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

Ressonâncias Stark e Tune-
lamento em Heteroestruturas
Semicondutoras.

LUIZ ALBERTO CURY

Dissertação apresentada no Institu-
to de Física e Química de São Carlos
para obtenção do Título de Mestre em
Física Básica.

Orientador : Prof. Dr. Nelson Studart Filho

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

São Carlos - 1987

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

Luiz Alberto Cury

APRESENTADA

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

DADE DE SÃO PAULO, EM 15 DE setembro DE 1987.

COMISSÃO JULGADORA:

Nelson Studart Filho

Dr. Nelson Studart Filho Orientador

A. Fazio

Dr. Adalberto Fazzio

Ioriatti Jr

Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Junior

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da FAPESP e em parte pelo CNPq no semestre inicial e também junto ao Centro de Computação do IFQSC-USP, no qual a maioria dos cálculos aqui apresentados foi desenvolvido. Uma pequena parte dos cálculos finais foi desenvolvida no Centro de Computação do Departamento de Física da UFPE.

Aos
meus pais,
Ercília e José Walter

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Nelson Studart, orientador e amigo pela orientação, apoio e excelentes discussões, apesar da minha teimosia, no decorrer deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques pelas discussões.

Ao Valdeci, pela colaboração na parte computacional.

Aos amigos, Márcio, Lula, Buriti, Rosana, Deborah, Zé, Sebastião, Clisthenis, Márcia, Robson, Valmor, Valmir, Artemis e Cecília pelo ótimo convívio e amizade durante este período no IFQSC-USP.

Ao pessoal da República e aos amigos da Universidade Federal de São Carlos.

Como não poderia deixar de esquecer, à Bia, Maria, Mara, Ana e todas as bibliotecárias do IFQSC-USP.

À FAPESP pela concessão da Bolsa de Mestrado e pontualidade sem a qual os objetivos pretendidos neste trabalho seriam impossíveis de serem alcançados.

Ao Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco pelo ambiente estimulante e apoio técnico e financeiro que muito ajudaram na confecção desta dissertação.

A Gilvani Holanda pelo excelente trabalho de datilografia.

Aos demais colegas que direta ou indiretamente participaram deste trabalho.

A você Sibely, pelo sorriso gostoso, tapas e beliscões que trocamos durante este tempão todo.

ÍNDICE

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	vi
RESUMO	vii
ABSTRACT	viii
 CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	 1
CAPÍTULO II - HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS DE POÇOS QUÂNTICOS	9
CAPÍTULO III - ESTADOS QUASE-LIGADOS E VIRTUAIS EM ESTRUTURAS DE POÇOS QUÂNTICOS	20
3.1 - POÇO QUÂNTICO ISOLADO	21
3.2 - ESTRUTURA DE DUPLA BARREIRA	31
CAPÍTULO IV - ESTRUTURA ELETRÔNICA DE POÇOS QUÂNTICOS NA PRESEN ÇA DE UM CAMPO ELÉTRICO EXTERNO	36
4.1 - O FORMALISMO DE MATRIZ DE ITERAÇÃO E ANÁLISE DE "PHASE-SHIFT"	37
4.2 - APLICAÇÕES DO MÉTODO	43
4.2.1 - Sistema de Poço Único	43
4.2.2 - Comparação com Outros Trabalhos	53
4.2.3 - Múltiplos Poços Quânticos Acoplados	56
4.2.4 - Comparação com alguns Resultados Experi- mentais	65
CAPÍTULO V - TUNELAMENTO RESSONANTE EM SUPER-REDES FINITAS SEMICONDUTORAS DE AlGaAs-GaAs.....	69
5.1 - TRANSMISSÃO ATRAVÉS DE MULTI-BARREIRAS: FORMALIS- MO GERAL	74
5.2 - O MODELO APROXIMADO DE TSU E ESAKI: O POTENCIAL ESCADA.....	79
5.3 - DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	81
5.4 - A CORRENTE DE TUNELAMENTO RESSONANTE	89
5.5 - APLICAÇÃO PARA HETEROESTRUTURAS DE DUPLA BARREIRA	93

CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES 106

BIBLIOGRAFIA 113

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	- Histograma dos artigos publicados sobre tunelamento ressonante através de barreiras semicondutoras em função do ano de publicação para a revista "Applied Physics Letters".....	5
Figura 2.1	- Diagrama de energia para a heteroestrutura composicional do tipo 1.....	11
Figura 2.2	- Diagrama de energia para a heteroestrutura composicional do tipo 2.....	11
Figura 2.3	- Diagrama de energia para a heteroestrutura composicional do tipo 3.....	12
Figura 2.4	- Diagrama de energia para a heteroestrutura de AlGaAs-GaAs uniformemente dopada	14
Figura 2.5	- Diagrama de energia para a heteroestrutura de AlGaAs-GaAs com uma dopagem modulada	15
Figura 2.6	- Esquema do coeficiente de absorção $\alpha(\hbar\omega)$ em função da energia para uma heteroestrutura composicional do tipo 1.....	18
Figura 3.1	- Poço quadrado.....	21
Figura 3.2	- Poço isolado sob ação de um campo elétrico constante	23
Figura 3.3	- Poço quadrado sob ação de um campo elétrico constante. Esquema do defasamento das componentes da função de onda em $z > L_p$	29
Figura 3.4	- Potencial de dupla barreira de AlGaAs-GaAs sem campo elétrico aplicado	31
Figura 3.5	- Esquema para demonstração do tunelamento ressonante em estrutura de dupla barreira	33
Figura 3.6	- Análise grosseira da corrente de tunelamento ressonante num sistema de dupla barreira	34

Figura 4.1	- Modelo simples para um sistema de poços quânticos (elétrons e buracos) sob ação de um campo elétrico constante perpendicular às interfaces..	38
Figura 4.2	- Curva da razão $\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22}$ em função da energia	45
Figura 4.3a	- Estrutura de pico na curva $ \mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22} $ X energia. Posição de ressonância para um estado quase-ligado de poço único.....	46
Figura 4.3b	- Estrutura de pico na curva $ \mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22} $ X energia. Posição de ressonância para um estado virtual de poço único.....	47
Figura 4.4	- Sistema de poço único na Configuração 57:43. a) Poço de 30Å; b) Poço de 60Å.....	48
Figura 4.5	- Sistema de poço único na Configuração 85:15. a) Poço de 30Å; b) Poço de 60Å	49
Figura 4.6	- Posição do primeiro nível quase-ligado em função do campo elétrico para três sistemas de poço único na configuração 57:43	51
Figura 4.7	- Curvas da diferença de energia ΔE em função do campo elétrico para elétrons e buracos	54
Figura 4.8	- Variação do primeiro nível quase-ligado e primeiro nível virtual em função do campo elétrico aplicado.....	55
Figura 4.9	- Diagrama das bandas de condução e de valência com os níveis quase-ligados e primeiros virtuais para $L_b=100\text{\AA}$	58
Figura 4.10	- Diagrama das bandas de condução e de valência com os níveis quase-ligados e virtuais para $L_b=50\text{\AA}$ sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m ..	59
Figura 4.11	- Diagrama das bandas de condução e de valência com os níveis quase-ligados e virtuais para $L_b=30\text{\AA}$ sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m	60

Figura 4.12	- Diagrama dos níveis não estacionários como função do número de poços para sistemas com $L_p = 30\text{\AA}$ e $L_b = 30\text{\AA}$ na configuração 57:43 na presença de um campo elétrico de 10^7V/m 62
Figura 4.13	- Diagrama dos níveis não estacionários como função do número de poços para sistemas com $L_p = 30\text{\AA}$ e $L_b = 50\text{\AA}$ na configuração 57:43 na presença de um campo elétrico de 10^7V/m 63
Figura 4.14	- Diagrama dos níveis não estacionários como função do número de poços para sistemas com $L_p = 30\text{\AA}$ e $L_b = 100\text{\AA}$ na configuração 57:43 na presença de um campo elétrico de 10^7V/m 64
Figura 5.1	- Energia potencial de uma super-rede com N barreiras sob ação de um campo elétrico constante.. 75
Figura 5.2	- Energia potencial no modelo aproximado de super-rede sob ação de um campo elétrico 80
Figura 5.3	- Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente na configuração 57:43 para campo elétrico nulo. a) Sistema com duas barreiras; b) Sistema com três barreiras; c) Sistema com cinco barreiras 82
Figura 5.4a	- Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistema com duas barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m na configuração 57:43 83
Figura 5.4b	- Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistema com três barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m na configuração 57:43..... 84
Figura 5.4c	- Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistema com cinco barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m

	na configuração 57:43.....	84
Figura 5.5	- Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para um campo de 10^7 V/m na configuração 85:15. a) Sistema com duas barreiras; b) Sistema com três barreiras; c) Sistema com cinco barreiras.....	85
Figura 5.6	- Comparação entre os Coeficientes de Transmissão para os modelos de potencial linear e tipo esca da num sistema de cinco barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m.....	87
Figura 5.7	- Comparação dos Coeficientes de Transmissão para sistema com cinco barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m nas configurações 85:15 e 57:43	88
Figura 5.8	- Níveis quase-ligados E_0 e E_1 e níveis virtuais E_2 em função da concentração x de alumínio numa estrutura de dupla barreira. a) Campo nulo; b) 4×10^6 V/m	89
Figura 5.9	- Sistema de barreira única sob ação de um campo elétrico constante	90
Figura 5.10	- Estrutura de dupla barreira 100-40-100 sob ação de um campo elétrico de 6×10^6 V/m	94
Figura 5.11	- Estrutura de dupla barreira 100-60-100 sob ação de um campo elétrico de 4×10^6 V/m	95
Figura 5.12	- Coeficiente de Transmissão em função da energia para uma estrutura de dupla barreira 50-50-50 sob ação de um campo elétrico de 3×10^6 V/m com os parâmetros: $m_p^* = 0,0665 m_0$, $m_b^* = 0,096 m_0$, $V_0 = 0,269$ eV e $x = 35\%$	96
Figura 5.13	- Coeficiente de Transmissão em função da voltagem aplicada para uma estrutura 100-40-100 com a energia dos elétrons no eletrodo emissor fixa	

	em 7meV.....	98
Figura 5.14	- Coeficiente de Transmissão em função da voltagem aplicada para uma estrutura 100-60-100 com a energia dos elétrons no eletrodo emissor fixa em 15meV	99
Figura 5.15	- Curva teórica da densidade de corrente versus voltagem para a estrutura 100-40-100.....	101
Figura 5.16	- Curva teórica da densidade de corrente versus voltagem para a estrutura 100-60-100.....	101
Figura 5.17	- Energia potencial mostrando tunelamento ressonante via ponto X para altas voltagens	102
Figura 5.18	- Curva de densidade de corrente X voltagem para a amostra 50-50-50 a uma temperatura de 77K....	104

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	- Parâmetros na configuração 85:15 e 57:43.....	44
Tabela 4.2	- Energia de transição elétron-buraco para poço único com os parâmetros: $V_e=0,2125\text{eV}$, $V_h=0,0375\text{eV}$, $m_e^*=0,07m_o$ e $m_h^*=0,45m_o$	66
Tabela 4.3	- Energias de transição elétron-buraco para múlti- plos poços quânticos com os parâmetros: $V_e=0,45\text{eV}$, $V_h=0,075\text{eV}$, $m_e^*=0,07m_o$ e $m_h^*=0,45m_o$	67

RESUMO

Neste trabalho determinamos a estrutura dos níveis dos estados quase-ligados e virtuais em sistemas de poços quânticos acoplados de AlGaAs-GaAs na presença de um campo elétrico externo (Voltagem) perpendicular às camadas semicondutoras. As heteroestruturas de AlGaAs-GaAs são modeladas por um conjunto de poços quânticos de potencial unidimensionais. Utilizamos a aproximação de função envelope que reduz o problema à solução usual da Equação de Schroedinger de massa efetiva. Os níveis eletrônicos são então determinados utilizando a solução exata da Eq. de Schroedinger em termos das funções de Airy nos poços e barreiras e um formalismo de Matriz de Iteração com Análise de "Phase-shift". Nossos resultados estão em boa concordância com resultados experimentais de transições óticas.

Motivados pelas propriedades singulares dos sistemas de dupla barreira, investigamos o tunelamento ressonante de elétrons através de multi-barreiras e a formação de regiões de resistência negativa na curva característica de corrente X voltagem. Para os processos de tunelamento em multi-barreiras determinamos o Coeficiente de Transmissão, como função da energia do elétron incidente, usando o formalismo de Matriz de Iteração. Este método pode ser bastante útil na interpretação de resultados experimentais nestes dispositivos. Calculamos também a densidade de corrente de tunelamento versus a voltagem aplicada no caso de dupla barreira de modo a interpretar recentes resultados experimentais.

