como descrito anteriormente para o cálculo autoconsistente.

Considerando o sistema com um único nível de Landau ocupado temos $n = 0$ e $m = 1$. Ao impor esta condição, podemos calcular o campo magnético para qual o fator de preenchimento é $\nu = 1$. A densidade de cargas para este campo é dada por:

$$n_s(B_{\nu=1}) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \bar{\nu}(0, 1) = -\frac{eB_{\nu=1}}{2\pi\hbar} \quad (5.11)$$

A equação de que descreve a energia potencial de interação eletrostática agora é da forma

$$\frac{d^2 V_H}{dz^2} = -\frac{e^2}{\epsilon} n_0 \phi_0(z) = -\frac{e^2}{\epsilon} \left[\frac{1}{2\pi l_B^2} \bar{\nu}(0, 1) \right] \phi_0(z) \quad (5.12)$$

que tem como soluo:

$$V_H(z) = -\frac{e^2}{2\epsilon} \left(\frac{eB_{\nu=1}}{2\pi\hbar} \right) \left\{ z \operatorname{erf}(\sqrt{a}z) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left[e^{-az^2} - 1 \right] \right\} \quad (5.13)$$

O valor mximo para a energia $V_H(z)$ ser dado por:

$$|V_{Hmax}| = \frac{e^2}{2\epsilon} \left(\frac{qB_{\nu=1}}{2\pi\hbar} \right) \left\{ \frac{W}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \left(e^{-aW^2/4} - 1 \right) \right\} \quad (5.14)$$

A energia da subbanda E_c corrigida em primeira aproximao pelo Hamiltoniano $V_H(z)$ pode ser calculada pela expresso:

$$E_c = E_0 + \langle \phi_0 | V_H | \phi_0 \rangle \quad (5.15)$$

Calculando o termo $\langle \phi_0 | V_H | \phi_0 \rangle$ obtemos:

$$E_c = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{qB_{\nu=1}\hbar}{2m^*} - \left(\frac{qB}{2\pi\hbar} \right) \frac{q^2}{2\epsilon} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right) - \frac{1}{2\sqrt{a\pi}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) \left(e^{-aL_w^2/4} + 1 \right) \right\} \quad (5.16)$$

Finalmente, a expresso para a densidade superficial de cargas no campo magntico para qual $\nu = 1$  dada por:

$$n_s(B_{\nu=1}) = \frac{V_p - \frac{\hbar\omega}{2} - E_d}{\frac{q^2}{\epsilon} \left(\frac{W \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right)}{4} + \frac{e^{-aW^2/4} - 1}{2\sqrt{a\pi}} - \frac{\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2a}W}{2} \right)}{\sqrt{2a\pi}} + \frac{\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{a}W}{2} \right) (e^{-aW^2/4} + 1)}{2\sqrt{a\pi}} + \frac{L_s}{2} \right) + \frac{2\pi\hbar^2}{m^*}} \quad (5.17)$$

Nas Tabelas 5.2 e 5.3 mostramos os resultados para sistemas do tipo n e do tipo p , respectivamente e comparamos os valores obtidos analiticamente com os valores experimentais e aqueles obtidos por clculos autoconsistentes (no caso de eltrons). Os valores absolutos das densidades superficiais para $B = 0$ so subestimados como j foi mostrado no Captulo 4. A razo  que em $B = 0$ mais do que uma subbanda est ocupada, de modo que para os poos mais estreitos os valores previstos pelo clculo

analítico para p_s se aproximam mais do valor experimental. Assim, os valores para p_s calculados analiticamente para o campo $B_{\nu=1}$ devem ser mais precisos. Nestas tabelas apresentamos os valores dos campos magnéticos para os quais calculamos que uma única subbanda é ocupada. Podemos notar que estes campos são bem menores para buracos devido à sua massa efetiva grande. Isto significa que a queda da densidade superficial p_s também ocorre para campos relativamente baixos (em torno de 4 T), concordando com as nossas observações experimentais do aumento do coeficiente Hall para os sistemas com portadores do tipo p (Figuras 5.3, 5.5 e 5.4).

