UNIVERSIDADE DE SAO PAULO

INSTITUTO DE FISICA E QUIMICA DE SAO CARLOS

"EFEITOS DE TUNELAMENTO NA ENERGIA
DE LIGAÇÃO DE IMPUREZAS DOADORAS
RASAS EM SUPER-REDES"

Robson Ferreira

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

Orientador: Prof.Dr. Lidério C. Ioriatti Jr.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1987

OK

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

Robson Ferreira

APRESENTADA

AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI

DADE DE SÃO PAULO, EM 17 DE agosto DE 1987.

COMISSÃO JULGADORA:

Lidério Jr

Dr. Lidério C. Ioriatti Jr. Orientador

Gilmar Eugênio Marques

Dr. Gilmar Eugênio Marques

José Roberto Leite

Dr. José Roberto Leite

A minha família,
naturalmente.

E aos amigos de ontem e hoje...

" Assim também vós, quando fizerdes tudo o que vos
for mandado, dizei: somos servos inúteis, porque
fizemos somente o que devíamos fazer."

S.Lucas,17:10

Ao Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior, por sua visão clara e competente do que seja Física, que transformaram este trabalho em algo extremamente proveitoso e agradável para mim; e pelo estímulo constante a um orientado absolutamente displicente com os prazos de seus compromissos.

Aos Profs. Drs. Sylvio G. Rosa Jr.; A. Ricardo D. Rodrigues; Jarbas C. Castro Neto e Oscar Hipólito, pelo grande apoio recebido nestes últimos anos. E também aos Profs. Drs. B. K. Cneng; Hamilton Bicalho e Cesar Cusatis, de modo especial nos tempos de graduação.

A tantas e tão boas amizades que pude fazer nestes anos, com as quais pude compartilhar de inúmeros momentos inesquecíveis.

Ao CNPq e à FAPESP, pelo apoio financeiro.

(Este trabalho foi realizado com os recursos computacionais do DFCM do IFQSC.)

INDICE

Indice	i
Resumo	iii
Abstract	iv
 INTRODUÇÃO	 1
 CAPITULO - 1 : ESTADO DE IMPUREZAS LOCALIZADOS	 6
 CAPITULO - 2 : IMPUREZAS HIDROGENÓIDES EM POÇOS QUANTICOS E SUPER-REDES - INTRODUÇÃO	 16
2.a : Solução variacional	17
2.b : Resultados anteriores	24
2.c : Resultados quantitativos preliminares	32
 CAPITULO - 3 : IMPUREZAS DOADORAS RASAS EM SUPER-REDES	 35
3.a : Estado fundamental associado à primeira minibanda de condução: análise sistemá- tica	 39
3.b : Modelo simplificado para impurezas em uma super-rede: o papel da largura de minibanda	 52

CAPITULO - 4 : MINIBANDAS SUPERIORES	68
4.a : Poços isolados	69
4.b : Super-redes	72
CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS	75
REFERÊNCIAS	79

RESUMO

Energias de ligação do estado fundamental de doadores rasos em super-redes são consideradas teoricamente com o auxílio de um procedimento variacional que leva em conta a mistura do contínuo de estados da minibanda à qual o mesmo está associado. Os cálculos são realizados para um grande número de parâmetros de super-rede e qualquer posição da impureza na mesma. É mostrado que a dependência da energia de ligação com os vários parâmetros envolvidos pode ser completamente explicada em termos de um modelo simples unidimensional (tight-binding) onde a largura da respectiva minibanda de condução e a energia de ligação no limite de poço isolado são os únicos parâmetros relevantes. A extrema concordância quantitativa entre as energias de ligação derivadas deste modelo e as obtidas pelo método variacional mais rigoroso vem enfatizar o papel fundamental desempenhado pela largura de minibanda como o único parâmetro relevante ao se levar em conta os efeitos de tunelamento existentes nas super-redes.

ABSTRACT

A variational procedure which takes into account the mixing of a continuum of subband states has been used to investigate the binding energies of shallow donors in superlattices. The calculations were performed for a wide range of superlattice parameters and impurity positions. It is shown that the dependence of the binding energy upon the various superlattice parameters can be completely explained in terms of a simple one-dimensional tight-binding model where the bandwidth of the respective conduction subband and the binding energy in the isolated quantum well are the only relevant parameters. The quantitative overall agreement between the binding energies derived from this model and those found variationally is excellent and emphasizes the fundamental role played by the bandwidth as the only relevant parameter accounting for the tunneling effects.

INTRODUÇÃO

Desde a proposta original de Esaki e Tsu em 1970 [I.1] que a física de heteroestruturas de semicondutores vem sendo exaustivamente explorada. Os desenvolvimentos neste campo têm sido fundamentais, tanto em relação à física básica, mediante a oportunidade de observação de novos fenômenos físicos não presentes nos semicondutores "puros", quanto em relação à física mais aplicada, voltada mais diretamente, e principalmente, à indústria de dispositivos eletrônicos. Um número bastante grande de materiais semicondutores e de geometrias diferentes (tipo heterojunções, poços quânticos isolados, super-redes, etc.) vem sendo considerados nos últimos anos. Também existem várias técnicas que permitem o crescimento destas heteroestruturas, como MOCVD, LPE e MBE. Contudo, sem dúvida alguma, as microestruturas crescidas com Arseneto de Gálio e Arseneto de Gálio e Alumínio (Ga(Al)As - GaAs), mediante a técnica de MBE têm-se mostrado as mais promissoras e as melhores estudadas. Isto se deve em grande parte à associação entre o ótimo casamento de parâmetros de rede destes dois materiais ($\Delta a/a \sim 0.06\%$ para uma concentração de Alumínio na liga de $\sim 30\%$, onde $a \sim 5\text{\AA}$ é o parâmetro de rede do GaAs) e à possibilidade de crescimento de amostras de alta qualidade oferecida pelos recursos da técnica de MBE (como no caso de baixas taxas de crescimento, $\sim 1\text{ }\mu/\text{h}$, e um controle bastante rigoroso sobre os parâmetros de crescimento, através de

um sistema de monitoramento "in situ" das amostras que estão sendo crescidas).

O estudo da física de sistemas de baixa dimensionalidade se deve ao fato de que o GaAs e o Ga(Al)As possuem valores de gap diferentes. Assim, nas super-redes, por exemplo, onde são crescidos em camadas alternadas, um elétron (ou um buraco) tem mais afinidade a se posicionar nas camadas do material de gap menor, no caso o GaAs. Como as interfaces são praticamente perfeitas (na escala do parâmetro de rede), então a nova estrutura de potencial sentida pela partícula que se move na super-rede pode ser bastante satisfatoriamente considerada como uma estrutura tipo Kronig-Penney (ou poço quântico ideal para uma camada de GaAs expremida entre duas outras de Ga(Al)As) na direção de crescimento.

Um número bastante grande de contribuições à física e tecnologia de semicondutores tem sido apresentadas em cima destas heteroestruturas "ideais". Neste trabalho estaremos interessados em analisar alguns aspectos teóricos do problema de níveis de energia de impurezas doadoras rasas nestes tipos de super-redes. Estudos anteriores referentes a impurezas em semicondutores puros e em poços quânticos de semicondutores, mostram que uma variação bastante considerável das energias de ligação ocorre ao se reduzir adiabaticamente uma das dimensões do sistema. As super-redes está associado um fenômeno inteiramente diferente, qual seja, a possibilidade de tunelamento eletrônico através das

barreiras estreitas de Ga(Al)As, a qual vem a influir de maneira decisiva no valor das energias de ligação da impureza. Por outro lado, até agora os poucos resultados experimentais existentes referem-se apenas aos poços quânticos, nada havendo em relação a impurezas em super-redes.

Os cálculos teóricos utilizados para poços baseiam-se na aproximação de massa efetiva, e referem-se em geral ao estado fundamental e primeiros estados excitados associados à primeira minibanda. No capítulo - 1 o problema de impurezas rasas em cristais puros (bulk) de semicondutores é introduzido de maneira geral, considerando-se a existência de estados ligados e ressonantes e derivando-se a equação para os auto-estados eletrônicos na aproximação de massa efetiva. Também a forma do potencial de impureza é brevemente discutida e o problema de níveis hidrogenóides em uma super-rede é rapidamente introduzido no final do capítulo.

Uma vez estabelecida a Hamiltoniana de massa efetiva, o problema se reduz à determinação dos auto-estados e auto-valores da impureza. Assim, o capítulo - 2 apresenta uma solução variacional formal ao problema do estado fundamental de impureza em uma super-rede de parâmetros arbitrários. Uma análise qualitativa dos resultados anteriores é feita, e alguns resultados quantitativos obtidos com o auxílio da solução variacional geral são apresentados. Tanto matemática quanto fisicamente o caso mais simples ocorre quando a interação entre

poços vizinhos é desprezível, e, como veremos, os vários resultados variacionais concordam bastante bem, tanto qualitativa quanto quantitativamente, no caso de poços isolados. Contudo os efeitos de tunelamento sobre a energia de ligação se tornam importantes para super-redes de barreiras finas ($\leq 100 \text{ \AA}$), e poderão ser observados já neste capítulo.

O capítulo - 3 considera de maneira mais geral e sistemática o problema da super-rede. Veremos que o comportamento da energia de ligação do estado fundamental pode ser totalmente explicado em termos da competição entre efeitos de confinamento/tunelamento eletrônicos nas várias camadas semicondutoras. A relação destes efeitos com a proposta variacional apresentada é discutida fisicamente, e um modelo simples para o problema é proposto, levando a uma expressão analítica para a energia de ligação como função de um único parâmetro relevante, a saber, a largura da primeira minibanda, uma vez conhecida a solução para o problema de poço equivalente, obtida fazendo a largura das barreiras laterais crescer sem limites mantendo a altura das mesmas e a posição da impureza no poço constantes. Assim, este capítulo tanto estende os resultados de Ioriatti e Tsu (ref.[2.1]) quanto os analisa de maneira totalmente original.

Assim, nosso trabalho se concentra essencialmente sobre o estado ligado fundamental associado à primeira minibanda da super-rede. Contudo, existe uma infinidade de níveis associados à presença da impureza na heteroestrutura, sendo que já se tem

estudado, tanto teórica quanto experimentalmente, alguns deles, especialmente os primeiros estados excitados associados também à primeira minibanda. Até onde temos conhecimento, muito pouco se tem considerado, até o momento, a respeito dos níveis associados a minibandas de ordem superior. Uma das vantagens do método que utilizaremos para o estado fundamental é que seu formalismo é também adequado à consideração dos níveis fundamentais ressonantes associados às minibandas mais altas da super-rede. Este assunto será destacado no capítulo - 4, onde, para o caso de poços isolados, também é feita a comparação de nossos cálculos com alguns resultados experimentais existentes. Veremos também que o modelo simples apresentado no capítulo - 3 para o nível associado à minibanda fundamental é em geral também válido para níveis de minibandas superiores.

O capítulo - 5 se reserva à apresentação de nossas conclusões e considerações finais.

CAPITULO - 1: ESTADOS DE IMPUREZA LOCALIZADOS

O estudo de impurezas rasas em "bulk" semicondutores tem sido uma intensa área de pesquisa, tanto teórica quanto experimental, dentro da física de estado sólido. Os primeiros resultados estão revistos no trabalho de Kohn, de 1954 [1.1], e referem-se a doadores e aceitadores rasos em Si e Ge. Os cálculos teóricos, baseados na aproximação de massa efetiva, estavam em bom acordo com os primeiros resultados experimentais. Com o desenvolvimento das técnicas experimentais novos fenômenos puderam ser observados, como é o caso de níveis de impureza ressonantes, e também uma precisão maior no valor das energias de ligação dos primeiros estados rasos pode ser obtida. A relação destes estados com a estrutura de bandas do material hospedeiro pode ser determinada, e sua comparação com as previsões teóricas efetuada. Em cada caso a aproximação de massa efetiva tem se mostrado bastante acurada. Neste capítulo estaremos interessados em rever, de modo bastante condensado, as hipóteses principais envolvidas na derivação de uma equação de massa efetiva para doadores rasos em um cristal (bulk) semicondutor. Um número bastante grande de textos de revisão existe atualmente sobre o problema de impurezas em semicondutores, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental [1.1]. Assim, nosso objetivo aqui é apenas introduzir o problema de impurezas hidrogenóides em

semicondutores, uma vez que a questão de impurezas hidrogenóides em super-redes de semicondutores, que será o tema de todos os outros capítulos à frente, é citada aqui apenas "en passant".