ABSTRACT

In this work the quasi-bound and virtual levels of both electrons and holes are determined in the case of coupled $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs quantum wells in the presence of an external electric field (Voltage) perpendicular to the layers. The heterostructures of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -GaAs are mimicked by a set of unidimensional quantum well potentials. We employ the envelope function approximation and solve the usual effective mass Schroedinger Equation. The electronic levels are then determined by using the exact solution of Schroedinger Eq. in terms of Airy functions into the wells and barriers and an Interaction Matrix formalism with the Phase-shift method. Our results are in a good agreement with the experimental results of optical measurements.

Motivated by the unusual properties of double-barriers devices we investigated the resonant tunneling of electrons through multi-barriers. The transmission Coefficient as a function of energy of the incident electron is determined by using an Interaction Matrix formalism. This method can be very useful in the interpretation of experimental results in semiconductor devices. We also calculate the tunneling current density as a function of applied voltage in the case of a double-barrier in order to interpret recent experimental results.

CAPÍTULO I

INTRODUCAO

A partir da proposta inicial de Tsu e Esaki⁽¹⁾, heteroestruturas semicondutoras têm sido extensivamente pesquisadas. Além de grande importância tecnológica na fabricação de dispositivos eletrônicos, por apresentarem propriedades óticas e de transporte superiores aos semicondutores convencionais volumétricos ("bulk"), apresentam efeitos físicos bastante interessantes, dentre alguns deles o Efeito Hall Quântico.

Estas heteroestruturas são formadas por camadas alternadas ultra-finas de dois semicondutores diferentes mas que possuem constantes de rede muito próximas de modo a obter-se um casamento perfeito nas interfaces. As reduzidas dimensões destes sistemas são tais que o comprimento de onda de De Broglie associado aos elétrons é comparável às dimensões características tal que os efeitos quânticos são relevantes. O crescimento epitaxial de camadas muito finas de dois semicondutores com diferentes larguras de banda proibida dão origem à formação do potencial de poços e barreiras quânticos. Estas heteroestruturas são fabricadas por elementos dos grupos III-V, II-VI, IV-VI e suas ligas ternárias e quaternárias. A mais estudada dentre todas tem sido indubitavelmente a formada por GaAs (Arseneto de Gálio) e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (Arseneto de Gálio com Alumínio) com a concentração X de alumínio variando de 10 a 50%.

As amostras são crescidas através de modernas técnicas tais como Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) e Deposição de Vapor Químico Organo-metálico (MOCVD) com precisão na escala atômica no nível de dopagem, geometria de interface e composição química.

As várias técnicas de dopagem, principalmente a dopagem modulada, fazem com que os elétrons estejam bastante afastados das impurezas proporcionando a estas heteroestruturas de AlGaAs-GaAs mobilidades cerca de mil vezes maiores do que nos dispositivos usuais de silício.

No Brasil, existe atualmente considerável esforço no estu-

do destes sistemas com vários grupos experimentais em instalações tais como os de São Carlos, Campinas e Belo Horizonte; e atuantes grupos teóricos conforme atestam as participações em recentes conferências nacionais e internacionais^(2,3).

Nos últimos anos, tem havido um crescente interesse em estudar as propriedades óticas e de transporte destes poços quânticos de semicondutores na presença de um campo elétrico aplicado na direção de crescimento das camadas.

Experiências de eletroabsorção em heteroestruturas de AlGaAs-GaAs feitas por Miller et al.⁽⁴⁾ mostraram grandes deslocamentos nas posições dos picos de excitons no Coeficiente de Absorção bem como a persistência desses picos mesmo a campos elétricos cinco vezes maiores que o campo de ionização do exciton no Bulk. O confinamento dos elétrons e buracos na mesma camada devido à profundidade dos poços quânticos, que impedem o tunelamento dos portadores para fora do poço, explicam este fenômeno denominado Efeito Stark Quântico Confinado⁽⁵⁾. Este efeito pode ser útil na construção de dispositivos moduladores eletro-óticos. Nestas heteroestruturas semicondutoras, as barreiras de AlGaAs são suficientemente largas e o potencial alto o bastante, devido a grande concentração de alumínio, de modo que a penetração da função de onda de um poço a outro possa ser desprezada para o estado do poço quântico com menor energia. Estas estruturas são conhecidas como múltiplos poços quânticos e, em geral, um poço quântico isolado tem sido modelado para os estudos de espectroscopia ótica. Porém, para estados de alta energia nos múltiplos poços quânticos, ou para barreiras de AlGaAs estreitas, a superposição das funções de onda é relevante e efeitos de tunelamento tornam-se importantes. Neste caso, as propriedades físicas são significativamente diferentes de modo que na presença de um campo elêtrico muito forte teremos de considerar a estrutura como um sistema de poços acoplados ou super-redes finitas. A importância desses e-

feitos é manifestada, por exemplo, na determinação das energias das transições óticas para um sistema de múltiplos poços quânticos por Klipstein et al.⁽⁶⁾ através de medidas de eletroreflectância e fotoluminescência. Eles observaram pontos característicos no espectro para energias correspondendo a transições óticas entre estados de buraco leve ou pesado e estados de elétron e compararam seus resultados com as energias calculadas por um método teórico de ressonância. Como poderemos ver a discrepância entre os valores medidos e calculados aumenta à medida que consideramos transições para níveis superiores.

Medidas de fotoluminescência por Mendez et al.⁽⁷⁾ e Furuta et al.⁽⁸⁾ tem mostrado que a aplicação de um campo elétrico diminui a intensidade ou mesmo elimina os picos de luminescência dos múltiplos poços quânticos. Este efeito tem sido associado à separação espacial entre os elétrons e buracos nos poços induzido pelo campo elétrico. Em ordem para explicar estes resultados Bastard et al.⁽⁹⁾ apresentaram cálculos variacionais para determinação dos níveis de energia em um poço quântico isolado sob ação de um campo elétrico. Eles encontraram, para campos fracos, um deslocamento Stark quadrático na energia dependente fortemente da profundidade do poço. Estes experimentos de luminescência do grupo da IBM foram feitos usando muitos poços quânticos com poços e barreiras estreitos onde o acoplamento dos poços não é desprezível. De acordo com Bastard et al. esta é a maior razão para as discrepâncias entre os resultados teóricos e experimentais. De fato, embora o cálculo variacional explique qualitativamente os resultados experimentais, eles mostram somente um pequeno efeito na intensidade de luminescência para campos da ordem de campos experimentais os quais eliminam por completo a intensidade dos picos de luminescência. Portanto, a penetração da função de onda para dentro das barreiras deve ser considerada nestes casos e esta é uma das principais motivações do nosso trabalho.

A idéia original de construção das heteroestruturas foi baseada nos processos de tunelamento ressonante de elétrons que originam uma região de resistência negativa nas curvas características de corrente x voltagem. A verificação deste interessante fenômeno quântico nas heteroestruturas semicondutoras, produziu recentemente uma sequência enorme de trabalhos. A figura 1.1 mostra a evolução ao longo dos anos dos trabalhos publicados sobre propriedades de transporte perpendicular às camadas, principalmente em sistemas de dupla barreira de AlGaAs-GaAs, em uma particular revista.

Fig. 1.1: Histograma dos artigos publicados sobre tunelamento ressonante através de barreiras semicondutoras em função do ano da publicação para a Revista "Applied Physics Letters".

Os dispositivos de dupla barreira estudados consistem de uma camada de GaAs entre duas camadas de AlGaAs, todas sem dopagem. A estrutura como um todo é prensada por eletrodos de n^+ GaAs altamente dopados responsáveis pelo suprimento de elétrons ao sistema.

Tsu e Esaki⁽¹⁰⁾, em 1973, foram os primeiros a mostrar teo

ricamente que um pico na corrente ocorreria se os elétrons injetados possuísssem uma certa energia ressonante. Utilizaram um modelo aproximado para o potencial de poços e barreiras com campo elétrico aplicado que denominamos de potencial escada e determinaram a corrente de tunelamento em função da voltagem aplicada.

A primeira evidência experimental do tunelamento ressonante de elétrons nestes sistemas de dupla barreira foi dada por L.L. Chang et al.⁽¹¹⁾ logo no ano seguinte. Entretanto, somente cerca de dez anos mais tarde, com a belíssima demonstração experimental do tunelamento ressonante e resistência diferencial negativa por Sollner et al.⁽¹²⁾ é que este efeito foi definitivamente caracterizado. Em seus resultados de corrente x voltagem podemos ver claramente um pico na corrente seguido de uma região de resistência negativa ambos explicados por processos de tunelamento ressonante dos eletrons incidentes. Este trabalho, como pode ser observado na figura 1.1, deu ensejo a uma gama enorme de trabalhos nos anos posteriores.

Tendo em vista a crescente alta de qualidade das amostras, as características de resistência diferencial negativa dos diodos fabricados com estas heteroestruturas tem sido substancialmente melhoradas, permitindo suas aplicações práticas na detecção e geração de ondas eletromagnéticas de altíssimas frequências e também a investigação do efeito de filtragem pela energia dos portadores injetados no semiconductor.

Em nosso trabalho nos interessamos em estudar um sistema de N poços quânticos de AlGaAs-GaAs na presença de um campo elétrico externo (voltagem), com a determinação da estrutura de níveis eletrônicos. Motivados pelas propriedades singulares dos sistemas de dupla barreira investigamos o tunelamento ressonante dos elétrons através de multi-barreiras e a formação das regiões de resistência negativa na curva característica de corrente x voltagem. Em nosso caso, as heteroestruturas são modeladas por um conjunto de poços quânticos

ticos de potencial unidimensionais. Utilizamos a aproximação de função envelope que reduz o problema à solução usual da Equação de Schroedinger de massa efetiva para poços quânticos na presença do campo elétrico externo. Os níveis eletrônicos são determinados utilizando um formalismo de Matriz de Iteração e Análise do "Phase-shift". Para os processos de tunelamento determinamos o Coeficiente de Transmissão e a densidade da corrente de tunelamento versus a voltagem.

No capítulo II, apresentamos uma introdução geral a respeito das heteroestruturas, os materiais semicondutores constituintes e suas ligas; os principais tipos de heteroestruturas composicionais; as diversas técnicas de dopagem e a origem do potencial de poços e barreiras devido aos diferentes gaps de energia dos materiais semicondutores.

No capítulo III, discutimos os estados quase-ligados nos sistemas de dupla barreira e a transformação dos estados ligados do poço quântico isolado em estados quase-ligados e virtuais devido à inclinação das bandas de condução e valência causada pela ação do potencial linear do campo elétrico constante. Discutimos ainda, em detalhes, a Física de Tunelamento ressonante nestes sistemas.

No capítulo IV desenvolvemos o Método de Matriz de Iteração e utilizamos a Análise de "Phase-shift" para a determinação dos níveis de energia dos estados quase-ligados e virtuais de um sistema com N poços quânticos na presença de um campo elétrico constante. No limite de $N=1$ nossos resultados reproduzem muito bem os resultados da literatura. Pelo nosso conhecimento trata-se do primeiro trabalho teórico de determinação da estrutura eletrônica de um sistema com $N>1$ sob ação de um campo elétrico.

Com o objetivo de estudar as propriedades de transporte nas heteroestruturas de AlGaAs-GaAs procedemos no capítulo V, utilizando nosso Método de Matriz de Iteração, ao cálculo do Coeficiente

de Transmissão em um sistema de multi-barreiras. Consideramos as soluções exatas da Equação de Schroedinger em termos das funções de Airy para o potencial linear do campo elétrico aplicado ao potencial de poços e barreiras da heteroestrutura. Tendo em vista a comparação com recentes resultados experimentais⁽¹³⁾, calculamos a densidade de corrente versus voltagem para um sistema de dupla barreira de AlGaAs-GaAs.

No capítulo VI, apresentamos as nossas discussões e comentários.

CAPÍTULO II
HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS DE POÇOS QUÂNTICOS

Neste capítulo pretendemos dar uma introdução geral em sistemas de heteroestruturas semicondutoras no que se refere a métodos de crescimento, tipos de heteroestruturas, técnicas de dopagem e propriedades eletrônicas devido à estrutura de poços de potencial.

Pesquisas efetivas no campo dessas heteroestruturas semicondutoras foram somente possíveis com o avanço da tecnologia dos aparelhos de crescimento epitaxial. Técnicas como Epitaxia por Feixe Molecular⁽¹⁴⁾ (MBE) e Deposição Química de Vapor Metalo-Organico⁽¹⁵⁾ (MOCVD) combinam um ambiente de crescimento ultra-limpo e uma taxa de crescimento muito baixa para a produção de amostras de alta qualidade. Em particular, estas técnicas permitem construir heterojunções que são atômicamente abruptas e planares. Apresentam uma reduzida taxa de crescimento possibilitando dessa maneira fabricar estruturas de camadas com espessuras de poucos Angstroms até da ordem de microns assim como microestruturas cuja dopagem possa ser continuamente modulada.