A Tabela 5.3 mostra que para os sistemas do tipo n o campo para o qual $\nu = 1$ é relativamente baixo somente para os poços bem largos, de novo concordando com as nossas observações (Figuras 5.1 e 5.2) e também com os cálculos autoconsistentes.

Comparamos também as razões dos coeficientes Hall em campo alto e campo baixo com as razões previstas pela expressão analítica. Mais uma vez, a expressão analítica prevê qualitativamente a variação da densidade de cargas no poço com campo magnético. Quantitativamente porém, a variação observada é maior do que aquela prevista por esta aproximação simples.

Tabela 5.2: Valores experimentais e calculados pela aproximação analítica para a densidade superficial p_s nos poços quânticos parabólicos tipo p , para campo magnético nulo e para campos magnéticos onde o fator de preenchimento ν e igual a 1. As razões entre a densidade de portadores para campo magnético nulo e campos altos calculadas através dos cálculos analíticos são apresentadas. De forma semelhante apresentamos a razão entre o coeficiente da resistência Hall para campos magnéticos altos e campos magnéticos baixos.

Amostra	L_s Å	W Å	p_s (10^{11} cm $^{-2}$)	p_s (B=0) (10^{11} cm $^{-2}$)	p_s ($B_{\nu=1}$) (10^{11} cm $^{-2}$)	$B_{\nu=1}$ (T)	$\frac{p_s}{p_s(B_{\nu=1})}$		$\frac{R_H(B>10T)}{R_H(0)}$	
							experimental	analítico	analítico	experimental
2384	200	1000	3,70	2,38	1,58	6,50	1,63	1,63	1,0	
2496	200	1500	2,44	1,90	1,18	4,90	1,61	1,61	1,5	
2496	200	1500	2,40	1,90	1,18	4,90	1,61	1,61	1,5	
2385	150	2000	2,40	1,70	0,98	4,05	1,73	1,73	—	
2499	150	2000	2,40	1,70	0,98	4,05	1,73	1,73	—	
2500	150	2500	2,20	1,43	0,81	3,35	1,8	1,8	2,5	
2518	150	2500	2,40	1,43	0,81	3,35	1,8	1,8	—	
2386	150	3000	2,40	1,24	0,68	2,81	1,8	1,8	—	

Tabela 5.3: Valores experimentais e calculados pela aproximação analítica para a densidade superficial n_s nos poços quânticos parabólicos tipo n , para campo magnético nulo e para campos magnéticos onde o fator de preenchimento ν e igual a 1. As razões entre a densidade de portadores para campo magnético nulo e campos altos, calculadas através dos cálculos analíticos e autoconsistentes são apresentadas. De forma semelhante apresentamos a razão entre o coeficiente da resistência Hall para campos magnéticos altos e campos magnéticos baixos.

Amostra	L_s Å	W Å	n_s (10^{11} cm $^{-2}$) experimental	n_s (B=0) (10^{11} cm $^{-2}$) analítico	n_s ($B_{\nu=1}$) (10^{11} cm $^{-2}$) analítico	$B_{\nu=1}$ (T)	$\frac{n_s}{n_s(B_{\nu=1})}$	$\frac{n_s(B>10T)}{n_s(0)}$	$\frac{R_H(B>10T)}{R_H(0)}$	autoconsistente		experimental	
										analítico	analítico	analítico	experimental
2384	200	1000	4,60	3,74	3,48	14,40	1,07	1,02	1,0				1,0
2577	200	1000	4,20	3,74	3,48	14,40	1,07	—	1,0				1,0
2378	500	1000	2,30	2,55	2,43	10,05	1,05	—	1,0				1,0
2496	200	1500	3,50	2,83	2,68	11,09	1,06	—	1,0				1,0
2535	200	1700	3,20	2,54	2,42	10,01	1,06	—	—				—
2386	150	3000	2,90	1,65	1,60	6,62	1,03	—	—				—
AG662	100	4000	1,50	1,31	1,27	5,26	1,03	1,10	1,33				1,33

5.4 Considerações finais

Os cálculos numéricos e analíticos foram feitos para $T = 0$ e não explica os efeitos da temperatura claramente visto nas Figuras 5.2, 5.3, 5.4 e 5.5. Uma temperatura finita deve alargar as oscilações no nível de Fermi o que pode mascarar as variações de densidade no poço, recuperando o coeficiente Hall normal, como observado experimentalmente.

