UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

"APROXIMAÇÃO DE THOMAS-FERMI
APLICADA A ESTRUTURAS
SEMICONDUCTORAS DELTA-DOPADAS"

José Camilo Barbosa

*Dissertação apresentada ao Instituto
de Física e Química de São Carlos,
Universidade de São Paulo, para
obtenção do Título de Mestre em
Física Básica*

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

SÃO CARLOS

1992

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

**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 13560.970 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE José Camilo Barbosa APRESENTADA AO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 05/09/1992

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Toriatti Jr

Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Prof. Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

Abstract

In this work we have used the Thomas-Fermi theory to study the electronic properties of planar doped semiconductors, or delta-doping, with a moderate to high density of dopants. The main aim of this work is to verify that this theory gives very good results when compared with the self-consistent method in the Hartree approximation. We have checked that many physical situations related to delta-doping can be described in a simple manner and also with very good results. We have studied the single delta problem and the superlattice problem and we have compared the Thomas-Fermi's and Hartree's results.

Resumo

Neste trabalho usamos a teoria de Thomas-Fermi para estudar as propriedades eletrônicas de semicondutores planarmente dopados, ou delta-dopados, com densidade de dopantes de moderada a alta. O principal objetivo do trabalho é a verificação de que esta teoria apresenta muito bons resultados com os do método auto-consistente na aproximação de Hartree quando aplicada a este tipo de problema. Verificamos que muitas situações físicas relacionadas a semicondutores delta-dopados podem ser descritas de uma maneira simples e com muito bons resultados. Estudamos o problema de um poço isolado e o problema da super-rede, comparando os resultados de Thomas-Fermi e Hartree.

Este trabalho conta com o apoio financeiro do CNPq

Conteúdo

1	Introdução	1
2	O Modelo Teórico	5
2.1	Introdução	5
2.2	A teoria do funcional densidade e o princípio variacional	7
2.3	A aproximação de Thomas-Fermi	11
2.4	A densidade de estados	14
2.5	A aproximação de Thomas-Fermi utilizando a densidade de estados	15
3	Aplicação do Formalismo de Thomas-Fermi a Estruturas Delta-Dopadas	20
3.1	Dopagem tipo delta	20
3.1.1	Introdução	20
3.1.2	O conceito de <i>delta-doping</i>	23
3.1.3	A equação de Thomas-Fermi para uma delta simplificada	26
3.1.4	A estrutura eletrônica do delta ideal	32
3.2	Uma delta isolada com difusão de dopantes e fundo residual aceitador	36
3.2.1	A estrutura eletrônica do <i>delta-doping</i> com difusão de doadores	38
3.2.2	O <i>delta-doping</i> com fundo residual aceitador e difusão de dopantes	39
3.3	A super-rede de <i>delta doping</i>	42
3.3.1	O conceito de super-rede	42
3.3.2	A equação de Thomas-Fermi para a super-rede	44
3.3.3	A estrutura eletrônica da super-rede	45

3.3.4	Densidade de estados	50
3.3.5	Cálculos auto-consistentes	51
3.3.6	Efeito Shubnikov-de Haas	53
4	Resultados e Discussões	55
4.1	Introdução	55
4.2	Resultados para uma delta isolada	55
4.2.1	Delta isolada simplificada	55
4.2.2	Delta isolada com difusão dos dopantes e fundo uniforme de aceitadores .	60
4.2.3	Resultados para a super-rede de deltas	67
4.2.4	Conclusão	74

Lista de Figuras

Figura 2.1 - Diagrama esquemático de um potencial suave. O sistema sujeito a este potencial pode ser dividido em pequenos sistemas de tamanho Δr .

Figura 2.2 - Densidade de carga de Thomas-Fermi e auto-consistente para a camada de inversão numa heterojunção. A linha pontilhada representa a contribuição da sub-banda mais baixa (ref. [28]).

Figura 3.1 - Ilustração de um transistor de efeito de campo: δ - FET (ref. [9]).

Figura 3.2 - Semicondutor *GaAs* crescido na direção $\langle 100 \rangle$. É mostrada também a distribuição de dopantes numa monocamada do cristal.

Figura 3.3 - Esquema ilustrando as várias regiões da banda de condução de um semicondutor delta-dopado.

Figura 3.4 - Forma poligonal da banda de condução de um semicondutor delta-dopado. Os valores $E_1, E_2, E_3, \dots$ são encontrados analiticamente (ref. [29]).

Figura 3.5 - Esquema da banda de condução e níveis de energia para vários valores de difusão dos dopantes (ref. [9]).

Figura 3.6 - Comparação entre o cálculo teórico e resultados experimentais da largura da curva de C-V para o semicondutor delta-dopado. O acordo teoria-experimento só está satisfeito se a difusão for desprezada (ref. [9]).

Figura 3.7 - Diagrama de bandas para uma super-rede do tipo *dente de serra*. As funções de onda mostradas são para $q = 0$. As minibandas têm largura ΔE_n (ref. [9]).

Figura 3.8 - Gráfico da função $F(E)$. Este gráfico determina a estrutura de minibandas.

Figura 4.1 - Gráfico mostrando os resultados para o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (indicado por círculos), e o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para uma delta isolada simplificada. Estes resultados são para $n_D = 5.0$, sem difusão e sem o fundo residual de impurezas aceitadoras.

Figura 4.2 - Comparação entre a densidade de estados de Thomas-Fermi e a densidade de Thomas-Fermi-Schrödinger para uma delta simplificada com $n_D = 5.0$.

Figura 4.3 - Comparação entre o potencial de Thomas-Fermi na presença de um fundo de impurezas aceitadoras com densidade 0.001 (linha pontilhada) e sem o fundo (linha contínua). Neste gráfico, $n_D = 6.82$ e $d = 0.79$.

Figura 4.4 - Gráfico mostrando os resultados para o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (indicado por círculos) e o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para uma delta isolada. Estes resultados são para $n_D = 6.82$, $n_S = 6.53$, $n_A = 0.001$ e uma difusão de 0.79.

Figura 4.5 - Ilustração da ocupação n_S de cada sub-banda como função da densidade de doadores. A linha contínua representa os resultados levando-se em conta efeitos de não-parabolicidade.

Figura 4.6 - Resultados para a densidade de carga eletrônica. Os círculos representam a

densidade de carga calculada auto-consistentemente e a linha contínua a densidade de carga de Thomas-Fermi-Schrödinger. Estes resultados são encontrados para uma delta isolada com $n_D = 6.82$, $n_A = 0.001$ e uma difusão de 0.79.

Figura 4.7 - Gráfico utilizado para encontrarmos as minibandas de uma super-rede com $n_D = 2.92$, $n_A = 0.001$, $d = 0.2$ e $a = 2.05$.

Figura 4.8 - Resultados para uma super-rede com $n_D = 2.92$, $n_A = 0.001$, $a = 2.05$ e $d = 0.2$. São apresentados o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (círculos), o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para $q = 0$ e a estrutura de minibandas.

Figura 4.9 - Densidade de estados para a super-rede com $n_D = 2.92$, $n_A = 0.001$, $a = 2.05$ e $d = 0.2$.

Figura 4.10 - Resultado para uma super-rede com $n_D = 3.0$, $n_A = 0.001$, $a = 5.06$ e $d = 0.5$. São apresentados o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (círculos), o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para $q = 0$ e a estrutura de minibandas.

Capítulo 1

Introdução

O confinamento espacial de portadores (elétrons ou buracos) em estruturas semicondutoras tem tido grande progresso nos últimos anos. Este progresso se tornou possível graças ao avanço nas técnicas de crescimento epitaxial de cristais, possibilitando a fabricação de uma grande variedade de estruturas nas quais os elétrons podem ser quanticamente confinados em dimensões menores que três. Essa capacidade de confinamento dos portadores em regiões muito pequenas é de grande interesse aplicativo. Em geral, a forma do potencial de confinamento, a qual nos dá a distribuição de portadores, depende dos detalhes das estruturas com as quais estamos trabalhando. É, então, desejável termos métodos teóricos para calcular o potencial de confinamento. Em particular, o confinamento bidimensional tem chamado muito a atenção nas últimas décadas pela possibilidade de sua utilização em dispositivos óptico-eletrônicos.

Neste trabalho, estamos interessados em estudar um tipo especial de confinamento, o chamado *delta-doping* ou dopagem planar. O potencial de confinamento é criado dopando-se um cristal semicondutor de tal forma que os átomos de dopantes estejam estatisticamente distribuídos num único plano do cristal hospedeiro. Mais especificamente, dopando-se arseneto de gálio com silício um potencial tipo V e um gás de elétrons confinado neste potencial são criados, dando origem, assim, a um gás de elétrons quase-bidimensional. Este tipo de sistema eletrônico tem se tornado atraente pela sua aplicação em transistores de efeito de campo, chamados δ - FET's. Estes transistores apresentam algumas vantagens em relação a transistores de efeito de campo convencionais.

Entende-se por um gás de elétrons quase-bidimensional aquele em que os elétrons têm níveis de energia quantizados numa dimensão, mas são livres para mover-se nas outras duas dimensões espaciais. Desta forma, o vetor de onda é um bom número quântico para as direções onde o elétron é livre, mas não na outra direção. Tais sistemas não são estritamente bidimensionais, pois a função de onda do elétron se estende na direção em que este elétron está ligado. A grande dificuldade encontrada em problemas de sistemas quase-bidimensionais é o fato de se tratar de um sistema de muitos corpos. A descrição de um sistema de muitos corpos não é fácil e tem sido a grande meta da Física durante este século. São muito poucos os sistemas que permitem uma solução analítica, ou numericamente exata, da equação de Schrödinger de muitos corpos. Entretanto, em muitos casos de interesse, como a interação elétron-elétron, requerem o uso de algumas simplificações no Hamiltoniano ou no esquema computacional usado. O recente progresso no cálculo da estrutura eletrônica de alguns sistemas, tal como estrutura eletrônica de sólidos, tem mostrado que nos faltam condições para prever as propriedades físicas de um sistema de muitos corpos com precisão e sem excessivo cálculo computacional.

O desenvolvimento de esquemas que possibilitem a descrição de sistemas de muitos corpos ainda continua e o propósito deste trabalho é descrever um destes esquemas para um tipo especial de sistema: o gás de elétrons quase-bidimensional formado dopando-se um semicondutor planarmente.

Na descrição de um sistema de muitos corpos interagentes – como elétrons em um sólido, por exemplo – é necessário considerarmos a função de onda Ψ do sistema, a qual depende das coordenadas espaciais e do spin de todos os elétrons do sistema. Uma das mais antigas e usadas aproximações para Ψ é devido a Hartree (1928), a qual é considerada como o produto das funções de onda de um-elétron. Cada uma destas funções de onda satisfaz a equação de Schrödinger de um-elétron na presença de um potencial efetivo. Este potencial efetivo é interpretado como uma média do potencial de todos os elétrons. A densidade de carga é encontrada somando-se o módulo ao quadrado da função de onda de todos os estados ocupados.

Em 1930 Fock acrescentou a estatística de Fermi a esta visão, trocando o produto das funções de onda por um determinante chamado determinante de Slater. Tal método ficou conhecido como a aproximação de Hartree-Fock. Ele introduz um novo termo na equação de Schrödinger: o potencial de troca. Ambas as aproximações de Hartree e Hartree-Fock são conhecidas também com a designação de método auto-consistente, já que o potencial (que depende da densidade de carga) depende das funções de onda dos estados de um-elétron.

Nosso trabalho se baseia num esquema bastante conhecido para se tratar um sistema de muitos corpos: a aproximação de Thomas-Fermi. Esta aproximação foi proposta por Thomas (1927) e Fermi (1928), baseada na densidade de elétrons do sistema. A aproximação de Thomas-Fermi assume que os elétrons não estão correlacionados, ou seja, o Hamiltoniano do sistema é descrito apenas pelos termos cinéticos e pelo potencial eletrostático. Nesta aproximação a energia cinética é descrita pela densidade eletrônica do sistema livre e o potencial eletrostático é determinado pela equação de Poisson. Como extensão da teoria de Thomas-Fermi surgiu em 1964 com Hohenberg e Kohn a teoria do funcional densidade. Desta última podemos extrair tanto o modelo de Thomas-Fermi assim como a aproximação de Hartree-Fock. A teoria do funcional densidade se baseia em expressar a energia do estado fundamental como um funcional da densidade eletrônica. Esta teoria reduz um problema de muitos corpos a um problema de um corpo com todos os efeitos de muitos corpos condensados num potencial efetivo.

O objetivo central deste trabalho é mostrar que com um formalismo bastante simples – Teoria de Thomas-Fermi – podemos calcular com precisão algumas propriedades eletrônicas do gás de elétrons quase-bidimensional formado pelo *delta-doping*, sem grande consumo de tempo computacional. Temos também por objetivo mostrar a ampla faixa de problemas que podem ser tratados pela teoria de Thomas-Fermi em estruturas delta dopadas.

No Capítulo 2 a teoria de Thomas-Fermi é desenvolvida seguindo o formalismo da densidade

de estados. Esta teoria é também discutida sob o ponto de vista do funcional densidade.

No Capítulo 3 o formalismo de Thomas-Fermi desenvolvido é aplicado ao sistema de elétrons formado por uma delta isolada. Fazemos também uma aplicação ao problema da super-rede de *delta-doping*. Além disso, discutimos o método auto-consistente, o qual é usado na comparação dos resultados.

Finalmente, no Capítulo 4 apresentamos nossos principais resultados onde é feita uma comparação entre os resultados auto-consistentes e os de Thomas-Fermi.

Capítulo 2

O Modelo Teórico

2.1 Introdução

Neste capítulo desenvolvemos a teoria de Thomas-Fermi que será aplicada ao nosso sistema eletrônico. Discutimos inicialmente a teoria de Thomas-Fermi do ponto de vista da teoria do funcional densidade e em seguida do ponto de vista da densidade de estados.

Ao longo dos últimos vinte anos a teoria do funcional densidade tem sido um poderoso método para se estudar as propriedades eletrônicas de sistemas de muitos elétrons. O método tem por base uma teoria exata para se lidar com sistemas eletrônicos no estado fundamental em termos da densidade $n(\vec{r})$. Tal método foi proposto em 1964 por Hohenberg e Kohn [28]. Estes autores mostraram que todos os aspectos da estrutura eletrônica de um sistema de muitos elétrons no estado fundamental são completamente determinados por sua densidade eletrônica $n(\vec{r})$. Além disso, obtiveram uma expressão formal para a energia de tal sistema como funcional de $n(\vec{r})$. Este funcional por sua vez contém um termo, $F[n(\vec{r})]$, que representa as energias cinética e de interação entre os elétrons. Como este problema não tem solução exata, não podemos determinar uma forma exata para $F[n(\vec{r})]$; entretanto, muitas formas têm sido usadas sendo a mais simples delas a de Thomas-Fermi. Na aproximação de Thomas-Fermi os elétrons são tratados como partículas independentes e a energia de interação entre os elétrons se deve somente à energia eletrostática; também, a energia cinética pode ser descrita por uma aproximação local baseada nos resultados de elétron livre, $[n(\vec{r})]^{5/3}$.

O objetivo desta teoria é reduzir um problema de muitos elétrons a um problema equivalente de um elétron, onde todos os efeitos de muitos corpos são incorporados num potencial efetivo.

Consideremos um sistema de muitos elétrons numa caixa que se movem sob a influência de um potencial externo $v(\vec{r})$ e também sob influência de sua mútua repulsão coulombiana. Tal sistema tem o Hamiltoniano definido por

$$H = T + V + U$$

onde T e V são respectivamente os operadores energia cinética e energia potencial devido ao potencial externo $v(\vec{r})$ e U é o operador energia potencial devido à interação coulombiana. Ainda, vamos considerar a classe de sistemas de muitos elétrons com mesma interação coulombiana mas com diferentes potenciais externos.

