UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO,
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

"ESTRUTURA ELETRÔNICA EM SISTEMAS COM
DOPAGEM TIPO DELTA."

Washington Luiz Carvalho Lima

Dissertação apresentada ao Instituto de Física e
Química de São Carlos, da Universidade de São
Paulo, para obtenção do título de Mestre em Física
Básica.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Henrique Degani

São Carlos - SP - 1992

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

208

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE Washington Luiz Carvalho Lima
APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM
22/06/1992

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcos Henrique Regani

Prof. Dr. Fernando Cerdeira

Prof. Dr. Lúcio Citrângulo Ioriatti Junior

AGRADECIMENTOS

Agradeço:

Ao Professor Marcos Henrique Degani, que me orientou neste trabalho, pela amizade, motivação e por ter me apresentado assuntos interessantes e objetivos;

Ao Professor Oscar Hipólito pelo apoio e confiança em alguns momentos particularmente difíceis;

Aos Professores Luiz Nunes de Oliveira e Lidério Ioriatti pelas discussões sempre proveitosas;

Ao Abraham em especial por ter me dado a coragem necessária no momento mais difícil durante o mestrado (mudar de orientador);

A todos os colegas do IFQSC pela agradável convivência nesse período;

Aos meus pais e irmãos; e

A todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

ÍNDICE

RESUMO	i
ABSTRACT	ii
 CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	 1
 CAPÍTULO II - MODELO TEÓRICO PARA CÁLCULO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA	 6
II-1 Método para Solução da Equação de Schrodinger Dependente do Tempo.	6
II-2 Propagação no Tempo Imaginário	11
II-3 Cálculo Auto-Consistente dos Níveis de Energia	14
 CAPÍTULO III - SISTEMA COM DOPAGEM DELTA SIMPLES	 22
III-1 Efeitos da Difusão dos Doadores	27
III-2 Efeitos da Concentração de Doadores	29
III-3 Efeitos da Temperatura	
 CAPÍTULO IV - EFEITOS DO CAMPO MAGNÉTICO NO SISTEMA COM DOPAGEM DELTA SIMPLES	 36
IV-1 Campo Magnético Perpendicular	36
IV-1.1 Considerações Teóricas	36
IV-1.2 Resultados e Discussões	39
IV-2 Campo Magnético Paralelo	40
IV-2.1 Considerações Teóricas	40
IV-1.2 Resultados e Discussões	42
 CAPÍTULO V - EFEITOS DO CAMPO ELÉTRICO E DA SUPERFÍCIE NO SISTEMA COM DOPAGEM DELTA SIMPLES	 53
V-1 Considerações Teóricas	55
V-2 Efeitos da Tensão Externa	55
V-3 Efeitos da Posição dos Átomos Doadores	64
 CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES	 68
APÊNDICE A	70
APÊNDICE B	74
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	76

RESUMO

Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas de um sistema com dopagem planar ou delta. Resolvemos as equações de Schrodinger e Poisson autoconsistentemente na aproximação de Hartree para diferentes situações de interesse com ou sem campos magnéticos ou elétricos externos. O método empregado para resolvermos a equação de Schrodinger é baseado na técnica do *split operator*. Obtemos o potencial efetivo, os níveis de energia e a densidade eletrônica em função da temperatura, densidade e largura de difusão dos doadores.

Para um campo magnético uniforme aplicado perpendicularmente ao plano de doadores mostramos que não ocorre nenhuma alteração na estrutura das sub-bandas eletrônicas no intervalo entre 0 e 20T. Para um campo magnético uniforme aplicado paralelamente ao plano de doadores os níveis eletrônicos são deslocados para energias mais elevadas provocando uma diminuição na população dos níveis mais excitados e um aumento significativo na massa efetiva do elétron.

Para sistemas na presença de um campo elétrico externo calculamos a energia das sub-bandas eletrônicas, a ocupação, a polarização e a capacitância em função da voltagem externa, da densidade e da posição das impurezas doadoras. Nossos resultados para capacitância estão qualitativamente em acordo com recentes resultados experimentais.

ABSTRACT

In this work we have studied the electronic proprieties of a system with planar doping or δ -doping. We have solved the Schrodinger and Poisson equations self-consistently in the Hatree approximation for several condition with or without external magnetic or electric fields. In order to solve Schrodinger equation we have employed the split operator technique. The effective potential, the energy levels and the electronic density was calculated as a function of temperature, donor density and donor diffusion width.

With external magnetic field applied perpendicular to the donors plane it is shown that the sub-bands energies are not altered for fields in the range of 0 to 20T. With magnetic fields applied parallel to the donors plane we have observed that the energy levels are shifted to higher energies and a depopulation of the excited levels occur, also an enhancement of the electron effective mass is found.

With an electric field applied to the system we have calculated the sub-bands energy levels, the electron concentration, the polarization, and the capacitance as a function of the gate voltage, donor density and the position of the donor plane. Our results for the capacitance agree qualitatively quite well with recent experimental data.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Desde a proposta inicial de Esaki e Tsu¹ o desenvolvimento no crescimento de heteroestruturas tem se acentuado cada vez mais, tornando-se um dos mais dinâmicos ramos da Física nessa última década.

Dentre uma variedade quase infinita de novas possibilidades de estruturas um sistema, originalmente proposto por Wood e outros², tem despertado um interesse cada vez maior. Nessas estruturas os átomos dopantes, geralmente Si, são introduzidos em um semiconductor, geralmente GaAs ou AlGaAs, durante a interrupção no crescimento epitaxial, o que resulta numa única monocamada de íons carregados cujo perfil pode ser descrito por uma função delta de Dirac. Um esboço desse sistema comumente chamado de " δ -doping", dopagem planar ou dopagem delta é mostrado na fig. 1. A técnica de crescimento de sistemas com dopagem delta representa desta forma, o limite físico na distribuição de dopantes em semicondutores e certamente terá grande importância no desenvolvimento futuro de novos dispositivos opto-eletrônicos.

Devido à atração eletrostática os elétrons são mantidos muito próximos dos doadores ionizados, formando um gás quase-bi-dimensional. Uma característica particular deste sistema é a ocupação de várias sub-bandas mesmo para concentrações moderadas de dopagem. Ao contrário das heterojunções com dopagem modulada, as estruturas com dopagem delta não apresentam alta mobilidade devido à proximidade dos elétrons aos íons que são fontes de espalhamento. Entretanto devido à capacidade de se conseguir alta concentração eletrônica próxima à

Fig. 1 : Ilustração esquemática do sistema com dopagem delta em GaAs. Os átomos de Si são confinados num único plano atômico.

superfície do material³ abre-se perspectivas para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos entre os quais se destaca o transistor de efeito de campo (δ -FET).

Várias técnicas experimentais tem sido usadas para estudar os níveis de energia dos elétrons confinados no poço de potencial criado pelos átomos doadores e pelos próprios elétrons. A evidência direta da formação de sub-bandas bidimensionais em sistema com dopagem delta foi obtida através das oscilações de Shubnikov-de-Hass observada por medidas de magneto-transporte⁴⁻⁶ e mais recentemente, através de experimentos de absorção no infravermelho longinquo⁷⁻⁸. Perfis de dopagens com larguras de 18 e 20 Å determinados por medidas de Capacitância-Voltagem (C-V) foram obtidas para dopagem de Si e Be respectivamente⁹⁻¹⁰. Outras técnicas tais como, espectroscopia Raman¹¹⁻¹², ressonância ciclotrônica¹³, tunelamento ressonante¹⁴⁻¹⁶ e espectroscopia de massa de íons secundários¹⁷ foram utilizados para o estudo do sistema com dopagem delta. A espectroscopia de fotoluminescência na estrutura com dopagem delta simples contudo é complicada devido ao fato que o potencial que confina os elétrons é repulsivo para os buracos. Isto reduz a superposição das funções de onda consideravelmente e conseqüentemente diminui a probabilidade de recombinação radiativa. Para conseguir o confinamento dos buracos os experimentais tem estudado sistemas com dopagem delta com as camadas de dopantes crescidas junto à superfície de GaAs ou junto à uma heterointerface de GaAs-AlGaAs¹⁸⁻¹⁹. A recombinação radiativa pode ser observada nessas novas estruturas.

Do ponto de vista teórico, o sistema com dopagem delta simples, tem sido estudado por cálculos auto-consistentes, na aproximação de Hartree⁴, ou na aproximação de Thomas-Fermi²⁰⁻²¹. Tem se mostrado que ambos os cálculos são equivalentes e que estão em boa concordância com os resultados experimentais. Contudo geralmente estes cálculos consideram a estrutura com dopagem delta ideal. Efeitos da difusão dos doadores ao longo da direção do crescimento que, conforme demonstrado por medidas de C-V são algumas vezes da ordem de 200 Å, a presença de dopagem residual, campos elétricos devido a interfaces ou campos elétricos e magnéticos externos geralmente não são considerados.

Recentemente, Degani²² tem calculado os níveis eletrônicos e suas ocupações na aproximação da funcional densidade local e tem considerado os efeitos de difusão de doadores e dopagem residual. Estes fatores modificam consideravelmente o potencial efetivo e consequentemente os níveis eletrônicos.

O avanço tecnológico tem possibilitado um controle cada vez maior do crescimento epitaxial e com isso a fabricação de heteroestruturas artificiais de alta qualidade com grande variedade de geometrias, o que vem revolucionando a física de dispositivos e semicondutores. Entre essas possibilidades, várias estruturas envolvendo dopagem delta foram propostas^{15,23} e apresentam propriedades e aplicações interessantes.

O cálculo da estrutura eletrônica é problema fundamental para compreensão das características, tais como condutividade, mobilidade, etc. Neste trabalho apresentaremos resultados de um cálculo auto-consistente, na aproximação de Hatree, para vários sistemas com dopagem delta.

No capítulo II apresentamos o método utilizado para a solução da equação de Schrodinger. Discutiremos o formalismo, suas vantagens e aplicações. Serão mostradas também as aproximações usadas na determinação do Hamiltoniano associado ao sistema com dopagem delta bem como as condições de contorno usadas para a sua solução.

No capítulo III discutimos inicialmente o sistema com dopagem delta simples apresentando os principais resultados de estrutura eletrônica. Serão analisados em detalhe as variações nos níveis de energia e ocupação das sub-bandas em função da densidade de doadores, largura da difusão e temperatura.

No capítulo IV consideraremos o efeito de um campo magnético externo aplicado na direção perpendicular ou paralela ao plano de átomos doadores. Para um campo magnético aplicado perpendicular ao plano de doadores os níveis de energia no plano x-y serão os níveis de Landau. Mostraremos que isto não altera o potencial efetivo na direção z, a densidade eletrônica e a estrutura de sub-bandas. Para campos na direção paralela ao plano de doadores o comportamento dos elétrons é mais complicado pois seu movimento é confinado na direção z tanto pelo

potencial elétrico quanto pelo campo magnético externo. O efeito do campo magnético é produzir um deslocamento diamagnético nos níveis eletrônicos. Os níveis mais excitados cruzam o nível de Fermi com o aumento do campo magnético ocasionando uma diminuição na população destas sub-bandas. Há uma visível mudança na distribuição de cargas entre as sub-bandas e na relação de dispersão $E(k)$. Outra característica importante que será mostrada neste capítulo é o aumento na massa efetiva do elétron em função do campo magnético.

No capítulo V discutiremos o sistema com dopagem delta crescido próximo à superfície do semicondutor e os efeitos da aplicação de um campo elétrico externo. Essa é a estrutura usada para fabricação de transistor de efeito de campo (δ -FET) e para experiências de tunelamento. Analisaremos então o efeito do campo elétrico na estrutura eletrônica e distribuição de cargas. Neste capítulo calcularemos ainda a polarização e capacitância em função do campo elétrico externo. A seguir mostramos a influência da posição da camada de átomos doadores em relação à superfície nas propriedades eletrônicas deste sistema.

No capítulo VI apresentaremos as conclusões deste trabalho.

CAPÍTULO II

MODELO TEÓRICO PARA CÁLCULO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA

CAPÍTULO II

Neste capítulo discutiremos o método teórico utilizado para calcular numericamente a estrutura das sub-bandas do sistema com dopagem delta.

O método que utilizamos para calcular os níveis eletrônicos desse sistema consiste inicialmente em resolver a equação de Schrodinger dependente do tempo através do uso da técnica do *split operator*. Esse método era usado basicamente em dinâmica molecular²⁴ e foi recentemente adaptado para o uso em física da matéria condensada onde tem sido aplicado com sucesso²⁵.

Inicialmente mostraremos como calcular numericamente a evolução temporal de uma função de onda utilizando a técnica do *split operator*. A seguir mostraremos como encontrar os auto-estados e auto-funções de um Hamiltoniano através da evolução temporal da função de onda no domínio de tempo imaginário. Finalmente discutiremos como resolver auto-consistentemente as equações de Schrodinger e Poisson associados ao sistema com dopagem delta bem como as condições de contorno utilizadas.