Para poços eletrônicos vemos nos cálculos numéricos uma queda relativamente abrupta da densidade para o poço de 4000 Å, para campos em torno do fator de preenchimento $\nu = 2$ ou 1. Para estes campos um aumento do coeficiente Hall é visto experimentalmente, mas não é um aumento muito abrupto. Por outro lado, um aumento abrupto do coeficiente Hall é visto para campos > 3.2 T nos poços do tipo p . Porém, a aproximação analítica que fizemos não nos permite calcular a densidade superficial em função do campo. É possível que cálculos numéricos para portadores tipo p mostrassem uma queda brusca de p_s , mas não podemos excluir a possibilidade que o campo aparentemente *crítico* decorre de um outro mecanismo físico. A seguir consideramos outras possíveis mecanismos para mudanças no coeficiente Hall.

Primeiro, Zaremba [80] considerou transporte para um 2DEG com mais do que uma sub-banda ocupada. Levando em consideração a possibilidade de transições entre sub-bandas modifica os coeficientes de transporte. Mas este efeito deve ser relativamente maior em campos baixos e mascarado para campos altos, o oposto do que observamos para os nossos sistemas.

Segundo, uma mudança do coeficiente Hall é prevista pela teoria de correções quânticas para a resistividade Hall, recentemente reformulada em termos de espalhamento elástico de elétrons por oscilações de Friedel [81]. Porém, este tipo de teoria não pode explicar a existência de um campo crítico.

Terceiro, podemos tentar considerar transporte dependente de spin. Outros trabalhos [58] em sistemas parabólicos, com campo aplicado paralelo ao poço, também mostraram mudanças no coeficiente Hall. O aumento do coeficiente Hall observado

neste caso foi atribuído a restrição de movimento dos elétrons na direção z devido à necessidade de uma mudança de spin para o movimento nesta direção. A possibilidade destas mudanças de spin são suprimidas em temperaturas baixas, levando a um aumento do coeficiente Hall. Apesar de algumas semelhanças no comportamento, devemos ressaltar as diferenças entre estas observações e os nossos resultados, indicando a diferente origem física dos dois fenômenos.

Por exemplo, o nosso efeito ocorre para temperaturas < 2 K enquanto o efeito em campo paralelo requer temperaturas da ordem de 50 K para reverter ao comportamento normal. Ainda mais significativo, em poços do tipo p o aumento do coeficiente Hall não é observado em campos paralelos. Esta observação indica a origem diferente dos fenômenos. Se tentamos explicar o aumento do coeficiente Hall em campos paralelos da mesma maneira que fizemos para campos perpendiculares, esperaríamos um *alargamento* da distribuição de cargas devido às forças de Lorentz sobre as cargas, ao invés do estreitamento que observamos e calculamos em campos perpendiculares. As cargas seriam deslocadas para posições mais próximas paredes do poço, levando a um *aumento* de cargas no poço, contrário às observações para poços tipo p em campos paralelos.

Finalmente, uma possibilidade intrigante seria a interpretação das nossas observações em termos de uma transição de fase do tipo onda de densidade de carga (*Charge Density Wave*, CDW) previsto por Brey [69]. Para densidades superficiais e larguras efetivas do poço suficientemente altas uma transição é previsto, também para poços do tipo p . Mas esta transição pode ser suprimido por espalhamento por impurezas. A nossa explicação em termos do processo de transferência de carga independe de espalhamento.

Nos cálculos numéricos que fizemos usamos a aproximação de Hartree que em princípio é válida para parâmetros de densidade adimensional $r_s < 1$. Mas como vimos (Tabela 5.1), este parâmetro é da ordem de 10 para buracos. Assim, não esperamos concordância quantitativa dos nossos cálculos com os resultados experimentais. Porém, acreditamos que os cálculos descrevem a física essencial por trás do processo

de transferência de carga e que a perda de carga no poço é um ingrediente importante na explicação da mudança do coeficiente Hall observado.