Em princípio, para esta classe de sistemas, a especificação do potencial externo determina todas as propriedades do sistema; em particular, a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ do estado fundamental. Por outro lado, temos o teorema de Hohenberg e Kohn garantindo a validade da recíproca desta afirmação, ou seja, que o potencial, a menos de uma constante, é determinado pela densidade $n(\vec{r})$. A prova deste teorema é feita por absurdo: podemos mostrar que $n(\vec{r})$ associada ao estado fundamental correspondendo a um potencial externo $v(\vec{r})$ não pode ser reproduzido pelo estado fundamental correspondendo a um potencial $v'(\vec{r})$, a menos que $v'(\vec{r}) - v(\vec{r}) = \text{constante}$. [28]

Concluimos, assim, que $n(\vec{r})$ determina o estado fundamental do sistema (Ψ). De fato, o teorema de Hohenberg e Kohn afirma que $n(\vec{r})$ determina o potencial, e o potencial por sua vez determina o estado fundamental.

2.2 A teoria do funcional densidade e o princípio variacional

Como vimos anteriormente, Ψ é um funcional de $n(\vec{r})$; então,

$$F[n(\vec{r})] = \langle \Psi | (T + U) | \Psi \rangle$$

representa o valor esperado da soma da energia cinética e energia de interação coulombiana.

Hohenberg e Kohn mostraram que a energia do estado fundamental de um sistema de N elétrons interagindo sob ação de um potencial externo é escrito como

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = E[n(\vec{r})] = \int v(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + F[n(\vec{r})]. \quad (2.1)$$

Também, concluíram que $E[n]$ assume seu valor mínimo, igual à energia do estado fundamental, para a correta $n(\vec{r})$ desde que a condição

$$N = \int n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.2)$$

esteja satisfeita.

Se $F[n]$ é conhecido, o problema de determinar a energia e a densidade eletrônica do estado fundamental se torna simples, desde que a única coisa que temos a fazer é minimizar o funcional energia. A condição de energia mínima se obtém fazendo a derivada funcional da equação (2.1) e, assim, temos

$$\frac{\delta F}{\delta n} + v = \mu$$

onde μ é um multiplicador de Lagrange a ser determinado usando a equação (2.2).

É usual extrairmos de $F[n]$ a energia coulombiana e definirmos o funcional

$$G[n] \equiv F[n] - \frac{1}{2} \int n(\vec{r}) n(\vec{r}') u(\|\vec{r} - \vec{r}'\|) d\vec{r} d\vec{r}', \quad (2.3)$$

onde $u(\|\vec{r} - \vec{r}'\|)$ é a interação coulombiana. Desta forma, o funcional energia torna-se

$$E[n] = \int v(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int n(\vec{r}) n(\vec{r}') u(\|\vec{r} - \vec{r}'\|) d\vec{r} d\vec{r}' + G[n]. \quad (2.4)$$

É conveniente expressar $G[n]$ como

$$G[n] = T[n] + E_{xc}[n]$$

onde $T[n]$ é a energia cinética do sistema não interagente e $E_{xc}[n]$ é chamado energia de correlação e troca do sistema interagente. Devemos observar que para um $n(\vec{r})$ arbitrário não podemos, a princípio, dar expressão alguma para o termo $E_{xc}[n]$.

Neste ponto cabe observar que Hohenberg e Kohn mostraram – usando a aproximação de densidade local – que se a densidade eletrônica variar lentamente, pode-se escrever

$$E_{xc}[n] = \int \epsilon_{xc}[n(\vec{r})] d\vec{r}. \quad (2.5)$$

Nesta expressão, $\epsilon_{xc}[n(\vec{r})]$ é a densidade de energia de correlação e troca de um gás de elétrons uniforme de densidade $n(\vec{r})$.

Da condição de minimização de $E[n]$ sujeita à equação (2.2), obtemos a condição de Euler:

$$\frac{\delta T[n]}{\delta n(\vec{r})} + \phi(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r}) - \mu = 0 \quad (2.6)$$

onde

$$\phi(\vec{r}) \equiv v(\vec{r}) + \int n(\vec{r}') u(\|\vec{r} - \vec{r}'\|) d\vec{r}'$$

e

$$v_{xc}(\vec{r}) \equiv \frac{\delta E_{xc}}{\delta n(\vec{r})}$$

Como foi dito anteriormente, deve existir um potencial efetivo v_{ef} tal que a equação de Schrödinger para o sistema de muitos elétrons possa ser escrita dentro do modelo de partícula

independente. As energias ϵ_i e as funções de onda $\psi_i(\vec{r})$, com $i = 1, \dots, N$, são determinadas resolvendo-se a equação

$$H_{\vec{r}}\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}). \quad (2.7)$$

Neste ponto devemos mencionar a aproximação usual que é feita quando estamos tratando portadores num semiconductor dopado – aproximação da massa efetiva. As propriedades eletrônicas de semicondutores são determinados completamente pelos elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência. Como os elétrons são encontrados quase que exclusivamente em níveis próximos ou ponto mínimo da banda de condução, a relação de dispersão geralmente pode ser aproximada por uma relação quadrática, ou seja,

$$\epsilon(\vec{K}) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} K_i (\vec{M}^{-1})_{ij} K_j,$$

onde $\vec{M}$ é um tensor identificado com o tensor massa efetiva.

Como estamos trabalhando com arsenieto de gálio, o qual possui *gap* direto, podemos escrever

$$\epsilon(\vec{K}) = \frac{\hbar^2}{2} m^{-1} \vec{K}^2, \quad m^{-1} = \text{traço } \vec{M}.$$

Uma das mais importantes propriedades de semiconductor é a habilidade em mudar substancialmente suas características físicas pela adição de impurezas. Como estamos considerando silício, que é do grupo IV, incorporado ao arsenieto de gálio na posição do gálio, que é do grupo III, sobra um elétron desta ligação. Se em primeira aproximação desprezamos a diferença na estrutura cristalina gerada pela incorporação do silício pelo gálio, podemos representar a substituição do gálio pelo silício acrescentando uma carga $-e$ no sítio em que houve a troca. Esta carga fica, então, ligada ao íon doador. Se a energia de ligação do elétron na impureza é pequena, os níveis de energia podem ser determinados considerando o potencial da impureza como uma perturbação do potencial cristalino: aproximação de massa efetiva.

Duas observações importantes devem ser feitas em adição a aproximação de massa efetiva.

1. O campo elétrico da carga representando a impureza é reduzido pela constante dielétrica estática ϵ_0 do semicondutor.
2. Pode-se mostrar [4] usando teoria de perturbação e a aproximação de banda parabólica que um elétron num semicondutor dopado é descrito por uma equação de Schrödinger do tipo átomo de hidrogênio e com uma massa efetiva m^* .

Estas duas observações nos sugerem representar um elétron na presença de uma impureza de carga $+e$ como uma partícula de carga $-e$ e massa m^* , movendo-se no espaço livre na presença de um campo atrativo de carga e/ϵ_0 . este é exatamente o problema do átomo de hidrogênio, exceto pelo fato de que o produto $-e^2$ deve ser trocado por $-e^2/\epsilon_0$ e a massa pela massa efetiva. Assim, o raio de Bohr efetivo da órbita é

$$a_0^* = \frac{m}{m^*} \epsilon_0 0.53 \text{ \AA}$$

e a energia do estado fundamental

$$R^* = \frac{m}{m^*} \frac{1}{\epsilon_0^2} 13.6 \text{ eV}.$$

O raio de Bohr efetivo é da ordem de $100\text{\AA}$. Vemos, então, que a função de onda associada a este elétron se estende por muitos parâmetros de rede do cristal, o que justifica o uso da constante dielétrica estática.

Concluimos, desta forma, que usando a aproximação de massa efetiva e podemos eliminar o potencial cristalino da equação de Schrödinger. Com isso, o elétron se move no cristal somente sob a ação do potencial de impureza, mas com uma massa diferente.

Dentro deste formalismo, o Hamiltoniano deste sistema é escrito como

$$H_{\vec{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + v_{ef}(\vec{r}) \quad (2.8)$$

Resolvendo-se a equação (2.7) com (2.8), podemos escrever a densidade eletrônica como

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \|\psi_i(\vec{r})\|^2 f(\epsilon_i) \quad (2.9)$$

onde $f(\epsilon)$ é a distribuição de Fermi-Dirac, isto é,

$$f(\epsilon) = \left(1 + e^{(\epsilon - \epsilon_F)/k_B T}\right)^{-1}$$

com ϵ_F a energia de Fermi, k_B constante de Boltzmann e T a temperatura. Desde que $v_{ef}(\vec{r})$ depende da densidade $n(\vec{r})$ o problema tem que ser resolvido auto-consistentemente com auxílio da equação de Poisson.

Podemos mostrar, através de (2.7) e (2.8), que

$$\mu - v_{ef}(\vec{r}) \equiv \frac{\delta T[n]}{\delta n(\vec{r})}. \quad (2.10)$$

Notemos que para um sistema no estado fundamental, o elétron com energia ϵ_F (mais alta energia do estado de um elétron) tem sua função de onda ψ_i estendida. Com isso, podemos mostrar [29] que

$$\mu = \epsilon_F.$$

As equações (2.7), (2.8) e (2.9) são conhecidas como equações auto-consistentes de Kohn-Sham. Para determinarmos o potencial efetivo, devemos conhecer a energia cinética do sistema como funcional da densidade. Na próxima seção discutimos uma maneira prática de se determinar este funcional.

2.3 A aproximação de Thomas-Fermi

Nesta seção, tratamos da aproximação de Thomas-Fermi [24], [7] que é considerada a versão mais simples da teoria do funcional densidade. As origens da teoria do gás de elétrons não-homogêneo são encontradas na teoria estatística de Thomas-Fermi a qual estende as relações para o gás de elétrons homogêneo para o caso de gás de elétrons não-homogêneo.

Quando a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ – ou o potencial que a gera – não varia muito relativamente ao comprimento de onda característico dos elétrons, a aproximação de Thomas-Fermi representa um método bastante eficiente. Mesmo quando tal condição não se verifica para algumas regiões (por exemplo, próximo ao núcleo de um átomo, onde o potencial se torna singular), há um regime de validade da teoria de Thomas-Fermi, o qual denominamos limite estatístico de muitos elétrons. Existem, então, dois limites de validade para a teoria de Thomas-Fermi; um deles é o limite da densidade variando lentamente e o outro é o de altas densidades.

Uma demonstração rigorosa de que esta aproximação para átomos se torna exata no limite de grande carga nuclear é dada por Lieb e Simon [11]. Para os sistemas que consideramos, podemos fazer uma demonstração análoga simplesmente trocando a carga nuclear pelo número de doadores ionizados.

A aproximação de Thomas-Fermi nos dá a densidade $n(\vec{r})$ como função do potencial efetivo $v_{ef}(\vec{r})$, usado na equação de Schrödinger para um elétron. Como mencionado acima, esta aproximação usa relações de gás de elétrons localmente uniforme; assim, vamos considerar um gás de elétrons uniforme com N elétrons contido numa caixa cúbica de lado l e, portanto com densidade média igual a

$$n_0 = \frac{N}{l^3}.$$

No estado fundamental, todos os estados estão preenchidos até um estado de energia máxima e todos os estados acima deste estão vazios. Com isto, os estados ocupados podem ser representados por pontos no interior de uma esfera de raio K_F no espaço de momento. Portanto, na esfera de volume $\frac{4\pi}{3}K_F^3$ o número total de estados, que é igual ao número total de elétrons, é

$$N = 2 \frac{4\pi K_F^3/3}{(2\pi/l)^3} = \frac{l^3}{3\pi^2} K_F^3 \quad (2.11)$$

onde o fator 2 desta expressão surge pelo fato de que em cada orbital podemos colocar 2 elétrons com spins contrários e $(2\pi/l)^3$ é o volume ocupado por um estado no espaço recíproco. Assim,

concluimos que a densidade eletrônica média n_0 está relacionada com K_F por

$$n_0 = \frac{K_F^3}{3\pi^2}. \quad (2.12)$$

O próximo passo é assumir que, para o gás de elétrons não-homogêneo, podemos aplicar a equação (2.12) na posição $\vec{r}$. Assim, obtemos o número de elétrons por unidade de volume $n(\vec{r})$ no estado fundamental como

$$n(\vec{r}) = \frac{K_F(\vec{r})^3}{3\pi^2} \quad (2.13)$$

onde K_F agora deve ser especificado para cada posição $\vec{r}$.

Outra etapa importante para se chegar à densidade de carga de Thomas-Fermi é a construção da densidade de energia cinética t do gás de elétrons não-homogêneo. Vamos assumir que a energia cinética seja dada apenas pelo primeiro termo da expansão em *série de gradientes* de $n(\vec{r})$, ou seja, vamos supor que a densidade varie lentamente na nossa escala de comprimento. Com isso,

$$T[n] = \int t[n] d\vec{r},$$

onde $t[n]$ é a densidade de energia cinética para um sistema de elétrons não interagente e com densidade n . Esta deve ser uma boa aproximação se a variação de $n(\vec{r})$ é suficientemente lenta no espaço, tal que um elétron num ponto $\vec{r}$ vê essencialmente um meio homogêneo com densidade $n(\vec{r})$. O próximo termo desta expansão é, como mostrado em [29],

$$\frac{1}{72} \frac{\hbar^2}{2m^*} \int \frac{1}{n(\vec{r})} \left\| \frac{\partial n(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right\|^2 d\vec{r}.$$

Como estamos usando a aproximação de banda parabólica, a energia de um elétron livre com momentum $\vec{K}$ é $\epsilon_{\vec{K}} = (\hbar^2 \vec{K}^2)/2m^*$. Então, para determinarmos a densidade de energia, temos que fazer a soma

$$\sum_{K=0}^{K_F} \epsilon_{\vec{K}}$$

e dividir pelo volume total, o que resulta em

$$t[n] = \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m^*} K_F^5.$$

Usando (2.13), tiramos K_F como função de $n(\vec{r})$ e concluímos, então, que

$$t[n(\vec{r})] = \frac{3\hbar^2}{10m^*} (3\pi^2)^{2/3} [n(\vec{r})]^{5/3}. \quad (2.14)$$

Integrando a equação (2.14) no espaço, obtemos a energia cinética T do gás:

$$T[n(\vec{r})] = \frac{3\hbar^2}{10m^*} (3\pi^2)^{2/3} \int [n(\vec{r})]^{5/3} d\vec{r}. \quad (2.15)$$

Isto mostra que nesta teoria a energia cinética é determinada explicitamente pela densidade eletrônica. Usando esta equação juntamente com a equação (2.10) obtemos finalmente

$$n(\vec{r}) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} (\mu - v_{ef}(\vec{r}))^{3/2}. \quad (2.16)$$

Logo, como afirmado anteriormente, fica determinada a densidade de carga como função do potencial efetivo.

2.4 A densidade de estados

Algumas vezes é conveniente estudarmos a densidade de estados da equação (2.7). A distribuição de portadores por intervalo de energia num semiconductor é determinada pela densidade de estados e pela distribuição de Fermi-Dirac. A função densidade de estados nos diz como os estados de muitos elétrons (buracos) estão dispostos num intervalo de energia; também, a distribuição de Fermi-Dirac nos diz qual a probabilidade de que um desses estados esteja ocupado.

É essencial entendermos a distribuição de estados para que possamos entender o comportamento dos dispositivos óptico-eletrônicos, os quais se baseiam em sistemas bidimensionais. Para isto, definimos a densidade de estados não-local como

$$D(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon) = 2 \sum_i \delta(\epsilon - \epsilon_i) \psi_i^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}) \quad (2.17)$$

que contém as soluções da equação de Schrödinger de um elétron para um determinado potencial. Tendo definido a densidade de estados, a densidade eletrônica pode ser escrita como

$$n(\vec{r}) = \int_0^\infty D(\vec{r}, \epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad (2.18)$$

onde $f(\epsilon)$ é a distribuição de Fermi-Dirac e $D(\vec{r}, \epsilon)$ é a densidade de estado local, isto é, quando em $D(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon)$ fazemos $\vec{r} = \vec{r}'$.