II-1 : MÉTODO PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER DEPENDENTE DO TEMPO

Para descrever o método do *split operator* partimos inicialmente da equação de Schrodinger dependente do tempo a qual pode ser escrita na seguinte forma:

$$\Psi(\vec{r}, t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H \cdot dt\right) \cdot \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{II-1})$$

sendo que para Δt muito pequeno será aproximada para:

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot \Delta t\right) \cdot \Psi(\vec{r}, t). \quad (\text{II-2})$$

Considerando o Hamiltoniano H do sistema dado pela soma da energia cinética mais a potencial, ou seja:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (\text{II-3})$$

e escrevendo-o na forma : $H = \frac{V(\vec{r})}{2} + \frac{P^2}{2} + \frac{V(\vec{r})}{2}$ podemos

reescrever (ver apêndice-A) a equação (II-2) na seguinte forma :

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left[\frac{-i \cdot V(\vec{r}) \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right] * \exp\left[\frac{-i \cdot P^2 \cdot \Delta t}{2 \cdot m \cdot \hbar}\right] * \exp\left[\frac{-i \cdot V(\vec{r}) \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right] * \Psi(\vec{r}, t) + O(\Delta t)^3 \quad (\text{II-4})$$

Na expressão acima o erro introduzido que é da ordem de Δt^3 é devido a não comutatividade entre os operadores energia cinética e potencial. É importante observarmos que cada operador na equação (II-4) é unitário, consequentemente a norma da função de onda é estritamente conservada em qualquer instante de tempo.

Para calcularmos a evolução temporal da função de onda precisamos resolver a equação (II-4) numericamente. Para isso o espaço é então discretizado e o potencial efetivo $V(\vec{r})$ e a função de onda inicial são calculados em cada ponto da rede.

Geralmente no sistema com dopagens delta as condições de contorno são impostas no volume (bulk). Neste caso é necessário considerarmos um sistema grande (da ordem de $10 \mu\text{m}$). Assim sendo o uso de uma rede uniforme é inapropriado pois o grande número de pontos da rede levaria a um aumento considerável no tempo de computação, tornando-o ineficiente. Para solucionar este problema, discretizamos nossa rede

não uniformemente. Um menor espaçamento é considerado onde a função de onda varia rapidamente e um maior espaçamento onde esta varia lentamente. Os valores de espaçamentos usados em nossos cálculos são da ordem de 1 Å em torno da posição da camada de doadores chegando até a 40 Å nas regiões mais afastadas. Isso permite uma maior rapidez no tempo de computação sendo possível tratar grandes sistemas com um menor número de pontos.

Como no sistema com dopagem delta devemos resolver essencialmente a equação de Schrodinger unidimensional vamos a seguir particularizar a equação (II-4) para uma única direção que chamaremos "x".

O procedimento utilizado para resolvermos a equação (II-4) consiste inicialmente em multiplicar em cada ponto da rede uma função de onda inicial $\Psi(x,0)$ por $\exp\left(\frac{-i \cdot V(x) \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right)$. Em seguida o operador contendo a energia cinética é aproximado pela seguinte expressão (ver apêndice A):

$$\exp\left[\frac{-i \cdot P^2 \cdot \Delta t}{2 \cdot m \cdot \hbar}\right] \approx \left[1 - \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{4 \cdot m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]^{-1} \cdot \left[1 + \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{4 \cdot m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] + O(\Delta t)^3. \quad (II-5)$$

O operador do lado direito da igualdade é também unitário e preservará a norma da função de onda. Outra observação importante é que o erro introduzido nessa aproximação também é da mesma ordem (Δt^3) que na equação (II-4).

Para aplicarmos esse operador na nova função de onda, resultante da primeira operação as derivadas em cada ponto são avaliadas como diferenças finitas tal que a solução desse sistema é reduzido à solução de uma matriz tridiagonal. A seguir o resultado é novamente multiplicado por $\exp\left(\frac{-i \cdot V(x) \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right)$ para obtermos a função de onda no tempo Δt . Este procedimento é repetido iterativamente para calcularmos a evolução temporal da função de onda.

Para maior clareza no procedimento utilizado no cálculo da evolução temporal da função de onda, apresentamos a seguir um esquema mais detalhado dos passos seguidos.

Indexando as posições e as distâncias entre os pontos por i e Δi respectivamente, temos:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & \Delta_{i-1} & & \Delta_i & & \Delta_{i+1} \\
 & + & + & + & + & + & + \\
 \text{-----} & & & & & & \text{-----} \\
 & i-2 & i-1 & i & i+1 & i+2 &
 \end{array}$$

Aqui fazemos as seguintes convenções :

$$\begin{aligned}
 \psi(x_i, t) &\rightarrow \psi_i \\
 V(x_i) &\rightarrow V_i
 \end{aligned} \tag{II-6}$$

Nas operações abaixo vamos considerar que a derivada segunda de uma função é obtida usando diferença finita de três pontos e é dada por:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} F(x_i) = \frac{2 \cdot F(x_i + \Delta_i)}{(\Delta_i (\Delta_i + \Delta_{i-1}))} - \frac{2 \cdot F(x_i)}{(\Delta_i \cdot \Delta_{i-1})} + \frac{2 \cdot F(x_i - \Delta_{i-1})}{(\Delta_{i-1} (\Delta_i + \Delta_{i-1}))} \tag{II-7}$$

A equação a ser resolvida é a seguinte:

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \underbrace{\exp\left[\frac{-i \cdot V(x) \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right] * \exp\left[\frac{-i \cdot P^2 \cdot \Delta t}{2 \cdot m \cdot \hbar}\right]}_{\eta(x)} * \underbrace{\exp\left[\frac{-i \cdot V(x) \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right] * \Psi(x, t)}_{\xi(x)}$$

Primeiro passo :

A primeira operação considerando uma rede discreta é dada por:

$$\xi_i = \exp\left(\frac{-i \cdot V_i \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar}\right) * \psi_i \tag{II-9}$$

sendo essa operação uma multiplicação numérica simples em cada ponto da rede.

Segundo passo :

Devemos resolver a seguinte equação:

$$\eta(x) = \exp\left[\frac{-i \cdot P^2 \cdot \Delta t}{2 \cdot m \cdot \hbar}\right] * \xi(x) \quad (\text{II-10})$$

para essa operação considerando a eq. (II-5) temos :

$$\eta(x) = \left[1 - \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{4 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]^{-1} \cdot \left[1 + \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{4 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] * \xi(x) \quad (\text{II-11})$$

a qual pode ser transformada para :

$$\left[1 - \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{4 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] * \eta(x) = \left[1 + \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{4 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] * \xi(x) \quad (\text{II-12})$$

logo definindo $\varepsilon = \frac{i \cdot \hbar \cdot \Delta t}{2 \cdot m}$ e usando a equação (II-7) para considerar a rede discreta, temos:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\varepsilon}{(\Delta i * \Delta i - 1)}\right) \eta_i - \frac{\varepsilon}{\Delta i (\Delta i + \Delta i - 1)} * \eta_{i+1} - \frac{\varepsilon}{\Delta i - 1 (\Delta i + \Delta i - 1)} * \eta_{i-1} = \\ \left(1 - \frac{\varepsilon}{(\Delta i * \Delta i - 1)}\right) \xi_i + \frac{\varepsilon}{\Delta i (\Delta i + \Delta i - 1)} * \xi_{i+1} + \frac{\varepsilon}{\Delta i - 1 (\Delta i + \Delta i - 1)} * \xi_{i-1} \end{aligned} \quad (\text{II-13})$$

logo representando essa operação na forma matricial temos :

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} \eta_j = \theta_i \quad (\text{II-14})$$

sendo :

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 + \frac{\varepsilon}{\Delta i \Delta i - 1} & p/ j=i \\ \frac{\varepsilon}{\Delta i (\Delta i + \Delta i - 1)} & p/j=i+1 \\ \frac{\varepsilon}{\Delta i - 1 (\Delta i + \Delta i - 1)} & p/j=i-1 \\ 0 & p/ \text{ outros valores de } j \end{cases} \quad (\text{II-15})$$

$$\theta_i = \left(1 - \frac{\varepsilon}{(\Delta i * \Delta i - 1)}\right) \xi_i + \frac{\varepsilon}{\Delta i (\Delta i + \Delta i - 1)} * \xi_{i+1} + \frac{\varepsilon}{\Delta i - 1 (\Delta i + \Delta i - 1)} * \xi_{i-1} \quad (\text{II-16})$$

O índice (i) representa cada ponto da rede. Logo reduzimos o problema a um sistema linear cuja matriz associada é tridiagonal. A solução desse sistema fornecerá os valores da função $\eta(x)$ em cada ponto i da rede. O algoritmo para inversão da matriz é facilmente encontrado em livros de matemática computacional ²⁶.

Terceiro passo :

Repetimos a operação do primeiro passo:

$$\psi_i(t+\Delta t) = \exp \left(\frac{-i \cdot V_i \cdot \Delta t}{2 \cdot \hbar} \right) * \eta_i \quad (\text{II-17})$$

Através do procedimento acima encontramos uma nova função de onda no tempo $t+\Delta t$ desde que conheçamos a função de onda no tempo t .

II-2: PROPAGAÇÃO NO TEMPO IMAGINÁRIO

No procedimento descrito acima mostramos como calcular a evolução temporal de uma função de onda. No entanto o nosso interesse neste momento resume-se em calcular as auto-funções e os auto-valores do Hamiltoniano H . O método utilizado para isso consiste em fazer uma pequena modificação no esquema já descrito acima. A propagação das funções de onda é efetuada no domínio de tempos imaginários ou seja, substituímos t por $-i\tau$. Com essa modificação pode se mostrar (ver apêndice - B) que a função de onda evolui para o estado fundamental do sistema.

Os estados excitados são obtidos usando-se o mesmo procedimento mas impondo a ortonormalidade entre todos os estados. Para essa operação usamos o método de Gram-Schmidt, muito conhecido em álgebra linear. As novas funções de onda são dadas por :

$$\psi_i^{\text{new}}(x,t) = \psi_i(x,t) - \sum_{j < i} \langle \psi_j(x,t) | \psi_i(x,t) \rangle \psi_j(x,t) \quad (\text{II-18})$$

onde os índices " i " e " j " representam os vários estados do sistema.

Essa operação é feita em cada passo durante a evolução temporal. Aqui é importante enfatizar que ao contrário da propagação no tempo real as funções de onda obtidas na propagação no tempo imaginário deverão ser normalizadas a cada passo.

Escolhemos um número de funções de onda iniciais igual ao número de estados que desejamos encontrar. As funções de onda iniciais podem ser praticamente quaisquer pois esse método é bastante eficiente e pouco dependente do chute inicial, em nosso caso usamos os polinômios de Hermite. A seguir fazemos uma evolução no tempo imaginário com incremento Δt para cada função de onda. A função de onda resultante correspondente ao estado fundamental é então normalizada. O próximo passo é aplicarmos o método de Gram-Schmidt para a função de onda resultante correspondente ao primeiro estado excitado, isto é, ortogonalizamos em relação ao estado fundamental, e normalizamos a nova função. Esse processo é feito em ordem ascendente de energia para todos os outros estados.

As funções de onda resultantes são novamente evoluídas de Δt , até que uma convergência na energia seja alcançada.

O incremento no tempo deve ser escolhido pequeno o bastante para assegurar uma precisão no cálculo das funções de onda. Esse tempo geralmente é escolhido fazendo-se uma propagação no tempo real e observando a conservação de energia, sendo escolhido um incremento de tempo para o qual a energia permanece inalterada.

As características mais importantes desse método de solução da equação de Schrodinger são:

- 1 - Boa estabilidade.
- 2 - Rápida convergência.
- 3 - Convergência praticamente independente do chute inicial nas funções de onda.
- 4 - Possibilidade de se estudar qualquer poço de potencial.
- 5 - Possibilidade de se estudar transientes, quando a propagação é feita no tempo real.

Na figura 2 mostramos um exemplo da evolução no tempo imaginário de dois estados de um poço quântico servindo para ilustrar a eficiência do método.

Fig. 2 : Propagação no domínio de tempo imaginário da função de onda para a obtenção dos primeiros estados de um poço de potencial de largura 100 Å e profundidade de 250 meV. A curva sólida corresponde ao estado fundamental e a curva tracejada ao primeiro estado excitado. O intervalo de tempo (Δt) é igual a 0.1 fsec.

II-3: CÁLCULO AUTO-CONSISTENTE DOS NÍVEIS DE ENERGIA

Na determinação dos níveis de energia e as funções de onda dos estados ligados de um sistema com dopagem delta usamos aproximação de massa efetiva. Os efeitos de não parabolicidade não são importantes²⁷ e serão negligenciados em nossos cálculos.

Os átomos doadores da camada delta são introduzidos em uma monocamada, mas devido a alta temperatura de crescimento, em torno de 500-600 °C, eles podem se difundir alargando a distribuição às vezes até 200 Å. Por esse motivo consideraremos em nossos cálculos os doadores distribuídos uniformemente numa espessura Δz . Uma concentração homogênea de impurezas residuais aceitadoras é considerada em todo o sistema sendo igual a $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. As impurezas residuais estão sempre presentes mesmo para os melhores crescimentos já realizados por qualquer tipo de sistema.

As interações entre os elétrons na banda de condução são consideradas na aproximação de Hatree onde o potencial devido a todos os elétrons é substituído por um único potencial médio. Cada elétron se move então num potencial efetivo V_H , que depende apenas da ^{direção} camada perpendicular à camada delta. Os efeitos de troca e correlação não são considerados nessa aproximação já que cálculos recentes²² feitos na aproximação de densidade funcional local mostram que as correções na energia de sub-bandas devido a esse efeitos podem ser negligenciados.

O potencial efetivo depende apenas da componente z , sendo que o movimento dos elétrons no plano paralelo à placa de dopagem permanece livre. Considerando a simetria de translação no plano x - y e a aproximação de massa efetiva as funções de ondas podem ser escritas como:

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{\rho})}{\sqrt{S}} * \xi_n(z) \quad (\text{II-19})$$

onde $\vec{k}$ é o vetor de onda na direção paralela ao plano x - y , $\vec{\rho}$ a posição neste plano ($\vec{\rho}=(x,y)$) e S é area da amostra. Nessa equação a onda

plana $\frac{\exp(i\vec{K} \cdot \vec{\rho})}{\sqrt{S}}$ descreve o movimento dos elétrons no plano paralelo à dopagem e a função $\xi_n(z)$ descreve os efeitos do potencial na direção z .