Estas heteroestruturas formadas por camadas intercaladas de dois diferentes semicondutores, em geral, do grupo III-V, II-IV e IV-VI e suas ligas ternárias e quaternárias e que possuam suas constantes de rede muito próximas são escolhidos de forma que seus "band-gaps" sejam diferentes. A junção dessas diferentes camadas semicondutoras devido às diferenças do gap de energia exibem nas posições de cada interface uma abrupta descontinuidade na estrutura de banda que dão origem ao potencial de poços quânticos e barreiras. Dessa forma, as propriedades eletrônicas dessas heteroestruturas podem ser manipuladas dependendo dos tipos de materiais semicondutores e das larguras das camadas constituintes do sistema. Em geral, há três tipos de heteroestruturas composicionais:

1) Heteroestruturas do tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$, em que o mínimo da banda de condução $E_c^{(I)}$ e o máximo da banda de valência $E_v^{(I)}$ de um semicondutor (GaAs) permanece dentro do gap de energia

do outro semiconductor ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) como mostrado na figura 2.1. ⁴

Fig. 2.1: Diagrama de energia para a heteroestrutura composicional do tipo 1. I) semiconductor GaAs; II) $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

2) Heteroestruturas do tipo InAs-GaSb, em que o mínimo da banda de condução $E_c^{(I)}$ de um semiconductor (InAs) permanece abaixo do máximo da banda de valência $E_v^{(II)}$ do outro semiconductor (GaSb) como mostrado na figura 2.2. ⁵

Fig. 2.2: Diagrama de energia para a heteroestrutura composicional do tipo 2. I) InAs; II) GaSb.

3) Heteroestruturas do tipo $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$ com

$x \approx y \approx (1-x)$, na qual o mínimo da banda de condução $E_C^{(I)}$ de um semiconductor ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) permanece dentro do gap de energia $E_g^{(II)}$ do semiconductor ($\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$), enquanto que o máximo da banda de valência do segundo semiconductor $E_V^{(II)}$ permanece dentro do gap de energia do primeiro semiconductor $E_g^{(I)}$ conforme mostrado na figura 2.3.

Fig. 2.3: Diagrama de energia para a heteroestrutura composicional do tipo 3. I) o semiconductor $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$; II) $\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$.

Um outro tipo de heteroestrutura é obtida utilizando-se camadas dopadas tipo n e p do mesmo material que são respectivamente, camadas com dopantes doadores e camadas com dopantes aceptores, e podem ser construídas intercaladas com camadas semicondutoras intrínsecas formando uma estrutura conhecida por nipi.

Doadores e aceptores são então ionizados devido à combinação de elétrons e buracos até o sistema total alcançar uma configuração de energia mínima. As cargas resultantes nas camadas dopadas (cargas positivas nas camadas n e cargas negativas nas camadas p) produzem um potencial eletrostático onde as bandas de condução e valência podem ser moduladas do mesmo modo que uma heteroestrutura composicional. Mesmo após o sistema ter alcançado o equilíbrio, os elétrons e buracos resultantes teriam uma probabilidade de recombinação através de um processo quântico de tunelamento. Dessa forma,

estruturas nipi podem ser preparadas de modo que o tempo de recombinação possa ser controlado via densidade de dopantes, ou seja, a largura e altura das barreiras moduladas pela concentração de impurezas controla uma maior ou menor taxa de recombinação.

Nas heteroestruturas composicionais do tipo I, mostrada na figura 2.1, as camadas dos dois semicondutores com larguras d_I e d_{II} e gaps de energias $E_g^{(I)}$ e $E_g^{(II)}$ se alternam, dando origem ao sistema de poços quânticos (GaAs) e barreiras (AlGaAs). A profundidade dos poços quânticos para elétrons e buracos é determinada pela diferença entre os mínimos das bandas de condução $\Delta c = E_c^{(II)} - E_c^{(I)}$ e pela diferença entre os máximos das bandas de valência $\Delta v = E_v^{(I)} - E_v^{(II)}$, respectivamente, dos dois semicondutores.

A magnitude do "band-gap" total é definida como sendo a diferença entre os gaps de energia dos dois semicondutores:

$$\Delta = E_g^{(II)} - E_g^{(I)} = \Delta c + \Delta v \quad (2.1)$$

A porcentagem de cada Δc e Δv em relação ao "band-gap" total Δ não é ainda claramente determinada. Dingle et al.^(16,17), através de medidas das transições de excitons em estruturas de múltiplos poços, propuseram que a proporção entre as descontinuidades das bandas fosse de 85:15 ($\Delta c = 0,85\Delta$ e $\Delta v = 0,15\Delta$). Este resultado também foi utilizado por People et al.⁽¹⁸⁾ e Gossard et al.⁽¹⁹⁾. No entanto, os resultados de Miller et al.⁽²⁰⁾ e Batey et al.⁽²¹⁾ confirmados por outros trabalhos mais recentes, admitem que a descontinuidade das bandas obedeça uma proporção da ordem de 60:40 ($\Delta c \approx 0,60\Delta$ e $\Delta v \approx 0,40\Delta$).

Esta é certamente uma questão importante pois a profundidade dos poços é um parâmetro essencial na determinação dos níveis de energia permitidos num sistema de poços quânticos finitos, os quais determinam as propriedades óticas e elétricas da heteroestrut

tura.

Nessas heteroestruturas, formadas por semicondutores intrínsecos do tipo composicional 1, não há portadores de corrente livres no estado fundamental de modo que uma dopagem nessas heteroestruturas é de especial interesse. Introduzindo somente impurezas doadoras nas camadas semicondutoras dessas heteroestruturas temos o que chamamos de dopagem uniforme, conforme mostrado na Figura

2.4. $\times$

Fig. 2.4: Diagrama de energia para a heteroestrutura de AlGaAs-GaAs uniformemente dopada.

A energia de ligação de uma impureza doadora isolada (tipo Si) no GaAs volumétrico é igual a 6 meV enquanto que no AlGaAs volumétrico ela é maior ou da ordem de 100 meV. Por causa do fato que o mínimo da banda de condução do GaAs permanece abaixo do nível doador nas camadas de AlGaAs, elétrons do centro doador de AlGaAs, por excitações térmicas ou óticas, fluem para a região de menor energia dentro da banda de condução no GaAs criando um gás de elétrons bidimensional. A interação desse gás de elétrons bidimensional com os íons positivos nas camadas de AlGaAs dá origem à curvatura das bandas de energia mostrada na Figura 2.4.

Outra forma de dopagem muito utilizada consiste em intro-

duzir impurezas doadoras somente nas camadas de AlGaAs, de gap maior, de forma que os núcleos das impurezas estarão fortemente ligados devido à grande energia de ligação no AlGaAs enquanto que os portadores podem migrar para as camadas de GaAs formando um gás de elétrons bidimensional nas interfaces. Esta técnica conhecida como dopagem modulada (ver Figura 2.5) que difere da uniforme pela não dopagem das camadas de GaAs, produz uma separação espacial entre os portadores de carga e os ions positivos reduzindo sua interação tal que a mobilidade dos portadores passe a ser centenas de vezes maior do que seria num cristal semiconductor com a mesma concentração de impurezas.

Fig. 2.5: Diagrama de energia para a heteroestrutura de AlGaAs-GaAs com uma dopagem modulada.

Devido à formação do potencial de poços quânticos as heteroestruturas composicionais do tipo AlGaAs-GaAs finitas apresentam uma peculiar estrutura eletrônica e bem diferente da de um semiconductor volumétrico. Os semicondutores constituintes dessa heteroestrutura possuem aproximadamente a mesma estrutura cristalina e constante da rede. O movimento dos portadores na direção z é quantizado, especificado por um número discreto de energias $E_{z,n}$. A posição destas energias dependem somente das larguras das camadas d_I

e d_{II} e da profundidade do poço de potencial que aumenta com o acréscimo da concentração x de alumínio. Para o movimento livre dos portadores, paralelamente às camadas, a aproximação de massa efetiva representa uma excelente aproximação na formação das subbandas de energia dando um caráter bidimensional à relação de dispersão que depende neste caso somente do vetor de onda $\vec{K}_{||}$, paralelo:

$$E_n(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 \vec{K}_{||}^2}{2 m_I^*} + E_{z,n} \quad (2.2)$$

A estrutura de subbandas permanece essencialmente inalterada (pelo menos para as subbandas de menor energia) em uma heteroestrutura com um grande número de poços e barreiras se a região de poço (GaAs) é repetida periodicamente intercalada com uma região de barreira (AlGaAs) suficientemente larga. Temos assim o que chamamos de um sistema de múltiplos poços quânticos.

Se, porém, para esta heteroestrutura com um número de períodos muito grande as barreiras de AlGaAs tornarem-se suficientemente estreitas para permitir uma significativa superposição entre as funções de onda de poços adjacentes, temos então que considerar efeitos de super-rede. Neste caso o tunelamento através das barreiras é significativo, influenciando no movimento dos portadores na direção z de crescimento das camadas. A energia passa então a depender do vetor de onda K_z com a formação das mini-bandas de energias permitidas separadas por mini-gaps, fazendo com que a relação de dispersão adquira um caráter tridimensional:

$$E(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 \vec{K}_{||}^2}{2 m_I^*} + E_z(k_z, d_I) \quad (2.3)$$

Com a consideração do movimento livre dos portadores na direção paralela às camadas em sistemas de poço isolado e múlti-

plos poços quânticos a Equação de Schroedinger para a função de on da envelope na aproximação de massa efetiva, desprezando-se as os cilações da função de Bloch, transforma-se em uma equação unidimensional. Os níveis discretos de energia $E_{z,n}$ são determinados, en tão, através das condições de contorno nas interfaces dadas pela continuidade da função de onda $\Psi(z)$ e do fluxo de probabilidade

$$\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z}.$$

Além das altas mobilidades, devida a formação do gás de e létrons bidimensionais paralelo às interfaces, obtidas pela dopagem modulada em heteroestruturas composicionais, uma das mais interessantes propriedades de transporte nessas heteroestruturas tipo AlGaAs-GaAs e uma das motivações para o nosso trabalho é a con dutividade diferencial negativa observada experimentalmente com a aplicação de uma voltagem entre os eletrodos do sistema. A formação de uma região decrescente na curva característica de corrente x voltagem tem sido extensivamente pesquisada. Maiores detalhes so bre essa propriedade de resistência negativa em heteroestruturas de AlGaAs-GaAs serão discutidas no próximo capítulo.

Investigações óticas nestes sistemas de poços isolados e múltiplos poços quânticos semicondutores, na última década, tem re velado as características do confinamento quântico dos portadores. Dingle et al. ^(16,17) observaram uma estrutura pronunciada no espectro de absorção ótica representando estados ligados em poço quântico isolado e em sistema de duplo poço. As amostras analisadas possu iam as larguras dos poços de GaAs na faixa entre 70Å e 500Å, as barreiras de $Al_xGa_{1-x}As$ com espessuras da ordem de 250Å, crescidas por MBE. Medidas a baixas temperaturas, para estas estruturas mos traram muitos picos de excitons associados com diferentes estados ligados de elétrons e buracos. Esta experiência de Dingle et al. foi uma das primeiras evidências experimentais da validade da aproximação de massa efetiva nestes sistemas.

Por causa do caráter bidimensional do sistema, a densidade de estados $N_{cv}(E)$ tem um valor constante para $E > E_{c,n} - E_{v,n}$ (dentro da aproximação de massa efetiva) o que leva a curva de $N_{cv}(E)$ x E ter um comportamento tipo escada (linhas tracejadas na Figura 2.6). Para uma configuração de uma única partícula deveríamos esperar que a curva do coeficiente de absorção ótica $\alpha(\hbar\omega)$ fosse grosseiramente proporcional a $N_{cv}(E)$. Devido aos efeitos excitônicos bidimensionais, porém, picos de absorção são esperados ocorrer levemente abaixo das posições de cada passo de $N_{cv}(E)$ como mostrado pelas linhas sólidas na Figura 2.6.

Fig. 2.6: Esquema do coeficiente de absorção $\alpha(\hbar\omega)$ em função da energia para uma heteroestrutura composicional do tipo 1. As linhas tracejadas representam a densidade de estados para uma configuração de uma partícula sem efeitos excitônicos.

Os resultados experimentais para as medidas de absorção ótica de Dingle et al. confirmaram quantitativamente o comportamento esperado. Esta concordância não apenas forneceu uma demonstração experimental da determinação dos níveis de energia em um poço quadrado, descritos nos textos elementares de Mecânica Quântica, como mostrou que uma simples aproximação de massa efetiva é apropriada para descrever estes sistemas.

Em outras experiências em sistemas de poços quânticos de

AlGaAs-GaAs não dopados, de alta qualidade, crescidos por MBE^(22,23) ou por MOCVD⁽²⁴⁾, o principal pico de fotoluminescência é atribuído à transições excitônicas entre elétrons e buracos bidimensionais.

Mendez et al.⁽⁷⁾ estudaram o efeito de um campo elétrico perpendicular às camadas em medidas de fotoluminescência de poços quânticos e associaram à diminuição da magnitude do pico de luminescência à polarização dos portadores confinados e modificação dos estados quânticos induzidos pelo campo elétrico. Miller e Gosard⁽²⁵⁾ estudaram e observaram efeitos de campo similares em poços quânticos dopados com Berílio (Be).