2.5 A aproximação de Thomas-Fermi utilizando a densidade de estados

A densidade de estados dada na equação (2.17) pode ser escrita na forma de operador. Para isto, usamos a relação de completeza

$$\sum_i \psi_i^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.19)$$

e a equação de Schrödinger

$$H_{\vec{r}} \psi_i = \epsilon_i \psi_i. \quad (2.20)$$

Assim, a equação (2.17) fica

$$D(\vec{r}, \vec{r}', \epsilon) = 2 \delta(\epsilon - H_{\vec{r}}) \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.21)$$

já que a seguinte propriedade é válida: $F(A)\psi = F(\lambda)\psi$, onde A é um operador e ψ e λ auto-vetor e auto-valor de A respectivamente.

Vamos usar agora o conceito de função de um operador estendida em série de potências para a função $\delta(\epsilon - H_{\vec{r}})$ e para o operador $H_{\vec{r}}$. Assim, teremos $\delta(\epsilon - H_{\vec{r}})$ com termos em $H_{\vec{r}}$, $H_{\vec{r}} H_{\vec{r}}$ e assim sucessivamente. Tomando $H_{\vec{r}}$ como em (2.8), sua parcela que representa o operador energia cinética, dada em termos subsequentes da série, não atua somente sobre $\vec{r}$ na função δ de (2.21) mas também sobre $v(\vec{r})$. Desta maneira, usando aproximação de banda parabólica em (2.20), a representação de $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ e desprezando termos de ordem maiores que um em $v(\vec{r})$, podemos escrever

$$D(\vec{r}, \epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} [\epsilon - v_{ef}(\vec{r})]^{1/2} & \text{se } v_{ef}(\vec{r}) \leq \epsilon \\ 0 & \text{se } \epsilon < v_{ef}(\vec{r}) \end{cases} \quad (2.22)$$

Então, usando a equação (2.18) e (2.22), escrevemos a densidade eletrônica como

$$\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{v_{ef}(\vec{r})}^{\infty} \frac{[\epsilon - v_{ef}(\vec{r})]^{1/2}}{1 + e^{(\epsilon - \mu)/k_B T}} d\epsilon.$$

No limite de baixa temperatura, ou seja, $T \rightarrow 0$, temos

$$f(\epsilon) = \begin{cases} 1 & \text{se } \epsilon \leq \mu \\ 0 & \text{se } \epsilon > \mu \end{cases}$$

e, assim, recuperamos o resultado (2.16) obtido anteriormente.

A extensão de (2.22) para semicondutores com bandas não-parabólicas e isotrópicas (modelo de Kane) é dada [14] por

$$D(\vec{r}, \epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} [\epsilon - v_{ef}]^{1/2} [1 + \alpha(\epsilon - v_{ef})]^{1/2} [1 + 2\alpha(\epsilon - v_{ef})] & \text{se } \epsilon \geq v_{ef} \\ 0 & \text{se } \epsilon < v_{ef} \end{cases} \quad (2.23)$$

Nesta expressão é usado o modelo de Kane, ou seja,

$$E(K) = \frac{1}{2\alpha} \left[\left(1 + 4\alpha \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (2.24)$$

onde α representa o parâmetro de não-parabolicidade.

O problema auto-consistente, representado pelas equações (2.7), (2.9) e equação de Poisson, é simplificado por (2.18), (2.22) e equação de Poisson, já que temos essencialmente que resolver a equação de Poisson para (2.18). Além disso, os efeitos da temperatura podem ser facilmente incluídos. Com isto, passamos a denominar tal equação de Poisson por equação de Poisson-Thomas-Fermi.

A vantagem de se usar o formalismo da densidade de estados é a de que podemos descrever o movimento dos elétrons ligados e os elétrons na camada de acumulação com apenas uma equação (equação (2.18)).

A aproximação de Thomas-Fermi pode ser entendida da seguinte maneira: imaginemos um potencial suave, e o nível de Fermi localizado como na figura (2.1) abaixo. Dividindo o sistema sujeito a este potencial em um número grande de sistemas menores e supondo que em cada um destes elementos o potencial seja constante, escrevemos a equação de Schrödinger como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{r}^2} = (\epsilon - v_{ef}(\vec{r}))\psi$$

com

$$\epsilon' = \epsilon - v_{ef}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} K_F^2(\vec{r}).$$

Como a densidade de estados para elétrons livres é

$$D(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\epsilon')^{1/2} & \text{se } \epsilon' > 0 \\ 0 & \text{se } \epsilon' < 0 \end{cases}$$

concluimos imediatamente a equação (2.22).

Figura 2.1 - Diagrama esquemático de um potencial suave. O sistema sujeito a este potencial pode ser dividido em pequenos sistemas de tamanho Δr .

A densidade eletrônica com sua expressão como em (2.16) pode ser usada para se calcular a estrutura eletrônica das camadas de inversão ou de acumulação (por exemplo, para δ -doping, como vemos nos capítulos posteriores). Entretanto, se (2.16) é usada para MIS (Metal-Isolante-Semicondutor), por exemplo, temos uma aproximação que não é satisfatória; mais precisamente, a densidade eletrônica calculada desta maneira não satisfaz a condição de borda $n(z) \rightarrow 0$, se

$z \rightarrow 0$. De fato, como consequência da descontinuidade na interface, a aproximação mais simples para a condição de contorno para as funções de onda é $\psi_i(z = 0) = 0$. Na figura (2.2) mostramos uma comparação entre o resultado auto-consistente de Thomas-Fermi para a densidade de carga de uma heterojunção, extraído de Ando [30].

Figura 2.2 - Densidade de carga de Thomas-Fermi e auto-consistente para a camada de inversão numa heterojunção. A linha pontilhada representa a contribuição da sub-banda mais baixa.

Por analogia à aproximação de Thomas-Fermi, G. Paasch e H. Übensee [15] desenvolveram um método para ser utilizado quando o potencial é descontínuo, ou seja, quando o potencial varia muito num intervalo que é menor que algum comprimento característico do sistema. Eles consideraram um potencial tendo as seguintes características:

$$v(\vec{r}) = \begin{cases} v(\vec{r}) & \text{em um dos lados da interface} \\ \rightarrow \infty & \text{no outro lado da interface} \end{cases} \quad (2.25)$$

Verificaram também que seus resultados eram muito bons se comparados aos resultados exatos

de alguns modelos como, por exemplo, o potencial triangular.

No capítulo seguinte vamos aplicar a equação de Poisson-Thomas-Fermi

$$\nabla^2 v_{ef}(\vec{r}) = -4\pi \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \frac{e^2}{\epsilon_0} (\mu - v_{ef}(\vec{r}))^{3/2} + 4\pi N_D^+(\vec{r}) - 4\pi N_A^-(\vec{r})$$

para um semicondutor delta-dopado. Nesta equação, $N_D^+(\vec{r})$ é a densidade de doadores e $N_A^-(\vec{r})$ a densidade de aceitadores. Esta expressão para a equação de Poisson-Thomas-Fermi é válida quando desprezados os efeitos de muitos corpos.

Capítulo 3

Aplicação do Formalismo de Thomas-Fermi a Estruturas Delta-Dopadas

3.1 Dopagem tipo delta

3.1.1 Introdução

Este capítulo é dedicado a um tipo especial de dopagem de semicondutores, onde os dopantes são confinados em um ou mais planos da rede cristalina do semicondutor. Assim, a espessura da região dopada é comparada ao parâmetro de rede do cristal e é menor que outros comprimentos relevantes neste tipo de problema; por exemplo, o comprimento de onda de *de Broglie* do portador livre (elétron ou buraco). Tal perfil de dopagem pode ser matematicamente descrito pela função delta de Dirac. Semicondutores com este tipo de distribuição de dopantes são denominados de várias formas, entre elas dopagem-delta (*delta-doping*), dopagem planar, dopagem-ponta (*spike-doping*). No restante deste trabalho, usaremos a nomenclatura original *delta-doping*, δ - *doping* ou *dopagem-delta*.

É considerado aqui o silício (*Si*) como dopante incorporado ao arsenieto de gálio (*GaAs*). Outros tipos de cristais e dopantes têm sido estudados como, por exemplo, *Sb* incorporado a *Si* [17] e *Si* incorporado a *InSb* [5].

O *delta-doping* tem se mostrado ser de grande importância na aplicação em dispositivos eletrônicos e entre estes é o transistor de efeito de campo (δ - *FET*) o mais destacado. O

esquema de um δ - *FET* está mostrado abaixo.

Figura 3.1 - Ilustração de um transistor de efeito de campo: δ - *FET*.

Os transistores de efeito de campo em geral podem ser considerados como resistências variáveis controladas pelos campos elétricos associados às junções *pn*. Consideremos o dispositivo na figura acima que possui um contato ôhmico – a fonte – em uma extremidade e um contato similar – o dreno – na outra. Os elétrons que se movem da fonte para o dreno passam através de um canal em virtude da tensão V_d do dreno. As tensões aplicadas à porta determinam a largura deste canal, provocando, desta maneira, variações na corrente.

O δ - *FET* tem certas vantagens com relação aos transistores de efeito de campo convencionais. Entre eles estão:

- menor distância da porta para o canal
- grande transcondutância
- alta densidade do gás de elétrons quase-bidimensional
- alta voltagem de ruptura (*breakdown*)

Uma importante característica dos *FETs* é a sua transcondutância (g). Ela descreve a variação da corrente de dreno com relação à voltagem de porta mantendo-se a voltagem de dreno constante, ou seja,

$$g = \left. \frac{\partial I}{\partial V_p} \right|_{V_d = cte.},$$

e é um parâmetro importante ao se projetar um circuito. Por exemplo, quando se projeta um amplificador com um *FET*, quanto maior a transcondutância, maior é o ganho deste amplificador.

Pode se expressar [9] a transcondutância máxima como

$$g_{max} = \frac{1}{L_p} (e\mu_0 w_p n_{2D}) \left[1 + \left(\frac{e\mu_0 d n_{2D}}{\epsilon v_s L_p} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (3.1)$$

onde L_p e w_p representam a largura e o comprimento da porta, μ_0 a mobilidade, v_s a velocidade do elétron, n_{2D} a concentração do gás de elétrons e d a distância do plano de dopantes à porta.

De acordo com a equação (3.1) acima, um *FET* eficiente deve possuir alta densidade de elétrons e os elétrons devem estar próximos à porta (d pequeno). Em transistores de efeitos de campo convencionais (*HEMT*) a distância d é da ordem de $600\text{\AA}$. Já no $\delta - FET$ esta distância é da ordem de $300\text{\AA}$. É sabido também que a densidade do gás de elétrons é maior no *delta-doping* que em outros tipos de potenciais de confinamento. Outra vantagem do $\delta - FET$ é sua voltagem de ruptura do sistema. Também, medidas de alta frequência têm sido feitas com o $\delta - FET$ [12]. Para determinados parâmetros da porta o sistema responde na faixa de *GHz*.

Neste trabalho, o problema do $\delta - doping$ é tratado sob o ponto de vista de Thomas-Fermi, visto no capítulo anterior. Será mostrado que este ponto de vista concorda muito bem com uma teoria mais elaborada, ou seja, auto-consistentemente.

3.1.2 O conceito de *delta-doping*

O conceito básico de δ - *doping* em *GaAs* está ilustrado na figura (3.2) abaixo.

Figura 3.2 - Semicondutor *GaAs* crescido na direção $\langle 100 \rangle$.
É mostrada também a distribuição de dopantes numa monocamada do cristal.

Os átomos de silício (doadores) estão, em princípio, situados em um único plano atômico do cristal (plano (100)). Os doadores ionizados formam uma lâmina contínua de carga positiva, onde a fração de cobertura planar pelas impurezas pode chegar a diversos doadores por unidade de área de Bohr efetiva. Como dito anteriormente, a distribuição das impurezas pode ser descrita pela função delta de Dirac para o caso de não haver grande difusão dos dopantes. Devido à atração eletrostática, os elétrons permanecem próximos a seus pares ionizados formando, assim, um gás de elétrons quase-bidimensional no poço de potencial produzido pela lâmina de carga positiva.

O potencial do δ - *doping* pode ser entendido olhando para a figura (3.3), assumindo o *Si* como dopante em *GaAs*:

Figura 3.3 - Esquema ilustrando as várias regiões da banda de condução de um semicondutor delta-dopado

O potencial devido à camada de dopantes ionizados é como o potencial de um plano infinito de cargas, ou seja, tipo V (região I da figura). Devido à atração eletrostática, os elétrons blindam o potencial da região I suavizando-o (região II). Se o sistema não é neutro, o potencial deve ter a forma inclinada como a da região III e ficando constante longe do plano de dopantes (região IV).

Podemos também entender este potencial como o encurvamento do ponto Γ da banda de condução. Se considerarmos que existe um fundo de impurezas aceitadoras intrínstico (fundo residual aceitador), a região IV do potencial deve coincidir com o nível de aceitador. No caso de desprezarmos o fundo residual aceitador, o potencial na região IV deve coincidir com o nível de doador.

Como dito anteriormente, temos um gás de elétrons quase-bidimensional sendo, assim, um problema de muitos corpos. A técnica utilizada para resolver este problema é descrita no Capítulo 2.

Dois fenômenos diferenciam este gás de elétrons de outros sistemas quase-bidimensionais:

1. Mesmo para a concentração de doadores moderada, muitas sub-bandas – ou níveis – são ocupadas
2. As funções de onda são estendidas sobre os doadores ionizados que formam o potencial triangular (tipo V).

Podemos aqui observar que, devido à proximidade com que o elétron permanece do átomo de impureza ionizado, os elétrons que ocupam o estado fundamental têm uma mobilidade mais baixa que os elétrons que ocupam os estados excitados.

A maior dificuldade neste tipo de problema concentra-se na necessidade da determinação do potencial efetivo que, em geral, é feito auto-consistentemente. Apesar do cálculo auto-consistente ter se mostrado em bom acordo com os resultados experimentais, este método pode se tornar dispendioso, ou seja, consumir um tempo computacional muito grande.

Muitas investigações teóricas têm sido feitas sobre as sub-bandas eletrônicas deste tipo de problema. Zrenner *et al* [2] usaram o método auto-consistente para determinar os níveis eletrônicos para o caso em que tem-se camada de dopantes difusa (com difusão de dopantes) e não-parabolicidade da banda. Degani [26] calculou os níveis de energia para um modelo mais realista de δ – *doping*, onde é considerada a variação de temperatura; considerou também dois tipos de distribuição de dopantes: uniforme e tipo gaussiana. Degani estudou ainda os efeitos de muitos corpos. Liu *et al* [31] desenvolveram as propriedades eletrônicas deste sistema, simulando o potencial tipo delta por uma forma poligonal e usaram funções de onda tipo senoidal a qual se anula nas extremidades do potencial (este esquema está mostrado na figura (3.4)).

Figura 3.4 - Forma poligonal da banda de condução de um semiconductor delta-dopado. Os valores $E_0, E_1, E_2, \dots$ são encontrados analiticamente.

O fato de os elétrons ocuparem muitos estados excitados sugere que uma aproximação semi-clássica possa ser usada para descrever este tipo de problema. Esta idéia é desenvolvida nas próximas seções para o caso de uma delta isolada e para o caso de multi-deltas periodicamente espaçadas.

3.1.3 A equação de Thomas-Fermi para uma delta simplificada

A teoria de Thomas-Fermi desenvolvida nesta subseção se baseia no Capítulo 2 e no trabalho desenvolvido por Ioriatti [23].

Considerar uma delta simplificada significa fazer algumas restrições no modelo exato; neste caso, são desprezados os efeitos da temperatura, a difusão dos dopantes, os efeitos de muitos corpos, o fundo de impurezas aceitadoras e a não-parabolicidade da banda.