Os auto-valores nessa aproximação são dados por :

$$E_{nk} = \epsilon_n + \hbar^2 k^2 / 2m^* \quad (\text{II-20})$$

onde m^* é a massa efetiva do semiconductor, cujo valor em nossos cálculos será de $0.067m_e$ o qual corresponde ao GaAs.

Os valores de $\xi_n(z)$ e ϵ_n são obtidos a partir da solução da equação de Schrodinger unidimensional:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_H(z) \right) \cdot \xi_n(z) = \epsilon_n(z) \cdot \xi_n(z) \quad (\text{II-21})$$

onde as funções de ondas $\xi_n(z)$ devem ser orto-normalizadas :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \xi_n(z) \xi_m^*(z) = \delta_{nm} \quad (\text{II-22})$$

O potencial de Hatree que descreve as interações entre os elétrons e destes com as impurezas é obtido através da solução da equação de Poisson unidimensional:

$$\frac{d^2}{dz^2} V_H(z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} \left[n(z) - N_d(z) + N_a(z) \right] \quad (\text{II-23})$$

onde ϵ é a constante dielétrica do material, cujo valor para o GaAs e usado aqui é 12.9, $n(z)$ é a densidade de elétrons, $N_d(z)$ é a densidade de doadores ionizados e $N_a(z)$ é a densidade de aceitadores residuais ionizados.

A densidade de elétrons é dada por:

$$n(z) = \sum_i N_i |\xi_i(z)|^2 \quad (\text{II-24})$$

onde N_i é o número de elétrons por unidade de área que ocupam a i -ésima sub-banda. Esse número depende basicamente da temperatura, da energia da sub-banda e da energia de Fermi E_F e é dado por:

$$N_i = \frac{m^* K_B T}{\pi \hbar^2} * \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - \epsilon_i}{K_B T} \right) \right] \quad (\text{II-25})$$

O potencial na equação (II-23) contém o termo de interação entre elétrons que de acordo com a equação (II-24) depende das funções de onda eq.(II.21). Esse termo transforma a equação de Schrodinger em um problema de auto valores não linear. Devido a essa interdependência devemos resolver auto-consistentemente as equações de Schrodinger e Poisson para obtermos os níveis de energia, as funções de ondas, a densidade eletrônica e o potencial efetivo.

As condições de contorno necessárias para a solução das equações apresentadas acima são as seguintes : (i) Campo elétrico nulo para $|z|=W/2$ e (ii) Potencial igual a ϕ_0 para $|z|=W/2$. Aqui W é o tamanho total do sistema considerado e ϕ_0 é a posição do nível de Fermi relativo ao fundo da banda de condução numa região do material onde o campo elétrico é zero e que geralmente está a uma distância considerável da camada de doadores. O valor do nível de Fermi depende apenas das características do material hospedeiro, concentração e nível de energia do aceitador e temperatura, sendo que a $T=0K$ coincide com o nível das impurezas aceitadoras para o caso de dopagem tipo p. Um esquema do sistema com dopagem delta simples onde são mostrados as bandas de condução e valência, bem como o nível aceitador e as condições de contorno é mostrado na fig.3.

Numericamente a equação de Schrodinger é resolvida pelo método da evolução temporal mostrado anteriormente.

A equação de Poisson é uma equação diferencial do 2ª ordem, onde a derivada segunda é numericamente calculada pela diferença finita de três pontos cuja solução como já vimos anteriormente é reduzida à inversão de uma matriz tridiagonal. As condições de contorno discutidas acima são facilmente incluídas na solução da equação de Poisson e são determinadas apenas pelos dois pontos extremos da rede.

Fig. 3 : Ilustração esquemática do diagrama de bandas de um sistema com dopagem delta, com átomos doadores distribuídos uniformemente em uma região de largura Δz .

Um esquema detalhado da solução da equação de Poisson com a inclusão das condições de contorno é dada a seguir.

A equação a ser resolvida é:

$$\frac{d}{dz^2} V_H(z) = k \cdot N_t(z) \quad (\text{II-26})$$

$$\text{onde } k = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} \quad \text{e} \quad N_t(z) = n(z) - N_d(z) + N_a(z) \quad (\text{II-27})$$

Para uma rede discretizada como vimos anteriormente temos:

$$\begin{array}{cccccccccccc} + & - & - & + & - & - & \dots & - & - & + & - & - & + & - & - & \dots & - & - & + & - & - & + \\ 1 & & 2 & & & & & & i-1 & & i & & i+1 & & & & & & n-1 & & n \end{array}$$

e considerando : $V_H(z_i) \rightarrow V_i$

$N_t(z_i) \rightarrow N_i$

a equação (II-27) é dada por :

$$\frac{2V_{i-1}}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} - \frac{2V_i}{(\Delta_i * \Delta_{i-1})} + \frac{2V_{i+1}}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i+1})} = k * N_i \quad (\text{II-28})$$

Para considerarmos as condições de contorno introduzimos os pontos "0" e "n+1" onde o potencial é conhecido e assume o valor de φ_0 discutido acima.

Nesse caso para os pontos "1" e "n" a equação (II-28) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} - \frac{2V_1}{(\Delta_1 * \Delta_0)} + \frac{2V_2}{\Delta_1(\Delta_1 + \Delta_0)} &= k * N_1 - \frac{2V_0}{\Delta_0(\Delta_1 + \Delta_0)} \\ \text{e} \\ - \frac{2V_n}{(\Delta_{n-1} * \Delta_n)} + \frac{2V_{n-1}}{\Delta_{n-1}(\Delta_{n-1} + \Delta_n)} &= k * N_n - \frac{2V_{n+1}}{\Delta_n(\Delta_{n-1} + \Delta_n)} \end{aligned} \quad (\text{II-29})$$

onde consideraremos : $\Delta_0 = \Delta_1$

$$\Delta_n = \Delta_{n-1} \quad (\text{II-30})$$

$$V_0 = V_{n+1} = \varphi_0$$

Aqui convém lembrarmos que o valor de φ_0 é determinado pelo nível de Fermi no volume (bulk). A temperatura igual a zero temos : $\varphi_0 = E_c - E_a$,

sendo E_c a energia do fundo da banda de condução e E_a a energia do nível aceitador.

Logo a representação matricial da equação (II-28), observando que para os pontos "1" e "n" são dados pela equação (II-29), pode ser escrita como:

$$\sum_{j=1}^n M_{ij} V_j = B_i \quad i=1, \dots, n \quad (II-31)$$

Sendo :

$$M_{ij} = \begin{cases} \frac{2}{\Delta_i \Delta_{i-1}} & p/ j=i \\ \frac{2}{\Delta_i (\Delta_i + \Delta_{i-1})} & p/ j=i+1 \\ \frac{2}{\Delta_{i-1} (\Delta_i + \Delta_{i-1})} & p/ j=i-1 \\ 0 & p/ \text{ outros valores de } j \end{cases} \quad (II-32)$$

e

$$B_i = \begin{cases} kN_i & p/ i \neq 1, n \\ kN_i - \frac{V_0}{\Delta_i^2} & p/ i=1 \\ kN_n - \frac{V_0}{\Delta_n^2} & p/ i=n \end{cases} \quad (II-33)$$

Onde (i) representa cada ponto da rede.

Assim a solução deste sistema linear através da inversão de uma matriz tridiagonal nos permitirá determinar o potencial de Hattree em cada ponto da rede. Neste procedimento o nível de Fermi do sistema é bem determinado e coincide com o zero de energia. Os valores de energia em nosso sistema com isso ficam medidos em relação ao nível de Fermi.

Para sistemas com dopagem delta com aplicação de campo elétrico externo ou que seja necessário considerarmos efeitos tais como estados de superfície ou barreira-Schottky as condições de contorno são ligeiramente diferentes mas podem ser facilmente implementadas nesse método. Para esses sistemas o nível de Fermi em relação ao fundo da

banda de condução na superfície do material é diferente do volume (bulk) mas mesmo assim é bem determinado. O que fazemos então é considerar na relação (II-30) $V_0 \neq V_{n+1}$. Nesse caso temos :

$$V_0 = \varphi_{01}$$

$$V_{n+1} = \varphi_{0n}$$

φ_{01} é determinado na superfície do material e depende do sistema considerado. Por exemplo para um sistema com campo elétrico externo aplicado temos :

$$\varphi_{01} = e\phi_b - eV_G$$

onde $e\phi_b$ é a função trabalho do material usado para fazer o contato Schottky e V_G é a tensão elétrica aplicada. φ_{0n} é determinado no bulk e já discutimos anteriormente.

As soluções das equações de Schrodinger e Poisson com as condições de contorno discutidas acima são encontradas pelo método de aproximações sucessivas. Os passos seguidos são os seguintes:

- 1- Determinamos as condições de contorno V_0 e V_{n+1} .
- 2- Escolhemos as funções de ondas iniciais $\xi_i^{(t=0)}$, onde i é o número de estados que desejamos encontrar. Usamos nesse caso os polinômios de Hermite centrados em $z=0$ como chute inicial.
- 3- Resolvemos a equação de Poisson obtendo o potencial de Hatree inicial $V_H^{(t)}$, considerando apenas as cargas devido aos íons.
- 4- Calculamos as energias iniciais $E_i^{(t)}$.
- 5- Fazemos uma propagação no tempo imaginário, com intervalo de Δt , obtendo as novas funções de ondas $\xi_i^{(t+\Delta t)}$. O intervalo de tempo Δt usado em nossos cálculos é da ordem de 0.1 fsec.
- 6- Obtemos as energias $E_i^{(t+\Delta t)}$ e com esses valores determinamos então a densidade de elétrons $n(z)^{(t+\Delta t)}$.
- 7- Obtida a densidade eletrônica, calculamos o novo potencial de Hatree $V_H^{(new)}$.

Para facilitar a convergência o potencial a ser usado na iteração subsequente é dado por uma combinação linear entre potencial

de Hatree calculado anteriormente e o novo potencial.

8- Calculamos então o potencial a ser usado na próxima iteração por: $V_H^{(t+\Delta t)} = (1-\alpha)V_H^{(t)} + \alpha V_H^{(new)}$, onde α varia de 0 a 1. Um valor pequeno de α dará uma convergência suave porém lenta, enquanto que para valores próximos de 1, a convergência é rápida mas em muitos casos ocorre divergência da solução. Logo escolhemos o maior valor possível desde que a convergência seja mantida.

9- Repetimos novamente o processo voltando ao passo (5).

Esse processo termina utilizando-se um critério de convergência. Em nosso caso esse critério é que a diferença de energia para todos os níveis entre duas propagações consecutivas seja menor que 0.01 meV. Ou seja :

$$E_i^{(t+\Delta t)} - E_i^{(t)} \leq 0.01 \text{ meV} \quad i=1, \dots, n$$

Essa precisão é mais do que suficiente para comparação com resultados experimentais.

CAPÍTULO III

SISTEMA COM DOPAGEM DELTA SIMPLES

CAPÍTULO III

Nesse capítulo discutiremos as características de um sistema com dopagem delta simples ou seja, uma camada de impurezas distribuídas uniformemente em uma espessura Δz envolto em GaAs. Calcularemos os níveis de energia eletrônico, número de ocupação ou seja, a densidade eletrônica em cada sub-banda, a densidade eletrônica total e o potencial efetivo. Discutiremos também como esses parâmetros variam em função da concentração e da largura de difusão dos doadores e da temperatura.

No sistema com dopagem delta vários fatores podem influenciar na forma, largura e profundidade do poço de potencial, bem como nas energias e ocupações de cada sub-banda. Os fatores mais importantes e que serão discutidos a seguir são a temperatura e a concentração dos átomos doadores assim como o efeito de difusão destes doadores. A concentração de impurezas aceitadoras residuais será considerado constante e igual a $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ que é um valor característico para estes sistemas. A concentração de impurezas residuais pode nos dar uma idéia da qualidade da amostra sendo que semicondutores de alta qualidade com concentrações da ordem de 10^{14} cm^{-3} são difíceis de serem produzidos e amostras com dopagem residual maiores que 10^{16} cm^{-3} geralmente são de qualidade inferior. Neste intervalo de concentração cálculos recentes ²⁷ mostram que a variação nas energias e ocupações das sub-bandas não são relevantes.

III-1: EFEITOS DA DIFUSÃO DOS DOADORES

Para estudarmos a influência da difusão dos átomos doadores consideraremos uma distribuição uniforme com espessura Δz . Para $\Delta z \leq 100 \text{ \AA}$, região de interesse para esse sistema, cálculos recentes ²²

mostram que a estrutura de sub-bandas calculada considerando uma distribuição uniforme ou gaussiana são praticamente equivalentes. Consideraremos também a temperatura igual à zero e a concentração de doadores igual à $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

A fig.4 mostra a forma do potencial efetivo e os respectivos níveis de energia para quatro diferentes valores de largura de distribuição de doadores (Δz) 5Å, 50Å, 100Å e 200Å. Nessa figura e em todas posteriores as energias são dadas em relação ao nível de Fermi ($E_F=0$).

A forma e profundidade do potencial é bastante sensível à difusão dos átomos doadores. Podemos observar que para $\Delta z=5\text{Å}$ o potencial tem a forma de "V" e com o aumento da largura ocorre um alargamento no potencial sendo que para $\Delta z=200\text{Å}$ este já tem uma semelhança maior com um poço parabólico. A profundidade do potencial efetivo sofre um decréscimo de aproximadamente 118,8 meV quando Δz varia de 5 para 200Å.