O estudo das propriedades eletrônicas de um cristal semiconductor puro é bastante difícil, uma vez que se refere a um problema de muitos corpos, onde um mar de elétrons interage entre si e com todos os íons da rede (interação Coulombiana), e se deve também considerar efeitos de troca e correlação. A primeira aproximação consiste em reduzir este problema ao formalismo de um elétron, onde os demais efeitos são incluídos num potencial atrativo efetivo, $V_{\text{per}}(\vec{r})$, com a periodicidade da rede estática dos íons positivos, e onde cada elétron agora se move como se não houvessem os demais. Os auto-estados eletrônicos são combinações lineares antissimétricas dos produtos dos estados de Bloch monoelétrônicos, para os quais se tem

$$H_0 \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1)$$

onde

$$H_0 = \vec{p}^2 / (2m) + V_{\text{per}}(\vec{r}) \quad (1.a)$$

é a Hamiltoniana de partícula independente e $E_n(\vec{k})$ os auto-estados. O problema de impurezas doadoras consiste em substituir

um dos átomos da rede por outro com um número atômico maior (mas não da mesma coluna periódica, que se refere ao caso bem mais complicado de impurezas isoeletrônicas). Isto acrescenta um outro potencial, $U(\vec{r})$, não periódico, à Hamiltoniana de muitos corpos. Assim, analogamente,

$$H \Psi_i = E_i \Psi_i \quad , \quad (2)$$

onde

$$H = H_0 + U(\vec{r}) \quad (2.a)$$

e a solução geral do problema é agora uma combinação linear antissimétrica de produtos dos Ψ_i associados a cada elétron.

No passo seguinte expandimos Ψ_i no conjunto completo de estados de Bloch,

$$\Psi_i = \sum_n \int d\vec{k} \phi_n^{(i)}(\vec{k}) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad , \quad (3)$$

onde utiliza-se a representação de zona-reduzida e a soma se estende a todas as bandas. Substituindo-se (3) em (2) e utilizando-se de (1), obtemos

$$(E_n(\vec{k}) - E) \phi_n(\vec{k}) + \sum_{n'} \int d\vec{k}' U_{nn'}(\vec{k}, \vec{k}') \phi_{n'}(\vec{k}') = 0 \quad , \quad (4)$$

onde o índice do elétron é suprimido e

$$U_{nn'} = \int d\vec{r} \, \psi_{n,\vec{k}} \cdot U(\vec{r}) \cdot \psi_{n',\vec{k}} \quad (4.a)$$

Um semiconductor puro constituído de N elétrons possui sua banda de valência composta de N níveis ocupados e a de condução totalmente vazia, sendo tais auto-estados e auto-valores dados por (1). Se agora temos, após introduzir a impureza, N+1 elétrons, e se os N estados ocupados da banda de valência são afetados muito pouco pelo potencial da impureza, então apenas um dos estados ψ_i em cada estado de N+1 elétrons caracteriza o elétron "extra", e, portanto, as propriedades físicas devidas à impureza. É justamente este estado que é comumente chamado de estado de impureza, e cuja auto-função monoelétrica e auto-valor devem ser investigados via eq.(4) e (4.a).

Uma consequência física da introdução da impureza é que os estados desocupados da banda de condução são modificados em estados de espalhamento. Contudo, o efeito mais importante se refere à introdução de estados com uma grande densidade de probabilidade na vizinhança da impureza. Estes podem ser de dois tipos: estados ligados e estados ressonantes, dependendo se o auto-valor de energia se localiza no gap ou no contínuo da banda de condução. E nestes dois últimos que estamos interessados.

Pode-se mostrar que no caso em que $E \neq E_n(\vec{k})$ para qualquer valor de $\vec{k}$, então a eq.(3) admite uma solução que decai a zero a

grandes distâncias da impureza. Na super-rede um tal estado deve se encontrar logo abaixo da primeira minibanda e está associado a esta (simetria par na direção da super-rede). Contudo, soluções associadas à simetria ímpar da segunda minibanda podem ser encontradas no primeiro minigap, isto é, entre a primeira e a segunda minibandas. Uma vez que E neste caso se superpõe ao contínuo bidimensional associado à primeira minibanda, temos agora um nível ressonante. Pode-se demonstrar também que no caso de haver $E = E_n(\vec{k})$ para algum valor de $\vec{k}$, então (4) não admite solução com E real, mas sim para $E = E_0 - i\Gamma'$, $\Gamma' > 0$, e que a função de onda (3) é composta de duas partes, uma evanescente a grandes distâncias e outra propagante. Γ' é uma medida da largura do nível ressonante, ou ainda, seu inverso mede o tempo de vida de um elétron "ligado" à impureza neste nível. Cálculos do valor de Γ' podem ser importantes em estudos de propriedades de transporte nas super-redes. É importante ressaltar que tais níveis são característicos das super-redes, uma vez que no cristal puro os únicos níveis ressonantes doadores que podem ocorrer estão associados à existência de outros mínimos na estrutura de banda $E_n(\vec{k})$ do material (pontos X e L, por exemplo, para estruturas tipo "zinc-blende"). Aqui estes não são considerados, uma vez que estão associados a energias bastante acima do ponto Γ ($\vec{k}=0$) do GaAs. Além do mais, consideraremos camadas de Ga(Al)As com $x \leq 0.45$, de modo a evitar as complicações da estrutura de bandas deste material para

concentrações maiores de Al (nesta região a mistura possui gap direto no ponto Γ , como o GaAs; para $x \approx 0.45 - 0.5$ mínimos equivalentes aparecem em $E_n(\vec{k})$ e, para concentrações maiores o mínimo está associado ao ponto X da zona de Brillouin).

A presença da impureza introduz na Hamiltoniana de muitos corpos do cristal puro um termo do tipo

$$\sum_i (- Z_{imp} e^2 / r_i + Z_{hosp} e^2 / r_i) \quad , \quad (5)$$

onde Z_{imp} e Z_{hosp} são respectivamente os números atômicos da impureza e do hospedeiro e a soma se estende sobre o número total (variável) de elétrons. Esta é a única correção à Hamiltoniana original caso não se considerem efeitos de relaxação da rede devidos aos átomos estranhos da impureza. Derivar o potencial de impureza de um elétron, $U(\vec{r})$ (eq.(2.a)), da eq.(5) não é nada simples; entretanto quando se consideram estados de impureza bastante estendidos, de tal forma que efeitos de curto alcance são pouco importantes e a parte de longo alcance do potencial é a que realmente mais importa, então em geral se pode considerar a seguinte forma:

$$U(\vec{r}) = - (Z_{imp} - Z_{hosp}) e^2 / (\epsilon r) + U_c(\vec{r}) \quad , \quad (6)$$

onde $\epsilon = \epsilon(\vec{k}=0)$ leva em conta efeitos coletivos e enfatiza o caráter de longo alcance do potencial da impureza, e $U_c(\vec{r})$

descreve efeitos de curto alcance, como: correções devidas à dispersão espacial da constante dielétrica; informações sobre a natureza química da impureza, além de Z_{imp} ; informações sobre a estrutura cristalina do cristal hospedeiro. (Mostrou-se recentemente [1.2] que efeitos relacionados à dependência espacial da constante dielétrica são muito pequenos para doadores rasos em poços quânticos, mesmo para o estado fundamental, onde a função de onda eletrônica possui amplitude máxima sobre a impureza.) No caso $Z_{imp} \neq Z_{hosp}$ o segundo termo é bem menos importante que o primeiro, e em geral é desprezado.

O último ponto deste capítulo se refere a considerar brevemente a aproximação de massa efetiva associada à resolução da eq.(4). Em primeiro lugar, como veremos, para estados doadores rasos as energias de ligação envolvidas são muito menores que a separação entre as bandas de valência e de condução, o que indica que $U(\vec{r})$ não é forte o suficiente de modo a produzir uma mistura considerável dos estados de condução e valência. Deste modo pode-se omitir a soma em (4) e se considerar apenas os estados desocupados da estrutura de bandas. A aproximação de massa efetiva consiste, essencialmente, em substituir os estados de condução de Bloch por ondas planas ou, analogamente, assumir a forma $U(\vec{k}', \vec{k}) = U(\vec{k}' - \vec{k})$ no cálculo dos elementos de matriz $U_{nn'}$ em (4.a). Pode-se mostrar que esta é uma suposição bastante aceitável quando o potencial exterior é suave o suficiente tal que suas componentes de Fourier de alta frequência sejam

desprezíveis, de modo que sua contribuição de longo alcance seja a mais importante e os auto-estados sejam bastante extendidos sobre a rede. Neste caso apenas os estados próximos ao mínimo de condução são importantes. Expandindo $E(\vec{k})$ ao redor de $\vec{k} = 0$ (ponto Γ), na aproximação de banda isotrópica, e até segunda ordem em $|\vec{k}|$, temos $E(\vec{k}) = (\hbar^2/2m^*) \vec{k}^2$, onde $E(\vec{k}=0)$ é tomado como origem da escala de energia. Assim,

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{k}^2 - E \right) \phi_m(\vec{k}) + \int d\vec{k}' U(\vec{k}-\vec{k}') \phi_m(\vec{k}') = 0, \quad (7)$$

e se tem a equação de massa efetiva

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r}), \quad (8)$$

onde $\Phi(\vec{r})$ é a transformada de Fourier de $\phi_m(\vec{k})$. Nesta aproximação, o auto-estado de impureza é dado por

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r}) \cdot \psi_{m,0}(\vec{r}) \quad (9)$$

Eq.(8) é a equação básica para o estudo de impurezas hidrogenóides. Uma vez que $U(\vec{r}) = -e^2/(\epsilon r)$, vemos que os dois efeitos principais ao se colocar um átomo hidrogenóide no cristal semiconductor estão contidos em m^* e ϵ , e se referem, respectivamente, ao fato do elétron sentir a periodicidade da rede e a presença dos outros elétrons do cristal. A solução para o

estado fundamental em um cristal de GaAs ($m^* = 0.067m$ e $\epsilon = 12.5$) é dada por

$$E_b = -e^4 m^* / (2\hbar^2 \epsilon^2) = -(m^* / (m \epsilon^2)) R_y = -5.87 \text{ meV} \quad (10)$$

$$a_b^* = \hbar^2 \epsilon / (m^* e^2) = (m \epsilon / m^*) a_b = 98.7 \text{ \AA} \quad (10.a)$$

onde a_b é o raio de Bohr e R_y a energia de ligação (Rydberg) para o átomo isolado, respectivamente iguais a $0.5 \text{ \AA}$ e 13.6 eV . Vemos então que de fato $|E_b|$ é bastante pequena e a função de onda é bastante estendida espacialmente, verificando consistentemente neste caso as aproximações utilizadas.

Ao se passar do cristal puro para a super-rede deve-se considerar a existência de um potencial, $V_{sl}(z)$, associado à nova periodicidade na direção de crescimento. Como vimos, V_{sl} é constante em qualquer camada da heteroestrutura e varia abruptamente nas interfaces entre camadas alternadas, refletindo a diferença de gap entre os dois materiais que entram na composição da super-rede. A existência do potencial V_{sl} é levada em conta, no formalismo de função envelope [1.3], através da imposição de condições de contorno adequadas à função $\Phi(\vec{r})$, eq.(9), chamada de função envelope do auto-estado eletrônico $\psi(\vec{r})$. No nosso caso, estas condições são: a) continuidade de $\Phi(\vec{r})$, e b) continuidade de $(\partial \Phi(\vec{r}) / \partial z) / m^*$ sobre as

interfaces. Esta última condição expressa simplesmente a continuidade da densidade de corrente eletrônica através da interface. Até onde se tem podido verificar experimentalmente, a equação de massa efetiva, associada às condições de contorno sobre a função envelope, tem-se mostrado bastante satisfatória, de tal modo que será utilizada como ponto de partida de nosso estudo.

CAPITULO - 2: IMPUREZAS HIDROGENÓIDES EM POÇOS QUANTICOS E SUPER-REDES - INTRODUÇÃO

Uma solução variacional geral apresentada ao problema de uma impureza doadora em uma super-rede de parâmetros arbitrários foi proposta em 1985 por Ioriatti e Tsu [2.1]. Eles estudaram o estado fundamental de uma impureza localizada no centro de uma camada de GaAs para várias espessuras de poços e barreiras e para uma concentração x de Alumínio fixa. Um dos objetivos do nosso trabalho consiste em um estudo mais sistemático da dependência da energia de ligação E_b com os vários parâmetros envolvidos no problema, $E_b = E_b(a, b, V_0; Z_i)$, onde a e b são as espessuras das camadas de GaAs e Ga(Al)As, respectivamente, V_0 é a parte da descontinuidade do gap entre os dois materiais que pertence à banda de condução e Z_i a posição da impureza ao longo da direção de crescimento. Naturalmente, $E_b(Z_i) = E_b(Z_i + a + b)$, devido à simetria do problema, onde $a + b$ é o período da super-rede. V_0 é função exclusiva da concentração x na liga de Ga(Al)As e é empiricamente dada por [2.2,15]

$$\Delta E_g(\text{Ga(Al)As}) = \Delta E_g(\text{GaAs}) + 1.155x + 0.37x^2 \quad (11)$$

$$V_0(\text{eV}) = 60\% (\Delta E_g(\text{Ga(Al)As}) - \Delta E_g(\text{GaAs})), \quad (11.a)$$

onde ΔE_g se refere ao gap do cristal puro. (Assim podemos ver

claramente porque, ao se crescer camadas alternadas de Ga(Al)As e GaAs, as primeiras funcionam como barreiras aos elétrons aprisionados nas segundas: é que o fundo da banda de condução do GaAs (poço) está dentro do gap das camadas laterais, e o elétron deve ter sua função de onda decaindo ao penetrar nestas "barreiras".)