- Os efeitos da temperatura:

Ao considerarmos a temperatura diferente de zero, a energia cinética do gás de elétrons aumenta, pois esta cresce com a temperatura. Com isto, alguns estados vazios passam a ser ocupados e outros ocupados eventualmente se tornam vazios, ou diminuem sua

ocupação. A distribuição de Fermi-Dirac nos dá a probabilidade de um estado de energia ϵ estar ocupado. Esta distribuição difere muito pouco nos casos de $T = 0$ (função degrau) e $T \neq 0$. Desta forma, não é esperado uma grande diferença nos resultados ao se considerar $T \neq 0$.

- A difusão dos dopantes:

Schubert mostrou usando cálculo variacional [9] que pode-se definir um semiconductor delta-dopado como uma estrutura em que a distribuição de dopantes está confinada a uma região estreita comparada com a extensão da função de onda do estado fundamental. Por exemplo, para uma densidade de dopantes igual a 5×10^{12} dopantes por cm^2 , a extensão da função de onda do estado fundamental é aproximadamente $50\text{\AA}$. Conclui-se que não faz diferença nos resultados finais se a distribuição de dopantes está confinada numa região de $1\text{\AA}$ ou $20\text{\AA}$; ambas podem ser consideradas do tipo delta. Na seção 3.3 incluímos estes efeitos para tornar os resultados um pouco mais realistas.

- Os efeitos de muitos corpos:

É sabido que os efeitos de muitos corpos, correlação e troca, não são muito importantes para valores da dopagem que estejam na faixa de 10^{12} a 10^{13} doadores por cm^2 . Degani mostrou [26] que os efeitos de muitos corpos são menos importantes que os efeitos da temperatura diferente de zero. Como em todo este trabalho usamos temperatura igual a zero e densidade de doadores na faixa citada acima, podemos desprezar, portanto, estes efeitos.

- O fundo de impurezas aceitadoras:

Seus efeitos são incluídos na seção 3.3.

- A não-parabolicidade da banda:

Zrenner *et al* [2] calcularam os números de ocupação para diversas sub-bandas considerando a não parabolicidade. Pode-se notar que a alteração dos resultados é muito pequena para a densidade de doadores até 10^{13} doadores por cm^2 .

Nesta primeira parte consideramos que os átomos doadores estão concentrados uniformemente em um único plano perpendicular à direção de crescimento z . É usada também a aproximação de massa efetiva para descrever os elétrons no semiconductor. O fundo não-intencional de aceitadores é considerado desprezível.

Se o raio de Bohr efetivo a_0^* e a energia de Bohr efetiva R^* , que para $GaAs$ são $98.7\text{\AA}$ e 5.87meV respectivamente, são utilizadas como unidades naturais de distância e energia, podemos escrever a densidade de estados da mesma maneira que no Capítulo anterior, ou seja,

$$D(\epsilon, \vec{r}) \equiv D(\epsilon, z) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2} (\epsilon - v_{ef}(z))^{1/2} & \text{se } \epsilon \geq v_{ef}(z) \\ 0 & \text{se } \epsilon < v_{ef}(z) \end{cases} \quad (3.2)$$

A partir desta densidade de estados, podemos determinar a densidade eletrônica por

$$n(z) = \int_0^\infty D(\epsilon, z) f(\epsilon) d\epsilon,$$

onde $f(\epsilon)$ é a distribuição de Fermi-Dirac. Como foi dito anteriormente, trabalhamos com a temperatura igual a zero; desta forma, a distribuição de Fermi-Dirac fica sendo $\theta(\mu - \epsilon)$, onde θ é a função degrau. Logo, a densidade eletrônica pode ser escrita como

$$n(z) = \frac{1}{2\pi^2} \int_{v_{ef}(z)}^\infty (\epsilon - v_{ef}(z))^{1/2} \theta(\mu - \epsilon) d\epsilon.$$

Podemos facilmente resolver a integral acima e concluir que

$$n(z) = \frac{1}{3\pi^2} (\mu - v_{ef}(z))^{3/2}, \quad (3.3)$$

a qual chamamos *densidade eletrônica de Thomas-Fermi*.

É fácil notar que, em geral, este resultado não pode ser exato, já que quando $v_{ef}(z) > \mu$, não podemos usá-lo; o melhor que podemos fazer neste caso é impor que $n(z) = 0$ nesta região

classicamente proibida. Observemos que isto não está de acordo com a mecânica quântica, pois as funções de onda dos elétrons podem ter uma amplitude diferente de zero nesta região. Em nosso caso, não temos este tipo de problema, pois, como sabemos, não existem estados ocupados com energia maior que a energia de Fermi.

O potencial efetivo v_{ef} que devemos calcular para transformar este problema de muitos corpos num problema equivalente de um corpo é a soma do potencial de Hartree com o potencial de correlação e troca (Capítulo 2) o qual será desprezado. O potencial de Hartree é devido à interação eletrostática dos elétrons entre si e com o plano de dopantes ionizados. Este potencial atua como uma blindagem do potencial externo o qual é devido ao plano de doadores ionizados. Uma vez determinada a densidade eletrônica, podemos calcular v_{ef} usando a equação de Poisson abaixo:

$$\frac{d^2 v_{ef}}{dz^2} = -8\pi [n(z) - N_D^+(z)], \quad (3.4)$$

onde $n(z)$ é a densidade eletrônica de Thomas-Fermi determinada anteriormente e $N_D^+(z)$ é a densidade de doadores ionizados.

Como dito anteriormente, podemos representar a distribuição de dopantes pela função delta de Dirac, ou seja, $N_D^+(z) = n_D \delta(z)$, onde n_D é a densidade areal de impurezas que, no sistema de unidades escolhido, é dada como o número de doadores por unidade de área de Bohr efetiva.

Substituindo a densidade eletrônica de Thomas-Fermi e a densidade de impurezas ionizadas da equação de Poisson, encontramos uma equação diferencial de segunda ordem, a qual chamaremos equação de Poisson-Thomas-Fermi:

$$\frac{d^2 v_{ef}}{dz^2} = -\frac{8}{3\pi} (\mu - v_{ef}(z))^{3/2} + 8\pi n_D \delta(z). \quad (3.5)$$

Esta equação é válida para $\mu > v_{ef}(z)$. Para $\mu < v_{ef}(z)$, a equação de Thomas-Fermi fica

$$\frac{d^2 v_{ef}}{dz^2} = 0,$$

já que não existe estados ocupados com energia maior que μ .

Existem três tipos de soluções da equação (3.5) (nos itens abaixo, estamos denotando por n_S o número de elétrons por unidade de área de Bohr efetiva):

1. Quando o sistema não é neutro, ou seja, $n_D > n_S$. Isto significa que nem todos os átomos doadores foram ionizados implicando em $\frac{dv_{ef}}{dz} > 0$, para $z \rightarrow \infty$
2. Quando o sistema é neutro, ou seja, $n_D = n_S$. Neste caso, todos os átomos doadores estão ionizados e contribuem com apenas um elétron. Assim, $\frac{dv_{ef}}{dz} = 0$, para $z \rightarrow \infty$
3. Soluções onde $n_D < n_S$. Esta classe de soluções é impossível de ocorrer neste tipo de problema. Neste caso, $\frac{dv_{ef}}{dz} < 0$, para $z \rightarrow \infty$

Estamos interessados na segunda classe dentre estas possíveis soluções, ou seja, trataremos o sistema como neutro. Resolvemos a equação (3.5) usando quadraturas – multiplicando ambos os lados da equação por $\frac{dv_{ef}}{dz}$ e integrando em z – e impondo as seguintes condições de contorno:

- neutralidade de carga: $\frac{dv_{ef}}{dz} = 0$, para $z \rightarrow \infty$
- presença do plano de doadores ionizados, gerando um campo elétrico constante: $\frac{dv_{ef}}{dz} = 4\pi n_D$, para $z \rightarrow 0^+$

Com este procedimento, obtemos a seguinte expressão para $v_{ef}(z)$:

$$v_{ef}(z) - \mu = -\frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4} \quad (3.6)$$

onde $\alpha = 2/15\pi$ e $z_0 = [\alpha^3/\pi n_D]^{1/5}$.

Tendo calculado o potencial, podemos calcular a energia do estado fundamental deste sistema. Usando a expressão (2.4) desprezando o termo de correlação e troca, escrevemos a energia como funcional da densidade eletrônica; encontramos, assim,

$$E_{TF}[n(z)] = \frac{3}{5} \int [3\pi^2 n(z)]^{2/3} n(z) dz + 4\pi n_D \int |z| n(z) dz - 2\pi \int \int n(z) n(z') |z - z'| dz dz'. \quad (3.7)$$

Como feito no capítulo anterior, tomando a derivada funcional desta expressão podemos mostrar a equação de Thomas-Fermi. Além disso, usando a densidade de Thomas-Fermi calculada em (3.3) e resolvendo as integrais, encontramos a energia do estado fundamental:

$$E_0 = \frac{5\alpha^2}{9z_0^4} n_D.$$

Como dito no Capítulo 2, a teoria de Thomas-Fermi é exata no limite de altas densidades. Se consideramos agora uma pequena variação deste limite, podemos obter a correção de mais baixa ordem na densidade de energia cinética de Thomas-Fermi. Tomando o segundo termo na expansão em gradientes da energia cinética como feito em [29], sua densidade fica:

$$t(n) = \frac{3}{5} (3\pi^2 n)^{2/3} n + \frac{1}{36} \frac{|dn/dz|^2}{n}.$$

Introduzindo esta correção na equação (3.7), encontramos uma correção para a energia do estado fundamental, que é

$$\Delta E_0 = \frac{5\alpha^2}{7z_0^2} n_D.$$

Nesta expressão, como $z_0 \sim n_D^{-1/5}$, então $\Delta E_0 \sim n_D^{7/5}$.

Neste ponto se torna necessário fazermos uma comparação entre a correção na energia do estado fundamental ΔE_0 , calculada acima, e a energia de correlação e troca as quais estamos desprezando. Então, usando a aproximação de densidade local, encontramos (Capítulo II) uma expressão para a energia de correlação e troca. Como mostrado em [29], a densidade de energia de correlação e troca é $\sim n(z)^{4/3}$. Usando agora a densidade de Thomas-Fermi, calculamos

esta energia e observamos que ela é $\sim n_D^{7/5}$, ou seja, da mesma ordem que ΔE_0 . Desde que desprezamos os termos de correlação e troca, devemos também desprezar esta correção. Concluimos, com isto, que a aproximação de Thomas-Fermi é equivalente à aproximação de Hartree.

3.1.4 A estrutura eletrônica do delta ideal

Como dito anteriormente, o problema de muitos corpos fica reduzido ao problema de um único elétron se movendo num potencial efetivo $v_{ef}(z)$, o qual foi determinado em (3.6).

Devido à simetria translacional no plano x, y , as funções de onda, na aproximação de massa efetiva, podem ser escritas como

$$\psi_{n\vec{K}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{K}_{//}\vec{r}_{//}}}{\sqrt{A}} \varphi_n(z) \quad (3.8)$$

e o espectro de energia dado por

$$E_n(\vec{K}) = \epsilon_n + \vec{K}_{//}^2,$$

onde $\vec{K}_{//}$ é o vetor de onda paralelo ao plano x, y e $\vec{r}_{//} = (x, y)$, ou seja, o elétron é livre na direção paralela ao delta. A é a área da amostra por unidade de área de Bohr efetiva e $\varphi_n(z)$ e ϵ_n são obtidos resolvendo-se a equação de Schrödinger unidimensional:

$$-\frac{d^2}{dz^2} \varphi_n(z) + v_{ef}(z) \varphi_n(z) = \epsilon_n \varphi_n(z) \quad (3.9)$$

Notemos que na equação (3.6) podemos, sem perda de generalidade, tomar $\mu = 0$, pois caso contrário temos somente uma mudança de escala da energia. Assim, usando (3.6) com $\mu = 0$ e (3.9) ficamos com

$$-\frac{d^2}{dz^2} \varphi_n(z) - \frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4} \varphi_n(z) = \epsilon_n \varphi_n(z) \quad (3.10)$$

Como o potencial é par, as funções de onda são pares ou ímpares. Desta forma, podemos fazer z positivo e tirarmos o módulo na equação (3.10).

Vamos procurar soluções exatas para a equação (3.10) acima. Para isto, definimos uma nova variável

$$x = \sqrt{\xi}(\alpha z + z_0), \quad \text{onde} \quad \xi = \sqrt{-\epsilon_n}/\alpha.$$

Com isto, a equação (3.10) é escrita como

$$x^2 \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) + \xi \left(\frac{1}{x^2} - x^2 \right) \varphi_n(x) = 0 \quad (3.11)$$

Com base na aproximação semi-clássica WKB, propomos para a equação diferencial acima as soluções

$$\varphi(x) = \sqrt{\lambda(x)} \operatorname{sen} \left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')} \right], \quad x > 0$$

ou então

$$\varphi(x) = \sqrt{\lambda(x)} \cos \left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')} \right], \quad x > 0,$$

onde a constante J e $\lambda(x)$ são desconhecidos e devemos, portanto, determiná-los. Para determinarmos J , nós usamos o fato de que é o Wronskiano de duas soluções linearmente independentes (ver Apêndice I).

Sabemos que $\varphi(x) \rightarrow 0$ se $x \rightarrow \infty$; então, da solução do tipo cosseno concluímos que a forma assintótica de $\lambda(x)$ deve ser tal que

$$\lambda(x) \rightarrow 0 \quad \text{se} \quad x \rightarrow \infty.$$

Com esta informação sobre a forma assintótica de $\lambda(x)$, podemos eliminar a solução do tipo cosseno e ficar somente com a do tipo seno.

As condições de contorno para as funções de onda são

$$\left. \frac{d\varphi(z)}{dz} \right|_{z=0} = 0, \text{ para estados pares}$$

$$\varphi(z = 0) = 0, \text{ para estados ímpares.}$$

Assim, $z = 0 \Rightarrow x = \sqrt{\xi} z_0$; logo, encontramos

$$J \int_{\sqrt{\xi} z_0}^{\infty} \frac{dx'}{\lambda(x')} = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.12)$$

para estados ímpares, e

$$J \int_{\sqrt{\xi} z_0}^{\infty} \frac{dx'}{\lambda(x')} = n\pi + \arctan(2J/\lambda'(\sqrt{\xi} z_0)), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.13)$$

para estados pares. Estas relações são as regras de quantização de Bohr-Sommerfeld para o espectro na equação de Schrödinger (3.10).

Temos ainda que determinar J e $\lambda(x)$ que até então são desconhecidos. Substituindo a função de onda na equação de Schrödinger, ficamos com a equação diferencial dada a seguir – detalhes estão contidos no Apêndice II.

$$4J^2 = 2\lambda''\lambda - \lambda'^2 + 4\xi\lambda^2\left(\frac{1}{x^4} - 1\right). \quad (3.14)$$

Como dito anteriormente, J é o Wronskiano da equação diferencial (3.10) e, portanto, não depende de x , ou seja, o lado direito da equação (3.14) é uma constante. Para determinarmos J , podemos tomar a função do lado direito num ponto qualquer – por exemplo, $x = 1$. Assim, conhecendo-se $\lambda(x)$ temos J imediatamente conhecido.