A densidade eletrônica calculada em função da largura Δz é mostrada na fig. 5. Podemos observar que os elétrons ficam confinados em uma região de aproximadamente 300Å de largura em torno da camada de doadores. Para $\Delta z=5\text{Å}$ a distribuição é bastante localizada enquanto que para $\Delta z=200\text{Å}$ o perfil é mais suave sendo os elétrons distribuídos quase uniformemente numa região de aproximadamente 200Å.

Os níveis de energia e a ocupação das sub-bandas calculados para várias sub-bandas em função da largura de difusão de doadores são mostrados na fig. 6. Observamos que essas quantidades são bastante sensíveis à variação de Δz . Para $\Delta z=5\text{Å}$ somente três sub-bandas são ocupadas, a partir de $\Delta z \approx 100\text{Å}$ mais uma sub-banda cruza o nível de Fermi. Da fig. 6(a) podemos observar que a energia do estado fundamental sempre aumenta quando Δz varia de 5 para 200Å. As energias dos níveis excitados a partir do segundo auto-estado por outro lado sempre diminuem. Um comportamento diferente ocorre para o primeiro estado excitado cujo comportamento é inicialmente uma diminuição na energia com Δz mas a partir de $\Delta z \approx 10 \text{ Å}$, quando o quarto sub-nível cruza o nível de Fermi, ocorre um ligeiro aumento na sua energia. A separação entre os níveis, quantidade que pode ser medida

Fig. 4 : Potencial Efetivo e nveis de energia calculados a $T=0K$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ para vrios valores de ΔZ . Consideramos que as impurezas doadoras esto distribidas uniformemente em ΔZ . A energia de Fermi E_F considerada igual a zero.

Fig. 5 : Densidade eletrônica calculada a $T=0\text{K}$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ para vários valores de Δz .

Fig. 6 : (a) Energia e (b) densidade eletrônica das sub-bandas, em função da largura Δz , considerando $T=0\text{K}$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

experimentalmente⁷⁻⁸, diminui, significativamente, para as duas primeiras sub-bandas, sendo que para os níveis superiores as variações são muito pequenas. Para $\Delta z=200\text{\AA}$ os níveis são praticamente equidistantes confirmando o caráter parabólico do potencial.

Uma variação na largura de difusão provoca uma redistribuição dos elétrons nas sub-bandas, sendo que a ocupação do estado fundamental decresce de $4,14 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ com $\Delta z=5\text{\AA}$ para $2,88 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ com $\Delta z=200\text{\AA}$. Como consequência há um aumento na população dos níveis mais excitados como podemos ver da fig. 6(b).

Podemos resumir o comportamento do sistema delta em função da difusão dos átomos doadores da seguinte forma. Com o aumento na espessura (Δz) da distribuição de doadores temos:

- 1 - Diminuição na profundidade e alargamento do potencial efetivo.
- 2 - Aumento em energia e diminuição na ocupação do estado fundamental.
- 3 - Aumento no número de sub-bandas ocupadas.
- 4 - Diminuição na separação entre os níveis das primeiras sub-bandas.
- 5 - Aumento na ocupação e diminuição na energia dos estados excitados.

III-2: EFEITOS DA CONCENTRAÇÃO DE DOADORES (N_D)

No estudo dos efeitos da concentração de átomos doadores no sistema delta consideraremos a temperatura $T=0\text{K}$ e a largura da distribuição de impurezas doadoras $\Delta z=50\text{\AA}$. A concentração de doadores será tomada entre $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e 10^{13}cm^{-2} que são os valores usuais de dopagem. Para valores de densidade menores que 10^{12}cm^{-2} , a descrição em termos de uma distribuição uniforme de dopantes certamente não é válida e seria necessário tratar a camada delta como impurezas distribuídas randomicamente no plano. Para sistemas com dopagem maiores que 10^{13}cm^{-2} geralmente ocorre saturação na concentração de elétrons livres^{23,28-29}.

A fig.7 mostra o efeito da concentração de doadores no potencial

Fig. 7 : Potencial efetivo calculado para diferentes valores de concentração de doadores (N_D), para $T=0\text{K}$, $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ e $\Delta z=50\text{\AA}$. A energia de Fermi é considerada igual a zero.

efetivo. Podemos notar uma grande variação na largura e profundidade do potencial com a densidade de doadores. Com o aumento na concentração há um aprofundamento e estreitamento do poço de potencial. O fundo do potencial varia de -71,6 meV para -253,8 meV quando N_D passa de $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ para 10^{13}cm^{-2} .

Com o aumento da densidade dos átomos doadores há um aprofundamento no potencial e consequentemente mais sub-bandas são ocupadas e um aumento na ocupação de cada uma delas é observado. Na fig. 8 mostramos a variação nas energias e ocupações das sub-bandas em função da concentração de doadores. Podemos observar que a energia das sub-bandas diminuem quase linearmente com o aumento na concentração dos doadores. Para $N_D \leq 4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ apenas duas sub-bandas estão ocupadas sendo que a partir de $N_D \cong 9 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ são quatro as sub-bandas ocupadas. Um aumento quase linear na ocupação também pode ser observado. Para o estado fundamental a ocupação varia de $1,25 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ para $5,43 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ quando a concentração de doadores varia de $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ para 10^{13}cm^{-2} .

Em resumo podemos dizer que com o aumento na concentração de doadores temos:

- 1 - Aprofundamento e estreitamento do potencial efetivo.
- 2 - Aumento no número de sub-bandas ocupadas.
- 3 - Diminuição quase linear nas energias das sub-bandas.
- 4 - Aumento quase linear na ocupação das sub-bandas

III-3: EFEITOS DA TEMPERATURA

Para estudarmos os efeitos da temperatura consideraremos um sistema onde a concentração e difusão de doadores são $7 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e 50Å respectivamente.

Nesse caso convém lembrar que nossas energias são tomadas em relação ao nível de Fermi e que este, medido em relação ao fundo da banda de condução, tem uma variação com a temperatura. Inicialmente calculamos o valor da energia de Fermi pois o utilizaremos nas condições de contorno conforme discutido no capítulo II.

Para o GaAs o valor do intervalo de energia proibida entre o topo

Fig. 8 : (a) Energia e (b) concentração de elétrons nas várias sub-bandas em função da concentração de doadores para $T=0K$, $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ e $\Delta z=50\text{\AA}$.

da banda de valência e o fundo da banda de condução (Gap) em função da temperatura é dado por:

$$E_g(T) = 1519 - 0.5405 \cdot T^2 / (204 + T) \text{ (meV)}. \quad (\text{III-1})$$

O nível de Fermi é determinado pela neutralidade de cargas. Para o GaAs com uma dopagem residual de aceitadores (tipo p) teremos:

$$N_e + N_A = N_b \quad (\text{III-2})$$

onde N_e é o número de elétrons na banda de condução, N_b é número de buracos na banda de valência e N_A é o número de aceitadores ionizados, sendo essas quantidades dadas por:

$$\begin{aligned} N_e &= N_C \cdot \frac{2}{\pi} \cdot F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_C}{K_B T} \right) & , N_C &= 2 \cdot \left(2 \cdot \pi \cdot m_e \cdot \frac{K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \\ N_b &= N_V \cdot \frac{2}{\pi} \cdot F_{1/2} \left(\frac{E_V - E_F}{K_B T} \right) & , N_V &= 2 \cdot \left(2 \cdot \pi \cdot m_b \cdot \frac{K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \\ N_A &= \frac{N_{A0}}{1 + 4 \cdot \exp \left(\frac{E_A - E_F}{K_B T} \right)} & , E_A &= 80 \text{ meV} \end{aligned} \quad (\text{III-3})$$

nessas equações N_{A0} é o número total de aceitadores, K_B é a constante de Boltzmann e $F_{1/2}(\eta)$ é a integral de Fermi sendo definida como:

$$F_j(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^j}{\exp(x - \eta) + 1} \cdot dx, \quad (j < -1) \quad (\text{III-4})$$

Resolvendo numericamente a equação III-2 podemos determinar a energia de Fermi em função da temperatura.

O gráfico da energia de Fermi, medido em relação ao fundo da banda de condução, em função da temperatura é mostrado na fig.9. Podemos observar que a energia de Fermi aumenta com a temperatura porém para baixas temperaturas ($T < 10\text{K}$) o comportamento é diferente. Neste caso inicialmente ($T = 0\text{K}$) a energia de Fermi coincide com o nível aceitador havendo posteriormente uma rápida diminuição com o aumento

da temperatura. Esse comportamento do nível de Fermi será determinante em alguns resultados do sistema com dopagem delta como veremos a seguir.

A mudança no potencial efetivo com a temperatura é mostrado na fig.10. Com o aumento da temperatura podemos observar uma ligeira variação da profundidade do potencial. Quando a temperatura varia de 0K para 300K o valor do fundo do potencial muda de -195,7 meV para -183,8 meV.

A fig.11 mostra as variações na ocupação e energia das sub-bandas em função da temperatura. Com o aumento da temperatura os elétrons das sub-bandas de menor energia são excitados termicamente para as sub-bandas de maior energia. Podemos observar que as ocupações da primeira e segunda sub-bandas decrescem quase que linearmente com a temperatura, em compensação, a quarta e quinta sub-bandas exibem um comportamento contrário. Um comportamento ligeiramente diferente é observado a baixas temperaturas ($T < 10K$) onde as variações nas populações das sub-bandas são mais abruptas. Para a terceira sub-banda em particular nesse intervalo de temperatura há um ligeiro aumento na ocupação enquanto que para $T > 10K$ observamos uma diminuição.

Os níveis de energia são bastante influenciados pela temperatura como podemos ver da figura 11(b). Há duas regiões com comportamentos distintos, uma para baixas temperaturas ($T < 10K$) e outra para temperaturas maiores que 10K. Para $T > 10K$ observamos que há um aumento praticamente linear nos níveis de energia de todas as sub-bandas, sendo variações ligeiramente maiores para os níveis mais elevados. Para $T < 60K$ temos quatro sub-níveis com energia menores que a energia de Fermi e para maiores temperaturas encontramos apenas três sub-níveis. Para $T < 10K$ o comportamento dos níveis de energia é diferente. Nesse intervalo de temperatura a variação nos níveis eletrônicos é mais rápido e diferente para cada um deles. Os níveis mais excitados sofrem um decréscimo em energia, isto ocorre a partir da terceira sub-banda, sendo que as variações mais intensas ocorrem para os níveis de maior energia. Para a primeira e segunda sub-banda ocorre o contrário, as energias associadas a elas aumentam nesse intervalo.

Fig. 9 : Energia de Fermi calculada em função da temperatura para GaAs com dopagem residual de aceitador (N_A) igual a $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. A energia é medida em relação ao fundo da banda de condução.

Fig. 10 : Potencial efetivo para o sistema com dopagem delta calculado para diferentes temperaturas com $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50 \text{ Å}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. As energias são medidas em relação ao nível de Fermi ($E_F=0$).

Fig. 11 : (a) Densidade e (b) energias para várias sub-bandas em função da temperatura considerando $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50 \text{ \AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. O nível de Fermi corresponde ao zero de energia.

Esse comportamento diferenciado tanto nos níveis eletrônicos como na ocupação das subbandas é devido principalmente à variação do nível de Fermi com a temperatura. Conforme foi mostrado para temperatura igual a 0K o nível de Fermi coincide com o nível das impurezas aceitadoras. Aumentando-se a temperatura observa-se um ligeiro descréscimo no nível de Fermi até $T \approx 10K$, para temperaturas superiores a este valor o nível de Fermi cresce monotonicamente. O comportamento do sistema constituído por uma dopagem delta simples com a variação de temperatura pode ser resumida no seguinte:

1 - Há uma variação no comportamento dos níveis eletrônicos e ocupações para baixas temperaturas ($T < 10K$), devido basicamente à variação do nível de Fermi com a temperatura.

2 - Aumento das energias das sub-bandas com a temperatura.

3 - Aumento na população das sub-bandas mais elevadas ocasionando uma diminuição na população das sub-bandas de menor energia.

4 - Pequena elevação no fundo do potencial com aumento da temperatura.

CAPÍTULO IV

EFEITOS DO CAMPO MAGNÉTICO NO SISTEMA COM DOPAGEM DELTA SIMPLES

CAPÍTULO IV

Uma das técnicas experimentais mais utilizadas para o estudo de sistemas com dopagem delta são as medidas de magnetotransporte^{4-6,30}. Geralmente nessas experiências o campo magnético pode ser aplicado tanto na direção perpendicular quanto na direção paralela à superfície do semiconductor e através dessas medidas pode se determinar a ocupação das subbandas eletrônicas. Essas medidas são de grande importância pois possibilitam a comparação dos resultados experimentais com os cálculos teóricos.

Neste capítulo pretendemos estudar os efeitos do campo magnético aplicado paralelo ou perpendicular à camada de doadores. Estes efeitos refletem-se no potencial efetivo e níveis de energia das sub-bandas do sistema com dopagem delta e consequentemente na população das mesmas.

Primeiramente mostraremos como o Hamiltoniano que descreve o movimento dos elétrons é modificado quando um campo magnético constante e uniforme é aplicado ao sistema e as considerações teóricas necessárias para resolvermos a equação de Schrodinger. A seguir os resultados serão apresentados e discutidos.