Conclusões

Neste trabalho foram estudadas amostras de PQWs crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE) em substratos de $GaAs$ (001) e $GaAs$ (311)A respectivamente. Estudamos um conjunto de amostras com larguras de $W = 1000 \text{ \AA}$ até 4000 \AA e com diferentes larguras na camada espaçadora L_s . Medidas de efeito Hall foram realizadas nos PQWs em campos magnéticos altos aplicados na direção do crescimento para temperaturas que variam entre os 50 mK e 1,0 K. O principal resultado foi mostrado para um campo magnético crítico ($B > 3 \text{ T}$), e em temperaturas suficientemente baixas, onde o coeficiente Hall aumenta acima do coeficiente extrapolado para baixos campos. Atribuímos este aumento à mudança da densidade de portadores no poço induzida pelo campo magnético. Argumentamos que as observações feitas experimentalmente podem ser explicadas satisfatoriamente pelo efeito do campo no potencial total, na largura efetiva da camada de portadores, e na densidade de cargas no poço.

Estudamos os PQWs do tipo n , como sistemas isolados, através de cálculos autoconsistentes. Determinamos a distribuição de densidade de cargas $n(z)$ e potencial total $V(z)$. Implementamos os nossos cálculos levando em consideração o processo de transferência de cargas entre as camadas com dopagem delta de silício e o PQW (campo magnético nulo). Obtemos assim resultados da densidade de cargas superficial n_s para PQWs com diferentes largura de poço W e largura da camada espaçadora (L_s). Estes resultados quando comparados com os valores experimentais, mostram uma boa concordância, dentro de 10%. O que indica que os resultados autoconsistentes descrevem corretamente os estados eletrônicos dos PQWs. Completamos nossa análise através de cálculos analíticos, em poços do tipo n e do tipo p , onde é considerada a ocupação de uma e duas subbandas. Esta aproximação mostrou-se útil pois foi capaz

de reproduzir de forma qualitativa o comportamento da densidade de cargas com a largura do poço e com a largura da camada espaçadora.

Estudamos os efeitos nas propriedades eletrônicas dos PQWs sujeitos a presença de campos magnéticos altos aplicados na direção de crescimento quando considerados como sistemas isolados. Para um poço isolado as larguras da densidade de cargas $n(z)$ e do potencial total $V(z)$ se comportam da mesma forma como já visto na literatura. De forma análoga ao estudo da transferência de cargas com campo magnético nulo, estudamos o processo de transferência de carga nos poços do tipo n através de cálculos autoconsistentes. Observamos uma diminuição de 8% na densidade de cargas n_s no PQW com largura de 4000 Å ($r_s = 3,04$) e de 1% no PQW com largura de 1000 Å ($r_s = 1,34$), concordando qualitativamente com as observações experimentais. Os cálculos analíticos mostram que a redistribuição de cargas são de importância ainda maior nos poços do tipo- p , novamente concordando com as observações. A explicação do aumento da coeficiente de Hall em termos do processo de transferência de carga parece assim razoável. Outros estudos além de estudos de transporte terão que ser feitos para confirmar a nossa interpretação.

Referências Bibliográficas

- [1] *Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors*, L. Esaki e R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **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] *Man-made superlattice crystals*, A. E. Blakeslee e C. F. Aliotta, IBM J. Res. Develop. **14**, 686 (1970).
- [5] *Growth of periodic structures by the molecular-beam method*, A. Y. Cho, Appl. Phys. Lett. **19**, 467 (1971).
- [6] *GaAs – AlGaAs heterojunction transistor for high frequency operation*, W. P. Dumke, J. M. Woodall e V. L. Rideout, Solid State Electron. **15**, 1339 (1972).
- [7] *The quantized Hall effect*, Klaus von Klitzing, Reviews of Modern Physics **58**, 519 (1986).
- [8] *Nobel Lecture: The fractional quantum Hall effect*, Horst L. Störmer, Reviews of Modern Physics **71**, 875 (1999).
- [9] *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).
- [10] *Nobel Lecture: Fractional quantization*, R. B. Laughlin, Reviews of Modern Physics **71**, 863 (1999).