Para determinarmos $\lambda(x)$, temos que resolver a equação diferencial de segunda ordem não-linear e não-homogênea (3.14). Para facilitar, fazemos a derivada com relação a x desta expressão e ficamos com uma equação diferencial linear de terceira ordem e homogênea:

$$x^3 \lambda''' + 4\xi x \lambda' \left(\frac{1}{x^2} - x^2 \right) - 8 \frac{\xi \lambda}{x^2} = 0. \quad (3.15)$$

Para resolver esta equação, utilizamos o método de Frobenius [6]. Este método propõe uma série de potências como solução da equação diferencial. A série de potências $\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$ é uma série de MacLaurin representando uma solução da equação diferencial, desde que seja analítica em $x = 0$. Se a solução não é analítica em $x = 0$, devemos propor uma série de Laurent da forma $\sum_{n=-m}^{\infty} c_n x^n$ onde m é a ordem do pólo. Neste caso, analisando as singularidades da equação diferencial que desejamos resolver, propomos a seguinte solução para $\lambda(x)$:

$$\lambda(x) = x \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n x^{2n},$$

que deve ser convergente $\forall x, x \neq 0, \infty$. Substituindo esta expressão em (3.15), chegamos a uma fórmula de recorrência de três termos (detalhes deste desenvolvimento estão no Apêndice III) dada por

$$\begin{aligned} c_0 &= 1 \\ \frac{c_n}{c_{n-1}} &= \frac{4\xi}{2n(2n+1) + 4\xi \frac{2n+1}{2n-1} \frac{c_{n+1}}{c_n}}, \quad n \geq 1. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Notemos que $c_n/c_{n-1} \rightarrow 0$ se $n \rightarrow \infty$, mostrando, assim, que a série é convergente. Notemos também que após alguns cálculos (Apêndice III), $\lambda(x)$ pode ser escrita como

$$\lambda(x) = x \sum_{n=0}^{\infty} c_n [x^{2n} + (-1)^n x^{-2n}], \quad \text{com } c_0 = 1. \quad (3.17)$$

Podemos ver que $\lambda(x) \rightarrow \infty$ se $x \rightarrow \infty$, como requerido anteriormente. Calculamos os coeficientes da série por meio de frações continuadas (Apêndice III).

Com a determinação de $\lambda(x)$ concluímos a solução do problema, pois como foi dito, a partir de $\lambda(x)$ calculamos J e, com isto, $\varphi(x)$. As auto-energias do delta são determinadas a partir dos valores de ξ os quais são determinados pelas regras de quantização (3.12) e (3.13).

3.2 Uma delta isolada com difusão de dopantes e fundo residual aceitador

Nesta parte do trabalho introduzimos dois efeitos importantes no formalismo descrito no Capítulo 2 e na seção anterior; são eles: os efeitos da difusão dos dopantes e da existência de um fundo residual aceitador. Desta forma, tornamos os resultados um pouco mais realistas, já que estes efeitos são intrínsecos a amostras reais crescidas em laboratório.

Quando dizemos que os dopantes estão localizados em uma única camada do cristal semiconductor estamos, obviamente, nos referindo a uma aproximação. Esta aproximação pode não ser boa se, como comentamos na seção anterior, a função de onda do estado fundamental se estender até um certo valor limite que depende da densidade de dopantes. Na figura (3.5) mostramos um esboço esquemático de um semiconductor delta dopado onde as impurezas, neste caso Si, estão localizadas num único plano. Na figura (3.5) está mostrado também o potencial com difusão.

Figura 3.5 - Esquema da banda de condução e níveis de energia para vários valores de difusão dos dopantes

Muitos trabalhos desenvolvidos nesta linha têm assumido que a distribuição de dopantes esteja num único plano. Por outro lado, existe evidências experimentais de que esta distribuição se estende, na verdade, por alguns parâmetros de rede do cristal [3] e [20]. Esta questão da difusão foi discutida por Lee *et al* [16] que concluiu que sob certas condições de crescimento do cristal uma difusão de 126 Å ocorria. Zrenner *et al* [1] concluíram que uma difusão de 195 Å ocorre em semiconductor altamente dopado.

Contrariamente a estes trabalhos citados acima, Schubert *et al* [8] demonstraram que sob condições de crescimento apropriadas é possível crescer um semiconductor delta dopado no qual os dopantes estejam localizados em uma monocamada. Schubert mostrou também, usando uma técnica chamada C-V (capacitância-voltagem), que a difusão não é relevante na sua amostra. O problema está na interpretação das medidas de C-V, as quais requerem o conhecimento da estrutura de sub-bandas. Ele comparou os resultados do perfil de C-V teórico e experimental encontrando o gráfico da figura (3.6) abaixo.

Figura 3.6 - Comparação entre o cálculo teórico e resultados experimentais da largura da curva de C-V para o semiconductor delta-dopado. O acordo teoria-experimento só está satisfeito se a difusão for desprezada.

Os resultados teórico e experimental somente estão em acordo se for assumida a ausência de difusão. A questão da interpretação das medidas de C-V é polêmica e está em aberto até o presente momento.

Neste trabalho assumimos que as impurezas doadoras estão distribuídas homogeneamente

numa camada de espessura d , ou seja, a densidade de dopantes é uma constante. Degani [26] considera também o caso da distribuição de dopantes com uma forma Gaussiana e mostra que a diferença deste caso com o de distribuição constante com relação aos níveis de energia e à ocupação destes níveis se torna relevante à medida que d aumenta.

3.2.1 A estrutura eletrônica do *delta-doping* com difusão de doadores

Com a suposição da densidade de dopantes ser constante em toda a camada de espessura d , podemos escrevê-la como

$$N_D^+(z) = \frac{n_D}{d} \theta\left(z + \frac{d}{2}\right) \theta\left(\frac{d}{2} - z\right), \quad (3.18)$$

e não como uma delta de Dirac, como feito na seção anterior.

Com a inclusão da difusão dos dopantes não podemos mais resolver este problema de maneira analítica; temos, então, que recorrer a métodos numéricos para resolver as equações diferenciais de Schrödinger e de Poisson-Thomas-Fermi. O que se altera com a inclusão da difusão dos dopantes é a parte da equação de Poisson-Thomas-Fermi que descreve a interação dos elétrons com o potencial externo alterando, assim, o potencial efetivo. Consequentemente, a equação de Schrödinger também muda.

Fazendo-se a mudança na equação de Poisson-Thomas-Fermi como proposto acima, ficamos com

$$\frac{d^2}{dz^2} v_{ef}(z) = -\frac{8}{3\pi} (\mu - v_{ef}(z))^{3/2} + \frac{8\pi n_D}{d} \theta\left(z + \frac{d}{2}\right) \theta\left(\frac{d}{2} - z\right). \quad (3.19)$$

Esta equação é resolvida numericamente sujeita às condições de contorno

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{dv_{ef}}{dz} \Big|_{z=0} = 0 & : \text{campo elétrico nulo no centro da} \\ & \text{distribuição de dopantes} \\ \frac{dv_{ef}}{dz} \Big|_{z=\infty} = 0 & : \text{neutralidade da carga} \\ v_{ef}(z) = 0, \quad z \rightarrow \infty & : \text{escolhemos a origem sob a banda de condução} \\ & \text{que é o valor assintótico de } v_{ef}(z) \end{array} \right.$$

Calculado o potencial efetivo, o substituímos na equação de Schrödinger e novamente por métodos numéricos podemos resolvê-la encontrando, assim, os auto-valores e as auto-energias.

3.2.2 O *delta-doping* com fundo residual aceitador e difusão de dopantes

O fundo residual do tipo-p é uma dopagem intrínseca do material introduzida não intencionalmente no crescimento. Este fundo de dopantes aceitadores tem um efeito prejudicial à mobilidade eletrônica. Além disso, ele exerce influência sobre os níveis de energia do delta e, assim, na quantidade de carga contida em cada sub-banda. Não consideramos aqui os efeitos do espalhamento dos elétrons por estas impurezas, mas a diminuição dos números de ocupação de cada sub-banda é um efeito observado.

O fato de o movimento na direção z estar ligado tanto ao potencial das impurezas residuais quanto ao potencial criado pelos próprios elétrons significa que a distribuição de carga modifica o potencial do delta.

A presença do fundo residual aceitador desloca o nível de Fermi para o nível de aceitadores já que, exceto pela dopagem do delta, o semiconductor é dopado com aceitadores. Tais estados são ocupados por elétrons tomados do poço do delta, produzindo uma região de cargas negativas estendida de uma distância l_A ao longo do eixo z – chamada camada de depleção – baixando-se, assim, o nível de Fermi. O comprimento l_A da camada de depleção é determinado pela forma

da banda de condução; mais precisamente, pela distância onde o encurvamento da banda deixa de ser notado.

A maneira de se calcular o potencial é a mesma como feita até agora, com exceção do número de elétrons que é alterado (isto é, não temos o número de elétrons igual ao número de doadores mas sim menor), pois os aceitadores tomam elétrons do poço. Diminuindo-se o número de elétrons no poço, os efeitos de blindagem do potencial externo são amenizados e, portanto, o poço deve se tornar muito mais profundo. Devemos, então, introduzir na equação de Poisson-Thomas-Fermi a densidade de aceitadores $N_A^-(z)$.

Neste ponto se faz necessária a seguinte observação: de uma forma específica, deveríamos escrever a densidade de dopantes no semiconductor de uma maneira mais rigorosa; assim, escrevemos a densidade de aceitadores como

$$\sigma_A^+ = \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r} - \vec{R}),$$

onde $\vec{R}$ representa os sítios efetivamente ocupados pelo aceitador ionizado. Estes sítios são distribuídos de forma randômica no plano x, y e não randômica ao longo do eixo z . A aproximação usual em semicondutores dopados é fazer-se uma média espacial da densidade de impurezas; assim temos

$$N_A^+(z) = \overline{\sigma_A^+} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \delta(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{R},$$

com Ω representando o volume macroscópico, isto é, com muitas impurezas. Vamos agora supor que esta densidade esteja distribuída sobre todo o volume da amostra uniformemente. Desta maneira, a equação de Poisson-Thomas-Fermi fica

$$\frac{d^2}{dz^2} v_{ef} = -\frac{8}{3\pi} (\mu - v_{ef})^{3/2} + \frac{8\pi}{d} n_D \theta(z + \frac{d}{2}) (\frac{d}{2} - z) - 8\pi n_A, \quad (3.20)$$

com n_A representando o número de aceitadores por unidade de volume de Bohr efetivo.

Como dito anteriormente, o número de elétrons no delta não é mais igual ao número n_D de átomos doadores, pois cada átomo aceitador toma um elétron. Vamos supor que cada impureza aceitadora tome um elétron do poço; podemos, então, escrever o número n_S de elétrons restantes no delta como

$$n_S = n_D - n_A l_A.$$

Para saber o número de elétrons restantes no sistema devemos calcular o tamanho da camada de depleção l_A . Este cálculo é feito no Apêndice IV, onde consideramos que todos os aceitadores estão ionizados entre $z = 0$ e $z = l_A/2$; assim,

$$l_A = \sqrt{\frac{E_g - E_A}{\pi n_A}},$$

onde E_g é a energia do *gap* do GaAs. Como $E_g \gg E_A$, vamos supor $E_g - E_A \simeq E_g$. A energia do *gap* para o GaAs é 1519.0/5.87.

Para resolver a equação diferencial (3.20) devemos determinar as condições de contorno para o potencial $v_{ef}(z)$. Calculamos também no Apêndice IV o campo elétrico do sistema para valores de z tais que $z_e/2 \leq z \leq l_A/2$, onde z_e é o tamanho da camada de acumulação. Sabendo-se o campo elétrico em $z = z_e/2$ obtemos imediatamente a condição de contorno para o potencial:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_{ef}}{dz} \Big|_{z=z_e/2} = 4\pi \sqrt{n_A E_g / \pi} \\ v_{ef}(z_e/2) = 0 \\ \frac{dv_{ef}}{dz} \Big|_{z=0} = 0 \end{array} \right.$$

Com isto, podemos determinar o potencial efetivo da maneira mais geral possível dentro do modelo proposto.

Novamente com o potencial calculado, podemos resolver a equação de Schrödinger e determinar os auto-valores e as funções de onda.

Além da estrutura de sub-bandas e das auto-funções, calculamos também o número de ocupação de cada sub-banda (n_i). À temperatura finita T podemos calcular n_i integrando o produto da distribuição de Fermi-Dirac e a densidade de estados nas variáveis *energia* e z . Este cálculo é apresentado no Apêndice V e resulta em

$$n_i = \frac{K_B T}{2\pi R^*} \ln \left[1 + e^{\left(\frac{\mu - \epsilon_i}{K_B T / R^*} \right)} \right],$$

onde $K_B T$ é a constante de Boltzmann vezes a temperatura por unidade de energia de Bohr efetiva. Devemos notar aqui que os níveis de energia também se alteram com a temperatura, uma vez que o potencial é alterado. A $T = 0$, a equação acima se reduz a

$$n_i = \frac{1}{2\pi} (\mu - \epsilon_i).$$

No capítulo seguinte apresentamos resultados concretos da estrutura de sub-bandas, números de ocupação, funções de onda e densidade de carga.

3.3 A super-rede de *delta doping*

3.3.1 O conceito de super-rede

A primeira proposta de uma super-rede foi feita a cerca de 20 anos atrás por Esaki e Tsu [22]. Esta proposta consiste de um semicondutor com camadas de dopantes tipo-n e tipo-p ou então alternando a composição do semicondutor ao longo da direção de crescimento gerando, assim, um potencial periódico nesta direção. Neste tipo de estrutura o período do potencial pode variar a partir de poucas dezenas do parâmetro de rede do cristal; com isto, é de se esperar que seja possível a observação de alguns efeitos quânticos dependentes das características da super-rede.

Segundo Esaki [21], a idéia de super-rede ocorreu quando se estava estudando tunelamento ressonante em poços e barreiras de potencial. A super-rede foi considerada uma extensão natural de estruturas duplas (por exemplo, poço quântico duplo). As propriedades ópticas de super-redes dopadas incluem:

- *gap* de energia reduzido quando comparado ao *gap* do material não dopado;
- Separação espacial das funções de onda dos elétrons e buracos.

Estes são os principais requisitos a fim de se obter emissão estimulada (*laser*).

Nesta parte do trabalho estamos interessados em super-redes de *delta-doping*. Existem dois tipos de camadas delta-dopadas periódicas:

1. Uma sequência periódica de camadas delta-dopadas com o mesmo tipo de dopante e separadas por regiões não dopadas, exceto pela dopagem residual intrínseca. Este tipo de estrutura é denotada por $\delta i \delta i$;
2. Uma sequência periódica de camadas delta-dopadas com dopantes tipo-n e tipo-p alternadamente e separadas por regiões não dopadas. Este tipo de super-rede é chamado dente de serra e está esquematizado na figura (3.7).

Figura 3.7 - Diagrama de bandas para uma super-rede do tipo *dente de serra*. As funções de onda mostradas são para $q = 0$. As minibandas têm largura ΔE_n

Recentemente, muitos trabalhos experimentais e teóricos têm sido feitos para a super-rede de *delta-doping* do tipo dente de serra. Schubert [10] estudou as propriedades ópticas deste tipo de estrutura. Mais recentemente, Wen-Chau Liu et al [32] estudaram as aplicações deste tipo

de super-rede usando sua propriedade de resistência-diferencial-negativa. Ambos os trabalhos citados acima consideram o potencial como triangular, o que permite resultados analíticos da estrutura de bandas. Neste caso, não existem portadores (elétrons ou buracos) livres, pois o nível de Fermi se posiciona entre as bandas de valência e condução. A presença dos portadores livres altera o potencial da super-rede e, portanto, todo o problema.

Neste trabalho, nos restringimos ao caso de super-rede dopada com o mesmo tipo de dopante (tipo-n). Existem poucos trabalhos publicados sobre este tipo de estrutura, Degani [27] estudou as propriedades eletrônicas deste tipo de estrutura usando o método auto-consistente.

Como dito na seção anterior, a super-rede, por construção, gera um potencial periódico na direção de crescimento. Desta forma, o potencial efetivo é também periódico nesta direção. Nossa questão é resolver o problema de um elétron em um potencial periódico $U_{ef}(z)$ com a periodicidade da super-rede, isto é,

$$U_{ef}(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_{ef}(z - na), \quad u_{ef}(z) = u_{ef}(z - na),$$

onde a é a separação entre os planos de dopantes, ou seja, o período da super-rede. Não levamos em conta aqui as complicações tecnológicas envolvidas no crescimento destas estruturas, ou seja, efeitos de borda ou eventual não-periodicidade da estrutura. Vamos considerar uma sequência infinita de poços de delta separados por uma distância a .