IV-1: CAMPO MAGNÉTICO PERPENDICULAR

IV-1.1: CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS:

Para um campo magnético aplicado perpendicular ao plano dos doadores, que denominamos de direção "z", temos $\vec{B}=(0,0,B)$. Neste caso é conveniente escolhermos o potencial vetor como sendo dado por:

$$\vec{A} = (0, B \cdot x, 0) \quad (IV-1)$$

O Hamiltoniano que descreve o sistema, desprezando-se a interação

do spin com o campo magnético, é dado por :

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} Bx \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 z} + V_H(z) \right] \quad (IV-2)$$

Com a escolha apropriada do gauge para o potencial vetor $\vec{A}$ o Hamiltoniano é independente da coordenada "y", e uma vez que a direção "z" não está acoplada com a direção "x", a função de onda pode ser escrita como:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \cdot \exp(i \cdot K_y \cdot y) \chi_1(z) \varphi_n(x) \quad (IV-3)$$

Resolvendo a equação de Schrodinger as funções $\chi_1(z)$ e $\varphi_n(x)$ são dados pelas seguintes equações:

$$\left\{ -\frac{1}{2m^*} \cdot \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar K_y + \frac{eBx}{c} \right)^2 \right\} \cdot \varphi_n(x) = \varepsilon_n(K_y) \cdot \varphi_n(x) \quad (IV-4)$$

e

$$\left(\frac{1}{2m^*} \cdot \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_H(z) \right) \cdot \chi_1(z) = \varepsilon_1 \cdot \chi_1(z) \quad (IV-5)$$

Neste caso a energia total é dada por :

$$E_{nm}(K_y) = \varepsilon_n(K_y) + \varepsilon_m \quad (IV-6)$$

Vamos então analisar as equações IV-4 e IV-5 separadamente.

A equação IV-4 que descreve o movimento dos elétrons na direção "x", pode ser reescrita como :

$$\left\{ -\frac{1}{2m^*} \cdot \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{1}{2} m^* \omega^2 (x-x_0)^2 \right\} \cdot \varphi_n(x) = \varepsilon_n(K_y) \cdot \varphi_n(x) \quad (IV-7)$$

sendo:

$$\omega_0 = \frac{eB}{m^* c} \quad \text{e} \quad x_0 = \frac{\hbar c K_y}{eB} . \quad (\text{IV-8})$$

Essa equação corresponde a um oscilador harmônico unidimensional de frequência ω_0 e centrado em x_0 , cuja solução é bem conhecida³¹. As auto-funções são proporcionais aos polinômios de Hermite e os autovalores $\epsilon_n(K_y)$ dados por:

$$\epsilon(K_y) = (n + \frac{1}{2}) \cdot \hbar \omega_0 \quad (\text{IV-9})$$

que são os conhecidos níveis de Landau.

Os auto valores são independentes de K_y , conseqüentemente o sistema apresenta uma degenerescência a qual para cada orbital, considerando um cristal finito, pode ser calculada e é dado por⁽³²⁾:

$$g_{or} = \frac{S \cdot eB}{2\pi\hbar c} \quad (\text{IV-10})$$

A presença do campo magnético quantiza o movimento no plano (x-y) com os elétrons descrevendo órbitas circulares cujo raio R_n depende do campo magnético e do número quântico n , e é dado por:

$$R_n^2 = (2n + 1) \lambda^2 , \quad (\text{IV-11})$$

onde $\lambda = \sqrt{\hbar c / eB}$ é o comprimento magnético.

Para analisarmos a equação IV-5 que descreve o movimento dos elétrons na direção "z", perpendicular ao plano das cargas doadoras, usamos um procedimento análogo ao descrito no capítulo II para a solução do sistema com dopagem delta simples. A diferença básica existente é que no delta simples o movimento no plano (x-y) é livre onde a energia é dada por $\hbar k^2 / 2m^*$ e nesse sistema com a presença do campo magnético o movimento é quantizado tornando a densidade de estados uma função da energia, e conseqüentemente, a ocupação dos níveis será calculada de forma diferente.

O sistema é resolvido auto-consistentemente da mesma forma que descrito no capítulo II alterando-se apenas o número de elétrons por unidade de área que ocupam a i -ésima sub-banda que agora é dado por:

$$N_i = \frac{eB}{\pi\hbar c} \sum_n \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_i + (n+1/2)\hbar\omega_0 - \epsilon_F}{K_B T}\right) + 1} \quad (\text{IV-12})$$

IV-1.2: RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados dos cálculos neste caso mostram que o potencial $V_H(z)$ não é modificado pelo campo magnético e consequentemente os níveis de energia e densidade eletrônica também permanecem inalterados. Podemos afirmar então que para um campo magnético aplicado na direção perpendicular ao plano de doadores, direção "z", o movimento no plano (x-y) é quantizado nos níveis discretos de Landau, mas o efeito no potencial e funções de ondas dos elétrons na direção-z é nula.

Esse comportamento do potencial de confinamento na direção-z com o campo magnético pode ser compreendido por dois efeitos relevantes no problema. Primeiro com o aumento do campo magnético os níveis de Landau ficam cada vez mais espaçados (ver eq.IV-9), consequentemente há uma diminuição no número de níveis de energia abaixo do nível de Fermi, isso contribui para diminuir a população de elétrons em cada sub-banda. Por outro lado com o aumento do campo magnético a degenerescência da cada nível de Landau aumenta (ver eq.IV-10) o que por sua vez contribui para um aumento no número de elétrons por sub-banda. O que acontece então é que há uma compensação entre esse dois efeitos de forma que o campo magnético na direção perpendicular não afeta o movimento dos elétrons na direção-z.

Esse resultado é particularmente importante ao analisarmos as experiências de Shubnikov-de-Hass, que servem para determinar as ocupações das sub-bandas. Nessas experiências um campo magnético magnético variável é aplicado na direção perpendicular ao plano de

doadores, de forma que o valor encontrado na ocupação das sub-bandas poderia ser interpretado como um valor médio. De acordo com nossos resultados a ocupação das sub-bandas é independente do campo externo.

IV-2 : CAMPO MAGNÉTICO PARALELO:

IV-2.1: CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS:

Para campo magnético aplicado na direção paralela ao plano de cargas temos:

$$\vec{B} = (0, B, 0) \quad (\text{IV-13})$$

neste caso é conveniente escolher o potencial vetor como : $\vec{A} = (B \cdot z, 0, 0)$. Com essa escolha o Hamiltoniano do sistema pode ser escrito na seguinte forma:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} Bz \right)^2 - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m^* \partial^2 y} + \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m^* \partial^2 z} + V_H(z) \quad (\text{IV-14})$$

onde a interação do campo magnético com o spin é negligenciada.

Para esse sistema a solução para a função de onda é dada por:

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \cdot \exp(iK_x \cdot x) \cdot \exp(iK_y y) \cdot \varphi_n(z) \quad (\text{IV-15})$$

neste caso a solução da equação de Schrodinger é reduzida à seguinte forma unidimensional:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial^2 z} + V_H(z) + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (z - z_0)^2 \right\} \cdot \varphi_{n, K_x}(z) = \varepsilon_n(K_x) \cdot \varphi_{n, K_x}(z) \quad (\text{IV-16})$$

onde: $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ é a frequência ciclotrônica

$$z_0 = -\frac{\hbar c \cdot K_x}{eB} \quad (\text{IV-17})$$

Nesta equação $V_H(z)$ é o potencial de confinamento auto-consistente gerado pelas cargas doadoras da camada delta, aceitadores residuais e elétrons. O termo após $V_H(z)$ é o potencial, $V_B(z)$, gerado pelo campo magnético. Observamos que $V_B(z)$ é um poço de potencial parabólico cujo centro " z_0 " depende do vetor de onda k_x perpendicular ao campo magnético B . Desta forma existe um acoplamento das direções x e z e os níveis eletrônicos relacionados com esses graus de liberdades tem a forma $\epsilon_n(K_x)$. A energia total do sistema é então dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 K_y^2}{2m^*} + \epsilon_n(K_x) \quad (\text{IV-18})$$

A equação de Schrodinger (IV-16) é resolvida auto-consistentemente juntamente com a equação de Poisson a qual determina $V_H(z)$ da forma descrita no capítulo II, mas agora com as seguintes modificações:

a: Nessa equação os valores de K_x são contínuos. Em princípio a eq.(IV-16) corresponde a um número infinito de equações. Entretanto discretizamos o espaço K_x e consideramos apenas os valores cuja ocupação, que depende da energia e será discutido abaixo, forem diferentes de zero. A solução da equação de Schrodinger é então obtida pelo método da evolução temporal no espaço imaginário para cada valor de K_x independentemente.

b: As equações II-22 e II-23, do capítulo II, que fornecem a densidade de elétrons necessária para obtenção do potencial $V_H(z)$ são agora substituídas por:

$$n(z) = \sum_i \sum_0^{K_{\text{máx}}} N_{i,K_x} \cdot |\varphi_{i,K_x}(z)|^2 \quad (\text{IV-19})$$

onde N_{i,K_x} é o número de elétrons por unidade de área que ocupam a i -ésima sub-banda entre K_x e $K_x + \Delta K_x$ e é dado por :

$$N_{I, K_x} = \frac{\sqrt{2m^*}}{(2\pi)^2 \hbar} \cdot \Delta k_x \int \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_n(K_x)}} * \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}\right) + 1} \quad (IV-20)$$

nessa equação a integral é resolvida numericamente por um método descrito na referência 33.

Com as duas modificações acima é possível encontrarmos a solução do sistema, utilizando as mesmas condições de contorno como discutidas no capítulo II.

IV-2.2: RESULTADOS E DISCUSSÕES :

No estudo da influência do campo magnético no potencial efetivo de uma delta simples consideraremos a temperatura igual a zero, a concentração de aceitadores residuais igual a $5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$, concentração de doadores com $5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e campo magnético variando de 0 a 20 Tesla.

A relação de dispersão $\varepsilon(K_x)$ das quatro primeiras sub-bandas calculadas com uma concentração de impurezas dadoras $N_d = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e distribuídas uniformemente em uma região de apenas 50Å é apresentada na fig.12 em função do campo magnético externo. Podemos observar nestes resultados dois importantes efeitos. a) Deslocamento na energia para valores mais altos. b) Alargamento na relação de dispersão.

a) Observamos um deslocamento diamagnético para todas as sub-bandas sendo maior o efeito para os níveis de maior energia. Discutiremos esse efeito com mais detalhes logo abaixo.

b) Da figura 12 podemos mostrar que o efeito do campo magnético na relação de dispersão é bem maior para sub-bandas de maior energia. Devemos notar também que diferentemente de poços quânticos com dopagem seletiva³⁴⁻³⁵, onde o mínimo da banda de condução é dependente da dopagem e pode ocorrer para $K_x \neq 0$, o mínimo de $\varepsilon(K_x)$ no sistema delta ocorre para $K_x=0$ e é independente da densidade de doadores. O achatamento na relação de dispersão pode ser entendido analisando-se a equação IV-16. O potencial devido à presença do campo magnético $V_B(z)$,

Fig. 12 : Dispersão das sub-bandas em função do vetor de onda (Kx) com $T=0\text{K}$, $\Delta z=50\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. As curvas sólidas correspondem a $B = 0\text{T}$ e as curvas tracejadas correspondem a $B = 20\text{T}$. $K_0 = 0.009814 \text{ (\AA}^{-1}\text{)}$.

é nada mais que um oscilador harmônico centrado em z_0 . Na ausência de um potencial de confinamento, isto é $V_H=0$, e campo magnético finito a energia não tem dependência com z_0 (ou K_x), de forma que o sistema é degenerado e a dispersão é plana. Com o confinamento $V_H(z) \neq 0$, a degenerescência é então levantada, e a energia passa a ser dependente de z_0 . Essa dependência é mais acentuada para sistemas cujo potencial de confinamento ($V_H(z)$) é mais forte.

A figura 13 mostra a variação na energia do sistema delta com $N_d=5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ em função do campo magnético. Podemos observar um aumento monotônico nos níveis de energia para todas sub-bandas com o aumento do campo magnético. A variação da energia em função do campo magnético é diferente nos diferentes níveis eletrônicos, por exemplo, enquanto o estado fundamental, $n=0$ varia de apenas 4.6 meV quando o campo magnético varia de 0 a 20T o segundo estado excitado $n=2$ varia de 39,5 meV. Estes resultados são para densidades de impurezas doadoras $N_d=5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Podemos entender este comportamento dos níveis eletrônicos em função do campo magnético da seguinte forma: Uma vez que as funções de onda dos estados excitados são mais extendidas é evidente que o efeito do campo magnético externo provoque uma perturbação maior nestes estados.

O efeito mais importante do deslocamento diamagnético é que os níveis mais excitados podem cruzar o nível de Fermi, como pode ser visto na figura 13. Para $N_d=5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ o segundo estado excitado $n=2$ cruza o nível de Fermi para $B \approx 10.3$ T enquanto -que para $N_d=8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ os estados correspondentes a $n=3$ e $n=2$ cruzam o nível de Fermi a $B \approx 5.4$ T e $B \approx 20$ T respectivamente. Os valores do campo magnético para os quais os estados eletrônicos cruzam o nível de Fermi são importantes para comparações com as medidas de magnetocondutividade. Há uma correspondência entre estes valores do campo magnético e aqueles para os quais observamos máximos na derivada da magnetocondutividade σ em relação ao campo magnético $(\partial\sigma/\partial B)^{5-6}$.