- [11] *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).
- [12] *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).
- [13] *Silicon and germanium doping of epitaxial gallium-arsenide grown by trimethylgallium-arsine method*, S. J. Bass, J. Cryst. Growth **47**, 613 (1979).
- [14] *Complex free-carrier profile synthesis by atomic-plane doping of MBE GaAs*, C. E. C. Wood, G. M. Metzger, J. D. Berry e L. F. Eastman, J. Appl. Phys. **51**, 383 (1980).
- [15] *Delta doping of III-V compound semiconductors: fundamental and device applications*, E. F. Schubert, J. Vac. Sci. Technol. **A8**, 2980 (1990).
- [16] *Energy-gap discontinuities and effective masses for GaAs/AlGaAs quantum wells*, R. C. Miller, D. A. Kleinman A. C. Gossard, Phys. Rev. B **29**, 7085 (1984).
- [17] *Remotely-doped graded potential well structures*, M. Sundaram, A. C. Gossard e J. H. English, Superlattices and Microstructures **4**, 683 (1988).
- [18] *Realization of a quasi-three-dimensional modulation-doped semiconductor structure*, M. Shayegan, T. Sajoto, M. Santos e C. Silvestre, Appl. Phys. Lett. **53**, 791 (1988).
- [19] *Two-dimensional hole gas in acceptor delta-doped GaAs*, F. A. Rebrodo e C. R. Proetto, Phys. Rev. B **47**, 4655 (1993).
- [20] *Band structure of holes in p-type delta-doping quantum wells and superlattices*, G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, Phys. Rev. B **53**, 9930 (1996).
- [21] *Density functional theory for holes in semiconductors*, R. Enderlein, G. M. Sipahi, L. M. R. Scolfaro e J. R. Leite, Phys. Rev. Lett. **79**, 3712 (1997).

- [22] *Theory of luminescence spectra from delta-doping structures: application to GaAs*, G. M. Sipahi, R. Enderlein, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, E. C. F. da Silva e A. Levine, Phys. Rev. B **57**, 9168 (1998).
- [23] *On a new action of the magnet on electrical current*, E. H. Hall, Amer. J. Math. **2**, 287 (1879).
- [24] E. H. Putley em *The Hall effect and related phenomena*, publicado por Butterworths, London (1980).
- [25] *Theory of quantum transport in a two-dimensional electron system under magnetic fields: I - Characteristics of level broadening e transport under strong fields*, Tsuneya Ando e Yasutada Uemura, J. of the Physical Society of Japan **36**, 959 (1974).
- [26] *Hall conductivity in n-type silicon inversion layers under strong magnetic field*, J. Wakabayashi e S. Kawaji, Surface Science **98**, 299 (1980).
- [27] *Theory of Hall effect in a two-dimensional electron system*, T. Ando, Y. Matsumoto e Y. Uemura, J. of the Physical Society of Japan **39**, 279 (1975).
- [28] *Analysis of P_{xx} minima in surface quantum oscillations on (100)normal-type silicon inversion layers*, T. Englert e K. von Klitzing, Surf. Sci. **73**, 70 (1978).
- [29] *25 years of the quantum Hall effect: how it all came about*, G. Landwehr, Physica E **20**, 1 (2003).
- [30] *New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance*, K. von Klitzing, G. Dorda e M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [31] *Effect of localization on the Hall conductivity in the two-dimensional system in strong magnetic fields*, H. Aoki and T. Ando, Solid State Commun. **38**, 1079 (1981).
- [32] *The technology and physics of molecular beam epitaxy* editado por E. H. C. Parker (Plenum Press, New York, 1985).