A primeira parte deste capítulo contém a apresentação do método descrito na ref.[2.1]. Podemos ter uma idéia mais quantitativa da relevância da geometria da heteroestrutura sobre o valor de E_b considerando a aplicação do método apresentado a várias situações de confinamento diferentes para a impureza. Alguns resultados assim obtidos são apresentados na terceira parte deste capítulo, após uma revisão dos métodos utilizados e resultados obtidos anteriormente para o estudo do estado fundamental de impurezas em poços quânticos e super-redes. Esta segunda parte também servirá para nos dar uma idéia da relevância das aproximações a serem introduzidas quando da apresentação do método na primeira parte do capítulo.

2.a) SOLUÇÃO VARIACIONAL

A Hamiltoniana do problema não apresenta separação de variáveis e, deste modo, deve ser resolvida aproximadamente. O método mais adequado a se utilizar no nosso caso é o variacional, uma vez que os valores de interesse para x são tais que V_0 é

grande demais para ser tratado como perturbação ($\sim 150 - 300$ meV).

Existem três casos limites onde a Hamiltoniana do problema apresenta solução exata: o caso tridimensional (bulk - 3D), onde $V_0 = 0$; o bidimensional (bulk - 2D), onde a impureza se encontra entre duas paredes de altura $V_0 \rightarrow \infty$ e de separação indo a zero; o de uma interface [2.3], onde a impureza se situa sobre uma descontinuidade infinita de potencial, onde $V_0 \rightarrow \infty$ para $z < Z_i$ e $V_0 = 0$ para $z > Z_i$. As soluções para o estado fundamental são:

$$\begin{aligned} 3D & \begin{cases} E_b = - Ry^* \\ \psi = \text{cte} \cdot \exp(-r/ab^*) \end{cases} \\ 2D & \begin{cases} E_b = - 4 Ry^* \\ \psi = \text{cte} \cdot \exp(-2\rho/ab^*) \end{cases} \\ I & \begin{cases} E_b = - Ry^*/4 \\ \psi = \text{cte} \cdot z \cdot \exp(-r/2ab^*) ; (z > Z_i=0) \end{cases}, \quad (12) \end{aligned}$$

onde $Ry^* = (m/m^*) Ry / \epsilon$ é o valor de Rydberg efetivo. Vemos uma variação de um fator 16 em $|E_b|$ entre duas geometrias limites, de tal modo que esta é também uma das motivações do nosso trabalho.

Os três casos limites acima podem ser agrupados sob a forma genérica

$$\psi = \phi(z) \cdot e^{-r/\lambda}, \quad (13)$$

onde λ é um parâmetro e $\phi(z)$ uma função apenas da direção da super-rede (z), e $r = (x^2 + y^2 + (z-Z_i)^2)^{1/2} = (\rho^2 + (z-Z_i)^2)^{1/2}$. Esta forma foi utilizada por alguns autores para tratar o problema do poço, onde $\phi(z)$ é agora a solução fundamental para o problema sem a impureza. Neste caso λ é o único parâmetro variacional. Como veremos, esta forma para $\phi(z)$ produz resultados bastante bons para o caso de poço isolado. Contudo, e este é o ponto crucial, para super-redes é completamente falso supor $\phi(z)$ como o estado mais baixo da minibanda à qual está associado o nível doador, uma vez que a impureza mistura todos os níveis desta subbanda e, deste modo, a princípio todos devem ser levados em conta em $\phi(z)$. Assim, é conveniente deixar $\phi(z)$ arbitrário e a ser determinado variacionalmente, de tal modo a minimizar E_b (para um dado valor do parâmetro variacional λ). Voltaremos a este ponto ao considerarmos, no próximo capítulo, o problema da super-rede, onde procuraremos discutir mais detalhadamente a física que se encontra embutida em $\phi(z)$. Por ora apenas acataremos a solução variacional dada pela eq.(13) como uma boa candidata, uma vez que interpola os três casos limites que admitem solução exata. Na realidade, admitiremos a seguinte solução,

$$\psi = N(z) \cdot \phi(z) \cdot \exp[-r/\lambda]; \quad (14)$$

$$N(z) = (2/\lambda) \cdot \exp[|z-Z_i|/\lambda] / \sqrt{1 + \frac{2}{\lambda}|z-Z_i|}, \quad (14.a)$$

onde $N(z)$ é escolhido de tal modo que $|\phi(z)|^2$ represente a densidade de probabilidade de encontrar o elétron na posição z . Vemos claramente que a proposta variacional consiste no orbital 1S do átomo de hidrogênio modulado por uma função amplitude que depende apenas da distância ao longo da super-rede. A Hamiltoniana de massa efetiva é escrita como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + V_{SL}(z) , \quad (15)$$

onde $V_{SL}(z) = V_0$ nas camadas de Ga(Al)As e nulo nas de GaAs. Após integração sobre as variáveis transversais, a energia do sistema (impureza + super-rede) é dada por

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \phi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \phi}{dz^2} + \phi (V_i(z) + V_{SL}(z)) \right] , \quad (16)$$

$$V_i(z) = -\frac{\hbar^2}{m^* \lambda^2} \left[\frac{2\lambda/ab^* - 1}{1 + \frac{2}{\lambda}|z - Z_i|} + \frac{1/2}{\left(1 + \frac{2}{\lambda}|z - Z_i|\right)^2} \right] . \quad (16.a)$$

É importante salientar que o problema tridimensional original ficou reduzido a outro unidimensional, associado ao potencial efetivo $V_i(z)$. Este, por sua vez, é composto de dois termos, um de longo e outro de curto alcance. Contudo, considerando que, conforme os casos limites exatos apresentados na eq.(12), $0.5 \leq \lambda/ab^* \leq 2$, vemos que $|V_i(z)| \leq |V_i(0)| = (\hbar^2/m^* \lambda^2)(2\lambda/ab^* - 1/2) \leq 4Ry^*$ (para $\frac{\lambda}{ab^*} \sim 1$ temos $|V_i(z)| \leq 3Ry^*$), que é um valor bastante pequeno em relação

a $V_0 \sim 30 - 50 R_y^*$. Além do mais, para $Z_i = 0$ = centro de um poço, $|V_i(z = a/2 = \text{interface})| \ll 1.5 R_y^*$ para $a \gg a_b^*$ e $\frac{\lambda}{a_b^*} \sim 1$, o que mostra que $V_i(z)$ decai rapidamente na escala do período da super-rede, e, em geral, pode-se considerar que $|V_i(z)| \ll V_0$. Assim, para super-redes de camadas não muito estreitas, ($a, b \gg a_b^*$), os efeitos de confinamento da função de onda eletrônica ao redor da impureza devem-se, podemos dizer, em grande parte à existência de uma "perturbação" do potencial periódico $V_{sl}(z)$ em uma região muito pequena ao redor de $z = Z_i$. Que os estados são bastante estendidos espacialmente e as energias de ligação bastante pequenas pode-se ver do fato que a "perturbação local" é bastante rasa. Este fato será de grande importância no próximo capítulo, onde consideraremos explicitamente o caso das super-redes.

Vemos também do fato que $V_0 \gg R_y^*$ que as funções de onda devem ter amplitude considerável apenas nos poços vizinhos à impureza, decaindo rapidamente ao penetrar na região das barreiras. Este forte confinamento nos poços é responsável por uma aproximação introduzida nos cálculos acima, qual seja, a de considerar m^* constante sobre toda super-rede. Desprezar as variações nas massas efetivas ao se cruzar uma interface na super-rede é uma boa aproximação na medida em que $|\phi|^2$ é pequena nas barreiras, de tal modo que m^* assume o valor associado aos poços (GaAs). Quanto menor $|\phi|^2$ nas barreiras em relação a seu valor nos poços tanto menos o elétron "sente" as

diferenças em m^* e tanto melhor a aproximação. Também as diferenças de constantes dielétricas podem ser desprezadas, uma vez que $|\epsilon_1 - \epsilon_2|/(\epsilon_1 + \epsilon_2) \ll 1$, onde os índices 1 e 2 referem-se aos valores de ϵ para o GaAs e Ga(Al)As. De fato, para poço, alguns cálculos realizados [2.4] levando em conta as variações de massa efetiva e a presença de cargas imagem (variações de ϵ) mostram que alguma correção deve ser introduzida para camadas de GaAs muito pequenas (tal que $|\phi|^2$ começa a se tornar relevante nas barreiras), como veremos mais à frente.

Minimizando E com relação a ϕ , mantendo-se λ fixo, obtemos a seguinte equação diferencial para ϕ :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{4x^2} + \frac{K}{x} \right) \phi = 0, \quad (17)$$

onde o seguinte conjunto de substituições é utilizado:

$$\beta^2 = (2m^*/\hbar^2)(V_0 \cdot \xi - E); \quad K = \frac{2\lambda/ab^* - 1}{2\beta\lambda} \quad (17.a)$$

$$x = \beta\lambda(1 + 2|z - z_1|/\lambda),$$

e $\xi = 0$ nas camadas de GaAs, e $\xi = 1$ nas de Ga(Al)As.

A eq.(17) é conhecida na literatura como equação diferencial de Whittaker, e suas duas soluções linearmente independentes, $M_{k,0}(x)$ e $W_{k,0}(x)$ como funções de Whittaker [2.5].

Pode-se mostrar facilmente que esta equação reproduz exatamente as soluções particulares eq.(12).

Apresentadas as soluções para cada região onde $V_{sl}(z)$ = constante (cada camada), o próximo passo a ser discutido refere-se às condições de contorno que devem ser impostas à solução variacional proposta de modo a se "ligar" sobre as interfaces as soluções obtidas para cada camada isoladamente. Contudo, como vimos no capítulo anterior, estas se resumem nas condições de continuidade de ψ e $\partial\psi/\partial z$. Na aproximação de m^* constante, o problema se resume na continuidade de $\phi(z)$ e $d\phi(z)/dz$ sobre cada interface, como pode ser mostrado facilmente. No caso de uma super-rede a imposição de continuidade de ϕ e $d\phi/dz$ sobre todas as interfaces e sobre a impureza dá origem a uma curva $E = E(\lambda)$, donde $E_b = E_{min} - E_0$, onde E_0 é a energia do fundo da minibanda à qual está associado o nível de impureza e $\partial E(\lambda)/\partial \lambda = 0$ para $E = E_{min}$. Voltaremos a este caso no próximo capítulo, onde é discutido o problema de ter de se considerar, em princípio, as infinitas interfaces da super-rede. Para o poço temos apenas que impor a continuidade de ϕ e $d\phi/dz$ sobre as duas interfaces e a impureza, e também que $|\phi| \rightarrow 0$ para $|z - Z_i| \rightarrow \infty$, simplificando consideravelmente a obtenção de resultados. Neste caso a subbanda se degenera no nível de caixa de energia E_0 e, novamente, $E_b = E_{min} - E_0$.

2.b) RESULTADOS ANTERIORES

Fica claro das soluções exatas particulares (eq.(12)) a importância dos efeitos da geometria de confinamento sobre E_b . Estes resultados, embora simples, contêm duas características importantes associadas ao comportamento de E_b :

A) $|E_b|$ cresce à medida que "a" diminui (ou que aumenta o confinamento);

B) $|E_b|$ diminui à medida que a impureza se desloca do centro do poço em direção à interface.

Como veremos, entretanto, A e B nem sempre se verificam, uma vez que nenhum destes três casos oferece oportunidade ao aparecimento de efeitos de tunelamento, que se tornam cruciais nas super-redes. A e B são tanto melhores quanto maiores b e V_0 . Para o caso de poço, onde $b \rightarrow \infty$ e V_0 é finito, ao reduzirmos "a" adiabaticamente, $|E_b|$ deve inicialmente satisfazer A e atingir um valor máximo para $a \approx ab^*$, onde os efeitos de confinamento são máximos. Reduzir a ainda mais leva a um número maior de colisões do elétron contra as interfaces e, conseqüentemente, a uma maior penetração nas barreiras laterais, deslocando ϕ e reduzindo assim $|E_b|$, de tal modo que $|E_b| \rightarrow Ry^*$ para $a \rightarrow 0$, que se refere novamente ao caso 3D (como em $a \rightarrow \infty$ e Z_i longe das interfaces). Também é claro que quanto maior V_0 tanto menor o

valor de a para o qual $|E_b|$ é máximo, de tal modo que, para $V_0 \rightarrow \infty$, A é completamente satisfeita e $|E_b|$ cresce monotonicamente até $4Ry^*$ para $a \rightarrow 0$: caso 2D.

J. Levine estudou, em 1965, o caso de uma impureza hidrogenóide colocada sobre uma descontinuidade infinita de potencial [2.3]. Ele mostrou que o estado fundamental deste sistema é a solução $2P_z$ (z perpendicular à descontinuidade) do átomo isolado, na região de potencial nulo, de energia $-Ry^*/4$, obtendo assim uma variação de um fator 4 em relação à energia do estado fundamental do cristal puro.