Ao compararmos a variação em energia das sub-bandas para diferentes densidades de doadores o sistema mostra um maior deslocamento diamagnético para menor densidade. Este comportamento pode ser entendido ao compararmos o raio ciclotrônico, o qual é dado

Fig. 13 : Energias das sub-bandas calculadas em função do campo magnético para (a) $N_D=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e (b) $N_D=8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Em ambos casos temos $T=0K$, $\Delta z=50\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. As energias são medidas em relação à energia de Fermi.

por $r_c = \sqrt{\hbar c / eB}$ (para $B=20T$ temos $r_c \approx 60\text{\AA}$), que dará a escala de comprimento do confinamento magnético com a extensão do confinamento gerado pelas cargas doadoras cujo valor diminui com o aumento da densidade. Com baixas densidades de átomos doadores espera-se um comportamento dominado pelo campo magnético enquanto que para densidades muito altas e valores usuais de campo magnético o seu efeito torna-se menor.

A ocupação das sub-bandas em função do campo magnético é mostrado na figura 14 para $N_d = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $N_d = 8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. podemos observar que não há um comportamento regular para todas as subbandas. É notado que a população do nível fundamental sempre aumenta com o campo magnético, enquanto que para o nível com energia imediatamente inferior ao nível de Fermi a população diminui. Para as sub-bandas com energias intermediárias é observado um comportamento onde inicialmente há um aumento sendo que inicia uma diminuição a partir do momento em que a banda imediatamente superior cruza o nível de Fermi. Esse comportamento deve ser analisado por dois fatores determinantes na população das sub-bandas. a) O valor da energia em relação ao nível de Fermi onde a população é maior para menor valor de energia. b) A relação de dispersão. Neste último caso quanto mais achatada a relação de dispersão, maior deve ser o valor de $K_{\text{máx}}$ na equação IV-19, de forma que há um número maior de estados contribuindo para a população daquela sub-banda. Com o campo magnético há um aumento no valor da energia e um achatamento na relação de dispersão em cada sub-banda. Esses dois efeitos contribuem de forma contrária para a população das sub-bandas sendo que o peso de cada um desses fatores é diferente nos diversos níveis. Para o estado fundamental, por exemplo, a variação na energia é mínima de forma que o achatamento na relação de dispersão é mais importante, o oposto ocorre para as sub-bandas ocupadas de maior energia.

Um efeito importante do campo magnético é a mudança no valor da massa efetiva das diversas sub-bandas. Na aproximação de banda parabólica a energia é considerada quadrática em torno de $K_x=0$. A variação da massa efetiva $m^*(B)$ com o campo magnético para as quatro primeiras sub-bandas é mostrado na figura 15(a) e 15(b) para

Fig. 14 : Ocupação das várias sub-bandas (N_i) em função do campo magnético para (a) $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e (b) $N_D = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Consideramos $T=0\text{K}$, $\Delta z=50\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

$N_d=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $N_d=8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ respectivamente. Pode se observar um aumento no valor da massa efetiva para todas as sub-bandas sendo que esse aumento é mais acentuado para as sub-bandas com maior energia, pois neste caso as funções de onda são mais extendidas. Se compararmos a variação da massa efetiva para uma mesma sub-banda, com diferentes valores de concentração de doadores, observamos que a mudança na massa efetiva é maior quando a concentração de doadores é menor. Esse efeito pode ser visto na figura 15(c) que mostra a variação da massa efetiva do estado fundamental em função do campo magnético para dois valores diferentes de concentração de doadores. Esse comportamento pode ser entendido de maneira análoga à discutida na variação da energia. Uma vez que para maiores concentrações de doadores o confinamento devido ao potencial eletrostático é maior de forma que a função de onda é mais localizada, assim sendo haverá um efeito menor do campo magnético neste estado. A transição metal-isolante observada experimentalmente em sistemas com dopagem delta⁶ pode ser atribuída, em grande parte, a esse aumento na massa efetiva já que é sabido que a resistividade de um material é proporcional ao valor da massa efetiva.

Para termos uma idéia da influência do campo magnético no confinamento eletrônico mostramos na figura 16 as funções de ondas das quatro primeiras sub-bandas do sistema com dopagem delta com $N_d=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para campo magnético igual a 0 e 20 Tesla. Podemos observar um aumento significativo no confinamento para todos os níveis sendo que as maiores perturbações ocorrem para os níveis de maior energia, o que é esperado conforme discutido anteriormente. Convém lembrarmos que neste sistema as funções de onda na direção-z dependem de K_x , e que na figura 16 temos as funções de onda para $K_x=0$. O potencial total é a soma de $V_H(z)$ e $V_B(z)$. Para valores de $K_x \neq 0$ o potencial magnético tende a confinar a função de onda em torno de z_0 , que é uma função de k_x . Portanto a função de onda será deslocada ficando localizada em posições diferentes de zero. Esse deslocamento é fundamental na determinação do potencial e densidade eletrônica total como veremos a seguir.

A figura 17 mostra a densidade total $N(z)$ e o potencial efetivo $V_H(z)$ em um sistema com uma delta simples para uma concentração de

Fig. 15 : Variação da massa efetiva de elétron (m_e^*) em função do campo magnético para várias sub-bandas com (a) $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e (b) $N_D = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. (c) Variação da massa efetiva do estado fundamental em função do campo magnético para valores diferentes de concentração de doadores. Temos $T=0\text{K}$, $\Delta z=50\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 16 : Quadrado da função de onda sendo (a) estado fundamental (b) primeiro estado excitado (c) segundo estado excitado (d) terceiro estado excitado. A curva sólida é para $B=0$ T e a curva tracejada é para $B=20$ T. Consideramos $T=0$ K, $N_D=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50 \text{ Å}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

doadores $N_d = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ com $B=0\text{T}$ e $B=20\text{T}$. Podemos observar que o efeito do campo magnético na densidade eletrônica total e o potencial efetivo é praticamente nula. Há um ligeiro acréscimo no confinamento eletrônico que conseqüentemente induz um pequeno aprofundamento no potencial. A pouca variação na densidade eletrônica e conseqüentemente no potencial é interessante já que vários aspectos são relevantes nesse comportamento. Primeiro, com o aumento do campo magnético vimos que há uma diminuição na população das sub-bandas mais excitadas, sendo os elétrons transferidos para estados de menor energia onde as funções de ondas são mais concentradas. Segundo, independentemente da redistribuição de cargas nas sub-bandas o campo magnético aumenta o confinamento em cada uma delas, conforme foi mostrado na variação das funções de ondas anteriormente. Terceiro, e talvez mais importante, é que o campo magnético gera um confinamento onde a função de onda é centrada numa posição diferente de zero e que depende do valor de K_x . Este causa um alargamento na distribuição de cargas. Conforme nossos resultados, esses três efeitos tendem a se cancelar.

Em resumo podemos dizer que os resultados mais importantes para um sistema constituído por uma delta simples na presença de um campo magnético paralelo ao plano de cargas doadoras são os seguintes:

- 1- Há um achatamento na relação de dispersão $\varepsilon(K_x)$ com o campo magnético
- 2- Há um deslocamento diamagnético na energia das sub-bandas.
- 3- Há uma diminuição na população das sub-bandas de maior energia.
- 4- Aumento da massa efetiva do elétron para todas as sub-bandas com o campo magnético.
- 5- O potencial efetivo e a densidade total são pouco afetados pelo campo magnético.
- 6- Os efeitos do campo magnético são mais importantes para sub-bandas de maior energia e para sistemas com menor densidade de doadores.

Fig. 17 : (a) densidade eletrônica total e (b) potencial efetivo calculados para valores diferentes do campo magnético com $T=0\text{K}$, $N_D=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

CAPÍTULO V

EFEITOS DO CAMPO ELÉTRICO E DA SUPERFÍCIE NO SISTEMA COM DOPAGEM
DELTA SIMPLES

CAPÍTULO V

O crescimento da camada de doadores em sistemas com dopagem delta é em alguns casos feito muito próximos à superfície do material. Estas estruturas são úteis para estudarmos tunelamento dos elétrons entre as sub-bandas da camada dopada e a superfície^{14,16}, para estudos do transistor de efeito de campo em sistemas delta, aqui chamado delta-FET^{3,23} e para estudos da difusão dos átomos doadores através das medidas de capacitância-voltagem (C-V)^{9,36-38}. Nesses sistemas um metal, geralmente ouro, é depositado sobre a superfície do semiconductor, formando uma barreira Schottky, onde uma tensão é então aplicada. Uma figura esquemática desse sistema e o respectivo diagrama de bandas é mostrado na fig. 18. Nessa figura os contatos ôhmicos, indicados como fonte e dreno são necessários apenas para experiências de simulação de delta-FET. Maiores detalhes quanto a fabricação desses materiais poderão ser encontrados nas ref. 3, 14 e 26.

Neste capítulo vamos estudar o efeito de um campo elétrico aplicado no sistema com dopagem delta, calculando o potencial efetivo, os níveis de energia e ocupação em função da tensão aplicada no contato. Duas outras características importantes deste sistema serão calculadas. Primeiramente a capacitância em função da tensão aplicada no contato a qual é obtida experimentalmente para determinarmos a difusão dos doadores. Segundo, a polarização em função do campo elétrico que nos dará a resposta dielétrica do sistema.

Nesses sistemas com dopagem delta um parâmetro importante na determinação de suas características é a posição da camada de doadores em relação à superfície. Mostraremos então o comportamento da energia e a ocupação das sub-bandas em relação a este parâmetro.

Inicialmente discutiremos as considerações teóricas necessárias para a solução desse sistema e a seguir os resultados numéricos serão apresentados e discutidos.

Fig. 18 : Ilustração esquemática (a) do arranjo experimental e (b) do potencial efetivo de um sistema com dopagem delta usado para experiências de tunelamento e como transistor de efeito de campo. $e\phi_B$ é a barreira de potencial metal-semicondutor e z_0 é a posição da camada de doadores em relação à superfície.

V-1: CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS:

Conforme visto no capítulo II as condições de contorno necessárias para resolvermos o sistema com dopagem delta depende do valor do potencial na superfície, ϕ_{01} , e no volume (bulk), ϕ_{0n} . O valor de ϕ_{0n} é determinado pelo valor do nível de Fermi em relação ao fundo da banda de condução, e como discutido anteriormente, é dado por:

$$\phi_{0n} = E_c - E_f. \quad (V-1)$$

O valor de ϕ_{01} depende de dois fatores : a) O valor do nível de Fermi na superfície do material que é determinado pela barreira de potencial ($e\phi_b$) gerado pelo contato metal-semicondutor, conforme mostrado na fig. 18 e depende basicamente do tipo de metal. Para o contato de ouro em GaAs o valor de $e\phi_b$ é de aproximadamente 1,0 eV e será o valor usado em nossos cálculos. b) A tensão elétrica aplicada no contato que desloca o fundo da banda de condução em relação ao nível de Fermi na superfície. Com essas considerações o valor de ϕ_{01} é dado por:

$$\phi_{01} = e\phi_b - eV_G \quad (IV-2)$$

onde $e\phi_b$ é a barreira de potencial metal-semicondutor e V_G é a tensão elétrica aplicada.

Esses valores das condições de contorno são as únicas modificações no procedimento descrito no capítulo II para solução auto-consistente das equações de Schrodinger e Poisson.

V-2: EFEITOS DA TENSÃO EXTERNA:

Para o estudo do sistema com dopagem delta na presença de um campo elétrico externo aplicado consideraremos uma concentração de átomos doadores de $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ distribuídos uniformemente numa camada de espessura de 50 Å, a concentração residual de aceitadores de $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ e a temperatura igual a zero. A posição da camada de

doadores em relação à superfície (Z_0) é mantida constante e igual a 200 Å. Um estudo mais detalhado dos efeitos de Z_0 nos níveis de energia serão considerados na próxima seção.

Na fig.19 mostramos o potencial efetivo para quatro diferentes valores de tensão V_G : -200, 0, 200 e 400 mV. Podemos observar uma grande variação na largura e na profundidade do potencial. O fundo do poço de potencial varia de -117,7 meV para -134,5 meV quando a tensão aplicada varia de -200 mV para zero. Temos então que a variação no fundo do potencial é bem menor que a variação correspondente do potencial na superfície. Isso ocorre porque com o aumento da tensão e consequentemente o aprofundamento e alargamento do potencial existirá um aumento no número total de elétrons ocasionando uma blindagem maior, de forma a minimizar o efeito da tensão externa. Nesse sistema podemos observar também que devido a superfície o potencial é assimétrico.

O efeito da tensão externa na densidade eletrônica é mostrado na fig. 20. Podemos observar que há um aumento e um alargamento na distribuição dos elétrons como consequência direta do comportamento do potencial mostrado anteriormente. Podemos observar também que a distribuição eletrônica não está centrada na posição dos átomos doadores mas está deslocada para a direção contrária à superfície. Com o aumento da tensão aplicada a distribuição tende a se tornar simétrica com o centro de massa deslocando-se para a posição dos átomos doadores.

Os níveis de energia e a ocupação calculados para várias sub-bandas em função da tensão externa (V_G) são mostrados na fig. 21. Para V_G menor que aproximadamente -880 mV nenhuma sub-banda tem energia menor que o nível de Fermi enquanto que para $V_G=600$ mV temos três sub-bandas ocupadas. Podemos observar que a energia de todas as sub-bandas diminuem, e consequentemente o número de ocupação é sempre crescente. Este efeito era de se esperar devido ao comportamento do potencial efetivo que se alarga e aprofunda.