3.3.2 A equação de Thomas-Fermi para a super-rede

Nesta seção vamos encontrar o potencial efetivo de um corpo da equação de Schrödinger usando o formalismo de Thomas-Fermi discutido no Capítulo 2. O modelo que usamos segue as mesmas aproximações que as de uma única delta estudada na seção anterior. Com base no teorema de Bloch, podemos nos limitar a uma única cela do potencial, ou seja, $-a/2 \leq z \leq a/2$. A extensão para outras regiões do espaço é feita usando-se o teorema de Bloch e as propriedades de periodicidade. De uma maneira exatamente análoga à feita anteriormente, podemos obter

a equação diferencial de Poisson-Thomas-Fermi para o multi-delta (super-rede), ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} u_{ef} = & -\frac{8}{3\pi} [\mu - u_{ef}(z)]^{3/2} + \frac{8\pi}{d} n_D \theta\left(\frac{d}{2} + z\right) \theta\left(\frac{d}{2} - z\right) - \\ & - 8\pi n_A \theta\left(\frac{a}{2} + z\right) \theta\left(\frac{a}{2} - z\right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Nesta equação, z é a coordenada na direção perpendicular aos planos de dopantes. Estes planos são considerados difusos de um tamanho d com n_D doadores por área de Bohr efetiva. Dentro da cela unitária é considerado um fundo uniforme de dopantes aceitadores com n_A aceitadores por volume de Bohr efetivo. Vamos considerar também que todos os átomos doadores são ionizados cedendo um elétron. Desde que o período da super-rede que vamos considerar é muito menor que o tamanho da camada de depleção, os efeitos de fundo do aceitadores são desprezíveis, já que estamos trabalhando com densidade de aceitadores na faixa de 0.001 aceitador por volume de Bohr efetivo. Muito poucos elétrons são tirados do poço. Temos, então, que resolver a equação (3.21) impondo condições de contorno tais que o sistema seja neutro dentro da cela unitária, isto é,

$$\begin{cases} \left. \frac{du_{ef}}{dz} \right|_{z=0} = 0 \\ \left. \frac{du_{ef}}{dz} \right|_{z=a/2} = 0 \end{cases}$$

3.3.3 A estrutura eletrônica da super-rede

Uma vez determinado o potencial efetivo, podemos resolver a equação de Schrödinger dentro da aproximação de massa efetiva. As funções de onda que correspondem ao movimento no plano x, y são dadas por uma onda plana, enquanto que o movimento na direção z é dado pela seguinte equação de Schrödinger em unidades de Bohr efetiva

$$\left[-\nabla^2 \varphi_{nq} + u_{ef}(z) \right] \varphi_{nq}(z) = \epsilon_n(q) \varphi_{nq}(z). \quad (3.22)$$

Mais adiante fica claro o significado dos índices n e q na função de onda e na energia. Os elétrons que obedecem a equação de Schrödinger com um potencial periódico são conhecidos

como elétrons de Bloch.

Utilizando o teorema de Bloch em nosso problema temos

$$\varphi_{nq}(z) = e^{iqz} u_{nq}(z), \quad u_{nq}(z) = u_{nq}(z + na),$$

ou

$$\varphi_{nq}(z + na) = e^{iqz} \varphi_{nq}(z). \quad (3.23)$$

Vamos impor condições de contorno periódicas sobre as soluções de (3.22) com base na seguinte afirmação: as propriedades dos sólidos não dependem das condições de contorno. Existem provas rigorosas desta afirmação [19]. Imaginemos que o comprimento Na do cristal (N aqui é o número de períodos da super-rede) seja muito grande e que a super-rede se feche num círculo de tal forma que

$$\varphi_{nq}(z + Na) = \varphi_{nq}(z)$$

o que significa que $q = 2p\pi/Na$, com p inteiro.

Podemos citar duas propriedades gerais das soluções da equação (3.22):

1. O teorema de Bloch introduz o vetor de onda q , o qual faz o mesmo papel que o vetor de onda de um elétron livre, com a diferença de que aqui q não é proporcional ao momentum eletrônico na direção z . Devemos ver q como um número quântico característico da simetria translacional do potencial. Notemos que q pode sempre ser confinado à primeira zona de Brillouin. Qualquer q' que não esteja na primeira zona de Brillouin pode ser escrito como $q' = q + G_z$, com q na primeira zona e G_z vetor da rede recíproca. Como $e^{iG_z na} = 1$ (por construção de G_z), então $\varphi_{nq'} = \varphi_{nq}$.

2. O índice n que aparece nas soluções da equação (3.22) se faz necessário pois para um certo q aparecem muitas soluções diferentes. Para cada n , o conjunto de níveis eletrônicos especificado por $\epsilon_n(q)$ é chamado minibandas de energia. Os valores permitidos de $\epsilon_n(q)$ são separados por lacunas (*gaps*) de energia. Para energias correspondentes a estes *gaps*, não há estados de Bloch permitidos satisfazendo as condições de contorno impostas. Estes *gaps* de energia são resultados da interação dos elétrons com os planos de dopantes. Como a estrutura é periódica, ocorre espalhamento de Bragg e, assim, regiões onde a equação de Bragg não é satisfeita não existem estados permitidos.

A condição de contorno periódica impõe, como vimos acima, que $q = 2p\pi/Na$. Como acabamos de ver, podemos restringir q na faixa $-\pi/a \leq q \leq \pi/a$ (primeira zona de Brillouin). Assim, concluímos que existem N valores de q diferentes, ou seja, para cada minibanda existem exatamente N (número de períodos da super-rede) níveis de energia discretos permitidos. Quando N é muito grande, estes níveis estão muito próximos e podemos considerar, em alguns cálculos, que a minibanda seja contínua.

Para determinarmos a estrutura de minibandas temos que resolver as equações (3.21) e (3.22). Podemos escolher a origem do sistema de coordenadas de tal modo que a energia potencial seja uma função par de z . Com isto, dentro da cela unitária da super-rede a equação de Schrödinger admite duas soluções linearmente independentes que dependem da energia. Tais soluções constituem uma base dentro da cela unitária. Escolhemos uma função par $\varphi_p(z)$ e uma função ímpar $\varphi_i(z)$ como duas soluções da equação de Schrödinger linearmente independentes. Estas soluções são definidas dentro da cela unitária da super-rede pelas seguintes condições de contorno

$$\varphi_i(0) = 0, \quad d\varphi_i/dz \Big|_0 = 1$$

$$\varphi_p(0) = 1, \quad d\varphi_p/dz \Big|_0 = 0$$

Observemos que deixamos implícita a dependência das funções de onda acima com relação à energia. A partir destas condições, podemos resolver a equação (3.22) por métodos numéricos

padrões. A solução geral para a equação de Schrödinger para uma dada energia pode ser escrita como

$$\varphi(z) = \beta\varphi_i(z) + \alpha\varphi_p(z), \quad (3.24)$$

com α e β constantes arbitrárias. Usando o teorema de Bloch na equação (3.24) concluímos que

$$\beta = \alpha \left(\frac{e^{iqa} - 1}{e^{iqa} + 1} \right) \frac{\varphi_p(a/2)}{\varphi_i(a/2)}. \quad (3.25)$$

Usando agora a continuidade da função de onda e de sua derivada em $z = a/2$ obtemos, então, para cada valor E da energia

$$\cos(qa) = \varphi_p(a/2)\varphi_i'(a/2) + \varphi_p'(a/2)\varphi_i(a/2) = F(E). \quad (3.26)$$

A equação (3.26) acima é uma equação transcendental que relaciona as energias permitidas e o vetor de onda q , isto é, a relação de dispersão $\epsilon_n(q)$. As energias permitidas são aquelas tais que

$$-1 \leq F[\epsilon_n(q)] \leq 1.$$

A figura (3.8) mostra um gráfico de $F(E)$ versus E com um particular valor para cada

constante a, d, n_A e n_D .

Figura 3.8 - Gráfico da função $F(E)$. Este gráfico determina a estrutura de minibandas

Para determinarmos a constante α , usamos a condição de normalização de $|\varphi(z)|^2$:

$$|\alpha|^2 \int [|\varphi_p(z)|^2 + \frac{1 - F^2}{(1 + F)^2} \left(\frac{\varphi_i(a/2)}{\varphi_i(a/2)} \right)^2 |\varphi_i(z)|^2] dz = 1,$$

com $-1 \leq F \leq 1$. Assim, as auto-funções são determinadas univocamente.

Como podemos ver na figura (3.8) acima, a função $F(E)$ apresenta grandes variações com E e as faixas de energia nas quais $|F(E)| \leq 1$ são estreitas.

A fim de obter a relação de dispersão aproximada, vamos expandir $F(E)$ nas vizinhanças de $E_1, E_2, \dots$, onde estes valores são as energias dos estados ligados de uma delta isolada. Em primeira ordem de aproximação obtemos a i -ésima minibanda da forma

$$\epsilon_i(q) = E_i + s_i + 2t_i \cos(qa) \quad (3.27)$$

onde

$$s_i = -\frac{F(E_i)}{[F'(E)]_{E=E_i}}, \quad 2t_i = \frac{1}{[F'(E)]_{E=E_i}}.$$

A expressão (3.27) é o resultado do método de *tight-binding*, o qual pode ser entendido como a hibridização dos estados ligados de potenciais independentes devido a efeitos de tunelamento. Desta forma, podemos entender a origem das minibandas como tal hibridização.

3.3.4 Densidade de estados

Vamos usar novamente aqui o fato de que o movimento na direção paralela ao delta é livre, assim como feito na subseção 3.6.4. A relação de dispersão da super-rede pode então ser escrita (em unidades reduzidas) como

$$E_n(\vec{K}) = \epsilon_n + K_{//}^2 \quad (3.28)$$

onde $\vec{K} \equiv (\vec{K}_{//}, q)$, $\vec{K}_{//}$ representa o vetor de onda na direção paralela ao delta e q é o vetor de onda na direção do delta. Como estamos usando o esquema de zona reduzida, temos $|q| \leq \pi/a$. Nesta equação, o primeiro termo representa a energia correspondente à direção perpendicular ao delta e o segundo termo a energia livre paralela ao delta.

No Capítulo 2 vimos que podemos escrever a densidade de estados como

$$D(E) = 2 \sum_{q, \vec{K}_{//}, n} \delta[E - \epsilon_n(q) - K_{//}^2]. \quad (3.29)$$

Aqui vamos fazer a aproximação de que q seja uma variável contínua, ou seja, vamos supor que a super-rede seja infinita. Então, podemos transformar as somas em $\vec{K}_{//}$ e em q em integrais. Integrando então na variável transversa $\vec{K}_{//}$, obtemos

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_n \int_0^\pi \theta[E - \epsilon_n(q)] dq,$$

onde θ representa a função degrau. Sejam ϵ_n^{min} e ϵ_n^{max} o fundo e o topo da n -ésima minibanda. Concluimos da equação acima que $D(E) = 0$ para $E \leq \epsilon_n^{min}$ e $D(E) = \sum_n 1/2\pi$ para $E \geq \epsilon_n^{max}$. Para calcularmos a densidade de estados para $\epsilon_n^{min} \leq E \leq \epsilon_n^{max}$, podemos fazer a seguinte mudança de variáveis

$$q = \arccos[F(\epsilon_n)], \quad \text{com } \epsilon_n^{\min} \leq \epsilon_n \leq \epsilon_n^{\max},$$

e ficamos com a integral

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_n \int_{\epsilon_n^{\min}}^E -\frac{dF/d\epsilon_n}{\sqrt{1-F^2}} d\epsilon_n. \quad (3.30)$$

Para resolver esta integral, fazemos uma nova mudança de variáveis: $u = F(\epsilon_n)$. Assim, temos

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_n \int_{F(\epsilon_n^{\min})}^{F(E)} -\frac{1}{\sqrt{1-u^2}} du \quad (3.31)$$

Esta integral deve ser resolvida em duas etapas, já que $F(\epsilon_n^{\min}) = 1$ se $\epsilon_n \in [1, -1]$ e $F(\epsilon_n^{\min}) = -1$ se $\epsilon_n \in [-1, 1]$. O resultado final para $D(E)$ é, então,

$$D(E) = \begin{cases} 0 & \text{se } E \leq \epsilon_n^{\min} \\ \frac{1}{2\pi^2} \sum_n \arccos[F(E)] & \text{se } \epsilon_n^{\min} \leq E \leq \epsilon_n^{\max} \text{ e } F(E) \in [1, -1] \\ -\frac{1}{2\pi^2} \sum_n \{\arccos[F(E)] - \pi\} & \text{se } \epsilon_n^{\min} \leq E \leq \epsilon_n^{\max} \text{ e } F(E) \in [-1, 1] \\ \frac{1}{2\pi} \sum_n 1 & \text{se } E \geq \epsilon_n^{\max} \end{cases}$$

Além do cálculo das minibandas e das funções de onda, calculamos também o número de ocupação n_i^{SR} de cada minibanda i . Este número é calculado integrando-se a densidade de estados vezes a distribuição de Fermi-Dirac:

$$n_i^{SR} = \frac{1}{2\pi^2} \int \theta(\mu - E) D(E) dE,$$

onde $\theta(\mu - E)$ é a distribuição de Fermi-Dirac para a temperatura T tendendo a zero.

3.3.5 Cálculos auto-consistentes

O problema de um gás de elétrons quase-bidimensional pode ser resolvido auto-consistentemente, ou seja, temos que resolver a equação de Schrödinger

$$\left[-\nabla^2 + v_{ef}(z)\right] \varphi_n(z) = \epsilon_n \varphi_n(z). \quad (3.32)$$

Como estamos desprezando os efeitos de muitos corpos, o potencial efetivo na equação acima é apenas o potencial de Hartree. Este potencial efetivo pode ser obtido resolvendo-se a equação de Poisson

$$\frac{d^2 v_{ef}(z)}{dz^2} = -8\pi[n(z) - N_I(z)]. \quad (3.33)$$

Nesta equação temos que

$$n(z) = \sum_i n_i |\varphi_i(z)|^2, \quad (3.34)$$

onde n_i é o número de elétrons por unidade de área de Bohr efetiva da i -ésima sub-banda e $N_I(z)$ a densidade de dopantes ionizados por área de Bohr efetiva. Para cada problema específico, super-rede ou delta isolado, temos uma densidade de dopantes específica.

Desde que $n(z)$ depende da função de onda, o mesmo ocorre com o potencial efetivo da equação (3.32). Assim, a equação de Schrödinger passa a ser uma equação diferencial não linear. Tais equações (3.32), (3.33) e (3.34) são resolvidas de maneira iterativa. Assumindo-se um potencial de entrada $V_i(z)$, podemos calcular as funções de onda a partir da equação (3.32). Com as funções de onda podemos calcular uma densidade de carga pela equação (3.34) e, com isto, gerar um potencial de saída $V_f(z)$. O método mais simples e usual para resolver a equação de Schrödinger no $(n+1)$ -ésimo passo é usar como potencial de entrada uma combinação linear do potencial de entrada e o potencial de saída da iteração no n -ésimo passo, ou seja,

$$V_i^{(n+1)}(z) = \alpha V_i^{(n)}(z) + (1 - \alpha) V_f^n(z),$$

com $0 < \alpha < 1$.

O potencial de saída do n -ésimo passo não pode ser usado como potencial de entrada do $n+1$ -ésimo passo, pois isto acarretaria problemas de convergência do método. Deve-se, também estipular um critério de convergência, isto é, em que passo o processo deve ser interrompido. O critério de convergência usual e que usamos aqui é o de olhar-se para as energias encontradas. Interrompemos o processo no momento em que esta energia não mais se altera dentro de uma certa precisão fixada.

No capítulo seguinte apresentamos resultados auto-consistentes para uma delta isolada e para a super-rede. Além disso, os comparamos com resultados obtidos com a aproximação de Thomas-Fermi.

3.3.6 Efeito Shubnikov-de Haas

Na prática, pode-se medir os números de ocupação n_i das diversas sub-bandas formadas pelo delta usando-se magnetotransporte.