O estudo de impurezas hidrogenóides confinadas em geometrias do tipo poço isolado passou a ganhar relevância apenas após o surgimento das técnicas de crescimento epitaxial. Impulsionado por resultados experimentais de fotoluminescência em uma super-rede de InAs-GaSb, que demonstravam a presença de uma estrutura energeticamente situada abaixo da linha de recombinação intrínseca do sistema, G. Bastard em 1981 propôs o primeiro modelo para o estudo de impurezas em um sistema de múltiplos poços quânticos de Ga(Al)As-GaAs [2.6]. No seu caso $V_0 \rightarrow \infty$ (poço infinito) para $|z| > a/2$, e sua solução variacional no poço reproduz os três limites onde soluções exatas são conhecidas. Seus resultados refletem bem as características A e B acima e, para $|z| > a/2$ mostram uma energia de ligação que vai rapidamente a zero ao se afastar a impureza da interface. Seus resultados referem-se apenas ao estado fundamental de impureza

associado ao primeiro nível de caixa.

O passo seguinte foi dado independentemente por Greene e Bajaj [2.7] e Mailhiot et al. [2.4] em 1982/3. Ambos consideraram a influência da altura finita V_0 (com $0.1 < x < 0.4$ e $V_0 = 85\% \Delta E_g$ em vez de 60%, como é mais aceito atualmente) sobre E_b para o estado fundamental e os primeiros estados excitados da série hidrogenóide associada ao primeiro nível de caixa no sistema de múltiplos poços de Ga(Al)As-GaAs. Greene e Bajaj estudaram o caso onde Z_i = centro do poço e m^* e ϵ são assumidos independentes de z . Mailhiot et al. consideraram também o caso Z_i = interface e m^* e ϵ diferentes em cada camada, levando em conta efeitos de cargas imagem. Suas funções variacionais fazem uso da simetria cilíndrica do problema e são bem mais complexas que a de Bastard.

Logo em seguida (1983) Tanaka et al. [2.8] estenderam os dois resultados anteriores com V_0 finito para a região $|Z_i| > a/2$ ($V_0 = 85\% \Delta E_g$ e m^*, ϵ = valores para GaAs), e obtiveram uma variação mais suave de E_b com Z_i se afastando da região de poço que a obtida por Bastard. Também consideraram o caso do poço assimétrico, onde cada camada lateral possui uma concentração diferente de Alumínio. A função variacional por eles utilizada é uma extrapolação direta da utilizada por Bastard e é da forma dada pela eq.(13), onde $\phi(z)$ é dado pela solução fundamental do poço finito.

Deste modo, estes três últimos trabalhos demonstram a influência dos efeitos de penetração nas barreiras sobre E_b .

Contudo, nenhum deles leva em conta efeitos de tunelamento entre-poços, que vão se tornar importantes (para V_0 fixo) para $b \propto ab^*$. A primeira tentativa na direção de sanar esta deficiência foi feita por Chaudhuri, ainda em 1983 [2.9]. Seu modelo considera uma impureza no centro de um poço e cuja auto-função adquire amplitude considerável apenas até os poços primeiros-vizinhos (modelo de três poços). Sua idéia inicial era encontrar um limite inferior b_{min} tal que para $b \gg b_{min}$ seu modelo fosse acurado para o cálculo de E_b . Seu modelo desconsidera as variações de m^* e ϵ e utiliza como auto-estado variacional a função dada pela eq.(13) com $\phi(z)$ sendo a solução do estado fundamental de três poços acoplados. Assim, seu formalismo é válido somente para super-redes onde a largura (W) da primeira minibanda é desprezível em relação a Ry^* . Se $W \sim Ry^*$ então se torna indispensável levar em conta também os outros estados da primeira minibanda, e não apenas o fundamental, em $\phi(z)$.

O método geral para o estudo dos níveis de impurezas hidrogenóides em super-redes de Ga(Al)As-GaAs foi apresentado simultaneamente por Z. Liu et al.[2.10-11] e por L. Ioriatti e R. Tsu [2.1]. Ambos consideraram para o estado fundamental a solução variacional geral apresentada pela eq.(13) onde λ e $\phi(z)$ são obtidos variacionalmente de tal modo a minimizar a energia E do elétron ligado à impureza. Deste modo, E é uma funcional de $\phi(z)$, para um dado valor de λ , e o problema tridimensional original é reduzido a outro unidimensional após integração sobre

as coordenadas transversais (x e y). A minimização de E dá origem a uma equação diferencial de segunda ordem para $\phi(z)$, associada ao movimento efetivo do elétron na direção de crescimento z da super-rede. Até aqui os dois trabalhos são completamente equivalentes. A tabela abaixo compara as principais características dos mesmos.

	Ref. [2.10-11]	Ref. [2.1]
m^+	descontínua	contínua
e	descontínua (sem carga imagem)	contínua
banda	não parabólica	parabólica
z_I	centro de um poço interface	centro de um poço
x	0.1 e 0.4	- 0.3
V_0	15% : 85 %	15% : 85 %
a, b	$a = b$	arbitrários

TABELA - 1: RESUMO COMPARATIVO DAS REF. [2.10,11] E [2.1]

Apesar de tratarem do mesmo problema e com o auxílio do mesmo método, contudo a ênfase de cada trabalho é bastante particular. O trabalho de Ioriatti e Tsu se utiliza de

aproximações mais simples (m^* , ϵ e parabolicidade da banda) e trabalha com impurezas apenas no centro de um poço da super-rede com o mesmo valor de x (ou V_0). A ênfase do trabalho está no estudo dos efeitos de tunelamento eletrônico que se realçam à medida que b é diminuído adiabaticamente para um dado valor de a . Também é claramente apresentada a física embutida atrás da proposta variacional eq.(14) : 1) $|\phi(z)|^2$ representa a probabilidade de se encontrar o elétron na posição z em seu movimento efetivo na direção da super-rede; 2) $\phi(z)$ deve levar em conta os efeitos de mistura dos estados deslocalizados do contínuo da primeira minibanda devidos à presença da impureza atrativa. É justamente este segundo item que, ao ser associado à largura W da primeira minibanda, constitui o principal resultado do nosso presente trabalho (como veremos no próximo capítulo).

O trabalho do outro grupo é desenvolvido em duas etapas. Primeiro o método de unidimensionalização é apresentado para o estudo da série hidrogenóide associada ao nível fundamental de um poço isolado. A ênfase deste primeiro trabalho está em verificar, de maneira bastante rigorosa, os limites de validade do modelo de poço infinito de Bastard. A motivação estava no bom acordo entre as medidas experimentais e os cálculos teóricos da diferença $E_{1s} - E_{2s}$ para excitons em poços quânticos bastante estreitos ($\sim 30 \text{ \AA}$, $x = 0.37$), desenvolvidos por Miller et al. (1981) [2.12]. Os resultados de Mailhiot et al. e Greene e Bajaj estabeleciam uma largura mínima $\gtrsim 40 \text{ \AA}$ (para $x = 0.4$) como limite de validade para

o modelo de Bastard. Uma vez que os raios de Bohr efetivos para excitons leves e pesados são bem maiores que a_b^* ($= 130,160$ e $98.7 \text{ \AA}$, respectivamente), seria então de se esperar que o modelo de poço infinito valesse também para impurezas hidrogenóides onde valesse para excitons. Para este fim tornava-se importante considerar as diferenças de massa efetiva e constante dielétrica (mesmo sem levar em conta cargas imagem), que são responsáveis por correções no valor de E_b , principalmente na região de interesse de poços estreitos. Efeitos de não-parabolicidade da banda de condução são introduzidos apenas no segundo trabalho, onde se verifica serem de menor importância sobre E_b que os dois primeiros (m^* e ϵ). De fato, os resultados por eles encontrados estendem a validade do modelo de Bastard para poços de dimensões bem menores que $40 \text{ \AA}$: $a_{\min} \sim 12 \text{ \AA}$ para $x = 0.4$ e impureza no centro do poço, assumindo a validade da aproximação de massa efetiva para poços bastante estreitos e considerando diferenças de no máximo 6% em $|E_b|$. Para impurezas na interface e $a_{\min} \sim 12 \text{ \AA}$ os erros envolvidos são da ordem de 14%. Além do mais, verificaram que para a γ a_b^* é uma aproximação muito boa desconsiderar a variação de massa efetiva para $Z_i =$ centro do poço. Neste trabalho consideraram também os quatro primeiros estados excitados ($2S$, $2P_{\pm 1}$, $2P_0$).

O segundo trabalho refere-se à generalização do método já desenvolvido, de modo a incluir agora as super-redes. Este passo é direto, uma vez que todo o formalismo já havia sido

apresentado, sendo apenas incluídos os efeitos de não-parabolicidade da banda de condução do GaAs. Aqui a preocupação dos autores, em relação ao estado fundamental, é dupla. Em primeiro lugar desejam testar a conjectura de Chaudhuri relacionada à existência de apenas um máximo em $|E_b|$ ao se diminuir $a=b$ continuamente (para um dado V_0 e Z_i). O resultado de duplo máximo obtido por este último com o auxílio do modelo de triplo poço é então associado à sua impossibilidade de levar em conta efeitos de espalhamento da função de onda eletrônica a poços próximos-vizinhos. Seus resultados quantitativos mostram ainda que as correções no valor de E_b devidos às diferenças em m^* e ϵ são bem menores que no caso de poço isolado: valores de pico 6% para super-rede e 16% para poço isolado, para o caso $x=0.4$ e Z_i = centro do poço. O outro ponto enfatizado refere-se à existência de uma correção quase desprezível em E_b devida aos efeitos de não-parabolicidade nas camadas de GaAs. O pico de correção para $x = 0.4$ e Z_i = centro do poço é da ordem de 3%, contra os 20% obtidos por Chaudhuri e Bajaj (1984) [2.13] para $x = 0.3$. A explicação para tamanha discrepância está em que estes últimos ao mesmo tempo desprezaram a diferença de massa efetiva entre poço e barreira e corrigiram a massa efetiva do Arseneto de Gálio com efeitos de não-parabolicidade. Assim, o resultado final era que tanto poço como barreira tinham suas massas efetivas corrigidas. Contudo, m^* deve variar apenas nas camadas de GaAs, uma vez que nas barreiras o nível eletrônico se

encontra no gap do Ga(Al)As, bem abaixo do seu ponto Γ , levando a uma correção de não-parabolicidade totalmente desprezível, com $m^*(\text{Ga(Al)As}) = m^*(\text{ponto } \Gamma)$ e independente da energia E. Assim, um tratamento plausível dos efeitos de não-parabolicidade sobre E_b devem levar em conta as diferenças em m^* desde o início.

Deste modo, os trabalhos de Z. Liu e T. Li e de Z. Liu e D. Ma podem nos fornecer uma medida quantitativa bastante rigorosa das diversas aproximações envolvidas em nossos cálculos. E vemos, de fato, que estas são bastante aceitáveis.

Quase simultaneamente Lane e Greene [2.14] também consideraram o caso geral de uma super-rede. Contudo, o método por eles utilizado, apesar de conter uma função de onda com um número bastante grande de parâmetros variacionais, não leva em conta a influência da presença da minibanda como um todo sobre o valor de E_b , senão que considera relevante apenas o estado mais baixo desta minibanda obtido pelo modelo de Kronig-Penney. Assim, seus resultados, como veremos no próximo capítulo, em geral subestimam o valor de $|E_b|$. Esta pode ser considerada uma mostra decisiva da importância de se deixar $\phi(z)$ arbitrária e a ser obtida de modo a minimizar E_b .

2.c) RESULTADOS QUANTITATIVOS PRELIMINARES

A fig.2 apresenta os resultados obtidos para as geometrias

apresentadas na fig.1.

FIG - 1: GEOMETRIAS CONFINANTES DE INTERESSE PARA UMA IMPUREZA (VER FIG - 2)

Podemos ver claramente a relevância dos efeitos de confinamento ao passarmos, respectivamente, das curvas (a) e (b) para (d) e (c). Notamos também que estes efeitos persistem mesmo para $z_0 \gg a b^*$, devido à natureza de longo alcance do potencial coulombiano. Uma medida da importância dos efeitos de tunelamento a poços vizinhos numa super-rede pode ser obtida considerando-se as curvas (c) e (e). Vemos que se $b \gg a b^*$, então a aproximação de poços isolados é bastante boa, enquanto para $b \ll a b^*$ a super-rede deve ser considerada. Devemos considerar ainda que as aproximações em m^* e ϵ subestimam muito mais o valor de $|Eb|$

para o caso de poço isolado que para a super-rede, de tal modo que, na realidade, um cálculo mais acurado deve enfatizar ainda mais os efeitos de tunelamento sobre E_b .