Esse aumento no número de elétrons nas sub-bandas e consequentemente no número total são importantes para os experimentos de espectroscopia de tunelamento^{14,16} pois representam as cargas

Fig. 19 : Potencial efetivo calculado para diferentes valores de tensão aplicadas no gate (V_G) considerando $T=0K$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50 \text{ Å}$, $Z_0=200 \text{ Å}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 20 : Densidade eletrônica total calculada para diferentes valores de tensão aplicadas no gate (V_G) considerando $T=0K$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50 \text{ Å}$, $Z_0=200 \text{ Å}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 21 : (a) Energia e (b) número de ocupação das sub-bandas em função da tensão externa (V_G) para $T=0\text{K}$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. A energia de Fermi é considerada igual a zero.

transferidas da superfície metálica para o semicondutor. Para voltagens positivas os elétrons são transferidos do metal para as sub-bandas do sistema com dopagem delta enquanto que para voltagens negativas os elétrons tendem a esvaziar essas sub-bandas. Nessas experiências a energia das sub-bandas eletrônicas podem ser determinadas a partir da primeira derivada da corrente de tunelamento.

O efeito do campo elétrico nas funções de onda dos três primeiros estados desse sistema é mostrado na fig. 22 para dois valores diferentes de tensão $V_G=0$ e $V_G=400$ mV. Podemos observar dois efeitos importantes nas funções de onda com o aumento da tensão externa. Primeiro, há um aumento no confinamento sendo esse estreitamento na função de onda uma consequência direta do aprofundamento do potencial. Segundo, há um deslocamento na função de onda para a superfície sendo que os máximos destas se deslocam de aproximadamente $30\text{\AA}$ neste intervalo de tensão. Podemos observar também que as funções de onda são assimétricas sendo que a maior probabilidade é observada à direita da posição da camada de átomos doadores. A assimetria é particularmente mais evidente para as funções de onda dos estados mais excitados.

Uma característica importante para sistemas com campo elétrico externo é a sua polarização que dará informações sobre a resposta dielétrica do sistema. A polarização para poços quânticos e fios quânticos foram calculados recentemente³⁹⁻⁴². Para sistemas com dopagem delta calcularemos a polarização em função da tensão externa aplicada já que nesse sistema o campo elétrico não é bem determinado. Os efeitos de acoplamento elétron-fonon, cujos efeitos nos cálculos da polarização em fios quânticos mostraram⁴¹ ser importantes, não serão incluídos nestes cálculos preliminares e será objeto de futura investigação.

A polarização por unidade de área é definida como:

$$P = \langle -ex \rangle_{V_G} - \langle ex \rangle_{V_G=0} \quad (V-3)$$

sendo "e" a carga eletrônica por unidade de área, x a posição e V_G a tensão externa aplicada enquanto que o símbolo $\langle \rangle$ denota valor médio.

Fig. 22 : Quadrado da função de onda sendo (a) estado fundamental (b) primeiro estado excitado (c) segundo estado excitado. A curva sólida é para $V_G=0$ e a curva tracejada é para $V_G=400$ mV. Consideramos $T=0K$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z=50 \text{ Å}$, $Z_0=200 \text{ Å}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

No sistema com dopagem delta, tanto a carga eletrônica quanto o valor médio da posição modificam-se com a tensão externa.

A polarização calculada para uma delta com uma concentração de doadores de $7 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, difusão de 50Å, concentração de aceitadores residuais de $5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ e temperatura igual a zero é mostrado na fig. 23 para V_G variando entre -400 e 400 mV. Observamos uma polarização linear. Esse comportamento linear da polarização, pelo menos nesse intervalo de tensão, é de certa forma interessante pois nenhuma das quantidades calculadas anteriormente e que são importantes nesse contexto, o número de ocupação e a distribuição de cargas, mostraram uma variação linear.

A determinação do perfil da concentração dos átomos dopantes, ou basicamente a difusão desses átomos durante o crescimento epitaxial, é obtida através das medidas de capacitância-voltagem (C-V). Nessas experiências a capacitância do sistema é medida em função da tensão aplicada num contato Schottky. Os dados obtidos podem ser elaborados para que um perfil da distribuição de cargas em função da posição possa ser inferidos das medidas de $C-V^{9,36-38}$. As interpretações destes perfis é que darão as informações sobre a difusão dos doadores.

A capacitância por unidade de área para um sistema com dopagem delta é definida como:

$$C = dQ/dV_G, \quad (\text{IV-4})$$

onde Q é a carga eletrônica por unidade de área, é mostrado na fig. 24 em função de V_G . Os parâmetros para esse sistema são os mesmos usados no cálculo da polarização e a capacitância é calculada para duas temperaturas $T=0\text{K}$ e $T=300\text{K}$.

Para $T=0\text{K}$ podemos observar duas regiões distintas para $V_G \leq -880\text{mV}$ e $V_G \geq -880\text{mV}$. Na primeira referente a $V_G \leq -880\text{mV}$ a capacitância é constante e igual a zero pois nenhuma sub-banda está ocupada. Para uma voltagem aplicada igual -880 mV, a qual chamamos de V_{limiar} , o nível fundamental cruza o nível de Fermi produzindo uma variação praticamente descontínua na capacitância. Para $V_G \geq -880 \text{ mV}$ a capacitância tem um comportamento praticamente linear não mudando sua

Fig. 23 : Polarização em função da tensão externa (V_G) calculado para um sistema com dopagem delta para $T=0K$, $N_D=7 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, $\Delta z=50\text{\AA}$, $Z_0=200\text{\AA}$ e $N_A=5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$.

Fig. 24 : Capacitância em função da tensão externa (V_G) calculada com $N_D = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Delta z = 50 \text{ \AA}$, $Z_0 = 200 \text{ \AA}$ e $N_A = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. A curva sólida é para $T = 0\text{K}$ e a curva tracejada é para $T = 300\text{K}$. No destaque interno medida experimental da capacitância em função da tensão externa (extraída da ref. 36 por E. F. Schubert e outros).

inclinação mesmo quando outros níveis começam a ser ocupados, ou seja quando estes cruzam o nível de Fermi.

Para $T = 300\text{K}$ o comportamento da capacitância é semelhante, sendo zero para valores abaixo de -1100 mV e com uma variação linear para tensões acima de -700 mV . A diferença maior ocorre para tensões em torno de V_{limiar} onde a transição ocorre de maneira abrupta porém continua consequência da distribuição de Fermi isto é, a possibilidade de ocupação dos níveis eletrônicos mesmo com energias acima do nível de Fermi.

Para uma comparação qualitativa, mostramos no destaque interno da fig. 24 uma medida experimental da capacitância versus a tensão externa^{3,36}. Podemos observar um comportamento semelhante ao nosso cálculo teórico. Entretanto para uma comparação quantitativa entre nossos resultados e os experimentais precisaríamos ter informações dos parâmetros da amostra utilizada tais como a concentração e posição dos átomos doadores.

Em resumo podemos dizer que para um sistema com dopagem delta crescido próximo a uma superfície e com uma tensão externa aplicada, temos:

1- Aprofundamento do potencial que neste caso é assimétrico com a diminuição da tensão externa.

2- Aumento e deslocamento da densidade eletrônica com tensão externa.

3- Diminuição da energia de todos os estados e consequentemente um aumento no número de ocupação com o aumento da tensão externa.

4- Deslocamento e localização das funções de onda com o aumento da tensão externa.

5- A polarização do sistema cresce linearmente com a tensão externa.

6- Capacitância calculada teoricamente tem comportamento qualitativamente de acordo com o resultado experimental.

V-3: EFEITOS DA POSIÇÃO DOS ÁTOMOS DOADORES

Para sistemas com dopagem delta simples crescidos próximos à

superfície do semiconductor um parâmetro importante é a distância (Z_0) da camada de átomos doadores em relação a ela. Estudos recentes tem mostrado ^{3,23} que nos transistores de efeito de campo fabricados a partir de estruturas com dopagem delta apresentam características favoráveis a esse tipo de operação devido a alta concentração eletrônica, alta transcondutância e voltagem de ruptura, é devido principalmente à proximidade do canal eletrônico à superfície.

Nesse trabalho estudamos a influência da posição Z_0 na energia e ocupação das sub-bandas que são características básicas para compreensão destes efeitos. Em nosso estudo consideramos a concentração de doadores de $7 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, a difusão de 50 Å, concentração residual de aceitadores de $5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ e temperatura igual a zero. A condição de contorno na superfície é dada apenas pela função trabalho do metal sendo mantido constante e igual a 1,0 eV. Logo, nessa simulação não consideraremos o efeito da tensão externa.

A fig.25 nos mostra a energia e ocupação das sub-bandas em função da posição (Z_0) dos átomos doadores no intervalo de 200 a 500 Å. Podemos observar que estas grandezas são bastante sensíveis a este parâmetro. A energia decresce a medida que aumentamos Z_0 , sendo que a variação é mais acentuada para Z_0 pequeno. A energia do estado fundamental varia de -80 meV quando $Z_0 = 200 \text{Å}$ para -130 meV quando $Z_0 = 500 \text{Å}$ sendo este valor já próximo ao de um sistema delta simples simétrico com os mesmos parâmetros, cujo valor da energia desse estado é de -143,5 meV. Podemos observar também que o número de sub-bandas ocupadas depende da posição dos átomos doadores sendo que para Z_0 menor que 380 Å duas sub-bandas estão ocupadas e para Z_0 maior que 380 Å temos três sub-bandas, que é equivalente ao de um delta simples simétrico com mesmos parâmetros. Isso mostra que para distâncias acima de 500 Å os efeitos da superfície não são importantes para esta concentração de doadores.

O número de ocupação das sub-bandas também mostra uma forte dependência com Z_0 , Estes valores aumentam com o aumento de Z_0 . É possível que a obtenção do número de ocupação das sub-bandas através de medidas de magneto-transporte poderiam estimar a distância da camada doadora em relação à superfície.

Podemos então resumir o comportamento do sistema com dopagem delta em função da distância da camada de doadores em relação à superfície da seguinte forma:

1- Diminuição da energia e aumento da ocupação com aumento da distância à superfície.

2- Com os parâmetros usados em nossos cálculos os efeitos da superfície não são importantes a partir de 500Å.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES

CONCLUSÕES

Neste trabalho estudamos a estrutura das sub-bandas eletrônicas para um sistema com dopagem delta. O cálculo numérico foi realizado na aproximação de Hatree utilizando um método baseado na técnica do *split operator* para a solução da equação de Schrodinger. Neste caso resolvemos a equação de Schrodinger dependente do tempo e fazemos a evolução da função de onda no domínio de tempo imaginário. Esse método mostrou-se muito eficiente na solução deste sistema pois é muito estável e praticamente independente do chute inicial das funções de onda. Uma característica importante deste método é que podemos utilizá-lo para qualquer potencial e nos permite estudar sistemas com dopagem delta nas mais diversas situações tais como, delta crescido em poços quânticos, deltas crescidos em barreira de potencial, deltas crescidos junto a interfaces e super redes de deltas.

Fizemos um estudo teórico detalhado do potencial efetivo, níveis de energia e densidade eletrônica do sistema com dopagem delta com e sem campo magnético ou elétrico externo em função da temperatura, densidade e largura de difusão de doadores. Nestes cálculos, observou-se que a estrutura de sub-bandas é muito sensível a todos esses parâmetros. Mostramos que há uma diminuição na profundidade e um alargamento no potencial efetivo e consequentemente uma diminuição na separação entre os níveis eletrônicos com o aumento da difusão dos dopantes, sendo que para $l \geq 200\text{\AA}$ os níveis são praticamente equidistantes refletindo o caráter parabólico do potencial. O aumento na concentração de doadores provoca um aprofundamento no potencial e um aumento significativo no número e ocupação das sub-bandas. Um resultado importante verificado é a diminuição da população do estado fundamental e consequentemente um aumento da população dos estados mais excitados com o aumento da temperatura.

Calculamos também a influência do campo magnético nestas estruturas. Para um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano de doadores mostramos que não ocorre nenhuma alteração na

estrutura de sub-bandas eletrônicas. Por outro lado nossos cálculos mostram que um campo magnético aplicado paralelo ao plano de doadores afeta consideravelmente a estrutura eletrônica deste sistema. Há um achatamento na relação de dispersão $\epsilon(k_x)$ para todas as sub-bandas. Esta permanece simétrica independente da concentração de doadores. Ocorre um deslocamento diamagnético nos níveis eletrônicos para maior energia provocando uma diminuição na população dos níveis mais excitados. Há um aumento na massa efetiva dos elétrons com o aumento do campo magnético. Mostramos que estes efeitos são mais pronunciados para sub-bandas de maior energia e sistemas com menor densidade de doadores. Apesar da grande variação nestas características mostramos que o potencial efetivo e a densidade eletrônica total permanece praticamente inalterada quando o campo varia de 0 à 20T.

Para sistemas com dopagem delta crescidos próximos à superfície de semicondutores na presença de um campo elétrico externo mostramos que a sua estrutura eletrônica é muito afetada pela voltagem aplicada no contato Schottky. Neste caso mostramos que com o aumento da tensão há um deslocamento e localização das funções de onda, um aprofundamento no potencial e um aumento no número de sub-bandas ocupadas. A polarização deste sistema calculada para $N_D = 7 \times 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$ mostra um comportamento linear para uma tensão externa variando entre -400 e 400mV. Mostramos que a capacitância calculada para esse sistema está qualitativamente de acordo com os resultados experimentais. Por fim calculamos o efeito da distância dos átomos doadores à superfície (Z_0) para $N_D = 7 \times 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$ e mostramos que para $Z_0 > 500 \text{ \AA}$ os efeitos da superfície não são importantes e o sistema comporta-se praticamente como um delta simples no volume (bulk).