Aplicando-se um campo magnético na direção de crescimento do delta pode ser mostrado que este campo não acopla com os estados do poço, mas quantiza os estados na direção paralela ao delta nos níveis de Landau. A condutividade (ou resistividade) estática é bastante afetada pela aplicação deste campo magnético. Esta resistividade oscila com B , oscilações de Shubnikov-de Haas.

Segundo Bastard [13], os campos B 's tais que a resistividade seja máxima são dados por

$$(\mu - \epsilon_i) = A \left[n + \frac{1}{2} + \frac{g^* \sigma_z}{2c} \right] B,$$

onde μ é o nível de Fermi, ϵ_i a energia do i -ésimo nível do delta, A uma constante devido à adimensionalização, c a velocidade da luz, n o número quântico que descreve os níveis de Landau, σ_z assumindo os valores $1/2$ ou $-1/2$ e finalmente g^* o fator de Landé efetivo.

O gráfico de $n \times B^{-1}$ deve ser uma reta cuja inclinação nos dá informações sobre o número de ocupação da i -ésima sub-banda.

Se mais que uma sub-banda está ocupada, temos um conjunto de diferentes oscilações superpostas. A resistividade deve, então ser decomposta nas várias frequências por meio de uma transformada de Fourier.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos os resultados da teoria de Thomas-Fermi a qual foi aplicada a estruturas delta-dopadas. A teoria de Thomas-Fermi foi aplicada para uma delta isolada e para a super-rede de deltas. Para efeito de comparação, apresentamos também os resultados feitos auto-consistentemente na aproximação de Hartree. Para resolvermos as equações diferenciais numericamente utilizamos o método numérico de Runge-Kutta [25]. Começamos discutindo o problema de uma delta simplificada, passamos para a delta com difusão e fundo residual de aceitadores e terminamos com a apresentação dos resultados para a super-rede.

Todos os resultados apresentados aqui estão em unidades adimensionalizadas pela energia de Bohr efetiva (5.87 meV) e pelo raio de Bohr efetivo (98.7 Å).

4.2 Resultados para uma delta isolada

4.2.1 Delta isolada simplificada

Estes resultados são para uma delta isolada sem difusão e sem o fundo de aceitadores. Com o potencial calculado – equação (3.6) – podemos calcular as funções de onda e a densidade de carga resolvendo a equação de Schrödinger. Vamos denominar estes resultados por funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger e densidade de carga de Thomas-Fermi-Schrödinger.

O gráfico da figura 4.1 e a tabela 4.1 apresentam um resumo dos resultados para uma

densidade de dopantes igual a 5.0. Na figura 4.1 os círculos representam pontos para o potencial auto-consistente na aproximação de Hartree. Devemos observar que o zero de energia foi colocado sob o nível de Fermi de Thomas-Fermi. Um fato importante a ser notado na figura 4.1 é que para a densidade de dopantes igual a 5.0 existe um grande número de sub-bandas ocupadas com cerca de 85% do número total de elétrons nas duas sub-bandas mais baixas.

ocupação das sub-bandas (n_i)		energia (ϵ_i)	
Thomas-Fermi	Hartree	Thomas-Fermi	Hartree
3.055	3.046	-19.196	-19.127
1.184	1.176	-7.439	-7.377
0.537	0.530	-3.373	-3.314
0.188	0.183	-1.185	-1.135
0.058	0.055	-0.364	-0.333
0.008	0.009	-0.054	-0.045

nível de Fermi μ		fundo do potencial $V(0)$	
Thomas-Fermi	Hartree	Thomas-Fermi	Hartree
0.0	0.0139	-32.046	-31.969

Tabela 4.1

Como podemos ver na tabela acima, nas duas sub-bandas mais populosas temos resultados muito bons se comparados com o mesmo cálculo feito de maneira auto-consistente. O erro relativo no número de ocupação das duas sub-bandas mais baixas é menor que 1% e cerca de 10% para a sub-banda menos populosa que possui 0.2% do número total de elétrons.

Os resultados usando-se a aproximação de Thomas-Fermi que encontramos aqui estão em perfeito acordo com os encontrados por Ioriatti [23].

Outro ponto importante a notarmos é a semelhança entre a densidade de estados de Thomas-Fermi e a densidade de estados de Thomas-Fermi-Schrödinger. No gráfico da figura 4.2 fazemos

uma comparação entre estas grandezas. Poderíamos tentar encontrar as energias usando-se somente a densidade de estados de Thomas-Fermi; entretanto, como podemos ver claramente no gráfico, para os estados ímpares esta tentativa seria frustrada enquanto que para os estados pares os resultados estariam em bom acordo.

Figura 4.1 - Gráfico mostrando os resultados para o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (indicado por círculos), e o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para uma delta isolada simplificada. Estes resultados são para $n_D = 5.0$, sem difusão e sem o fundo residual de impurezas aceitadoras.

Figura 4.2 - Comparação entre a densidade de estados de Thomas-Fermi e a densidade de Thomas-Fermi-Schrödinger para uma delta simplificada com $n_D = 5.0$

4.2.2 Delta isolada com difusão dos dopantes e fundo uniforme de aceitadores

Os resultados apresentados aqui para uma delta isolada são os mais realistas possíveis dentro do nosso modelo, ou seja, consideramos a difusão de dopantes e o inevitável fundo de impurezas aceitadoras.

Com a introdução da difusão de dopantes e do fundo de aceitadores temos um novo problema auto-consistente a ser resolvido. Do ponto de vista de Thomas-Fermi, devemos apenas mudar as condições de contorno da equação de Poisson-Thomas-Fermi, ou seja, devemos resolver a equação (3.19) sujeita às condições de contorno indicadas no texto.

A difusão de dopantes suaviza o potencial na origem e diminui sua profundidade provocando, assim, uma diferença nos níveis de energia. A presença do fundo de aceitadores, por sua vez, provoca um grande aumento da profundidade do potencial, mas muito pouca diferença na região próxima ao fundo do potencial. No gráfico da figura 4.3 apresentamos um resultado que compara o potencial de Thomas-Fermi com o fundo uniforme de aceitadores e sem este fundo. Podemos notar que as afirmações feitas acima são verdadeiras. A diferença relativa para o fundo do potencial é 0.1%, imperceptível na escala do gráfico. Concluimos, então, que os elétrons nas sub-bandas inferiores não são afetados pela presença das impurezas aceitadoras. Podemos entender este comportamento do potencial notando que os elétrons que estão nas sub-bandas superiores não estão fortemente ligados ao potencial. Dois efeitos devem ser analisados: é mais provável que um elétron que não esteja fortemente ligado ao potencial seja atraído pela impureza aceitadora; outro ponto importante é que estes elétrons, mais distantes do potencial que os fortemente ligados, blindam o potencial da impureza aceitadora. Assim, os elétrons mais fortemente ligados não sentem o potencial das impurezas aceitadoras.

Com relação ao aumento na profundidade do poço, este é um efeito esperado. Com a

retirada de alguns elétrons do poço os efeitos de blindagem do potencial do tipo V formado pelo plano de átomos ionizados é menor, aumentando, assim, sua profundidade e baixando o nível de Fermi para o nível de aceitadores, já que longe do potencial a dopagem é do tipo aceitador.

ocupação das sub-bandas (n_i)			energia (ϵ_i)	
teoria		experimento		
Thomas-Fermi	Hartree		Thomas-Fermi	Hartree
3.596	3.618	3.83	-22.52	-22.92
1.835	1.835	1.71	-11.45	-11.72
0.812	0.806	0.74	-5.02	-5.25
0.283	0.267	0.28	-1.70	-1.87

nível de Fermi (μ)		fundo do potencial $V(0)$	
Thomas-Fermi	Hartree	Thomas-Fermi	Hartree
0.0	0.0184	-28.902	-29.455

Tabela 4.2

Na figura 4.4 e na tabela 4.2 estão resumidos os resultados para uma delta isolada com densidade de doadores igual a 6.82, densidade de aceitadores igual a 0.001 e difusão de dopantes 0.79. Com estes parâmetros, as condições de contorno para o potencial de Thomas-Fermi são:

$$\begin{cases} \left. \frac{dv_{ef}}{dz} \right|_{z=0} = 0 \\ \left. \frac{dv_{ef}}{dz} \right|_{z=z_e/2} = 3.67 \end{cases}$$

com z_e sendo o tamanho da camada de acumulação. Então, devemos resolver a equação (3.20) sujeita às condições acima. Para isso, escolhemos aleatoriamente um valor para o fundo do potencial e evoluímos a solução até $v_{ef}(z)$ zerar e testamos a condição de contorno. Se tal condição estiver satisfeita, encontramos z_e e o fundo do potencial; senão, propomos outro valor.

Podemos ver na tabela 4.2 que a diferença relativa entre os números de ocupação de Thomas-Fermi e auto-consistente são menores que 1% para as principais sub-bandas. Com relação à comparação com os resultados experimentais, notamos uma diferença relativa da ordem de 10%. Esta diferença é esperada e atribuída aos efeitos de não-parabolicidade da banda de condução, uma vez que estamos considerando uma densidade de dopantes elevada. Tal diferença é prevista por Zrenner [2] e está ilustrada no gráfico da figura 4.5.

Outra grandeza que deve ser comparada é a densidade de carga. O gráfico da figura 4.6 ilustra a densidade de carga de Thomas-Fermi-Schrödinger e auto-consistente para uma delta isolada com os mesmos parâmetros que os da discussão acima. Podemos notar que ambas as densidades estão bem próximas exceto por uma pequena diferença na origem. Esta pequena diferença é basicamente a mesma que aparece nos potenciais.

Figura 4.3 - Comparação entre o potencial de Thomas-Fermi na presença de um fundo de impurezas aceitadoras com densidade 0.001 (linha pontilhada) e sem o fundo (linha contínua). Neste gráfico, $n_D = 6.82$ e $d = 0.79$.

Figura 4.4 - Gráfico mostrando os resultados para o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (indicado por círculos) e o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para uma delta isolada. Estes resultados são para $n_D = 6.82$, $n_S = 6.53$, $n_A = 0.001$ e uma difusão de 0.79.

Figura 4.5 - Ilustração da ocupação n_s de cada sub-banda como função da densidade de doadores. A linha contínua representa os resultados levando-se em conta efeitos de não-parabolicidade.

Figura 4.6 - Resultados para a densidade de carga eletrônica. Os círculos representam a densidade de carga calculada auto-consistentemente e a linha contínua a densidade de carga de Thomas-Fermi-Schrödinger. Estes resultados são encontrados para uma delta isolada com $n_D = 6.82$, $n_A = 0.001$ e uma difusão de 0.79.

4.2.3 Resultados para a super-rede de deltas

Para resolvermos o problema da super-rede devemos resolver a equação de Poisson-Thomas-Fermi – equação (3.21) – sujeita às condições de contorno de neutralidade do potencial dentro da cela, ou seja,

$$\left. \frac{du_{ef}}{dz} \right|_{z=0} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{du_{ef}}{dz} \right|_{z=a/2} = 0.$$

Calculado o potencial, resolvemos a equação de Schrödinger para encontrarmos as minibandas e as funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger.

O gráfico da figura 4.7 ilustra a função $F(E)$, usada para encontrarmos as minibandas, para um período de 2.05, densidade de doadores igual a 2.92, densidade de aceitadores igual a 0.001 e difusão de doadores numa região de 0.2. Neste gráfico podemos notar a presença de 3 minibandas.

No gráfico da figura 4.8 ilustramos os potenciais de Thomas-Fermi, potencial auto-consistente (círculos), as funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger e a estrutura de minibandas. Notemos que o potencial baixa em relação ao nível de Fermi, contrariamente ao potencial de uma única delta. Fica claro também, a partir deste gráfico, que a largura das minibandas é maior quanto mais distante as energias estão do topo do potencial tendendo para o caso tridimensional, diminuindo, desta forma, o *gap* de energia entre as minibandas. Esta tendência pode ser notada também nas funções de onda que tendem a ser estendidas, ou seja, do tipo oscilante para as minibandas superiores e não tendendo a zero longe do plano de dopantes como no caso de uma delta isolada. Na tabela 4.3 estão resumidos os principais resultados para esta super-rede. Podemos ver que os resultados de Thomas-Fermi estão em excelente acordo com os resultados calculados de maneira auto-consistente, ou seja, a diferença relativa no número de ocupação é menor que 0.5%.

ocupação das sub-bandas (n_i)		energia das sub-bandas (ϵ_i)			
Thomas-Fermi	Hartree	Thomas-Fermi		Hartree	
2.058	2.061	-12.53	-13.24	-12.63	-13.33
0.832	0.833	-2.00	-7.16	-2.03	-7.17
0.029	0.029	0.00	-1.67	-0.012	-1.70

nível de Fermi (μ)		fundo do potencial $V(0)$	
Thomas-Fermi	Hartree	Thomas-Fermi	Hartree
0.0	-0.012	-19.810	-19.984

Tabela 4.3

Na figura 4.9 está ilustrado o resultado para a densidade de estados de Thomas-Fermi-Schrödinger para esta super-rede. Devemos observar a diferença entre este resultado e o de uma delta isolada onde tínhamos degraus. Para a super-rede estes degraus são alargados, mostrando a abertura dos níveis em minibandas e a tendência do sistema para o caso tridimensional.

O gráfico da figura 4.10 ilustra o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (círculos), o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger e a estrutura de minibandas para uma super-rede com uma densidade de doadores igual a 3.0, densidade de aceitadores igual a 0.001, período 5.06 e difusão de dopantes numa região igual a 0.5. Podemos notar nesta figura uma minibanda muito estreita, ou seja, um nível. O aparecimento deste nível se deve ao fato de que estamos considerando um período grande, não permitindo que as funções de onda de poços vizinhos possam tunelar e hibridizar-se com as funções de onda do poço gerando, assim, as minibandas. Na tabela 4.4 estão resumidos os resultados para esta super-rede. Novamente, os resultados para os números de ocupação usando-se o cálculo de Thomas-Fermi ou auto-consistente são praticamente indistinguíveis.

ocupação das sub-bandas (n_i)			energia das sub-bandas (ϵ_i)			
teoria		experimento				
Thomas-Fermi	Hartree		Thomas-Fermi		Hartree	
1.899	1.898	2.05	-11.90	-11.90	-11.96	-11.96
0.733	0.731	0.70	-4.58	-4.62	-4.59	-4.63
0.318	0.313	...	-1.58	-2.25	-1.56	-2.23
0.060	0.058	...	0.00	-1.03	-0.004	-1.02

nível de Fermi (μ)		fundo do potencial $V(0)$	
Thomas-Fermi	Hartree	Thomas-Fermi	Hartree
0.0	0.004	-17.360	-17.418

Tabela 4.4

Estes resultados foram comparados aos resultados experimentais [18] mostrando-se em bom acordo e com um erro relativo de 7% para a ocupação da primeira minibanda e 4% para a da segunda minibanda. Os resultados para as outras minibandas não foram acessíveis pela técnica de medida utilizada (efeito Shubnikov-de Haas).

Figura 4.7 - Gráfico utilizado para encontrarmos as minibandas de uma super-rede com $n_D = 2.92$, $n_A = 0.001$, $d = 0.2$ e $a = 2.05$.

Figura 4.8 - Resultados para uma super-rede com $n_D = 2.92$, $n_A = 0.001$, $a = 2.05$ e $d = 0.2$. São apresentados o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (círculos), o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para $q = 0$ e a estrutura de minibandas.

Figura 4.9 - Densidade de estados para a super-rede com $n_D = 2.92$, $n_A = 0.001$, $a = 2.05$ e $d = 0.2$.

Figura 4.10 - Resultado para uma super-rede com $n_D = 3.0$, $n_A = 0.001$, $a = 5.06$ e $d = 0.5$. São apresentados o potencial de Thomas-Fermi, o potencial auto-consistente (círculos), o quadrado das funções de onda de Thomas-Fermi-Schrödinger para $q = 0$ e a estrutura de minibandas.

4.2.4 Conclusão

Usamos a teoria de Thomas-Fermi para semicondutores delta dopados. Esta teoria foi aplicada a um único poço para uma super-rede de deltas.