Espectroscopia de fotocorrente DC e dinâmica de portadores fotoexcitados foram estudados com campos aplicados por Polland et al.⁽²⁶⁾, Collins et al.⁽²⁷⁾, Matsumoto et al.⁽²⁸⁾ e Viña et al.⁽²⁹⁾. Alibert et al.⁽³⁰⁾ e Klipstein et al.⁽⁶⁾ fizeram medidas de eletroreflectância e determinaram os níveis de energia devido aos efeitos de um campo elétrico aplicado.

Temos, portanto, de uma forma sucinta registrado alguns dos progressos obtidos nesta área de semicondutores através de uma variedade de heteroestruturas crescidas por técnicas epitaxiais de alta precisão onde as amostras exibem extraordinárias propriedades óticas e de transporte tais como a ultra-alta mobilidade de portadores, coexistência semimetálica de elétrons e buracos e os efeitos de um campo elétrico induzido sobre as propriedades óticas que em geral não existem em cristais "naturais". Assim, este novo grau de liberdade oferecido pelas pesquisas em semicondutores através de avançadas técnicas em crescimento de materiais tem inspirado muitos experimentos engenhosos, resultando em observações que não apenas predizem efeitos mas também fenômenos totalmente desconhecidos como a quantização fracionária no Efeito Hall Quantizado, que requer novas interpretações.

CAPÍTULO III
ESTADOS QUASE-LIGADOS E VIRTUAIS EM ESTRUTURAS DE POCOS QUÂNTICOS

Neste capítulo pretendemos discutir os estados quase-ligados e virtuais em heteroestruturas semicondutoras na presença de um campo elétrico constante.

Na primeira parte, tratamos um sistema de poço finito isolado e discutimos os vários métodos de determinação dos níveis de energia dos estados quase-ligados e estados virtuais dos elétrons sob ação de um campo elétrico.

Na segunda parte usamos uma heteroestrutura de dupla barreira, amplamente estudada em tempos recentes, para discutir a Física do tunelamento ressonante com a formação de uma região de resistência negativa na curva característica corrente x voltagem⁽³¹⁾.

3.1 - POÇO QUÂNTICO ISOLADO

Considere, então, o potencial unidimensional representado por um poço único finito conforme mostrado na Figura 3.1.

Fig. 3.1: Poço quadrado. E_0 e E_1 são os níveis de energia dos estados estacionários, E_2 representa o primeiro nível virtual.

Como é bem conhecido, os estados do poço quadrado com energias E_0 e E_1 (ver figura 3.1) são estados estacionários com

os seus níveis de energia determinados pelas condições de contorno das funções de onda e suas derivadas, nas bordas do poço.

No caso em que uma partícula incide com uma energia $E > V_0$ o potencial do poço quadrado age como um centro espalhador. Nessa faixa de energia e principalmente na região próxima ao topo do poço ($E > V_0$) verificamos um pronunciado padrão oscilatório no Coeficiente de Transmissão para elétrons atravessando o poço quântico⁽³²⁾. Somente para certos valores de energia o Coeficiente de Transmissão alcança a unidade, significando que a partícula é totalmente transmitida. Logo, existem certas condições de interferências construtivas entre as partes refletidas e transmitidas da função de onda na região dentro do poço as quais não sendo satisfeitas proporcionam uma probabilidade alta da partícula ser repelida pelo poço de potencial. Sob tais condições de interferências construtivas a partícula é capturada pouco poço quântico por um tempo determinado e esta captura ressonante pode alternativamente ser vista como um estado virtual. Estes estados virtuais ou ressonantes com um tempo de vida finito dentro do contínuo de um sistema, desempenham papel importante no estudo de espalhamento. Em heteroestruturas de semicondutores a importância destes estados virtuais é evidente a partir do trabalho de Bastard et al.⁽³³⁾ que observaram numa experiência de espectroscopia de excitação, em estruturas de dois poços de AlGaAs-GaAs acoplados, linhas correspondentes a transições óticas que envolviam um nível de buraco-leve correspondente a um estado virtual, na faixa do contínuo, da banda de valência.

Quando consideramos um campo elétrico constante, aplicado na direção perpendicular às camadas que definem o poço quântico, não resta estritamente nenhum estado ligado real. O efeito do potencial criado pela ação do campo elétrico (F) é em primeira aproximação, inclinar toda a estrutura de banda anterior. Desde que na presença do campo o Hamiltoniano assume a forma

$$H=H_0+eFz, \quad (3.1)$$

onde H_0 representa a partícula no poço quadrado, o novo potencial torna-se (ver figura 3.2),

Fig.3.2: Poço isolado sob ação de um campo elétrico constante. E_0 e E_1 são os níveis de energia dos estados quase-ligados e E_2 um nível virtual.

Dessa forma, a partícula inicialmente presa na região de poço tem agora, por menor que seja a sua energia potencial, uma probabilidade de tunelar para fora pois a barreira anteriormente de largura infinita passa a ter uma largura efetiva finita com a inclinação da banda.

A ação do campo elétrico, portanto, converte todos os estados estacionários de um poço quadrado em estados quase-ligados cujo tempo de vida, apesar de bem maior do que o tempo de vida de um estado virtual, não se compara com o tempo de vida infinito de um estado estacionário. Obviamente, a vida média destes estados dependem crucialmente da intensidade do campo elétrico.

Podemos tomar o seguinte critério para considerar um estado como quase-estacionário baseado na medida do decaimento característico (L/q_0) da função de onda não perturbada ($F=0$) para um estado fundamental dentro de uma barreira finita

$$\left(\frac{q_0}{L}\right)^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_0) , \quad (3.2)$$

onde q_0 é o vetor de onda adimensional característico e E_0 é a energia para o estado fundamental com campo nulo. Portanto, para ter-se um estado quase-ligado com um tempo de vida razoavelmente longo a seguinte desigualdade deve ser satisfeita ,

$$\frac{eFL}{q_0} \ll \frac{\hbar^2 q_0^2}{2m^* L^2} . \quad (3.3)$$

Neste caso, a função de onda decai rapidamente dentro da barreira tal que sua amplitude é desprezível mesmo que a barreira tenha sido suficientemente rebaixada pela ação do campo elétrico. Dessa forma, a probabilidade de tunelamento da partícula é muito pequena e ela fica confinada por mais tempo.

Em relação aos estados virtuais com $E > V_0$ ($F=0$) há um rearranjo nas posições dos níveis devido à perturbação do campo e dependendo dos parâmetros campo elétrico (F), largura do poço (L_p) e profundidade do poço (V_0) pode haver um aumento na densidade dos níveis virtuais pois com o campo crescente os estados quase-ligados com maior energia evoluem num processo contínuo, tornando-se estados virtuais.

A determinação dos níveis de energia dos estados quase-ligados, também comumente chamados Ressonâncias Stark, tem impulsionado recentemente a publicação de vários trabalhos teóricos⁽³⁴⁾ de modo a explicar o comportamento observado em medidas óticas de sistemas de poços quânticos na presença de um campo elétrico^(6 e 7).

Landau e Lifshitz⁽⁴²⁾ introduziram um método formal de tratar sistemas em que uma partícula pode sempre tunelar para o infinito. Em tais sistemas, podemos então definir os conceitos de estados quase-ligados e virtuais onde a partícula permanece confinada por um período de tempo finito τ ; denominamos então τ como o tempo de vida da partícula e pode ser definido da forma,

$$\tau \sim 1/W, \quad (3.4)$$

onde W é a probabilidade de tunelamento da partícula por unidade de tempo.

O espectro de energia desses estados quase-ligados e virtuais serão quase-discretos consistindo de uma série de níveis alargados cujas larguras estarão relacionadas com o tempo de vida τ .

A discussão, porém, desses estados quase-ligados e virtuais não pode se limitar aos métodos usuais para a solução da Equação de Schroedinger requerendo a finitude da função de onda no infinito. Ao invés disso nós devemos procurar por soluções que representem uma função de onda caminhante para o infinito pois são estas que verdadeiramente correspondem às partículas que efetivamente tunelaram no sistema. Desde que tal condição de contorno no infinito é complexa nós não podemos garantir que os autovalores de energia sejam reais. Pelo contrário, resolvendo-se a equação de Schroedinger obtem-se um conjunto de valores complexos os quais es

crevemos na forma,

$$E = E_0 - i\Gamma, \quad (3.5)$$

onde E_0 e Γ são duas constantes.

É fácil de se ver o significado físico dos valores da energia complexa. O fator tempo que entra na função de onda, representando uma partícula num determinado estado quase-ligado ou virtual tem a forma

$$e^{-iEt/\hbar} = e^{-iE_0t/\hbar} e^{-\Gamma t/\hbar} \quad (3.6)$$

Portanto, a probabilidade de encontrarmos a partícula confinada ao sistema, proporcional ao módulo quadrado da função de onda, de cresce com o tempo na forma $e^{-2\Gamma t/\hbar}$. A constante Γ , como vemos, deve ser uma quantidade positiva para satisfazer as condições físicas do sistema. Assim, o tempo de vida τ , definido quando a parte temporal decresce de $1/e$, é dado por

$$\tau = \hbar/2\Gamma, \quad (3.7)$$

e $W = 1/\tau$, a probabilidade de transmissão por unidade de tempo, torna-se

$$W = 2\Gamma/\hbar. \quad (3.8)$$

Γ é então uma medida da meia largura do nível quase-ligado ou virtual cujo energia é E_0 . O inverso de Γ é proporcional ao tempo de vida médio que a partícula permanece confinada ao sistema.

Na aproximação de função envelope, onde a componente de Bloch que oscila rapidamente é desprezada, e empregando o modelo simples de Hamiltoniana dada pela Eq.(3.1), o problema de um poço isolado sob ação de um campo elétrico reduz-se a uma equação de Schroedinger de massa efetiva unidimensional. A solução pode ser escrita como combinações lineares das funções de Airy:

$$\Psi_1 = A_1 A_i(-Y) \quad Z < 0, \quad (3.9a)$$

$$\Psi_2 = A_2 A_i(-X) + B_2 B_i(-X) \quad 0 < Z < L_p, \quad (3.9b)$$

$$\Psi_3 = A_3 A_i(-Y) + B_3 B_i(-Y) \quad Z > L_p, \quad (3.9c)$$

onde $Y = z/\ell_b + E/eF\ell_b$, $X = z/\ell_p + (V_o + E)/eF\ell_p$ e L_p é a largura do poço.

Ahn e Chuang⁽⁴⁰⁾ utilizaram o método descrito por Landau e Lifshitz na solução deste problema. O espectro de energia dos estados quase-ligados assim como a meia largura Γ dos respectivos níveis resultaram da resolução de um determinante de uma matriz 4x4, em termos das funções de Airy com argumentos complexos, obtido a partir das condições de continuidade das funções de onda exatas dentro e fora do poço de potencial (Eqs. 3.9). O uso, entretanto, dos argumentos complexos nas funções de onda tornou a solução numérica bastante complicada por este método.

De modo a explicar resultados de fotoluminescência, Bastard et al.⁽⁹⁾ haviam aplicado os Métodos Variacional e Perturbativo para determinar os níveis quase-ligados de poço finito e os níveis ligados de poço infinito, sob ação de um campo elétrico constante. Encontraram, para campos fracos, um deslocamento Stark quadrático dos níveis com uma intensidade fortemente dependente da profundidade dos poços.

Como o problema aqui tratado envolve tunelamento da partícula para o infinito, um método bastante conveniente é o de Análise de "Phase-shift" que tem sido utilizado no estudo de Ressonâncias Stark no átomo de hidrogênio. O método baseia-se, como é bem conhecido, nas relações de interferência das funções de onda propagantes e antipropagantes no infinito. Mais precisamente, é a razão entre os coeficientes dessas componentes da função de onda que se relacionam

com a diferença de fase entre elas.

No caso de poço único na presença de um campo elétrico, como discutido anteriormente, as funções de onda exatas dentro e fora do poço (Eqs. 3.9) são dados como combinações lineares das funções de Airy, onde consideraremos os argumentos reais.

Para Z tendendo ao infinito, as expansões assintóticas das componentes da função de onda Ψ_3 (Eq. 3.9c), na região para $Z > L_p$, são dadas por:

$$A_i(-\gamma) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\gamma^{1/4}} \operatorname{sen} \left(\frac{2}{3} \gamma^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right), \quad (3.10)$$

$$B_i(-\gamma) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\gamma^{1/4}} \cos \left(\frac{2}{3} \gamma^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.11)$$

Definimos então os coeficientes A_3 e B_3 , que são funções da energia, em termos de uma fase δ , dados pelas expressões:

$$A_3 = A \cos \delta \quad (3.12a)$$

$$B_3 = A \sin \delta \quad (3.12b)$$

substituindo as equações (3.10), (3.11) e (3.12) na expressão de Ψ_3 (Eq. 3.9c) obtemos

$$\Psi_3 = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\gamma^{1/4}} \operatorname{sen} \left(\frac{2}{3} \gamma^{3/2} + \frac{\pi}{4} + \delta \right). \quad (3.13)$$

Introduzimos, portanto, na função de onda Ψ_3 que representa a partícula livre sob ação de um campo elétrico, uma fase δ a qual é resultante da defasagem que ocorre entre as componentes propagantes e antipropagantes devido à presença do potencial do poço quântico inclinado. Ou seja, a parte antipropagante, incidindo na barreira

triangular finita à direita do poço (figura 3.3) tem uma probabilidade de penetrar no poço, quando tunelar para fora novamente ela estará atrasada em relação à componente propagante que vai em direção ao infinito.