A estrutura eletrônica deste tipo de sistema é muito sensível a todos os parâmetros envolvidos nos cálculos de forma que uma informação bem detalhada das características da amostra deve ser obtida para uma comparação dos nossos resultados com os resultados experimentais.

APÉNDICE A

APÊNDICE A

APROXIMAÇÃO PARA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER DEPENDENTE DO TEMPO

A solução da equação de schrodinger dependente do tempo é dada por:

$$\psi(\vec{r}, t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H \cdot dt'\right) \psi(\vec{r}, t) \quad (A-1)$$

para Δt muito pequeno é aproximada por:

$$\psi(\vec{r}, t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot \Delta t\right) \psi(\vec{r}, t) \quad (A-2)$$

sendo o Hamiltoniano do sistema dado por:

$$H = \frac{V(\vec{r})}{2} + \frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2} \quad (A-3)$$

temos:

$$\psi(\vec{r}, t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t - \frac{i}{\hbar} \cdot \left(\frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2}\right) \Delta t\right] \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad (A-4)$$

Vamos então avaliar o seguinte operador:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot \Delta t\right) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t - \frac{i}{\hbar} \cdot \left(\frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2}\right) \Delta t\right] \quad (A-5)$$

Neste caso convém definir os seguintes operadores:

$$A = -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \cdot \Delta t$$

$$B = -\frac{i}{\hbar} \cdot \left(-\frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2} \right) \Delta t \quad (A-6)$$

Para $\Delta t \rightarrow 0$ vamos considerar a seguinte aproximação :

$$[V(\vec{r})\Delta t, [V(\vec{r})\Delta t, P^2\Delta t]] = [P^2\Delta t, [V(\vec{r})\Delta t, P^2\Delta t]] = 0 \quad (A-7)$$

onde o símbolo $[Q, W]$ representa o comutador do operador Q com operador W .

Neste caso temos então a seguinte relação:

$$\exp(A+B) = \exp(A) \cdot \exp(B) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} [A, B]\right) \quad (A-8)$$

logo:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot H \cdot \Delta t\right) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \left(-\frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2}\right) \Delta t\right) \\ &\quad * \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \left[\frac{V(\vec{r})}{2}, -\frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2}\right] \Delta t^2\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \left(-\frac{P^2}{2m} + \frac{V(\vec{r})}{2}\right) \Delta t\right) \\ &\quad * \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \left[\frac{V(\vec{r})}{2}, -\frac{P^2}{2m}\right] \Delta t^2\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{P^2}{2m} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) * \\ &\quad * \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \left[-\frac{P^2}{2m}, \frac{V(\vec{r})}{2}\right] \Delta t^2\right) * \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \left[\frac{V(\vec{r})}{2}, -\frac{P^2}{2m}\right] \Delta t^2\right) \end{aligned}$$

$$= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{P^2}{2m} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) \quad (A-9)$$

Com isso a equação (A-8) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{P^2}{2m} \Delta t\right) * \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V(\vec{r})}{2} \Delta t\right) * \psi(\vec{r}, t + \Delta t) + O(\Delta t)^3 \quad (A-10)$$

APROXIMAÇÃO PARA O TERMO QUE CONTÉM OPERADOR ENERGIA CINÉTICA

O operador que contém a energia cinética é o seguinte:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{P^2}{2m} \Delta t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \quad (A-11)$$

que usando a seguinte convenção $-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = K$ é dado por :

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{P^2}{2m} \Delta t\right) = \exp(K \Delta t) \quad (A-12)$$

expandindo a exponencial para $\Delta t \rightarrow 0$ e considerando somente termos quadráticos temos :

$$\exp(K \Delta t) = 1 + K \Delta t + \frac{(K \Delta t)^2}{2!} + \dots \quad (A-13)$$

$$\exp(K \Delta t) = 1 + \frac{K \Delta t}{2} + \frac{K \Delta t}{2} + \frac{(K \Delta t)^2}{4} + \frac{(K \Delta t)^2}{4} + \frac{(K \Delta t)^3}{8} + \dots \quad (A-14)$$

onde o último termo somado não altera a aproximação quadrática :

$$\exp(K \Delta t) = \left(1 + \frac{K \Delta t}{2}\right) \cdot \left(1 + \frac{K \Delta t}{2} + \frac{K^2 \Delta t^2}{4} + \dots\right) \quad (A-15)$$

desta forma fazemos a seguinte aproximação:

$$\exp(K\Delta t) = \left(1 + \frac{K\Delta t}{2}\right) \cdot \left(1 - \frac{K\Delta t}{2}\right)^{-1} + O(\Delta t)^3 \quad (\text{A-16})$$

com isso mostramos que para $\Delta t \rightarrow 0$ temos:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{P^2}{2m} \Delta t\right) \approx \left(1 + \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\Delta t \partial^2}{2m \partial x^2}\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\Delta t \partial^2}{2m \partial x^2}\right)^{-1} \quad (\text{A-17})$$

APÊNDICE B

APÊNDICE B

PROPAGAÇÃO NO DOMÍNIO DE TEMPO IMAGINÁRIO

Para um sistema com Hamiltoniano independente do tempo cujas auto-funções são $\phi_n(\vec{r})$ com auto-valores ε_n , tal que $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \dots$, temos que uma função de ondas $\psi(\vec{r})$ qualquer pode ser expandida na base desse Hamiltoniano e sua evolução no tempo é dada por:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n \cdot \exp\left(-\frac{i \cdot \varepsilon_n \cdot t}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r}) \quad (\text{B-1})$$

Fazendo a substituição de $t \rightarrow -i\tau$, isto é, considerando a propagação no domínio de tempo imaginário, temos:

$$\psi(\vec{r}, \tau) = \sum_n a_n \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r}) \quad (\text{B-2})$$

Considerando a integral do quadrado da função de onda em todo o espaço temos:

$$\int |\psi(\vec{r}, \tau)|^2 \cdot d\vec{r} = \sum_n |a_n|^2 \cdot \exp\left(-\frac{2 \cdot \varepsilon_n \cdot \tau}{\hbar}\right)$$

onde observamos que a função de onda não permanece normalizada no tempo e tem um decaimento exponencial. Normalizando a função de onda temos:

$$\psi^{\text{norm}}(\vec{r}, \tau) = \frac{\sum_n a_n \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_n \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r})}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 \cdot \exp\left(-\frac{2 \cdot \epsilon_n \cdot \tau}{\hbar}\right)}} \quad (\text{B-3})$$

que expandindo os somatórios fica:

$$\begin{aligned} \psi^{\text{norm}}(\vec{r}, \tau) &= \frac{a_0 \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_0 \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_0(\vec{r}) + a_1 \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_1 \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_1(\vec{r}) + a_2 \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_2 \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_2(\vec{r}) + \dots}{a_0 \cdot \exp\left(-\frac{\epsilon_0 \cdot \tau}{\hbar}\right) \sqrt{1 + \left(\frac{a_1}{a_0}\right)^2 \exp\left(\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_1) \cdot \tau}{\hbar}\right) + \left(\frac{a_2}{a_0}\right)^2 \exp\left(\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_2) \cdot \tau}{\hbar}\right) + \dots}} \\ &= \frac{\phi_0(\vec{r}) + a_1 \cdot \exp\left(+\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_1) \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_1(\vec{r}) + a_2 \cdot \exp\left(+\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_2) \cdot \tau}{\hbar}\right) \phi_2(\vec{r}) + \dots}{\sqrt{1 + \left(\frac{a_1}{a_0}\right)^2 \exp\left(\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_1) \cdot \tau}{\hbar}\right) + \left(\frac{a_2}{a_0}\right)^2 \exp\left(\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_2) \cdot \tau}{\hbar}\right) + \dots}} \end{aligned} \quad (\text{B-4})$$

No limite de $\tau \rightarrow \infty$ teremos:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}, \tau) = \phi_0(\vec{r}) \quad (\text{B-5})$$

Um fator importante na evolução da função de onda no domínio de tempo imaginário é que a função de onda converge para o estado fundamental independente dos valores de a_n ou seja para qualquer que seja o estado inicial.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] L. Ezaki e R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970)
- [2] C. E. C. Wood, G. Metze, J. Berry e L. F. Eastman, J. Appl. Phys. 51, 383 (1980)
- [3] E. F. Schubert e K. Ploog, Jpn. J. Appl. Phys. 24, L608 (1985)
- [4] A. Zrenner, F. Koch e K. Ploog, Surf. Sci. 196, 671 (1988)
- [5] A. Zrenner, H. Reisinger, F. Koch, K. Ploog e J. C. Maan, Phys. Rev. B 33, 5607 (1986)
- [6] F. Kock, A. Zrenner e K. Ploog, *Springer Series in solid-state sciences vol.71*, Ed. by G. Landwehr (Springer-verlag Berlin Heidelberg - New York (1986)), Pag. 308
- [7] N. Schwarz, F. Muller, G. Tempel, F. Koch e G. Weimann, Semicond. Sci. Technol. 4, 571 (1989)
- [8] G. Tempel, F. Muller, N. Schwarz, F. Koch, G. Weimann, H. P. Zeinal e I. Eisele, Surf. Sci. 228, 247 (1990)
- [9] T. H. Chiu, J. E. Cunningham, B. Tell e E. F. Schubert, J. Appl. Phys. 64, 1578 (1988)
- [10] E. F. Schubert, J. M. Kuo, R. F. Kopf, H. S. Luftman, L. C. Hopkins e N. J. Sauer, J. Appl. Phys. 67, 1969 (1989)
- [11] A. C. Maciel, M. Tatham, J. F. Ryan, J. M. Worlock, R. E. Nahory, J. P. Harbison e L. T. Florez, Surf. Sci. 228, 251 (1990)
- [12] J. Wagner, A. Fischer e K. Ploog, Phys. Rev. B 42, 7280 (1990)
- [13] P. M. Koenraad, A. P. J. Voncken, J. Singleton, F. A. P. Blom, C. J. G. M. Langerak, M. R. Leys, J. A. A. J. Perenboom, S. J. R. M. Spermon, W. C. Van Vleuten e J. H. Wolter, Surf. Sci. 228, 538 (1990)
- [14] M. Zachau, F. Koch, K. Ploog, P. Roentegen e H. Beneking, Solid State Commun. 59(8), 591 (1986)
- [15] C. J. Arsenaut e M Mennier, Phys. Rev. B 39, 8739 (1989)
- [16] I. Eisele, Surperlattices and Microstructures 6, 123 (1989)

- [17] A. M. Lanzillotto, M. Santos, e M. Shayegan, Appl. Phys. Lett. 55, 1445 (1989)
- [18] I. V. Kukushkin, K. Von Klitzing, K. Ploog e V. B. Timofeev, Phys. Rev. B 40, 7788 (1989)
- [19] I. V. Kukushkin, K. Von Klitzing, K. Ploog, V. E. Kirpichev e B. N. Shepel, Phys. Rev. B 40, 4179 (1989)
- [20] L. Ioratti, Phys. Rev. B 41, 8340 (1990)
- [21] Z. D. Kvon e A. G. Pogosov, Sov. Phys. Semicond. 25, 82 (1991)
- [22] M. H. Degani, Phys. Rev. B 44, 5580 (1991)
- [23] K. Ploog, M. Hauser e A. Fischer, Appl. Phys. A 45, 233 (1988)
- [24] R. Kosloff, J. Phys. Chem. 92, 2087 (1988)
- [25] M. H. Degani, Appl. Phys. Lett. 59(1), 57 (1991)
- [26] W. H. Press, B. P. Flanery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterlin, *Numerical Recipes (Cambridge University Press)*, pag. 356
- [27] Wen-Chau Liu, Chung-Yih Sun e Wen-Shiung Lour, Superlattices e Microstructures 10, 19 (1991)
- [28] S. Sasa, S. Muto, K. Kondo, H. Ishikawa e S. Hiyamizu, Jpn. J. Appl. Phys. 24, L602 (1985)
- [29] A. Zrenner, F. Koch, R. L. Williams, R. A. Stradling, K. Ploog e G. Weimann, Semicond. Sci. Technol. 3, 1203 (1988)
- [30] C. H. Perry, K. S. Lee, W. Zhou, J. M. Worlock, A. Zrenner, F. Koch e K. Ploog, Surf. Sci. 196, 677 (1988)
- [31] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics Vol II*, cap. IV
- [32] G. Bastard, "Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures", Cap. VIII
- [33] X. Aymerich-Humet, F. Serra-Mestres e J. Millan, J. Appl. Phys. 54, 2850 (1983)
- [34] G. M. G. Oliveira, V. M. S. Gomes, A. S. Chaves, J. R. Leite e J. M. Worlock, Phys. Rev. B 35, 2896 (1987)
- [35] M. P. Stopa e S. das Sarma, Phys. Rev. B 40, 10048 (1989)
- [36] E. F. Schubert e K. Ploog, Jpn. J. Appl. Phys. 25, 966 (1986)
- [37] A. Zrenner, Appl. Phys. Lett. 55(2), 156 (1989)
- [38] E. F. Schubert, R. F. Kopf, J. M. Kuo, H. S. Luftman e P. A. Garbinski, Appl. Phys. Lett. 57(5), 497 (1990)

- [39] B. Sukumar e K. Navaneethakrishnan, Solid State Commun. 71(8), 681 (1989)
- [40] A. Puri, J.G. Sun e T. Odagaki, Solid. State Commun. 70(9), 907 (1989)
- [41] B. Sukumar e K. Navaneethakrishnan, Phys. Rev. B 41(18), 1291 (1990)
- [42] K. F. Ilaiwi e M. Tomak, Phys. Stat. Soli. (b) 166, 409 (1991)