Como dito no capítulo anterior e verificado em nossos resultados, contrariamente a estruturas semicondutoras do tipo heterojunção, no problema do *delta-doping* muitas sub-bandas são ocupadas para uma razoável densidade de dopantes. Este grande número de sub-bandas ocupadas é que sugere a utilização de uma aproximação semi-clássica como a de Thomas-Fermi. É de se esperar que para densidades muito baixas – onde apenas uma sub-banda seja ocupada – esta aproximação não seja mais válida.

Os resultados da teoria de Thomas-Fermi foram comparados aos resultados feitos de maneira auto-consistente na aproximação de Hartree, os quais se mostraram em muito bom acordo. A grande vantagem da teoria de Thomas-Fermi é que, com apenas a equação diferencial

$$\frac{d^2 v_{ef}}{dz^2} = \frac{8}{3\pi} (\mu - v_{ef}(z))^{3/2} - 8\pi N_D(z) + 8\pi N_A(z),$$

podemos descrever o potencial de uma série de estruturas delta dopadas com precisão.

Com o método apresentado aqui, combinamos a simplicidade do método clássico com a mecânica quântica para extrair informações precisas sobre as propriedades eletrônicas de estruturas delta-dopadas.

Extensões triviais deste modelo são a inclusão de efeitos da temperatura finita, de efeitos de não-parabolicidade da banda de condução e de efeitos de muitos corpos.

Vale notar que para $T \neq 0$ é esperado que o acordo entre os resultados de Thomas-Fermi e Hartree seja ainda melhor que os mostrados aqui. Isto se deve ao fato de que com a inclusão da temperatura finita, estados com energias mais altas cuja função de onda é estendida e que

a $T = 0$ estavam vazios ou com uma ocupação muito baixa se tornam agora ocupados ou com uma ocupação maior. É sabido que para um sistema de elétrons livres, cujas funções de onda são ondas planas, os resultados de Thomas-Fermi e Hartree são os mesmos. Então, em nosso problema, quanto maior a ocupação dos estados cujas funções de onda são estendidas melhor o acordo entre Thomas-Fermi e Hartree.

Apêndice I

O Wronskiano de duas soluções linearmente independentes da equação

$$x^2 \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \xi \left(\frac{1}{x^2} - x^2 \right) \varphi(x) = 0 \quad (\text{I.1})$$

é independente de x .

Sejam $\varphi_i(x)$ e $\varphi_p(x)$ duas soluções linearmente independentes da equação (I.1) acima, ou seja,

$$\varphi_i(x) \neq k\varphi_p(x), \quad k = \text{const. qualquer.}$$

O Wronskiano é definido como

$$W(\varphi_i, \varphi_p) = \varphi_i \varphi_p' - \varphi_i' \varphi_p, \quad (\text{I.2})$$

onde a linha representa derivação com relação a x . Derivando (I.2), obtemos

$$W' = \varphi_i \varphi_p'' - \varphi_i'' \varphi_p.$$

Como φ_i'' e φ_p'' satisfazem (I.1), temos

$$W' = 0 \quad \text{ou} \quad W = \text{constante.}$$

No caso particular em que $\varphi_i(x)$ e $\varphi_j(x)$ são

$$\varphi_i(x) = \sqrt{\lambda(x)} \operatorname{sen} \left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')} \right]$$

e

$$\varphi_p(x) = \sqrt{\lambda(x)} \cos \left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')} \right],$$

temos que

$$\varphi_i'(x) = \frac{\lambda'}{\sqrt{2\lambda}} \operatorname{sen} \left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')} \right] - \frac{J}{\sqrt{\lambda}} \cos \left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')} \right]$$

e

$$\varphi'_p(x) = \frac{\lambda'}{\sqrt{2\lambda}} \cos\left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')}\right] - \frac{J}{\sqrt{\lambda}} \sin\left[J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')}\right].$$

Definindo

$$\gamma(x) = J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')},$$

então o Wronskiano fica

$$W = \frac{\lambda'}{2} \sin(\gamma) \cos(\gamma) + J \sin^2(\gamma) - \frac{\lambda'}{2} \sin(\gamma) \cos(\gamma) + J \cos^2(\gamma),$$

concluindo, assim, que

$$W(\varphi_i, \varphi_p) = J. \tag{I.3}$$

Apêndice II

Temos que resolver a equação diferencial

$$x^2 \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \xi \left(\frac{1}{x^2} - x^2 \right) \varphi(x) = 0 \quad (\text{II.1})$$

com

$$\varphi(x) = \sqrt{\lambda(x)} \operatorname{sen}(\gamma(x)), \quad \text{com} \quad \gamma(x) = J \int_x^\infty \frac{dx'}{\lambda(x')}. \quad (\text{II.2})$$

Como visto no Apêndice I,

$$\varphi'(x) = \frac{\lambda'}{2\sqrt{\lambda}} \operatorname{sen}(\gamma) - \frac{J}{\sqrt{\lambda}} \cos(\gamma).$$

Então,

$$\varphi''(x) = -\frac{\lambda'^2}{4\sqrt{\lambda^3}} \operatorname{sen}(\gamma) + \frac{\lambda''}{2\sqrt{\lambda}} \operatorname{sen}(\gamma) - \frac{J^2}{\sqrt{\lambda^3}} \operatorname{sen}(\gamma). \quad (\text{II.3})$$

Substituindo (II.2) e (II.3) em (II.1) ficamos finalmente com

$$(\lambda'^2 + 2\lambda\lambda'' - 4J^2) + 4\xi \left(\frac{1}{x^4} - 1 \right) \lambda^2 = 0. \quad (\text{II.4})$$

Apêndice III

Temos que resolver a equação diferencial

$$x^3 \lambda''' + 4\xi x \lambda' \left(\frac{1}{x^2} - x^2 \right) - \frac{8\xi \lambda}{x^2} = 0 \quad (\text{III.1})$$

pelo método de Frobenius.

Propomos a seguinte solução:

$$\lambda(x) = x \sum_{-\infty}^{\infty} c_n x^{2n}$$

ou

$$\lambda(x) = \sum_0^{\infty} c_n x^{2n+1} + \sum_0^{\infty} c_{-n} x^{-2n+1} - c_0 x.$$

Necessitamos das derivadas primeira e terceira de $\lambda(x)$; para isto, vamos utilizar a primeira parcela da expressão acima já que a segunda é determinada apenas trocando-se n por $-n$. Temos então

$$\lambda'(x) = \sum_0^{\infty} (2n+1) c_n x^{2n} - c_0$$

e

$$\lambda'''(x) = \sum_0^{\infty} (2n+1) 2n(2n-1) c_n x^{2n-2}.$$

Substituindo estas expressões na equação diferencial, ficamos com

$$\begin{aligned}
& \sum_0^{\infty} (2n+1)2n(2n-1)c_n x^{2n+1} + 4\xi \sum_0^{\infty} (2n+1)c_n x^{2n-1} - 4\xi \sum_0^{\infty} (2n+1)c_n x^{2n+3} - \\
& - 8\xi \sum_0^{\infty} c_n x^{2n-1} + \sum_0^{\infty} (-2n+1)(-2n)(-2n-1)c_{-n} x^{-2n+1} + 4\xi \sum_0^{\infty} (-2n+1)c_{-n} x^{-2n-1} - \\
& 4\xi \sum_0^{\infty} (-2n+1)c_{-n} x^{-2n+3} - 8\xi \sum_0^{\infty} c_{-n} x^{-2n-1} - 4\xi c_0 x^{-1} + 4\xi c_0 x^3 + 8\xi c_0 x^{-1} = 0.
\end{aligned}$$

Trocando n por $n+1$ nos somatórios 2, 4 e 7 e n por $n-1$ nos somatórios 3, 6 e 8 ficamos com c_0 livre, ou seja, podemos tomar $c_0 = 1$ e

$$\begin{aligned}
& \sum_1^{\infty} \left\{ \left[(2n+1)(2n)(2n-1)c_n + 4\xi(2n+1)c_{n+1} - 4\xi(2n-1)c_{n-1} \right] x^{2n+1} + \right. \\
& \left. + \left[(-2n+1)(-2n)(-2n-1)c_{-n} + 4\xi(-2n+1)c_{-n+1} - 4\xi(-2n-1)c_{-n-1} \right] x^{-2n+1} \right\} = 0.
\end{aligned}$$

Para que as relações de recorrência da série crescente e da série decrescente sejam iguais, devemos ter $c_{-n} = (-1)^n c_n$. Com isto, a relação de recorrência fica

$$(2n+1)(2n)(2n-1)c_n + 4\xi(2n+1)c_{n+1} - 4\xi(2n-1)c_{n-1} = 0$$

ou

$$\frac{c_n}{c_{n-1}} = \frac{4\xi}{2n(2n+1) + 4\xi \frac{(2n+1)}{(2n-1)} \frac{c_{n+1}}{c_n}}.$$

Para determinarmos todos os coeficientes c_n , utilizamos o método de frações continuadas. Como $c_{n+1}/c_n \rightarrow 0$ se $n \rightarrow \infty$, começamos com n grande; por exemplo 1000. Se $c_{1001}/c_{1000} = 0$, podemos encontrar c_{1000}/c_{999} . Passando ao segundo passo, temos $n = 999$ e podemos determinar c_{999}/c_{998} . Assim por diante, chegamos a c_1/c_0 . Como o valor de c_0 é 1.0, determinamos c_1 . Desta maneira, vamos determinando todos os coeficientes até c_{1000} .

Apêndice IV

Vamos aqui calcular a camada de depleção (l_A) para um semiconductor delta-dopado com fundo residual aceitador. Para este cálculo, usamos a figura abaixo que representa um diagrama esquemático das bandas de condução e valência deste problema. Devemos observar aqui que todos os cálculos são feitos em unidades de energia de Bohr efetiva e raio de Bohr efetivo.

μ : nível de Fermi;

l_A : camada de depleção;

E_V : energia da banda de valência;

E_C : energia da banda de condução;

E_A : nível de aceitador;

z_e : tamanho da região onde existem elétrons ligados (camada de acumulação);

E_g : energia do *gap*.

O campo elétrico a uma distância z do plano de dopantes pode ser calculado usando-se a lei de Gauss. Com isto, podemos calcular a força elétrica sobre os elétrons

$$F = 4\pi[(n_D - n_S) - 2n_A z],$$

e o trabalho para se levar um elétron de $z_e/2$ a $l_A/2$

$$\begin{aligned} W &= E_g - E_A = - \int_{z_0/2}^{l/2} (-F) dz = \\ &= 4\pi(n_D - n_S)\left(\frac{l}{2} - \frac{z_0}{2}\right) - 4\pi n_A\left(\frac{l}{2} - \frac{z_0}{2}\right)^2 \end{aligned}$$

onde n_D é a densidade superficial de doadores, n_S a densidade superficial de elétrons e n_A a densidade volumétrica de aceitadores. Supondo $l_A/2 \gg z_e/2$, encontramos

$$E_g - E_A = 2\pi(n_D - n_S)l_A - \pi n_A l_A^2.$$

Como cada átomo aceitador toma um elétron do potencial, temos que

$$n_D - n_S = n_A l.$$

Assim, concluímos que

$$l_A = \sqrt{\frac{E_g - E_A}{\pi n_A}}.$$

Apêndice V

A finalidade deste apêndice é determinar o número de ocupação de cada estado $\varphi_i(z)$ com energia ϵ_i para o problema de delta-doping.

Temos a densidade de carga dada por

$$n(z) = \int_{V(z)}^{\infty} f(\epsilon) D(z, \epsilon) d\epsilon,$$

com $f(\epsilon)$ representando a distribuição de Fermi-Dirac e $D(z, \epsilon)$ a densidade de estados:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon - \mu)/K_B T}}$$

e

$$D(z, \epsilon) = \frac{1}{2\pi R_y^*} \sum_i |\varphi_i(z)| \theta(\epsilon - \epsilon_i); \quad R_y^* : \text{energia de Bohr efetiva.}$$

Desta forma,

$$n(z) = \frac{1}{2\pi R_y^*} \sum_i |\varphi_i(z)|^2 \int_{V(z)}^{\infty} \frac{\theta(\epsilon - \epsilon_i)}{1 + e^{(\epsilon - \mu)/K_B T}} d\epsilon.$$

Resolvendo-se a integral, chegamos a

$$n(z) = \frac{1}{2\pi} \frac{K_B T}{R_y^*} \sum_i |\varphi_i(z)|^2 \ln \left(1 + e^{\frac{(\mu - \epsilon_i)}{K_B T / R_y^*}} \right).$$

Referências

- [1] A. Zrenner, F. Koch, K. Ploog, *Proceedings of the Seventh International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems – Santa Fé*, 341 (1987)
- [2] A. Zrenner, F. Koch, K. Ploog, *Surf. Sci.*, **196**, 671 (1988)
- [3] C. E. C. Wood, G. M. Metze, J. D. Berry and L. F. Eastman, *J. Appl. Phys.*, **51**, 383 (1980)
- [4] C. W. Wolfe, N. Holonyak, G. Stillman, *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice-Hall International Editions, New Jersey (1989)
- [5] E. A. Johnson, A. Mackinnon, *Semic. Sci. Technol.*, **5**, S189 (1990)
- [6] E. Butkov, *Mathematical Physics*, Addison-Wesley Publishing Company, London (1968)
- [7] E. Fermi, *E. Phys.*, **48**, 73 (1928)
- [8] E. F. Schubert, J. B. Stark, B. Ullrich, J. E. Cunningham, *Appl. Phys. Lett.*, **52**, 118 (1988)
- [9] E. F. Schubert, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A8**, 2980 (1990)
- [10] E. F. Schubert, *Sur. Sci.*, **228** (1990)
- [11] E. Lieb, B. Simon, *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 681 (1973)
- [12] E. F. Schubert, A. Fischer, K. Ploog, *IEEE Trans. Electron Devices*, **Vol. ED-33**, no 5, 625 (1986)
- [13] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Ed. Les Éditions de Physique, France
- [14] G. Gobsch, G. Paasch, H. Übensee, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **135**, 283 (1986)
- [15] G. Paasch and H. Übensee, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **113**, 165 (1982)
- [16] H. Lee, W. J. Schaff, G. W. Wicks, L. F. Eastman, A. R. Calawa, *Inst. Phys. Conf. Ser.*, **74**, 321 (1985)
- [17] H. P. Zeindl, T. Wegehaupt, I. Eisele, H. Oppolzer, H. Reisinger, G. Tempel, F. Koch, *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 1164 (1987)

- [18] J. C. Egues, J. C. Barbosa, A. C. Notari, P. Basmadji, L. Ioriatti, E. Rans, J. C. Potal, *J. Appl. Phys.*, **70**, 7 (1991)
- [19] J. L. Lebowitz, E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 631 (1969)
- [20] K. Ploog, *J. Cryst. Growth.*, **84**, 304 (1987)
- [21] L. Esaki, IEEE, *J. Quantum Electron*, **22**, 1682 (1986)
- [22] L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.*, **14**, 61 (1970)
- [23] L. Ioriatti, *Phys. Rev B*, **41**, 8340 (1990)
- [24] L. H. Thomas, *Proc. Camb. Phil Soc*, **23**, 542 (1927)
- [25] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1970)
- [26] M. Degani, *Phys. Rev B*, **44**, 5580 (1991)
- [27] M. Degani, *J. Appl. Phys.*, **70**, no 8, 4362 (1991)
- [28] P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.*, **136**, B864 (1964)
- [29] S. Lundqvist, N.H. March, *Theory of Inhomogeneous Electron Gas*, Plenum Press, New York (1983)
- [30] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, *Rev. Mod. Phys.*, **54**, 437 (1982)
- [31] When-Chau Liu, Chung-Yih Sun, Wen-Shiung Lour, *Superlatt. Microstruct.*, **10**, no 1 (1991)
- [32] When-Chau Liu, Chung-Yih Sun, Wen-Shiung Lour, Der-Feng Guo, *J. Vac. Sci. Technol. B10* (1992)