Fig. 3.3: Poço quadrado sob ação de um campo elétrico constante. Esquema do defasamento das componentes da função de onda em $z > L_p$.

Entretanto, a componente antipropagante só fornecerá uma grande probabilidade da partícula penetrar na barreira e voltar se possuir uma energia próxima o suficiente de um nível quase-ligado ou mesmo virtual do poço. Isso indica que há uma relação entre o processo de defasagem das componentes da função de onda e a determinação dos níveis de energia quase-ligados e virtuais do sistema.

Analiticamente, a relação entre a fase δ e a razão entre os coeficientes $A_3(E)$ e $B_3(E)$ é obtida através de nossas definições (Eqs. 3.12), na forma

$$\delta = \arctg \left(B_3(E)/A_3(E) \right) . \quad (3.14)$$

A razão $B_3(E)/A_3(E)$ é conhecida e provem das condições de contorno nas bordas do poço. Pela Análise do "Phase-shift" os níveis quase-ligados e virtuais são caracterizados por um rápido aumento de Π na fase δ o que implica num comportamento da razão $B_3(E)/A_3(E)$ variando rapidamente de mais a menos infinito ou vice-versa⁽⁴³⁾. Maiores detalhes serão apresentados no capítulo seguinte onde generalizamos o problema para um potencial de N poços acoplados e obtemos a expressão da fase δ em função dos coeficientes da função de onda na região $Z > L$.

Durante o desenvolvimento do nosso trabalho, tivemos conhecimento do trabalho de Austin e Jaros⁽³⁵⁾ que utilizaram esta mesma técnica na determinação da estrutura eletrônica do poço quântico isolado sob ação de um campo elétrico.

Comparativamente, como veremos no capítulo IV, os três métodos apresentam resultados bastante semelhantes. O Método Variacional, porém, além de ser um método aproximado, nos fornece somente o nível de energia do estado fundamental. Neste caso, convém mencionar que a função de onda variacional proposta por Bastard et al.⁽⁹⁾ é bastante aceitável como atestaram Miller et al.⁽⁵⁾.

O método exato de Ahn e Chuang⁽⁴⁰⁾, apesar de factível torna-se obviamente muito complicado, do ponto de vista numérico, quando sua aplicação for estendida para um problema de múltiplos poços e barreiras.

Embora o Método da Análise do "Phase-shift" possa apresentar resultados não satisfatórios para campos elétricos muito intensos (acima daqueles usados experimentalmente), como mostraram Ahn e Chuang é um Método que apresenta inúmeras vantagens ao se tratar um potencial de N poços acoplados, utilizando campos elétricos da ordem dos valores experimentais.

3.2 - ESTRUTURA DE DUPLA BARREIRA

Passamos agora a analisar uma outra heteroestrutura muito estudada tanto teórica quanto experimentalmente. Trata-se de duas barreiras de potencial que modelam camadas não dopadas de AlGaAs e um poço de potencial devido à camada de GaAs. O sistema é prensado por eletrodos de GaAs altamente dopadas que fornecem elétrons para o tunelamento e está mostrado na figura 3.4.

Fig. 3.4: Potencial de dupla barreira de AlGaAs-GaAs sem campo elétrico aplicado. E_0 e E_1 são níveis de energia para estados quase-ligados e E_f é a energia de Fermi.

Consideremos os estados com energias E_0 e E_1 dentro do poço entre as duas barreiras acima (figura 3.4). Não podemos afirmar que esses estados sejam estados estacionários pois a partícula tem sempre uma probabilidade não nula de tunelar para fora do poço dependendo das larguras do poço, das barreiras e da profundidade do poço. Estes portanto são estados quase-ligados, com um tempo de vida finito, da mesma forma que o são os estados de poço isolado (figura 3.2) sob ação de um campo elétrico constante.

Consideremos agora uma partícula livre incidindo no potencial de dupla barreira com uma energia $E > V_0$. Como no caso do

poço quadrado o potencial da barreira agir $\grave{a}$ como um centro espalhador e sob certas condiç $\tilde{o}$ es de interfer $\tilde{e}$ ncias construtivas nas interfaces da estrutura esta part $\acute{i}$ cula pode ser capturada por um tempo determinado, caracterizando um estado virtual.

Vemos, portanto, que as definiç $\tilde{o}$ es de estados quase-ligados e virtuais s $\tilde{a}$ o os mesmos nos dois tipos de problema. Agora no entanto, estamos interessados no tunelamento de el $\acute{e}$ trons via estes estados quise-ligados e virtuais. Deste modo, devemos estar envolvidos no c $\acute{a}$ lculo do Coeficiente de Transmiss $\tilde{a}$ o, a ser desenvolvido no cap $\acute{i}$ tulo V. Aqui queremos discutir a F $\acute{i}$ sica do processo de tunelamento ressonante (44 e 45). Tomemos, por simplicidade, a estrutura de dupla barreira mostrada na figura 3.4.

A probabilidade de transmiss $\tilde{a}$ o de um el $\acute{e}$ tron atrav $\tilde{e}$ s de um potencial de barreira dupla sem um campo el $\acute{e}$ trico aplicado, torna-se unit $\acute{a}$ ria quando sua energia $\acute{e}$ igual $\grave{a}$ energia de um estado quase-ligado dentro do poço, independentemente da largura das barreiras; longe desta condiç $\tilde{a}$ o de resson $\tilde{a}$ ncia, a probabilidade cai exponencialmente. Este fen $\acute{o}$ meno, chamado de tunelamento ressonante, foi predito na d $\acute{e}$ cada de 60 e subsequentemente observado em heteroestrutura de AlGaAs-GaAs-AlGaAs (11,12 e 46).

Suponhamos que durante o processo de tunelamento, ambos, a energia total e o momento paralelo ($\vec{K}_{||}$) $\grave{a}$ s interfaces sejam conservados. Consideraremos o caso em que as barreiras s $\tilde{a}$ o id $\tilde{e}$ nticas, $\grave{a}$ temperatura zero, como mostrada na figura 3.4 onde, em geral, a energia E de um el $\acute{e}$ tron no eletrodo n^{+} -GaAs difere das energias ($E_0, E_1, \dots$) dos estados quase-ligados do poço de potencial.

Para uma certa voltagem V aplicada entre os el $\acute{e}$ trodos (da ordem de $2E_0/e$) podemos esperar um aumento na corrente de tunelamento devido aos efeitos de resson $\tilde{a}$ ncia. Na prafica, h $\tilde{a}$ uma poss $\acute{i}$ vel faixa de energias para o el $\acute{e}$ tron incidente ($0 \leq E \leq E_f$) pela qual a probabilidade de tunelamento torna-se significativa. A fi-

gura 3.5 ilustra a contribuição para a corrente de diferentes estados com o aumento da voltagem.

Fig. 3.5: Esquema para demonstrações do tunelamento ressonante em estrutura de dupla barreira:

- (a) banda de condução de uma dupla barreira de AlGaAs-GaAs-AlGaAs;
- (b) alinhamentos relativos entre o nível quase-ligado do poço quântico e a energia de Fermi para três voltagens representativas.

Para $eV/2 < E_0 - E_F$, nenhum tunelamento é possível, até que a voltagem limiar V_1^0 ($eV_1^0/2 = E_0 - E_F$) seja alcançada. Nesse ponto a energia do estado quase-ligado E_0 está emparelhada com a energia de Fermi do eletrodo emissor. A partir daí mais estados tornam-se viáveis, e com a voltagem V crescente, a corrente ressonante aumenta monotonicamente. Finalmente, quando $eV/2 > eV_2^0/2 \equiv E_0$, ou seja, a energia do estado quase-ligado está abaixo de zero, não mais entre a faixa de $0 \leq E \leq E_F$, torna-se impossível o tunelamento pois não há conservação do momento paralelo e da energia total. A corrente então

tenderia a diminuir rapidamente formando uma abrupta região de resistência negativa e a curva da corrente x voltagem apresentaria, numa análise grosseira, um formato triangular como mostrado na figura 3.6.

Fig. 3.6: Análise grosseira da corrente de tunelamento ressonante num sistema de dupla barreira.

Entretanto, o que se observa experimentalmente nas curvas $I \times V$ é que há claramente uma região de resistência negativa com um decaimento mais suave e não tão abrupto, devido à natureza quase-estacionária dos estados com energias $E_0, E_1, \dots$ que apresentam um alargamento $\Gamma_0, \Gamma_1, \dots$ delimitando suas posições ⁽⁴⁷⁾.

Sob essas condições, uma partícula incidindo com uma determinada energia ressonante E_r ($0 < E_r < E_f$), correspondendo a uma largura de nível Γ_r de um estado quase-ligado, é transmitida e contribui para a corrente de tunelamento. A escala de tempo envolvida neste evento é dada aproximadamente por $t \sim \hbar/\Gamma_r$, discutido anteriormente. Durante este período de tempo uma grande densidade de probabilidade eletrônica forma-se dentro do poço devido à interferência construtiva entre a função de onda transmitida através da primeira barreira com aquela refletida pela segunda.

Ricco e Azbel ⁽⁴⁸⁾ têm recentemente apontado que para se

obter uma máxima transmissão ressonante é preciso iguais coeficientes de transmissão para ambas as barreiras, ou seja, a estrutura deve ser simétrica. Entretanto, com a aplicação de um campo elétrico ou uma voltagem externa o potencial torna-se assimétrico. Como consequência dessa assimetria verifica-se uma diminuição na magnitude do pico de ressonância no Coeficiente de transmissão como veremos posteriormente na apresentação de nossos resultados no capítulo V.

No caso de super-redes formadas por múltiplas barreiras e poços, o processo de tunelamento ressonante é similar ao da dupla barreira exceto que a sequência de reflexões externas responsáveis pela formação da ressonância é mais complexa.

CAPÍTULO IV
ESTRUTURA ELETRÔNICA DE POÇOS QUÂNTICOS NA PRESENÇA DE UM CAMPO
ELÉTRICO EXTERNO

Neste capítulo vamos determinar a estrutura dos níveis quase-ligados e virtuais de elétrons e buracos em poços quânticos sob ação de um campo elétrico usando o formalismo de Matriz de Iteração e Análise de "Phase-shift".

Nestas certas heteroestruturas semicondutoras, as camadas de AlGaAs são suficientemente largas e o potencial é alto, devido a grande concentração de Al, de modo que a penetração da função de onda de um poço para outro pode ser negligenciada para estados do poço quântico com baixas energias. Estas estruturas são conhecidas como Múltiplos Poços Quânticos (MPQ) e, em geral, um poço quântico isolado tem sido modelado para estudos de espectroscopia ótica⁽³⁰⁾. Porém, para estados com altas energias nos MPQ, ou para estreitas barreiras de AlGaAs, a superposição das funções de onda é relevante e efeitos de tunelamento tornam-se importantes. Neste caso, as propriedades físicas são significativamente diferentes. Para MPQ na presença de um forte campo elétrico, estes efeitos são verificados e devemos considerá-los para poços quânticos acoplados ou super-redes finitas. A importância destes efeitos é manifestada, por exemplo, na determinação das energias das transições óticas para múltiplos poços quânticos pelas medidas de eletroreflectância e fotoluminescência reportadas por Klipstein et al⁽⁶⁾.

Como o objetivo de nosso trabalho é discutir estados virtuais e quase-ligados na presença de um campo elétrico, consideraremos como discutido no capítulo II, uma aproximação de massa efetiva para a função envelope em um modelo simples de duas bandas, não incluindo a deformação das bandas devido às impurezas e a não parabolicidade das bandas.

4.1 - O FORMALISMO DE MATRIZ DE ITERAÇÃO E ANÁLISE DE "PHASE-SHIFT"

Os poços quânticos sob ação de um campo elétrico constan-

te, perpendicular às interfaces, constitui-se então um sistema cujos estados são não estacionários, podendo ser quase-ligados ou virtuais, conforme o nível de energia estiver dentro ou acima do poço de potencial.

Para um número finito de poços, a energia potencial tem a forma esboçada na Figura 4.1.

Fig. 4.1: Modelo simples para um sistema de poços quânticos (elétrons e buracos) sob ação de um campo elétrico constante perpendicular às interfaces.

Na Figura 4.1 definimos as regiões pares como regiões de poços de potencial e as regiões ímpares como barreiras. Deste modo, podemos escrever analiticamente:

$$V_n(z) = \begin{cases} -eFz & \text{para } n \text{ ímpar} \\ -(V_0 + eFz) & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (4.1.1)$$

onde e = carga do elétron,

F = magnitude do campo elétrico,

V_0 = profundidade do poço de potencial.

A letra n é um índice que varia de 1 a $2N+1$, sendo N o número de poços do sistema.