- [33] *Molecular beam epitaxy*, A. Y. Cho e J. R. Arthur, Progress in Solid-State Chemistry **10**, 157 (1975).
- [34] S. M. Sze em *Physics of semiconductor devices*, (John Wiley & Sons, Singapura, 1981).
- [35] Jasprit Singh em *Semiconductor optoelectronics: Physics and Technology*, editado por George T. Hoffman (McGraw-Hill, Singapura, 1995).
- [36] Manijeh Razeghi em *Fundamentals of solid state engineering*, segunda edição, (Springer, United States of America, 2006).
- [37] Sandro Martini em *Estudo da segregação de índio em camadas epitaxiais de InGaAs crescidas sobre substratos de GaAs(001)*, Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências (2002).
- [38] *Electrical and optical properties of Si doped GaAs grown by molecular beam epitaxy on [311]A substrates*, T. Takamori, T. Fukunaga, J. Kobayashi, K. Ishida e N. Nakashima, Solid State Commun. Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 1097 (1987).
- [39] *Molecular-beam epitaxial growth and characterization of silicon-doped AlGaAs and GaAs on [311]A GaAs substrates and their device applications*, W. Q. Li, P. K. Bhattacharya, S. H. Kwok e R. Merlin, J. Appl. Phys. **72**, 3129 (1992).
- [40] *Electrical properties of heavily Si-doped [311]A GaAs grown by molecular beam epitaxy*, K. Agawa, K. Hirakawa, N. Sakamoto, Y. Hashimoto e T. Ikoma, Appl. Phys. Lett. **65**, 1171 (1994).
- [41] Tomás Erickson Lamas em *Epitaxia por feixe molecular de camadas dopadas do tipo p para construção de dispositivos optoeletrônicos*, Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências (2004).
- [42] *Alloy-disorder-scattering-limited mobility of electrons in superlattice*, Partha Ray e P. K. Basu, Phys. Rev. B **45**, 9169 (1992).

- [43] *Alloy disorder scattering contribution to low-temperature electron mobility in semiconductor quantum well structures*, S. B. Ogale e A. Madhukar, J. Appl. Phys. **56**, 368 (1984).
- [44] *Band-offset determination in parabolic and triangular quantum-wells of GaAs/GaAsAs and GaInAs/AlInAs*, R. F. Kopf, M. H. Herman, M. L. Schnoes e C. Colvard, J. Vac. Sci. Technol. B **11**, 813 (1993).
- [45] *Band-offset in GaAs/Al_xGa_{1-x}As multiple quantum wells calculated with the sp³s* tight-binding model*, Y Fu e K. A. Chao, Phys. Rev. B **43**, 4119 (1992).
- [46] *Dynamic-response of parabolically confined electron-systems*, A. Wixforth, M. Kaloudis, C. Rocke, K. Ensslin, M. Sundaram, J. H. English e A. C. Gossard, Semicond. Sci. Technol. **9**, 215 (1994).
- [47] *Electron energy levels for a dense electron gas in parabolic GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells*, A. J. Rimberg e R. M. Westervelt, Phys. Rev. A **40**, 3970 (1989).
- [48] *The dynamics of charge-density waves*, G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
- [49] *Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium*, E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988).
- [50] *Evidence of the triangular lattice of crystallized electrons from time resolved luminescence*, Phys. Rev. Lett. **72**, 3594 (1994).
- [51] *Inhomogeneous electron gas*, P. Hohenberg e W. Kohn., Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [52] *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*, W. Kohn e L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [53] *One-particle properties of an inhomogeneous interacting electron gas*, L. J. Sham e W. Kohn, Phys. Rev. **145**, 561 (1966).
- [54] *Explicit local exchange-correlation potentials*, L. Heiden e B. I. Lundqvist, J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, 2064 (1971).

- [55] *Self-consistent electronic structure of parabolic semiconductor quantum wells: Inhomogeneous-effective-mass and magnetic-field effects*, M. P. Stopa e S. Das Sarma, Phys. Rev. B **47**, 2122 (1993).
- [56] *Comprehensive analysis of Si-doped $Al_xGa_{1-x}As$ ($x=0$ to 1): Theory and experiments*, N. Chand, T. Henderson, J. Klem, W. Ted Masselink, R. Fisher, Y. C. Chang e H. Morkoç, Phys. Rev. B **30**, 4481 (1984).
- [57] *Iteration methods for calculating self-consistent fields in semiconductor inversion layers*, F. Stern, J. Comp. Phys. **6**, 56 (1970).
- [58] Celso de Araújo Duarte em *Propriedades magnéticas e de spin em semicondutores do grupo III-V*, Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências (2004).
- [59] Cásio Sanguini Sérgio em *Transporte quântico em poços parabólicos largos* Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências (2003).
- [60] *DX centers and Coulomb potential fluctuations*, Z. Wilamowski, J. Kossut, W. Jatsch e G. Ostermayer, Semicond. Sci. Technol. **6**, B38 (1991).
- [61] *Diffusion and drift of Si dopants in δ -doped n-type $Al_xGa_{1-x}As$* , E. F. Schubert, C. W. Tu, R. F. Kopf, J. M. Kuo e L. M. Lunardi, Appl. Phys. Lett. **54**, 2592 (1989).
- [62] *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).
- [63] L. I. Schiff em *Quantum Mechanics*, (McGraw-Hill, New York 1968).
- [64] *The quantum Hall effect* editado por R. E. Prange e S. M. Girvin (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [65] *Ground state of an electron gas in a magnetic field*, V. Celli e N. D. Mermin, Phys. Rev. **140**, A839 (1965).