FIG - 2: ENERGIA DE LIGAÇÃO PARA AS GEOMETRIAS APRESENTADAS NA FIG - 1 ($V_0 = 40 Ry^*$)

CAPITULO - 3: IMPUREZAS DOADORAS RASAS EM SUPER-REDES

A obtenção de resultados para uma super-rede é mais complicada que para o caso de poço isolado uma vez que deve-se considerar a aplicação das condições de continuidade de $\Phi(z)$ e sua derivada sobre todas as interfaces e não mais apenas sobre duas. Contudo, devido à natureza física do problema, espera-se que $|\psi|^2$ decresça rapidamente para $|z - z_i| \gg \lambda$, onde λ é a medida de localização da função de onda eletrônica. Também, como vimos, $|V_i(z)| \sim Ry^* \ll V_0$ e cai rapidamente a zero para $z \gg ab^*$ (ou $z \sim$ alguns períodos da super-rede). Assim, um corte em $V_i(z)$ a uma distância $\Lambda \gg \lambda$ deve introduzir erros desprezíveis em E_b . Podemos ter uma idéia do erro introduzido considerando o caso mais desfavorável de uma impureza isolada em um cristal puro sujeita à perturbação $V = (+e^2 / (\epsilon r)) \theta(|z| - \Lambda)$, onde θ é a função degrau. Para o estado fundamental, temos

$$\psi \propto \exp[-r/ab^*] ;$$

$$\frac{|\langle \psi | V | \psi \rangle|}{Ry^*} = 2 \cdot e^{-2\Lambda/ab^*} \quad (18)$$

Para $\Lambda = 2ab^* \sim 200 \text{ \AA}$, temos uma correção menor que 4% em $|E_b|$.

Para super-redes, devido à maior localização da função de onda eletrônica nos poços, este erro é ainda menor (<1%), conforme a tabela abaixo.

a = b	1.0		0.5		0.3	
Λ_0	CB	CP	CB	CP	CB	CP
1.0					0.938	1.024
1.5	0.862	2.110	1.021	1.569	0.984	1.057
2.0	0.862	2.111	1.025	1.569	0.997	1.066
2.5	0.862	2.111	1.025	1.569	1.001	1.068
3.0					1.002	1.068

TABELA - 2: INFLUENCIA DA DISTANCIA DE CORTE SOBRE $|E_b|$
 POSIÇÃO DA IMPUREZA: CP = CENTRO DE UM POÇO;
 CB = CENTRO DE UMA BARREIRA (UNIDADES
 ATOMICAS); $\Lambda \equiv \frac{a(\text{ou } b)}{2} + (a+b) \cdot \text{INTEIRO} \left(\frac{\Lambda_0}{a+b} \right)$

Para distâncias tais que $|z - Z_i| > \Lambda$, uma vez que $V_i(z) = 0$, o problema reduz-se ao do modelo de Kronig-Penney (KP). Só que o interesse agora concentra-se em soluções $\phi_{KP}(z)$ que se anulem para $|z - Z_i| \rightarrow \infty$. Assim, conforme a fig.3, as soluções são : 1) para $z - Z_i > \Lambda$, $\phi_{KP}^{(o)}(z)$; 2) para $|z - Z_i| < \Lambda$, $\phi(z)$, soluções

reais da equação de Whittaker; 3) para $z-Z_i < -\Lambda$, $\phi_{kp}^{(E)}(z)$. Λ é escolhido tal que $\phi(z)$ e $\phi_{kp}(z)$ liguem-se sobre uma interface, de modo a facilitar os cálculos. Com o auxílio deste "truque" o problema numérico se simplifica, uma vez que agora aplicamos as condições de continuidade somente em algumas interfaces (apenas nas contidas no intervalo $|z-Z_i| \ll \Lambda$). Além do mais, para impurezas no centro de um poço ou de uma barreira basta considerar apenas "meia-super-rede", devido à simetria do problema : $\phi'(0) = 0$ para o nível fundamental associado a minibandas de simetria par e $\phi(0) = 0$ para ímpares. No resto do capítulo consideraremos apenas o nível fundamental abaixo da primeira minibanda (par).

FIG - 3.a: REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DE $|\phi(z)|^2$ PARA UMA IMPUREZA EM UM POÇO DE UMA SUPER-REDE (VER TEXTO)

FIG - 3.b: IDEM FIG - 3.a PARA O CASO DE UMA BARREIRA

O primeiro item deste capítulo contém a apresentação e discussão dos resultados obtidos. Um modelo extremamente simples para o problema de uma impureza hidrogenóide em uma super-rede é apresentado no segundo item, onde também seu limite de validade é estabelecido por comparação com os resultados variacionais mais rigorosos já conhecidos. As consequências deste modelo sobre o entendimento geral do problema de impureza que nos propusemos analisar neste trabalho são discutidas no final do capítulo.

3.3) ESTADO FUNDAMENTAL ASSOCIADO A PRIMEIRA MINIBANDA DE CONDUÇÃO: ANÁLISE SISTEMÁTICA

Os primeiros resultados são apresentados na fig.4, onde, a exemplo de Greene e Bajaj (1983) [2.7] $-E_b$ é plotado contra $V_0^{-1/2}$, aqui para V_0 entre 20 e 70 Ry^* e $a = ab^*$.

Curvas 1,2 e 3: impureza no centro do poço.

A curva 1 refere-se ao caso de poço isolado e, como os primeiros autores, obtemos uma reta com inclinação negativa : $-E_b/Ry^* = 2.339 - 1.359 \sqrt{Ry^*/V_0}$. Aumentar V_0 equivale a aumentar o confinamento do elétron no poço, obrigando $|\phi|^2$ a se concentrar sobre a impureza, aumentando $|E_b|$. Se b é finito mas suficientemente grande, como no caso da curva 2 onde $b = ab^*$, então, embora já possam ser observados, contudo os efeitos de tunelamento entre poços são ainda pequenos. Naturalmente estes efeitos tendem a diminuir $|E_b|$, uma vez que contribuem para deslocar $\phi(z)$, aumentando sua amplitude em lugares afastados de $z=Z_i$, a saber, nos poços vizinhos. Aqui a largura W da primeira minibanda varia entre 0.19 e 0.03 Ry^* ($\ll Ry^*$). Contudo, para $b = ab^*/2$ (curva 3), W varia entre 0.17 e 1.35 Ry^* , ou seja, $W \sim Ry^*$. Neste caso estes efeitos são bastante pronunciados, uma medida dos quais sendo dada por $1 - E_b(b=ab^*/2)/E_b(b \rightarrow \infty)$: $\sim 4\%$ para $V_0 = 70 Ry^*$ e $\sim 25\%$ para $V_0 = 20 Ry^*$.

FIG - 4: VARIAÇÃO DE $|Eb|$ COM V_o ($a = ab^*$ E $b \Rightarrow$ VER TEXTO)

ALTO: $\underline{V_o/Ry^*}$ E $\underline{x}$ (CONC. AL NAS BARREIRAS: 60% - 40%)

Curvas 4,5 e 6 : impureza na interface.

Temos, para a curva 4, o caso de poço isolado e, novamente uma reta, só que agora com coeficiente angular positivo: $-Eb/Ry^*$

$= 1.324 + 0.347 \sqrt{Ry^*/Vo}$. $|E_b|$ diminui com o aumento de Vo uma vez que o mesmo dá origem a uma diminuição em $|\phi(Z_i)|^2$, que vai a zero para $Vo \rightarrow \infty$. Para $b = ab^*$, curva 5, novamente os efeitos de interação entre poços são pequenos, mas é interessante de se notar que, embora para a curva 2 $|E_b|$ sempre diminua com uma diminuição de Vo , aqui $|E_b|$ passa por um máximo : $-E_b/Ry^* = 1.364, 1.367$ e 1.313 para $Vo/Ry^* = 70, 50$ e 20 , respectivamente. Embora pouco pronunciado, contudo tal máximo é totalmente consistente com nossa interpretação. Para $Vo \rightarrow \infty$ ϕ está totalmente confinada no poço da impureza. Se Vo diminui mas, ainda assim, é suficientemente grande ($50 Ry^* \ll Vo$), existe apenas uma certa penetração na barreira do lado da impureza, aumentando $|E_b|$, embora diferenciando-se muito pouco do caso $b \rightarrow \infty$. Para Vo ainda menor, ϕ torna-se ainda mais deslocalizada, devido agora a tunelamento principalmente ao poço vizinho ao da impureza e mais próximo à interface onde está a mesma, fazendo com que $|E_b|$ diminua. Devemos notar que para $Z_i =$ centro do poço tanto efeitos de penetração em barreiras quanto de tunelamento entre poços contribuem igualmente para diminuir $|E_b|$, de tal modo que a curva 2 é sempre decrescente. Aqui contudo os primeiros aumentam enquanto os segundos diminuem $|E_b|$, de tal modo que a competição entre estes dois efeitos dá origem ao aparecimento do máximo para $|E_b|$. Por outro lado, para $b = ab^*/2$ (curva 6) este máximo deverá ocorrer para Vo muito maior que $70 Ry^*$, de tal modo que $|E_b|$ agora é sempre decrescente (para o intervalo de Vo

considerado).

Curvas 7 e 8 : impureza no centro da barreira.

Para V_0 pequeno ($\sim 20 \text{ Ry}^*$) $|E_b| < \text{Ry}^*$, uma vez que o máximo de $|\phi|^2$ afasta-se de $z=Z_i$. Se V_0 aumenta, ocorre, simultaneamente: 1) $|\phi|^2$ diminui ainda mais em $z=Z_i$, concorrendo para $|E_b|$ diminuir; 2) ϕ torna-se mais localizada nos poços primeiros vizinhos à impureza devido à inibição do efeito de tunelamento para poços mais afastados, contribuindo assim para aumentar $|E_b|$. Na curva 7, onde $b=0.5ab^*$, $|E_b|$ sempre cresce, mostrando a predominância do 2º) efeito sobre o 1º). Por outro lado, para $b=ab^*$, curva 8, ambos competem entre si e um máximo para $|E_b|$, embora pouco pronunciado, aparece: $-E_b/\text{Ry}^* = 0.843, 0.863, 0.862$ para $V_0/\text{Ry}^* = 20, 70$ e 80 , respectivamente.

O próximo gráfico, fig.5, refere-se à variação de E_b com a posição Z_i da impureza, fixos a, b e V_0 . As curvas são obtidas com o auxílio de uma aproximação nos cálculos. Vemos que, para os casos limites que possuem solução exata (eq.(12)), as autofunções e auto-valores de energia possuem as formas gerais dadas por:

$$\begin{aligned} \psi &= \phi(z) \cdot \exp[-r/\lambda_0] \\ E_b &= -\hbar^2 / (2m^* \lambda_0^2) = -\text{Ry}^* / (\lambda_0 / ab^*)^2. \end{aligned} \quad (19)$$

Assim, o ansatz para a energia do elétron

	(1)		(2)		(3)		(4)	
a	1.0		1.0		0.5		0.5	
b	1.0		0.5		1.0		0.5	
W	0.028		0.525		0.196		2.534	
	Eb	Eb ₁	Eb	Eb ₁	Eb	Eb ₁	Eb	Eb ₁
CB	0.862	0.832	0.963	0.941	0.990	0.958	1.025	1.015
I	1.366	1.335	1.174	1.161	1.787	1.760	1.225	1.225
CP	2.111	2.078	1.886	1.873	2.297	2.272	1.569	1.567
Δ_M	3.5 %		2.3 %		3.2 %		1.0 %	

TABELA - 3: APROXIMAÇÃO $|Eb_1|$ (EQ.(20)) PARA $|Eb|$. $\Delta_M = \text{MAX}(1 - |Eb_1|/|Eb|)$; $V_0 = 40$ (UNIDADES ATOMICAS). GRAFICOS RELATIVOS AS COLUNAS (1)-(4): FIG-5,6. CP = CENTRO DE UM POÇO; CB = CENTRO DE UMA BARREIRA; I = INTERFACE.

$$E = E_0 + E_b = E_0 - \hbar^2 / (2m\lambda^2) \quad (20)$$

deve constituir uma boa aproximação ao valor exato. Neste caso λ é uma função exclusiva das condições de contorno do problema, não havendo mais o processo de minimização da energia uma vez que λ não é mais um parâmetro variacional. Além do mais, devemos

FIG - 5: VARIAÇÃO DE $|E_b|$ COM A POSIÇÃO DA IMPUREZA ($Z_i = 0 \Rightarrow$ INTERFACE) PONTOS SOBRE CADA CURVA RELATIVOS A RESPECTIVA COLUNA NA TABELA - 3.

lembrar que, uma vez que o processo de minimização de $E=E(\lambda)$ é descartado, uma simplificação numérica bastante grande é introduzida. A tabela - 3 dá uma idéia das aproximações envolvidas e os pontos sobre as curvas na fig.5 referem-se aos

resultados variacionais.

Devemos ressaltar que as curvas da fig.1 também são obtidas utilizando esta aproximação. Para poços os erros introduzidos são menores que 2%.

FIG - 6: VARIAÇÃO DE $|E_b|$ COM Z_i - CONFORME FIG - 5 E TABELA - 3 (AQUI $Z_i = 0 \Rightarrow$ CENTRO DE UM POÇO)

Podemos notar que as curvas da fig.5 são suaves e apresentam valores mínimo e máximo nos pontos de simetria: centro da barreira e do poço, respectivamente. Estes mesmos resultados são reapresentados na fig.6, agora Z_i variando sobre um período inteiro da super-rede e com abscissa $2Z_i/P$ entre -1 e +1. O centro do poço é dado por $Z_i=0$, o centro da barreira por $Z_i = +$ ou $- P/2$ e as interfaces por $Z_i = +$ ou $- a/2$.