Assim, a Equação de Schroedinger na direção z nas várias regiões do potencial pode ser escrita na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} \psi_n(z) - eFz \psi_n(z) = E \psi_n(z) \quad \text{para } n \text{ ímpar,} \quad (4.1.2a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dz^2} \psi_n(z) - (V_0 + eFz) \psi_n(z) = E \psi_n(z) \quad \text{para } n \text{ par.} \quad (4.1.2b)$$

Fazendo a transformação de coordenadas $u = z/l_b + E/eFl_b$ na equação (4.1.2a) e a transformação $u = z/l_p + (V_0 + E)/eFl_p$ na equação (4.1.2b) reduzimos ambas à forma:

$$\psi''(u) + u \psi(u) = 0, \quad (4.1.3)$$

cuja solução é conhecida ser uma combinação linear das funções de Airy⁽⁸⁴⁾.

Escrevemos, então, as soluções para as funções de onda, tanto nas regiões pares quanto ímpares, como

$$\psi_n(z) = A_n Ai(-z/l_n - C_n) + B_n Bi(-z/l_n - C_n), \quad (4.1.4)$$

com

$$C_n = \begin{cases} E/eFl_b & n \text{ ímpar} \\ (V_o + E)/eFl_p & n \text{ par} , \end{cases} \quad (4.1.5)$$

$$l_n = \begin{cases} l_b = (\hbar^2/2m_b^*eF)^{1/3} & n \text{ ímpar} \\ l_p = (\hbar^2/2m_p^*eF)^{1/3} & n \text{ par} , \end{cases} \quad (4.1.6)$$

e

$$m_n^* = \begin{cases} m_b^* & n \text{ ímpar} \\ m_p^* & n \text{ par} , \end{cases} \quad (4.1.7)$$

sendo m_b^* e m_p^* as massas efetivas da partícula na barreira e no poço respectivamente.

Devemos impor as seguintes condições de contorno das funções de onda e suas derivadas nas posições z_n de cada interface:

$$\psi_n(z_n) = \psi_{n+1}(z_n) , \quad (4.1.8a)$$

$$\frac{1}{m_n^*} \psi'_n(z_n) = \frac{1}{m_{n+1}^*} \psi'_{n+1}(z_n) , \quad (4.1.8b)$$

o índice n agora variando de 1 até $2N$, o dobro do número de poços.

O fator m_n^*/m_{n+1}^* é necessário para que o fluxo quântico $\frac{i\hbar}{2m^*} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*)$ seja conservado em cada interface.

Substituindo a forma geral da função de onda ψ_n (Eq. 4.1.4) nas Eqs. (4.1.8) temos

$$A_n A_i(\alpha_n) + B_n B_i(\alpha_n) = A_{n+1} A_i(\alpha_{n+1}) + B_{n+1} B_i(\alpha_{n+1}) , \quad (4.1.9a)$$

$$-\frac{1}{l_n m_n^*} [A_n A_i'(\alpha_n) + B_n B_i'(\alpha_n)] = -\frac{1}{l_{n+1} m_{n+1}^*} [A_{n+1} A_i'(\alpha_{n+1}) + B_{n+1} B_i'(\alpha_{n+1})], \quad (4.1.9b)$$

onde

$$\begin{cases} \alpha_n = -(\beta_n/l_n + C_n), \\ \alpha_{n+1} = -(\beta_n/l_{n+1} + C_{n+1}). \end{cases} \quad (4.1.10)$$

Algebricamente, A_n e B_n são explicitados em termos de A_{n+1} e B_{n+1} para obter as seguintes expressões,

$$A_n = -\pi \left\{ \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} A_i'(\alpha_{n+1}) B_i(\alpha_n) - A_i(\alpha_{n+1}) B_i'(\alpha_n) \right] A_{n+1} + \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} B_i'(\alpha_{n+1}) B_i(\alpha_n) - B_i(\alpha_{n+1}) B_i'(\alpha_n) \right] B_{n+1} \right\}, \quad (4.1.11a)$$

$$B_n = \pi \left\{ \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} A_i'(\alpha_{n+1}) A_i(\alpha_n) - A_i(\alpha_{n+1}) A_i'(\alpha_n) \right] A_{n+1} + \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} B_i'(\alpha_{n+1}) A_i(\alpha_n) - B_i(\alpha_{n+1}) A_i'(\alpha_n) \right] B_{n+1} \right\}, \quad (4.1.11b)$$

sob a forma de matriz as relações (4.1.11) transformam-se em

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \quad (4.1.12)$$

sendo M_n , a Matriz de Iteração, que tem a seguinte forma

$$M_n = \pi \begin{pmatrix} \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} A_i(\alpha_{n+1}) B_i(\alpha_n) - A_i(\alpha_{n+1}) B_i'(\alpha_n) \right] & \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} B_i'(\alpha_{n+1}) B_i(\alpha_n) - B_i(\alpha_{n+1}) B_i'(\alpha_n) \right] \\ \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} A_i'(\alpha_{n+1}) A_i(\alpha_n) - A_i(\alpha_{n+1}) A_i'(\alpha_n) \right] & \left[\frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} B_i'(\alpha_{n+1}) A_i(\alpha_n) - B_i(\alpha_{n+1}) A_i'(\alpha_n) \right] \end{pmatrix} \quad (4.1.13)$$

A expressão matricial (4.1.12), quando explicitados os índices de 1 a $2N$, relacionando os coeficientes A_1 e B_1 em termos de A_{2N+1} e B_{2N+1} torna-se:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_1 M_2 \dots M_{2N} \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} \quad (4.1.14)$$

Para z tendendo a $-\infty$ a função de onda $\Psi_1(z)$ (ver Figura 4.1) deve anular-se. Entretanto a função de Airy $Bi(-z/l_b - C_1)$ correspondente a $\Psi_1(z)$, para $z \rightarrow -\infty$ diverge, o que não é fisicamente aceitável. Impomos então $B_1 \equiv 0$ para a região $z < z_1$, e a equação matricial (4.1.14) adquire a forma

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix} = M_1 M_2 \dots M_{2N} \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} \quad (4.1.15)$$

Definindo $\mathcal{M} = \prod_{n=1}^{2N} M_n$ como a matriz multiplicação das matrizes de iteração, resulta que $\mathcal{M}$ é uma matriz de ordem 2. Assim,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{11} & \mathcal{M}_{12} \\ \mathcal{M}_{21} & \mathcal{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} \quad (4.1.16)$$

A razão B_{2N+1}/A_{2N+1} está relacionada com o comportamento das funções de onda que incidem e emergem à direita da região dos poços de potencial (ver Figura 4.1 para $z > z_{2N}$). É portanto, uma quantidade que indica os processos de interferência existentes entre essas funções de onda através de suas diferenças de fase.

Relacionamos a razão entre estas constantes dependentes da energia diretamente com o "Phase-shift" através da fórmula (4.1.17), como discutido anteriormente. Assim

$$\delta = \arctg (B_{2N+1} / A_{2N+1}) . \quad (4.1.17)$$

A razão B_{2N+1}/A_{2N+1} , calculada pela expressão matricial (4.1.16), é dada por

$$\frac{B_{2N+1}}{A_{2N+1}} = - \frac{M_{21}}{M_{22}} , \quad (4.1.18)$$

e portanto

$$\operatorname{tg} \delta = - \frac{M_{21}}{M_{22}} . \quad (4.1.19)$$

Deste modo, através do cálculo numérico dos elementos da matriz multiplicação M_{21} e M_{22} , obtemos um método para determinar os níveis de energia não estacionários em N poços quânticos acoplados sob ação de um campo elétrico. Assim sendo, é suficiente determinar a energia onde ocorra uma variação de π na fase δ .

4.2 - APLICAÇÕES DO MÉTODO

4.2.1 - Sistemas de poço único

Nesta seção apresentaremos nossos resultados referentes a um poço quântico isolado. Utilizaremos tanto a razão 85:15 como a 57:43 para a diferença dos gaps distribuída entre as bandas de condução e valência em nossos cálculos no intuito de averiguar as diferenças apresentadas entre os dois tipos de configurações. Consideraremos por simplicidade as massas efetivas iguais tanto para elétrons quanto buracos nos poços e nas barreiras. Para efeito de cálculo numérico tomamos os valores dos parâmetros como dados na Tabela 4.1.

	57:43	85:15
V_e (eV)	0,228	0,34
V_h (eV)	0,172	0,06
$m_e^*(m_o)$	0,0665	0,0665
$m_h^*(m_o)$	0,34	0,45

Tabela 4.1: Parâmetros nas configurações 85:15 e 57:43⁽⁴⁾.

Em primeiro lugar mostramos a curva dos coeficientes $(-\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22})$ em função da energia numa região próxima da energia de um estado quase-ligado para elétrons e buracos (ver Figuras 4.2 a e b). Nas posições de descontinuidade a razão $(-\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22})$ passa de um valor positivo grande para um valor negativo também grande ou vice-versa. Como a razão $(-\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22})$ é igual a $\text{tg}(\delta)$ significa que δ passa abruptamente de $\pi/2$ a $-\pi/2$, ou seja, há uma variação de π na fase δ caracterizando um estado não estacionário. Isso acontece tanto para estados quase-ligados como virtuais do sistema na presença de um campo elétrico.

Deste modo, as ressonâncias Stark são determinadas por inspeção da razão $-\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22}$ em função da energia. No entanto, podemos usar a parametrização do tipo Breit-Wigner de modo a estimar o tempo de vida dos estados quase-ligados e virtuais que é proporcional ao inverso da meia largura Γ . Obviamente, esta aproximação não é boa para ressonâncias muito largas que são esperadas ocorrer em campos intensos.

Fig. 4.2: Curva da razão $-M_{21}/M_{22}$ em função da energia.

a) Descontinuidade demarcando um nível quase-ligado para elétron num poço isolado com largura de $30\text{\AA}$ sob ação de um campo elétrico 10^7 V/m na configuração 57:43; b) Descontinuidade demarcando um nível quase-ligado para buraco num poço isolado com largura $30\text{\AA}$ sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m na configuração 57:43.

As figuras 4.3a e 4.3b mostram uma estrutura de pico na quantidade $|\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22}|$ onde podemos qualitativamente comparar os tempos de vida de estados quase-ligados com os de estados virtuais.

Observando as escalas de energia nas Figuras 4.3a e 4.3b, conclui-se facilmente que as ressonâncias devido a estados virtuais são mais largas do que as de estados quase-ligados, implicando que os tempos de vida de estados virtuais são bem menores que os de quase-ligados. Este resultado é consistente com nossa intuição física.

Figura 4.3a: Estrutura de pico na curva de $|\mathcal{M}_{21}/\mathcal{M}_{22}|$ X energia. Posição de ressonância para um estado quase-ligado de poço único. Configuração 57:43, $F = 10^7 \text{ V/m}$ e $L_p = 30 \text{ \AA}$.

Figura 4.3b: Estrutura de pico na curva de $|M_{21}/M_{22}|$ X energia. Posição de ressonância para um estado virtual de poço único. Configuração 57:43, $F = 10^7 \text{ V/m}$ e $L_p = 30 \text{ \AA}$.

Deste modo, a partir das Figuras 4.2 e 4.3 que exibem claramente as descontinuidades e os picos ressonantes podemos com provar a validade de nosso Método de Matriz de Iteração na deter-

minação dos níveis quase-ligados e virtuais. Note os Algarismos significativos no eixo da Energia nas Figuras 4.3a para níveis quase-ligados.

As Figuras 4.4 e 4.5 exibem os diagramas de níveis de energia de estados quase-ligados assim como os primeiros estados virtuais para poços de diferentes larguras e nas duas configurações de "band off-set".

Figura 4.4: Sistema de poço único na Configuração 57:43.

a) Poço de 30Å; b) Poço de 60Å. Os parâmetros utilizados são dados na Tabela 4.1 com um campo de 10^7 V/m.

Fig. 4.5: Sistema de poço único na Configuração 85:15.

a) Poço de 30Å; b) Poço de 60Å. Os parâmetros utilizados são dados na Tabela 4.1 com um campo de 10^7 V/m.

É interessante notar que para a largura de poço igual a 60Å (ver Figuras 4.4b e 4.5b) existem dois estados quase-ligados na banda de condução na configuração 85:15 para os elétrons, enquanto que há apenas um estado na configuração 57:43. O contrário acontece na banda de valência para os buracos, onde na configuração 57:43 há dois estados quase-ligados e na configuração 85:15 somente um. Este resultado pode ser entendido facilmente discutindo

o caso de poço quadrado sem campo elétrico aplicado. A solução da equação transcendental resultante impõe condições para os parâmetros massa (m), profundidade do poço (V_0) e largura do poço (L_p) na determinação do número de estados ligados. Com a massa efetiva do elétron e a largura do poço são iguais para a banda de condução dos elétrons a diferença entre o número de estados ocorre devido aos valores de V_0 que são bem diferentes nas duas configurações. No entanto, para os estados quase-ligados de buracos, as massas efetivas e a profundidade do poço são diferentes nas duas configurações. V_h na configuração 57:43 é muito maior do que na configuração 85:15 enquanto que a diferença de massas é pequena. Portanto obtem-se mais de um estado quase-ligado para buraco na configuração 57:43 em comparação com a configuração 85:15.