- [66] *Possible states for a three-dimensional electron gas in a strong magnetic field*, B. I. Halperin, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 1913 (1987).
- [67] *Evidence for an anisotropic state of two-dimensional electrons in high Landau levels*, M. P. Lilly, K. B. Cooper, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, e K. W. West, Phys. Rev. Lett. **82**, 394 (1999).
- [68] *Strongly anisotropic electronic transport at Landau level filling factor $\nu = 9/2$ and $\nu = 5/2$ under a tilted magnetic field*, W. Pan, R. R. Du, H. L. Störmer, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin e K. W. West, Phys. Rev. Lett. **83**, 820 (1999).
- [69] *Energy spectrum of electrons in a parabolic quantum well in strong magnetic fields*, L. Brey, Phys. Rev. B **44**, 3772 (1991).
- [70] *Magnetoplasmon excitations and spin density instabilities in an integer quantum Hall system with tilted magnetic field*, D. Wang, S. Das Sarma, E. Demler e B. I. Halperin, Phys. Rev. B **66**, 195334 (2002).
- [71] *Stripes in quantum Hall double-layer systems*, L. Brey e H. A. Fertig, Phys. Rev. B **62**, 10268 (2000).
- [72] *Density matrix renormalization group study of the striped phase in the 2D $t - J$ model*, S. R. White e D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **80**, 1272 (1998).
- [73] *Subband spectrum of a parabolic quantum well in a perpendicular magnetic field*, C. E. Hembree, B. A. Mason, A. Zhang e J. A. Slinkman., Phys. Rev. B **46**, 7588 (1992).
- [74] *Magneto-optical absorption in an overfilled parabolic quantum well. I. Tilted field*, J. Dempsey e B. I. Halperin, Phys. Rev. B **47**, 4662 (1993).
- [75] *Magnetic freezeout and impact ionization in GaAs*, T. O. Poehler, Phys. Rev. B **4**, 1223 (1971)
- [76] *Magnetic freezeout effect in $Al_{0,32}Ga_{0,68}As$* , E. Ranz e J. C. Portal, Semicond. Sci. Technol. **8**, 1532 (1993).

- [77] *Fractional quantization of the hall effect*, H. L. Störmer, A. Chang, D. C. Tsui, J. C. M. Hwang, A. C. Gossard, e W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **50**, 1953 (1983).
- [78] *High-quality two-dimensional electron system confined in an AlAs quantum well*, T. S. Lay, J. J. Heremans, Y. W. Suen, M. B. Santos, K. Hirakawa, M. Shayegan e A. Zrenner, Appl. Phys. Lett. **47**, 4662 (1993).
- [79] *Self-consistent calculation of the electronic properties of a selectively doped $Al_xGa_{1-x}As - GaAs$ quantum well under high magnetic fields*, J. Sanchez-Dehesa, F. Meseguer, F. Borondo e J. C. Maan, Phys. Rev. B. **36**, 5070 (1987).
- [80] *Transverse magnetoresistance in quantum wells with multiple subband occupancy*, E. Zaremba, Phys. Rev. B **45**, 14143 (1992).
- [81] *Interaction corrections to the hall coefficient at intermediate temperatures*, Gábor Zala, B. N. Narozhny, and I. L. Aleiner, Phys. Rev. B **64**, 201201 (2001).