Conforme a fig.4, para um dado valor de a , quanto menor b menor $|E_b|$ para $Z_i =$ centro do poço ou interface, e maior $|E_b|$ para $Z_i =$ centro da barreira. Contudo, fixos b e V_0 a dependência com a , segundo a figura acima, é mais complicada. Por exemplo, para $Z_i =$ centro do poço temos: $|E_b|$ diminui se a diminui e b é pequeno (como para $b=0.5ab^*$), uma vez que o tunelamento entre poços aumenta; por outro lado, $|E_b|$ aumenta se a diminui e b é grande (como no caso $b = ab^*$), uma vez que aumenta o confinamento de ϕ no poço da impureza. Esta inversão de comportamento de E_b com a , dependendo se $b > ab^*$ ou $b < ab^*$, já havia sido observada por Ioriatti e Tsu. Assim, a exemplo desses autores, a fig.7 refere-se a plotar $|E_b| \times b$, para vários valores de a e $Z_i =$ centro do poço e interface, ou $|E_b| \times a$, para vários valores de b e $Z_i =$ centro da barreira.

Comparando as duas primeiras curvas (fig.7.a,b) vemos em ambas que se $b \gg ab^*$ uma diminuição em a ($0.3 < a/ab^* < 1.5$) faz com que $|\phi(Z_i)|^2$ aumente, devido basicamente a efeitos de

FIG - 7.a: EFEITOS DE TUNELAMENTO SOBRE $|E_b|$ - RESULTADO VARIACIONAL - IMPUREZA NO CENTRO DE UM POÇO

confinamento, aumentando $|E_b|$. Contudo, para $b \ll ab^2$ torna-se relevante se a impureza está no centro ou na interface do poço. Se está no centro, como vimos, qualquer tunelamento é prejudicial, e uma diminuição em a , aumentando W , reduz $|E_b|$.

Por outro lado, se está na interface e a é grande, o tunelamento ocorre principalmente para o poço primeiro vizinho ao da impureza e mais próximo a esta. Como b é pequeno, ainda assim $|\phi|^2$ é relevante apenas na região onde $|V_i(z)|$ é grande, de tal modo que uma pequena diminuição em a aumenta $|E_b|$, pois ϕ concentra-se mais ao redor da impureza, devido ao tunelamento, ao

FIG - 7.b: IDEM FIG - 7.a PARA INTERFACE

contrário do caso $Z_i =$ centro do poço. Entretanto, se b e $a \ll ab^*$, então mesmo para impureza na interface $|\Phi|^2$ é relevante em poços afastados, de tal modo que em ambas as curvas $|E_b|$ diminui junto com a , e a diferença entre impureza no centro do poço e na interface não altera mais o comportamento de E_b (apenas seu valor numérico).

FIG - 7.c: IDEM FIG 7.a PARA O CENTRO DE UMA BARREIRA

Para Z_i = centro da barreira (fig.7.c) o comportamento geral que se observa é uma diminuição de $|E_b|$ tanto ao se aumentar a para b fixo quanto ao se aumentar b para a fixo, como seria de se esperar em vista do forte confinamento eletrônico nos poços laterais. Pequenos desvios se observam apenas para a e b pequenos, e estão associados a efeitos de tunelamento.

Antes de encerrarmos este item, gostaríamos de considerar um pouco os resultados de Lane e Greene [2.14]. Como foi citado no capítulo anterior, eles desconsideram em sua função variacional a largura finita da minibanda, uma vez que aquela consta do produto de uma parte relacionada aos "estados internos" do doador, e que foi igualmente utilizada por Greene e Bajaj [2.7], e $\phi(z)$, dada pela solução do modelo de Kronig-Penney associado ao nível do fundo da minibanda. Nossos resultados estão em ótimo acordo (erros $< 1\%$) com os de Greene e Bajaj e também com os dos primeiros autores para o caso de poço isolado, onde $\phi(z)$ para ambos é o auto-estado de poço mais baixo, enquanto que as discordâncias são bastante grandes quando consideramos o caso da super-rede, conforme fig.8, onde os erros chegam a até $\sim 25\%$ ($a = b = ab^*$ e $x = 0.3$, conforme considerado por estes autores). A diferença essencial entre Lane e Greene, e Greene e Bajaj está na amplitude de modulação $\phi(z)$. Portanto as discrepâncias observadas no caso da super-rede só podem estar associadas à escolha desta função.

FIG - 8: EFEITO DA ESCOLHA DO ANSATZ VARIACIONAL SOBRE $|Eb|$ PARA SUPER-REDE. $x = 0.3$, $a = b = ab^*$ ($I =$ INTERFACE). CURVA INFERIOR: REF.[2.14]

Finalmente, para encerrar esta parte gostaríamos apenas de destacar que é sem sentido físico a representação que alguns autores vem fazendo de $|\psi(0,0,z)|^2$ como a quantidade relevante para descrever o movimento efetivo do elétron na direção z , como é o caso de Chaudhuri [2.9], para o modelo de três poços, e Z. Liu et al [2.10 - 11], para poços e super-redes. A quantidade com sentido físico, em nosso formalismo, é $|\Phi|^2$, que se acha

esquematisada na fig.3.

3.b) MODELO SIMPLIFICADO PARA IMPUREZAS EM UMA SUPER-REDE: O PAPEL DA LARGURA DE MINIBANDA

Até aqui temos considerado os resultados obtidos para a energia de ligação do estado fundamental de impureza como função dos vários parâmetros da super-rede, a, b, V_0 e diversas posições da impureza na mesma, analisando o comportamento de E_b em termos de efeitos de confinamento e tunelamento eletrônico, através do parâmetro único W (largura da primeira minibanda), extendendo deste modo o trabalho de Ioriatti e Tsu. Neste trabalho, e até aqui no nosso, a importância do valor de W é enfatizada "à posteriori" a dependência de E_b com os vários parâmetros ter sido obtida, apenas ilustrando seu comportamento, mas nunca determinando seu valor numérico.

O objetivo principal deste item é apresentar e discutir as consequências de um modelo simples para o problema de uma impureza em uma posição qualquer de uma super-rede e que relacione de modo direto os valores numéricos de E_b e W , mediante uma função analítica para E_b onde W seja o parâmetro mais relevante: $E_b = E_b(W)$.

Como ponto de partida devemos recordar que o problema original foi transformado, pela eliminação das coordenadas transversais, em outro unidimensional, ao qual está associado o

potencial efetivo $V_i(z)$ discutido no capítulo - 2. Além do mais, como vimos, $|V_i(z)| \sim Ry^* \ll V_0$, e cai rapidamente na escala de um período da super-rede. Estes fatos formam a base do modelo a ser proposto. Em primeiro lugar, motivados pela unidimensionalização do problema e pelo forte confinamento imposto pelo potencial V_0 das barreiras, substituímos a própria super-rede por uma rede discreta unidimensional cujos sítios, espaçados da "distância" P entre si, estão associados aos poços de GaAs originais. Além do mais, admitiremos que cada sítio esteja acoplado apenas a seus dois vizinhos mais próximos. Se n é o índice do n -ésimo sítio desta rede, a solução estacionária do problema na ausência da impureza se reduz à solução do sistema infinito de equações acopladas [3.1]

$$\begin{aligned}
 & \dots \\
 E a_{n-1} &= E^0 a_{n-1} - A a_{n-2} - A a_n \\
 E a_n &= E^0 a_n - A a_{n-1} - A a_{n+1} \\
 E a_{n+1} &= E^0 a_{n+1} - A a_n - A a_{n+2} \\
 & \dots
 \end{aligned} \tag{21}$$

onde $|a_n|^2$ é a probabilidade de se encontrar o elétron no n -ésimo sítio (poço) e $iA/\hbar$ é a amplitude de probabilidade deste elétron tunelar para o sítio $n+1$ ou $n-1$ (por unidade de tempo). Uma solução possível para este sistema é bastante conhecida, e é dada por

$$a_n = e^{iK(nP)} \quad (22)$$

$$E = E^0 - 2A \cos(KP) \quad (22.a)$$

onde k é um parâmetro arbitrário e E^0 é a energia de sítio do elétron. Assim, na ausência de impureza o elétron é totalmente deslocalizado dentro da super-rede e pode possuir uma energia (estacionária) qualquer dentro da banda de largura $4A$: $E^0 - 2A \leq E \leq E^0 + 2A$. Portanto é conveniente a associação $W = 4A$, onde W é a largura da minibanda da super-rede original. Assim, vemos que é a interação entre poços vizinhos a responsável pelo aparecimento das minibandas finitas na super-rede. Ainda seguindo as analogias do modelo, E^0 deve ser associado ao nível de caixa fundamental do caso limite $b \rightarrow \infty$ na super-rede.

Passamos a seguir a considerar a presença da impureza. Tornam-se cruciais neste ponto as características apresentadas pelo potencial $V_i(z)$. Também é fundamental se localizar a impureza na super-rede. Assim, consideraremos inicialmente o caso em que a mesma se encontra em um ponto qualquer de um poço de GaAs (ou em um dos sítios discretos). O caráter raso e de curto alcance de $V_i(z)$ nos permite, em primeira aproximação, supor que sua única influência se restringe a tornar o sítio da impureza energeticamente um pouco mais favorável em relação aos demais. Isto pode ser feito ao se introduzir um termo adicional à equação central do sistema eq.(21), para impureza no sítio $n = 0$, permanecendo as demais equações inalteradas:

$$E a_0 = (E^0 - Q) a_0 - A a_1 - A a_{-1} \quad (23)$$

No caso, $Q > 0$, de modo a refletir o caráter atrativo da impureza. Como procuramos por soluções que estejam no gap e logo abaixo do fundo da banda, um ansatz adequado é dado por

$$a_n = \begin{cases} c e^{K(nP)} & , n < 0 \\ c' e^{-K(nP)} & , n > 0 \end{cases} \quad (24)$$

Substituindo no novo sistema de equações, é fácil de se obter, para $c = c'$,

$$\begin{aligned} E &= E^0 - 2A \cosh(kP) \\ Q &= 2A \sinh(kP) \\ E &= E^0 - \sqrt{4A^2 + Q^2} \end{aligned} \quad (25)$$

Uma vez que $E_b = E - (E^0 - 2A)$, e utilizando $A = W/4$, obtemos finalmente

$$|E_b| = \frac{W}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4Q^2}{W^2}} - 1 \right) \quad (26)$$

Vemos que o parâmetro Q , inicialmente desconhecido, pode ser facilmente determinado devido à condição limite imposta sobre $|E_b|$ na região em que $b \rightarrow \infty$ (a, V_0 e Z_i mantidos constantes) e o problema se reduz ao de um poço isolado. Se E_0 é o valor de $|E_b|$

neste caso limite, então temos, para $W \rightarrow 0$,

$$E_{bo} = Q. \quad (27)$$

Assim, fixo a , V_0 e Z_i (dentro do poço), que equivale também a fixar Q , E_b é uma função exclusiva do parâmetro W , para qualquer valor de espessura de barreira b .

FIG - 9.a : MODELO PRELIMINAR PARA IMPUREZA NO CENTRO DE UM POÇO DE UMA SUPER-REDE

Uma vez apresentada a equação resultante do modelo proposto e que relaciona E_b e W , conhecido o valor de E_b para $W \rightarrow 0$ (poço isolado), como visto acima, passamos a verificar seu limite de validade. Isto é feito mediante comparação dos valores de E_b por ela fornecidos com os obtidos no item anterior com a ajuda do método variacional, conforme a fig.9, onde são apresentados os resultados para $V_0 = 40 \text{ Ry}^*$ e impureza no centro de um poço e numa interface da super-rede.

FIG - 9.b : IDEM FIG - 9.a PARA UMA INTERFACE

Podemos ver que a concordância é extremamente boa, em ambos os casos, para a região $b \gg ab^*$, para qualquer um dos valores de a . Contudo, aparecem grandes diferenças para a região $b \ll ab^*$. O que ocorre neste caso é que para estes valores de b tão pequenos $|V_i(z)|$ passa a ter amplitude considerável em poços vizinhos ao da impureza, e isto principalmente para o caso da interface (fig.9.b), onde podemos ver que as discrepâncias são maiores. Assim, para um dado valor de a , para valores de b suficientemente pequenos outros poços começam também a ser "perturbados". Portanto este modelo para impureza num poço é bastante acurado somente na medida em que os efeitos de $V_i(z)$ podem ser considerados como uma perturbação constante local, isto é, no próprio poço (sítio) da impureza.