Uma conclusão importante obtida verificando-se vários resultados para diferentes valores de campos elétricos é que o nível de energia ressonante dos estados quase-ligados decresce como função do campo elétrico. Para três sistemas de poço único com larguras diferentes verificamos essa dependência que podem ser vistas na Figura 4.6.

Fig. 4.6: Posição do primeiro nível quase-ligado em função do campo elétrico para três sistemas de poço único na configuração 57:43.

Na faixa de campos pequenos nossos resultados apresentam um comportamento tipo quadrático comprovado experimentalmente por Aliberti et al.⁽³⁰⁾. Para campos elétricos maiores, as curvas passam a ter um comportamento linear.

No caso de $L_p = 30 \text{ \AA}$, a ação do campo elétrico, afeta muito pouco o sistema. As posições dos níveis quase-ligados, de elétrons e buracos, tiveram uma variação pequena da ordem de 5 meV. Conforme

aumentamos a largura do poço a ação do campo elétrico torna-se mais efetiva, inclinando mais as bandas de condução e valência decrescendo o nível de energia dos estados quase-ligados dos portadores. Para $L_p = 100\text{\AA}$, com a variação do campo elétrico de 0 a $2 \times 10^7 \text{V/m}$, há uma diferença grande entre os níveis para os dois extremos da curva, da ordem de 30meV para o caso de elétrons e de 45meV para os buracos, a qual está em boa concordância com os resultados de Miller et. al.⁽⁵⁾ do grupo da Bell que reproduzem muito bem experimentos de absorção ótica.

Bastard et.al.⁽⁶⁾ também chegaram à conclusão que o campo elétrico afeta mais a sistemas cuja largura do poço é da ordem de $100\text{\AA}$. Através das funções de onda na banda de condução e de valência variacionais, para poço único, calcularam o quadrado da Integral de "Overlap" M_{CV}^2 em função do campo elétrico, que é proporcional à taxa de recombinação dos elétrons e buracos e mostraram que a taxa de recombinação diminui acentuadamente, da ordem de 67% , para sistemas com largura de poço igual a $100\text{\AA}$ e campos elétricos de 10^7V/m , enquanto que em sistemas de $30\text{\AA}$ a redução é da ordem de 10% para o mesmo campo elétrico.

Este resultado, apesar de não quantitativo, explicou qualitativamente os resultados experimentais da diminuição do pico de luminescência em um sistema de multi-camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ obtidos por Mendez et al.⁽⁷⁾. A razão pela qual não se conseguiu resultados numericamente compatíveis reside no fato que a experiência foi feita utilizando uma amostra contendo vários poços quânticos e não somente um, além do resultado variacional não considerar os efeitos de superposição das funções de onda e os processos de tunelamento ressonante.

Os resultados experimentais de Mendez et al. mostram que com aumento do campo elétrico há uma redução no pico de luminescência excitônica até seu completo desaparecimento.

A aplicação de um campo elétrico induz uma separação espacial entre elétrons e buracos e para os poços de $100\text{\AA}$ essa separação, obviamente, é maior que num poço de $30\text{\AA}$. Assim sendo, para o caso onde os pares elétron-buraco estão mais separados a taxa de recombinação deve diminuir concordando com os resultados de Bastard et al.. Essa polarização dos portadores, em direções opostas, é então responsável pela diminuição do pico de luminescência pois quanto maior o campo elétrico maior é a polarização, e conseqüentemente a probabilidade de recombinação dos pares elétron-buraco e a emissão de fótons, diminui.

4.2.2 - Comparação com outros trabalhos

Nesta seção pretendemos comparar nossos resultados com aqueles de prévios trabalhos já discutidos no capítulo III no caso de Poço isolado. Para efeito de cálculo tomamos os parâmetros dos portadores na configuração 85:15. Fazendo $N=1$ em nosso método, produzimos facilmente os resultados de Austin e Jaros⁽³⁵⁾ e comparamos com os resultados do método variacional de Bastard et al.

A Figura 4.7 mostra a diferença de energia entre o primeiro nível quase-ligado na presença do campo elétrico F , e o nível estacionário do poço quadrado em $F=0$ para elétrons e buracos em um poço quântico de largura $L_p=30\text{\AA}$. Os resultados do cálculo variacional para elétrons são mostrados e apresentam boa concordância apenas no limite de campos fracos.

Fig. 4.7: Curvas da diferença de energia ΔE em função do campo elétrico para elétrons e buracos. A curva pontilhada é obtida pelo método Variacional. Os parâmetros dos portadores são: $V_e = 0,4\text{eV}$, $V_h = 0,07\text{eV}$, $m_e^* = 0,067m_0$ e $m_h^* = 0,45m_0$.

Mostramos ainda na figura 4.8 o comportamento do primeiro nível quase-ligado e virtual para o caso dos buracos na banda de valência em função do campo elétrico para poço único de largura $L_p = 30\text{\AA}$.

Fig. 4.8: Variação do primeiro nível quase-ligado e primeiro nível virtual em função do campo elétrico aplicado. Os parâmetros de buraco utilizados foram: $V_h = 0,07\text{eV}$ e $m_h^* = 0,45m_o$.

A comparação com os resultados da solução exata de Ahn e Chuang (Ver capítulo III) não pode ser obtida diretamente desde que os valores numéricos do campo elétrico e da energia estão parametrizados em outras unidades. No entanto, estes autores concluem que seus resultados são iguais aqueles obtidos pelo método de "Phase-shift" exceto a campos muito intensos. Nesta região de campos não existe o ponto de retorno, onde a curva de energia muda de concavidade.

Esse efeito de "retorno" inicia-se na faixa de campos elétricos muito intensos, da ordem de $2,8 \times 10^7 \text{ V/m}$ para os buracos e da ordem de $2,0 \times 10^8 \text{ V/m}$ para os elétrons. Para campos maiores do que esses limites a posição do nível ressonante ao invés de acompanhar a inclinação das bandas devido ao potencial do campo elétrico reverteria ao contrário crescendo em relação ao fundo do poço onde um estado poderia sofrer uma transição passando de um estado quase-ligado para um estado virtual. Esse efeito, no entanto parece provir de falhas no Método de "Phase-shift" a altos campos. A solução exata de Ahn e Chuang, porém, quando levada a tratar sistemas com maior número de poços torna-se extremamente complicada e o Método de "Phase-shift", pelo contrário, é hábil para tratar sistemas com N poços acoplados na faixa de campos elétricos experimentais.

4.2.3 - Múltiplos Poços Quânticos Acoplados

Nesta seção estamos interessados em estudar sistemas com mais de um poço quântico. Determinaremos os níveis dos estados quase-ligados e virtuais para elétrons e buracos pela Análise do "Phase-shift".

Vamos mostrar que para certas larguras de barreiras podemos tratar um sistema de N poços acoplados como se eles estivessem isolados um do outro. Os níveis quase-ligados tendem a se repetir a medida que as barreiras vão se alargando, ou seja, para barreiras suficientemente largas não existe superposição das funções de onda de portadores em poços vizinhos de modo que os auto-valores do sistema total tenderão a reproduzir os auto-valores de um poço isolado. Como estamos considerando a concentração de alumínio fixa e portanto o potencial da barreira, permanece sendo a largura dos poços a única variável relevante.

Consideraremos, para efeito de discussão, sistemas com 2 e 3 poços para um dado campo elétrico de 10^7 V/m e a largura dos poços de $30 \text{ \AA}$.

Três sequências de diagramas são mostrados para diferentes larguras das barreiras. Nos sistemas $L_b=100\text{\AA}$, mostrados na figura 4.9, é possível considerar os poços como isolados pois os níveis quase-ligados em cada poço isoladamente, nos sistemas de 2 e 3 poços, apresentam a mesma posição relativa como se apresentam os níveis quase-ligados para poço único da figura 4.4a. A diferença, portanto, entre os níveis quase-ligados dos poços vizinhos é devido ao potencial do campo que rebaixa a origem de cada poço de potencial conforme suas posições, na quantidade eFd , onde d é a distância efetiva desde a origem do primeiro poço até aquele em que se está interessado.

Para as larguras de poço $L_b=50\text{\AA}$ mostrados na figura 4.10, os níveis quase-ligados ainda apresentam um comportamento semelhante aos sistemas com $L_b=100\text{\AA}$. Entretanto, devido às barreiras serem mais estreitas, proporcionando uma maior superposição entre as funções de onda de portadores em poços vizinhos, ocorrem pequenas diferenças na energia dos níveis de forma que eles não se repetem uniformemente em cada poço. Para os sistemas com a largura das barreiras $L_b=30\text{\AA}$ mostrados na figura 4.11, todas as características dos dois últimos sistemas são perdidas de forma que a superposição das funções de onda e os efeitos de tunelamento tornam-se significativos. Isto se manifesta principalmente, na determinação dos estados quase-ligados para elétrons cujos níveis não apresentam nenhuma uniformidade.

a)

b)

Fig. 4.9: Diagrama das bandas de condução e de valência com os níveis quase-ligados e primeiros virtuais para $L_p=100\text{\AA}$. a) Dois poços acoplados; b) Três poços acoplados. Ambos os sistemas a) e b) na presença de um campo elétrico de 10^7V/m . As linhas tracejadas indicam níveis virtuais.

a)

b)

Fig. 4.10: Diagrama das bandas de condução e de valência com os níveis quase-ligados e virtuais para $L_b = 50\text{\AA}$ sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m . a) Dois poços acoplados; b) Três poços acoplados. As linhas tracejadas indicam níveis virtuais.

a)

b)

Fig. 4.11: Diagrama das bandas de condução e de valência com os níveis quase-ligados e virtuais para $L_b=30\text{\AA}$ sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m . a) Dois poços acoplados; b) Três poços acoplados. As linhas tracejadas indicam níveis virtuais.

Concluimos, então, que barreiras de AlGaAs com larguras da ordem de $100\text{\AA}$ são suficientes para desacoplar os poços quânticos

num sistema de N poços. Neste caso, todos os poços possuem a mesma estrutura de níveis ressonantes quase-ligados, de modo que, ao invés de tratarmos um sistema com N poços cujas barreiras são suficientemente largas, consideramos o sistema formado por um único poço quântico. Esta propriedade dos poços quânticos será utilizada na seção a seguir para calcular os níveis ressonantes de elétrons e buracos num sistema de múltiplos poços com a finalidade de obter a energia de transição do par elétron-buraco e comparar com os resultados de eletroreflectância e fotoluminescência de Klipstein et al.⁽⁶⁾. Antes, porém, de fazermos a comparação com a experiência, mostramos nas figuras 4.12-4.14 as posições dos níveis ressonantes quase-ligados, primeiros níveis virtuais de elétrons e buracos em função do número de poços onde temos considerado três larguras de barreira diferentes. Da mesma forma, como nas figuras 4.9-4.11, queremos mostrar a influência da largura das barreiras na determinação dos níveis de energia. Trabalhamos com sistemas de 1 a 4 poços quânticos onde em todos os casos tomamos novamente a largura dos poços igual a $30\text{\AA}$.

Verificando o diagrama (ver figura 4.12a) para os níveis de elétron no caso das larguras das barreiras serem de $30\text{\AA}$, notamos uma razoável variação na estrutura dos níveis à medida que cresce o número de poços N de modo que esta não se repete não mantendo as posições dos níveis anteriores. Assim, um sistema com $L_b = 30\text{\AA}$ para $N > 2$ já apresenta níveis não estacionários que diferem em energia além do termo constante do campo e portanto apresentam energias de recombinação dos pares elétron-buraco diferentes de poço a poço. Isto implica em propriedades óticas diferentes e este sistema não pode ser tratado como um sistema de poços isolados.

Fig. 4.12: Diagrama dos níveis não estacionários como função do número de poços para sistemas com $L_p = 30 \text{ \AA}$ e $L_b = 30 \text{ \AA}$ na configuração 57:43 na presença de um campo elétrico de 10^7 V/m . a) níveis de elétrons; b) níveis de buraco. As linhas tracejadas indicam níveis virtuais e as cheias níveis quase-ligados.

Fig. 4.13: Diagrama dos níveis não estacionários como função do número de poços para sistemas com $L_p=30\text{\AA}$ e $L_b=50\text{\AA}$ na configuração 57:43 na presença de um campo elétrico de 10^7V/m . a) níveis de elétrons; b) níveis de buraco. As linhas tracejadas indicam níveis virtuais e as cheias indicam níveis quase-ligados.

Fig. 4.14: Diagrama dos níveis não estacionários como função do número de poços para sistemas com $L_p=30\text{\AA}$ e $L_b=100\text{\AA}$ na configuração 57:43 na presença de um campo elétrico de 10^7V/m . a) níveis de elétrons; b) níveis de buraco. As linhas tracejadas indicam níveis virtuais e as cheias indicam níveis quase-ligados.