Podemos facilmente notar que nesta região $|E_b| \rightarrow Ry^*$, que é o caso limite exato quando $b \rightarrow 0$. Contudo, a expressão para $|E_b|$ eq.(26) pode ser facilmente corrigida de modo a levar em conta este outro caso limite, a saber, $|E_b| \rightarrow Ry^*$ para $W \rightarrow W_m$, onde $W_m = \lim (\pi / (a+b))^2 = (\pi / a)^2$, com a fixo e $b \rightarrow 0$. Isto é feito acrescentando-se à expressão de $|E_b|$ uma outra constante, E_b^0 :

$$|E_b| = \frac{W}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4Q^2}{W^2}} - 1 \right) + E_b^0 \quad . \quad (28)$$

Assim, para os dois casos limites, temos (em Ry^*)

$$\lim_{w \rightarrow 0} |Eb| = Eb^0 = Q + Eb^0 ; \quad (29)$$

$$\lim_{w \rightarrow w_M} |Eb| = 1 = \frac{w_M}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4Q^2}{w_M^2}} - 1 \right) + Eb^0 . \quad (29.a)$$

FIG - 10.a: COMPARAÇÃO ENTRE O MODELO SIMPLES (CURVAS) E OS RESULTADOS VARIACIONAIS (PONTOS) PARA $|Eb|$. CASO DA IMPUREZA NO CENTRO DE UM POÇO

Deste modo, Q e Eb^0 podem ser univocamente determinados. A aplicação desta nova fórmula pode ser observada na fig.10 abaixo,

onde os parâmetros são os mesmos que os da fig.9. Vemos, de fato, que ambos os limites são respeitados e, ainda mais, uma melhora sensível aparece nos resultados na região onde $b \ll ab^*$, em relação à fórmula anterior (com $Eb^0 = 0$).

FIG - 10.b : IDEM FIG - 10.a PARA UMA INTERFACE

É interessante neste ponto salientar a extrema concordância entre os resultados variacionais de E_b (que

acreditamos serem bastante rigorosos) e os obtidos com o auxílio de um modelo extremamente simples para o problema. Além do mais, é ainda surpreendente que este modelo não introduza parâmetros ajustáveis ao problema (Q e E_b^0 dependem apenas de condições de contorno impostas sobre E_b), e que dependa apenas de grandezas associadas aos casos de confinamento eletrônico extremo, E_{b0} (obtido para o poço isolado correspondente), e de tunelamento eletrônico extremo, W (obtido para a super-rede sem impureza), ou seja, dos parâmetros relevantes aos casos onde o elétron ou está totalmente confinado sobre a impureza, ou totalmente deslocalizado. Como o problema de uma impureza em um poço possui vários resultados bastante acurados na literatura (incluindo, inclusive, os efeitos de descontinuidade da massa efetiva e constante dielétrica, e a não-parabolicidade da relação de dispersão do GaAs), e W pode ser obtido por uma calculadora de bolso, então acreditamos que o problema similar de uma impureza em um poço de uma super-rede de parâmetros praticamente arbitrários esteja agora consideravelmente simplificado.

Apesar de ser muito bom para o caso de impureza em um ponto qualquer de um poço, o modelo apresentado acima se mostra completamente falho quando esta se encontra no centro de uma barreira. Neste caso ocorre algo bastante diferente. Agora, $V_i(z)$, superposto ao potencial periódico, se apresenta como uma perturbação na região da barreira, onde $V_0 \gg |V_i(z)|$. Além do

mais, como $V_i(z)$ cai rápido na escala de b , se b não é muito pequeno, então não podemos mais falar em uma perturbação local em um dos sítios da super-rede discreta. O que vai ocorrer é que esta perturbação local sobre a barreira vai modificar a probabilidade de tunelamento eletrônico entre os sítios (poços) na região intermediária dos quais está a impureza. Assim, reescrevemos

$$\begin{aligned}
 & \dots \\
 E a_{-2} &= E^0 a_{-2} - A a_{-1} - A a_{-3} \\
 E a_{-1} &= E^0 a_{-1} - B a_0 - A a_{-2} \\
 E a_0 &= E^0 a_0 - A a_{-1} - B a_{-1} \\
 E a_1 &= E^0 a_1 - A a_2 - A a_0 \\
 & \dots
 \end{aligned} \tag{30}$$

onde a impureza se encontra "entre" os sítios -1 e 0 e $B \neq A$ se refere à nova amplitude de probabilidade da transição entre estes sítios. Novamente, para o ansatz

$$\begin{aligned}
 a_n &= c e^{-k n P} & , n > 0 \\
 c' e^{k (n+1) P} & & , n \leq -1
 \end{aligned} \tag{31}$$

que garante que $a_0 = a_{-1}$, $a_1 = a_{-2}$, ... (ou seja, se refere a uma solução exponencialmente decrescente e simétrica em relação à posição da impureza), obtemos, com $c = c'$,

$$\begin{aligned}
 E &= E^0 - A(e^{KP} + e^{-KP}) & , 1 \leq n \leq -2 \\
 E &= E^0 - B - A e^{-KP} & , n = 0, -1.
 \end{aligned} \tag{32}$$

A solução deste sistema é facilmente obtida,

$$e^{KP} = B/A \Rightarrow E = E^0 - (A^2 + B^2)/B ; \tag{33}$$

$$|Eb| = |E - (E^0 - 2A)| = (A-B)^2/B . \tag{33.a}$$

Para $A = W/4$ e $B \equiv W'/4$, como antes, temos

$$|Eb| = \frac{(W - W')^2}{4 W'} . \tag{34}$$

Esta é a fórmula equivalente à eq.(26) para o caso de impureza num poço. Contudo, aqui W' não é mais um parâmetro determinado unicamente pelo valor de E_b no caso limite $b \rightarrow \infty$, como ocorria para Q no caso anterior. W , como é sabido, para a e V_0 fixos, se comporta como

$$W = W_m \exp[- \sqrt{(V_0 - E_0(b = \infty))/Ry^*} \cdot b/ab^*] . \tag{35}$$

Assim, W' deve apresentar uma dependência similar com b (fixos a e V_0). Só que agora, por causa da impureza, devemos substituir $V_0 \rightarrow V_0 - Q'$, $E_0 \rightarrow E_0 - |Eb|$, onde Q' , se refere a uma perturbação média sobre V_0 na barreira onde se encontra a impureza. Contudo, o problema se complica por causa da presença de $|Eb|$ em W' , além

do fato que agora são dois os parâmetros, a saber, Q' e uma amplitude W_m' equivalente a W_m na fórmula acima.

Contudo, com a finalidade de evitar estas complicações adicionais e ao mesmo tempo dar uma justificativa para uma dependência deste tipo para W' , procedemos de modo inverso, isto é, partimos dos valores conhecidos para E_b e W , variando b para a e V_0 fixos, e determinamos com o auxílio da eq.(34) para $|E_b|$ a dependência de W' com b . Isto é feito na fig.11 para $a = 1.2ab^*$ e $V_0 = 40Ry^*$.

FIG - 11: VERIFICAÇÃO DO MODELO SIMPLES PARA BARREIRA

A equação da reta da fig.11 é $\ln(W'/Ry^*) = 1.998 - 11.409b/ab^*$. Considerando que, para a e V_0 dados acima, temos $E_0(b = \infty) = 4.26 Ry^*$, e que assim $\sqrt{(V_0 - E_0)/Ry^*} = 5.97$, então, na realidade, é mais correta a expressão (em unidades convenientes)

$$W' = W'_m \exp[-2 \sqrt{V_0 - E_0} \cdot b] \quad , \quad (36)$$

contrariamente ao caso anterior, onde o fator 2 não aparece na exponencial. Contudo, a dependência exponencial é perfeitamente aceitável e, deste modo, as hipóteses apresentadas acima completamente justificáveis. Portanto, complicações à parte, o fenômeno físico que dá origem ao comportamento para E_b quando a impureza se localiza no centro de uma barreira está embutido novamente em um modelo bastante simples e eficaz.

Uma análise simples dos dois casos já apresentados nos mostra que a diferença fundamental entre ambos está no modo como o fenômeno de tunelamento, que tende sempre a deslocar a auto-função eletrônica através da super-rede, influi sobre a amplitude da mesma nas vizinhanças da impureza. No primeiro caso (impureza num poço), a tendência do tunelamento a poços vizinhos é diminuir $|\phi|^2$ sobre a impureza, levando a uma diminuição constante de $|E_b|$ com um aumento de W . No caso da barreira a tendência é outra, ou seja, permitir à auto-função que se

deslocalize é contribuir para que sua amplitude aumente na região das barreiras e, em especial, sobre a impureza, fazendo com que $|E_b|$ aumente constantemente com W . Contudo, as tendências acima podem vir a se inverter se b é diminuído excessivamente, como podemos ver nos gráficos da fig.7. Para impureza num poço, e principalmente na região da interface, o tunelamento pode vir a ser tanto que $|E_b|$ chega a cair abaixo de Ry^* . Após um mínimo valor, $|E_b|$ deve voltar a crescer de tal modo que $|E_b| \rightarrow Ry^*$ para $b \rightarrow 0$. Analogamente para o caso da barreira, onde $|E_b|$ pode vir a passar por um máximo $> Ry^*$ e deve decrescer novamente a seu valor limite Ry^* . Nesta região de parâmetros ocorre uma mistura entre os dois casos acima. O caso mais crítico é o da região da interface. Para Z_i próximo a uma delas, é possível que um novo modelo, combinação dos dois independentes anteriores, e que admite esta mistura de tendências, venha a dar melhores resultados quantitativos para $|E_b|$. Contudo, por três motivos não estaremos interessados em prosseguir nesta linha: 1) para camadas muito estreitas a própria aproximação de massa efetiva ainda é questionada por vários autores; 2) estaremos trabalhando no limite de validade do próprio modelo de interação entre primeiros-vizinhos (tight-binding); 3) acreditamos que já estejam entendidas as características básicas do comportamento da energia de ligação do nível hidrogenóide fundamental numa super-rede.

Estas conclusões, naturalmente, consideram apenas o caso do estado fundamental associado à minibanda mais baixa da super-rede, que é o que viemos considerando até aqui. É bastante provável, contudo, que valham também para os primeiros estados excitados associados a esta mesma minibanda. Para os estados $2P_{\pm 1}$, por exemplo, uma função variacional do tipo da apresentada anteriormente para o estado 15 pode ser rapidamente proposta, a saber,

$$\psi = f \cdot \phi(z) \cdot e^{-r/\lambda} \cdot e^{\pm i\varphi} \quad , \quad (37)$$

que interpola o primeiro estado excitado dos casos limites: 3D (bulk), para $\phi(z) = 1$; 2D (bulk), para $\phi(z) = 1$ ($z = 0$); interface [2.3], para $\phi(z) = z$. Neste caso, o processo de unidimensionalização é mais trabalhoso, mas pode-se mostrar que o novo potencial efetivo $V_i(z)$ é também bastante raso e decai rapidamente na escala de um período da super-rede, como no caso do estado fundamental. Assim, as bases para a validade do modelo simples anterior estão apresentadas.

Para o estado $2P_0$ (bulk), a ligação deve ser associada à segunda minibanda, devido à sua simetria ímpar. Estados associados a minibandas superiores são considerados no próximo capítulo.

CAPITULO - 4: MINIBANDAS SUPERIORES

Já vimos no capítulo - 1 que a cada minibanda da super-rede (ou nível de caixa de um poço isolado) está associado todo um conjunto de níveis doadores, e que estes se encontram localizados em energia entre as mesmas minibandas. No nosso caso estaremos apenas interessados nos níveis fundamentais associados a cada minibanda. Até aqui, a aplicação do formalismo apresentado nos capítulos anteriores se restringiu ao estudo dos níveis abaixo da primeira minibanda, isto é, à minibanda eletrônica fundamental. Contudo, o mesmo formalismo desenvolvido no capítulo - 2 (e, como veremos, também os modelos simples apresentados no capítulo - 3) é perfeitamente adequado ao estudo do nível doador associado à segunda minibanda, e que se localiza em energia no minigap entre esta e a primeira. Como já citamos, tais níveis são ressonantes com o contínuo bidimensional da primeira minibanda. Contudo, alguns cálculos já efetuados [4.1] mostram que seu acoplamento com o mesmo contínuo é extremamente pequeno, levando a larguras de níveis praticamente desprezíveis. Neste sentido podemos utilizar nosso formalismo e falar em níveis discretos.

A questão principal consiste em que a função variacional do capítulo - 2, além de reproduzir a solução "par" $1S$ para $\phi(z) = 1$ (bulk-3D), também reproduz a solução "ímpar" $2P_z$, para

$\phi(z) = z$. Desta forma, a função variacional é perfeitamente apta ao estudo do nível fundamental associado à segunda minibanda (que é também a minibanda fundamental "ímpar"). Neste caso, basta procurarmos por soluções energeticamente situadas entre o topo da primeira e o fundo da segunda minibandas, e que satisfaçam adequadamente às condições de contorno.

4.a) POÇOS ISOLADOS

Aqui novamente o caso mais simples é o de poços isolados. A fig-12 apresenta os resultados dos cálculos para o caso em que $V_0/Ry^* = 40$ e uma impureza no centro do poço. São considerados os níveis fundamentais associados aos três primeiros níveis de caixa. Como vemos, para os dois primeiros a solução variacional reproduz exatamente os casos limites (bulk) $a \rightarrow 0$ ou ∞ : $|E_b| = Ry^*$ ou $Ry^*/4$, respectivamente para o primeiro e segundo nível. Se, além do mais, pensarmos em ψ como uma função variacional que, diferente dos dois casos acima, não respeita necessariamente soluções exatas em casos limites ($a \rightarrow 0$ ou ∞), mas apenas a simetria "par" ou "ímpar" do problema, então podemos usar esta função para procurarmos, também, por um estado entre o segundo e o terceiro nível de caixa (ou mesmo mais acima). Neste caso, $\phi(z) = + \phi(-z)$, e a solução obtida refere-se a uma solução variacional para o nível doador fundamental associado ao terceiro nível de caixa. Vemos claramente de fig-12 que este "chute"

FIG - 12: NIVEL DOADOR ASSOCIADO AO (1)PRIMEIRO, (2)SEGUNDO, (3)TERCEIRO NIVEL DE POÇO ISOLADO ($V_0/Ry^* = 40$; IMPUREZA NO CENTRO DO POÇO)

variacional não é muito bom para larguras de poços suficientemente pequenas: neste caso o próprio nível entra no contínuo de estados localizados acima das barreiras (V_0) e a

energia de ligação cai a zero. Contudo, neste caso, para $a/ab^* \gtrsim 1.5$, os resultados se apresentam bastante razoáveis. Vemos, por exemplo, que $|E_b|$ é maior para o terceiro nível que para o segundo, como deveria ser, uma vez que para uma solução par $|\phi|^2$ é maior sobre a impureza que para uma solução ímpar (onde $|\phi|^2 = 0$, uma vez que a mesma se localiza no centro do poço).

No trabalho apresentado na ref[4.2] os autores se utilizam da técnica de espalhamento Raman Ressonante para estudar amostras centro-dopadas ("spike-doped") com doadores rasos. Seu resultado principal consiste no aparecimento de dois pares de "doublets" anti-Stokes, com picos bem definidos (larguras $\sim 2\text{meV}$). Estes são associados pelos autores às transições $\epsilon_1 \rightarrow \epsilon_2$, $\epsilon_1 \rightarrow 3$, $E_1 \rightarrow E_2$, e $E_1 \rightarrow E_3$, onde " ϵ " se refere aos níveis de caixa isolados e "E" aos níveis doadores fundamentais correspondentes. A tabela-4 abaixo compara os resultados experimentais apresentados na ref[4.2] com os nossos cálculos teóricos. Mais precisamente, as amostras utilizadas no trabalho acima são ditas possuírem espessuras de poços isolados de 2.41 e 4.66 ab^* , respectivamente. Contudo, erros de até 5 % sobre estes valores são bastante plausíveis, devidos ao próprio processo de crescimento das amostras. Assim, o que fizemos foi variar o valor da espessura do poço, dentro deste limite ($\leq 5\%$), de tal modo a se chegar o mais próximo possível dos resultados experimentais. Utilizamos $a/ab^* = 2.44$ e 4.30, em cada caso. Variações em V_0 (ou nas dopagens) se mostram bem menos influentes sobre os valores

x	0.24		0.23	
	EXP	TEO	EXP	TEO
a/ab ^z	4.66	4.30	2.41	2.44
$\epsilon_{1,2}/Ry^z$	1.4	1.4	3.7	3.7
$E_{1,2}/Ry^z$	1.8	1.9	4.1	4.2
$\epsilon_{1,3}/Ry^z$	3.7	3.6	9.9	9.8
$E_{1,3}/Ry^z$	4.0	4.0	?	10.1

TABELA - 4: COMPARAÇÃO ENTRE NOSSOS CÁLCULOS (TEO) E OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (EXP) DA REF.[4.2]

das energias de ligação (o que é devido basicamente a se tratar de dopagens "centrais" e poços bastante grandes).

Observamos claramente uma concordância bastante boa entre os resultados experimentais e as diferenças obtidas calculando-se os três primeiros níveis de caixa (modelo de Kronig-Penney) e os três níveis doadores fundamentais associados. As diferenças relativas destes resultados com os obtidos considerando as espessuras de poços originais da ref[4.2] como exatas são bastante pequenas (menores que 5 %).

4.b) SUPER-REDES

Para super-redes não existem ainda resultados experimentais. Também, como foi apresentado acima, todo o formalismo do capítulo - 2 pode ser utilizado novamente para se obter os estados doadores associados a minibandas superiores: basta procurar-se por soluções nas regiões de energias (mais elevadas) adequadas. Contudo, em vez de tentarmos novamente um estudo sistemático detalhado do comportamento da energia de ligação com os vários parâmetros envolvidos, como na seção 3.a, estaremos aqui apenas interessados em mostrar a validade do modelo simplificado apresentado no item 3.b. Consideraremos aqui somente o caso de uma impureza no centro de um poço e o nível doador associado à segunda minibanda ($V_0/Ry^* = 40$), conforme a fig-13. As curvas sólidas são obtidas através da eq.(28), e os pontos discretos pelo método variacional mais rigoroso. Devemos também notar que o caso limite $b \rightarrow 0$ corresponde a $|E_b| \rightarrow Ry^*/4$, e não mais a Ry^* , como já vimos acima. Além do mais, W agora é a largura da segunda minibanda.

Podemos ver novamente que, nos casos apresentados acima, o comportamento da energia de ligação segue o mesmo padrão que para o primeiro nível doador. Também fica claro novamente o papel relevante da largura da segunda minibanda, através do bom acordo

entre as curvas sólidas e os pontos variacionais.

FIG - 13: RESULTADOS PARA SUPER-REDES: CURVAS= MODELO SIMPLES DO CAP-3 / PONTOS= RESULTADOS VARIACIONAIS ($V_0/Ry^* = 40$; IMPUREZA NO CENTRO DE UM POÇO)

CONCLUSOES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como vimos, a presença de níveis doadores rasos em poços quânticos de semicondutores (especialmente Ga(Al)As - GaAs) tem sido amplamente considerada nos últimos anos, a motivação estando concentrada basicamente na enorme influência sobre as energias de ligação 1) do tamanho das camadas onde a impureza se acha confinada (poços), e 2) da posição da impureza nas mesmas. Estas são características completamente desconhecidas do problema de impurezas em "bulk" semicondutores. As super-redes está associado um grau de liberdade a mais, qual seja, a espessura finita das camadas confinantes (a "altura" das mesmas consideradas sempre constantes, uma vez que, como vimos, influem menos sobre as energias de ligação). Isto dá origem ao aparecimento de um efeito completamente sem análogo no caso de poços isolados, a saber, o de tunelamento eletrônico através das camadas confinantes e consequente deslocalização da função de onda, que passa a ter amplitudes razoáveis em poços mais afastados.

A competição entre os efeitos de confinamento, que tendem a localizar mais o elétron sobre a impureza e, consequentemente, aumentar sua energia de ligação, e o de tunelamento, que age de modo inverso, pode ser melhor apreciada através do modelo simples apresentado no cap. - 3 (para impureza em um poço da super-rede). Lá vimos que a energia de ligação, para qualquer valor da

espessura de barreira, depende apenas de seu valor limite de barreira infinita, onde efeitos de confinamento são dominantes, e da largura da minibanda à qual está associado o nível doador, que é o parâmetro relevante para descrever os efeitos de tunelamento na super-rede e se refere ao caso de tunelamento extremo na ausência da impureza (modelo de Kronig-Penney para o elétron livre). Que estes sejam os únicos parâmetros importantes não é tão surpreendente, em vista da própria natureza do problema. O que é realmente marcante é a extrema concordância do mesmo com resultados mais rigorosos e em uma faixa tão grande de parâmetros de super-rede e posições da impureza, como vimos nos capítulos anteriores.

Muito pouco tem-se observado experimentalmente sobre as influências das larguras de minibanda nos fenômenos eletrônicos associados às super-redes. Contudo, esta é uma idéia que remonta ao início mesmo da física de heteroestruturas de semicondutores: a proposta original de Esaki e Tsu estava relacionada à possibilidade de realização de um oscilador de Bloch, para o qual a existência de larguras finitas de subbanda se tornava essencial. Contudo, mesmo apesar da escassez de evidências experimentais, vários estudos teóricos têm sido realizados em cima da possibilidade de existência de tais subbandas, e suas influências nos fenômenos eletrônicos e de transporte nas heteroestruturas têm sido amplamente consideradas. Neste trabalho

temos investigado teoricamente as influências de tais minibandas sobre os níveis de impurezas doadoras rasas nas super-redes. Entretanto, nos restringimos ao caso mais simples de níveis fundamentais doadores. Considerações futuras podem ser dirigidas a várias direções distintas que, no caso de poços isolados, têm-se mostrado bastante promissoras, por exemplo,

- níveis excitados mais baixos, que viria a permitir comparação com espectros de transição na região de FIR;

- níveis hidrogenóides na presença de um campo magnético paralelo ou perpendicular à direção de crescimento da heteroestrutura, onde um aumento adicional das energias de ligação é esperado;

- níveis hidrogenóides na presença de campos elétricos, originando efeitos Stark sobre a impureza, ou ionização da mesma para campos suficientemente intensos;

- cálculo da largura dos níveis ressonantes, que poderia vir a ter alguma aplicação nas propriedades de transporte das super-redes;

- efeitos de tunelamento em níveis aceitadores rasos, para os quais as complicações da banda de valência devem ser levadas em conta. Para o problema bastante próximo de níveis de excitons os efeitos de tunelamento devem ser também bastante relevantes, uma vez que à banda de valência está associado uma descontinuidade menor de potencial, e também devido ao fato que os raios de Bohr envolvidos são maiores que os de doadores.

Alguns destes itens têm sido relativamente pouco considerados mesmo no caso mais simples de poços isolados. Contudo o interesse neste campo é bastante claro, e os problemas envolvidos têm tornado esta uma das áreas mais excitantes da física de semicondutores, com grandes perspectivas para o futuro.

REFERENCIAS

INTRODUÇÃO

[I.1] Existe um número bastante elevado de artigos de revisão e de livros específicos sobre a física de heteroestruturas de semicondutores, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental e aplicado. Contudo, uma coletânea bastante recente dos principais tópicos de interesse pode ser encontrada em : IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. QE-22, No.9, 09/86. Um número ainda maior de referências pode ser encontrado no artigo "A Bird's-Eye View on the Evolution of Semiconductor Superlattices and Quantum Wells", pg. 1611 - 1624, na referência acima.

CAPITULO - 1

[1.1] Existem excelentes textos de revisão sobre o problema de impurezas rasas em semicondutores puros, tanto teóricos quanto experimentais, entre os quais destacamos os seguintes:

- Altarelli, M.; Bassani, F., Handbook on Semiconductors, eds. T.S. Moss, W. Paul - North-Holland Publ. Comp. - 1982

- Baranowski, J.M.; Grynberg, M.; Porowski, S., referência acima

- Bassani, F.; Iadonisi, G.; Preziosi, B., Rep. Prog. Phys. 37(1974)

1099

- Ramdas, A.K.; Rodrigues, S., Rep. Prog. Phys. 44(1981)1297

- Pantelides, S.T., Rev.Mod.Phys.50(1978)797

- Kohn, W., em Solid State Physics - Vol.5(1957)258

[1.2] Oliveira, L.E.; Falicov, L.M., Phys.Rev.B34(1986)8676

[1.3] Uma revisão bastante recente do formalismo de função envelope pode ser encontrado no artigo de G.Bastard e J.A.Brum na referência [I.1], pg.1625

CAPITULO - 2

[2.1] Ioriatti, L.; Tsu, R., Surface Science 174(1986)420 ;
Bull.Am.Phys.Soc. 30(1985)630

[2.2] Miller, R.C.; Kleinman, D.A.; Gossard, A.C., Phys.RevB29
(1984)7085

[2.3] Levine, J.D., Phys.Rev.140(1965)A586

[2.4] Mailhiot, C.; Chang, Y.C.; McGill, T.C., Phys.Rev.B26(1982)
4449

[2.5] Abramowitz, M.; Stegun, I., eds., Handbook of
Mathematical Functions (Dover - NY1968)pg.505

[2.6] Bastard, G., Phys.Rev.B24(1981)4714

[2.7] Greene, R.L.; Bajaj, K.K., Sol.StateCommun.45(1983)825

[2.8] Tanaka, K.; Nagaoka, M.; Yamabe, T., Phys.Rev.B28(1983)7068

[2.9] Chaudhuri, S., Phys.Rev.B28(1983)4480

[2.10] Liu, Z.; Li, T., J.Phys.C18(1985)691

[2.11] Liu, Z.; Ma, D., J.Phys.C19(1986)2757

[2.12] Miller, R.C.; Kleinman, D.A.; Tsang, W.T.; Gossard, A.C.,
Phys.Rev.B24(1981)1134

[2.13] Chaudhuri, S.; Bajaj, K.K., Phys.Rev.B29(1984)1803

[2.14] Lane, P.; Greene, R.L., Phys.Rev.B33(1986)5871

[2.15] Lee, H.J.; Jurável, L.Y.; Woolley, J.C.; Springthorpe, A.J,
Phys.Rev.B21(1980)659

CAPITULO - 3

[3.1] Ver, por exemplo, Feynman Lectures on Physics, Vol III
- cap. 13.

CAPITULO - 4

[4.1] Priester, C.; Allan, G.; Lanno, M., Phys.Rev.B29(1984)3408,
e também, Jayakumar, K.; Balasubramanian, S.; Tomak, M., Phys.Rev.B34
(1986)8794

[4.2] Perry, T.A.; Merlin, R.; Shanabrook, B.V.; Comas, J., PRL54
(1985)2623