Nos sistemas com as larguras das barreiras iguais a $50\text{\AA}$ e $100\text{\AA}$ a estrutura é outra, a medida que aumentamos o número de poços os níveis se repetem seguidamente apenas defasados devido ao potencial constante do campo elétrico. Para $L_b=50\text{\AA}$ (figura 4.13) há ainda uma pequena diferença nas energias e os níveis não se repetem uniformemente conforme já havíamos discutido. Para $L_b=100\text{\AA}$ (figura 4.14) os níveis tanto virtuais como quase-ligados se repetem uniformemente conforme cresce o número de poços. Isto significa que em sistemas com $L_b \geq 100\text{\AA}$ as partículas estão realmente confinadas nos poços quânticos com uma probabilidade de tunelamento muito pequena. No entanto, cabe ressaltar que os níveis quase-ligados para buracos em qualquer dos três sistemas tomados, $L_b=30\text{\AA}$, $50\text{\AA}$ ou $100\text{\AA}$, se repetem uniformemente com o aumento do número de poços independente da largura das barreiras. Esse comportamento é devido ao coeficiente de transmissão para buracos ser muito pequeno, as funções de onda penetram muito pouco nas barreiras contrariamente ao comportamento dos elétrons. Assim, uma barreira de $30\text{\AA}$ se torna tão boa como uma de $100\text{\AA}$ para impedir o tunelamento dos buracos.

Este fato está ligado à relação entre as massas efetivas dos portadores e respectivas barreiras de potencial embutidas no parâmetro relevante KL onde K é o vetor de onda e L a largura da barreira. Para um caso simples de tunelamento via uma barreira quadrada temos que $K_h L > K_e L$ e o coeficiente de transmissão $T \sim e^{-2KL}$, de forma que o coeficiente de transmissão para os buracos será menor do que para os elétrons justificando a pequena probabilidade de tunelamento e consequente repetição dos níveis ressonantes quase-ligados para o caso dos buracos mesmo diante de uma barreira tão estreita quanto $30\text{\AA}$.

4.2.4 - Comparação com alguns resultados experimentais

Nesta parte, faremos a comparação de nossos resultados para recombinação dos pares elétron-buraco sob ação de um cam

po elétrico com os resultados experimentais de fotoluminescência (PL), fotoluminescência excitante (PLE) e eletroreflectância (ERS) obtidos por Klipstein et al.⁽⁶⁾ em sistemas de poço único e múltiplos poços quânticos de $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs. As amostras investigadas em sua experiência possuíam para um sistema de poço único uma concentração de alumínio x variando uniformemente de 0,2, perto do poço, para 0,4 nas bordas das barreiras; e para o sistema de múltiplos poços uma concentração de alumínio fixa de 0,4 em cada barreira $Al_xGa_{1-x}As$. O campo elétrico era controlado aplicando-se entre os eletrodos das estruturas uma tensão reversa, onde uma voltagem de 2V produzia um campo aproximado de 20KV/cm.

Os resultados experimentais para o sistema de poço único, obtido pela análise do espectro de eletroreflectância mostram transições elétron-buraco pesado até nível 2 e transições elétron-buraco leve somente entre o primeiro nível. As energias de transições podem ser vistos na tabela 4.2 juntamente com nossos resultados teóricos utilizando-se a configuração 85:15.

	TRANSIÇÃO	ERS ENERGIA (eV)	PL ENERGIA (eV)	PLE ENERGIA (eV)	NOSSO MÉTODO (eV)
Temperatura ambiente	E (1) -HH (1)	1,463	-	-	1,45667
	E (1) -LH (1)	1,476	-	-	-
	E (2) -HH (2)	1,556	-	-	1,55741
Temperatura do Hélio	E (1) -HH (1)	1,557	1,547	1,559	1,55238
	E (1) -LH (1)	1,568	-	1,571	-
	E (2) -HH (2)	1,654	-	-	1,65341

Tabela 4.2: Energias de transição elétron-buraco para poço único com os parâmetros: $V_e=0,2125eV$, $V_h=0,0375eV$, $m_e^*=0,07m_o$ e $m_h^*=0,45m_o$. E(n), LH(n) e HH(n) são respectivamente as posições dos níveis de elétron, buraco leve e buraco pesado.

Nossos resultados, como mostrados na Tabela 4.2., compreendem somente transições elétron-buraco pesado. Utilizamos para o gap do GaAs os valores 1,423eV e 1,519eV, na temperatura ambiente e do hélio, respectivamente.

Para o sistema de múltiplos poços Klipstein et al. mostraram haver transições elétron-buraco pesado até nível 4. Nossos resultados foram obtidos fazendo a aproximação para um sistema de um poço quântico conforme prévia discussão na seção anterior. Os resultados juntamente com os resultados experimentais podem ser vistos na tabela 4.3.

	TRANSIÇÃO	ERS ENERGIA (eV)	PL ENERGIA (eV)	PLE ENERGIA (eV)	NOSSO MÉTODO (eV)
Temperatura ambiente	E (1) -HH (1)	1,455	-	-	1,46283
	E (1) -LH (1)	-	-	-	-
	E (2) -HH (2)	1,534	-	-	1,58502
	E (3) -HH (3)	1,667	-	-	1,77135
	E (4) -HH (4)	1,841	-	-	1,93916
Temperatura do hélio	E (1) -HH (1)	1,544	1,541	1,545	1,55884
	E (1) -LH (1)	(1,556)	-	1,556	-
	E (2) -HH (2)	1,622	-	1,632	1,68102
	E (3) -HH (3)	1,759	-	1,761	1,86735
	E (4) -HH (4)	1,930	-	1,926	2,03517

Tabela 4.3: Energias de transição elétron-buraco para múltiplos poços quânticos com os parâmetros: $V_e=0,425\text{eV}$, $V_h=0,075\text{eV}$, $m_e^*=0,07m_o$ e $m_h^*=0,45m_o$. E(n), LH(n) e HH(n) são respectivamente as posições dos níveis de elétron, buraco-leve e buraco-pesado.

Como podemos ver os resultados teóricos obtidos pelo nosso modelo simples têm boa concordância com os resultados experimentais

de eletroreflectância, fotoluminescência e fotoluminescência excitante, especialmente em sistemas de poço único. A discrepância, entretanto, entre os resultados teóricos e experimentais pode ser atribuída à imprecisa determinação do campo elétrico e incerteza nos parâmetros tais como as massas efetivas e a concentração de alumínio.que também contribuem, em parte, para as diferenças apresentadas. Além de não estar sendo considerado o efeito de superposição das funções de onda para os estados de maior energia pelo fato de utilizarmos a aproximação de poço único.

Embora a configuração 57:43 seja a mais aceita para as discontinuidades das bandas, os parâmetros utilizados em nossos cálculos teóricos, em ambos os sistemas usados experimentalmente, obedecem a configuração 85:15 além de que Klipstein et al. discutem que a configuração 75:25 também poderia ser utilizada para ajustar suas energias de transição.

CAPÍTULO V
TUNELAMENTO RESSONANTE EM SUPER-REDES FINITAS SEMICONDUTORAS DE
ALGaAs-GaAs.

O diodo tunel, descoberto por L. Esaki na década de 50, foi um dos primeiros dispositivos eletrônicos que operava baseado no efeito quântico de tunelamento por parte dos portadores, através de uma junção pn semicondutora.

O diodo tunel tem sua importância ainda maior pois, conforme atesta L. Esaki⁽⁸⁵⁾, os estudos dos mecanismos de transporte nas junções pn motivaram uma série de pesquisas que culminaram, na década de 70, na proposta original de L. Esaki juntamente com R. Tsu, da super-rede semicondutora.

Em 1973, então, R. Tsu e L. Esaki⁽¹⁰⁾ propuseram um modelo teórico unidimensional para investigar as propriedades de transporte de uma super-rede formada por camadas semicondutoras de AlGaAs-GaAs intercaladas, dando origem a um sistema periódico de poços e barreiras de potencial.

As hipóteses básicas de seu modelo teórico são:

- (1) Cada barreira ou poço de potencial deve conter um número suficiente de subcamadas atômicas para que a aproximação de massa efetiva seja aplicável em cada região;
- (2) Os portadores são descritos por uma relação energia-momento da forma quadrática;
- (3) A diferença na massa efetiva de camada para camada é desprezada;
- (4) Mesmo sob ação de uma voltagem aplicada as camadas de AlGaAs e GaAs são modeladas por um potencial de barreiras e poços de intensidade uniformes;
- (5) O transporte de carga é feito predominantemente por elétrons desde que 85% da diferença entre as energias dos gaps entre os dois materiais destina-se à banda de condução;
- (6) A dopagem é pequena e as camadas suficientemente finas para que os efeitos de depleção de cargas não sejam pronunciadas;

- (7) O campo elétrico externo distribui-se uniformemente ao longo das camadas;
- (8) O livre caminho médio dos portadores é longo o suficiente de modo que atravessam muitos períodos da super-rede sem perder a coerência devido ao espalhamento.
- (9) Nenhuma fonte ou sumidouro existe nas camadas intermediárias;
- (10) A corrente resulta de transferências entre estados que obedecem a estatística de Fermi-Dirac.

Com estas hipóteses, desenvolveram um formalismo de Matriz transferência considerando o tunelamento de um sistema finito de multi-barreiras para obter o Coeficiente de Transmissão em função da energia longitudinal do elétron incidente e dos parâmetros da super-rede. Consideraram no processo de tunelamento a conservação do momento paralelo e da energia total formada por uma componente paralela e uma na direção ao longo do eixo de crescimento da super-rede:

$$E = E_z + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} . \quad (5.1)$$

Sob ação de uma voltagem externa o modelo é readaptado e as barreiras são rebaixadas uma em relação a outra simulando a presença de um campo elétrico constante. O Coeficiente de Transmissão no caso geral é então obtido em termos dos elementos da matriz transferência. Mostraram, para estruturas formadas por duas, três e cinco barreiras, indícios da formação de minibandas de energia à medida que o número de barreiras aumentava e que picos no Coeficiente de Transmissão ocorriam para elétrons com uma dada energia ressonante. Na seção 5.2 discutiremos com mais detalhes este modelo aproximado.

Chang, Tsu e Esaki⁽¹¹⁾ foram os primeiros a obter evidências experimentais acerca do tunelamento ressonante num sistema de dupla barreira de AlGaAs-GaAs discutido no capítulo III. A curva

IxV mostrava, para determinados valores de voltagem, um máximo na corrente o que era associado a efeitos de tunelamento ressonante, pois para aquela voltagem a energia do elétron incidente correspondia à energia de um estado quase-ligado do sistema.

Esse efeito de tunelamento ressonante em sistemas de dupla barreira só teve sua confirmação definitiva cerca de dez anos mais tarde com as medidas experimentais de Sollner et al.⁽¹²⁾, com amostras sensivelmente melhores. Obtiveram um resultado que acentuava marcadamente a região de resistência negativa da curva característica IxV.

A experiência de Sollner et al., que demonstraram a viabilidade de se aplicar as propriedades dessas heteroestruturas semicondutoras em vários circuitos ressonadores e amplificadores principalmente na faixa de comprimento de ondas milimétricas e submilimétricas despertou imediatamente o interesse na investigação dos fenômenos de tunelamento nestes dispositivos.

Nosso trabalho consiste no desenvolvimento de um formalismo teórico geral para o cálculo do Coeficiente de Transmissão em sistemas de super-redes finitas reformulando algumas das hipóteses básicas de Tsu e Esaki que julgamos relevante na descrição dos processos de tunelamento ressonante.

Embora as hipóteses (3) e (4), formuladas por Tsu e Esaki sejam um pouco irrealistas, foram presumivelmente usadas por causa da grande simplificação na obtenção dos resultados. A hipótese (3) que consiste em tomar massas iguais nos diferentes tipos de camadas da super-rede implica num tunelamento especular (isto é, na continuidade da função de onda e da sua derivada) levando em conta de modo errôneo a conservação da corrente. A hipótese (4) permite-nos expressar as funções de onda, e portanto o Coeficiente de Transmissão, em termos de funções exponenciais. Embora isto seja certo para um sistema de barreiras uniformes sem nenhuma perturbação ex-

terna devemos levar em conta na solução da Equação de Schroedinger o potencial criado quando uma voltagem externa é aplicada e isso se expressa na inclinação de toda a banda de condução e não no rebaixamento das barreiras uma em relação a anterior como foi suposto (ver figura 5.2). A hipótese (5) de menor interesse também foi usada porque acreditava-se que a melhor configuração entre as distribuições das bandas de condução e de valência era a de 85:15. No entanto trabalhos mais recentes sugerem que a mais apropriada seja a de 60:40.

O objetivo deste capítulo é pois apresentar um Método que descreva o tunelamento através de um sistema de multi-barreiras finitas reformulando as hipóteses básicas (3) e (4) e considerando ambas as configurações 85:15 e 57:43 para efeito de comparação.

Referente à hipótese (3) consideraremos em cada interface da heteroestrutura, além da continuidade da função de onda a continuidade do fluxo de corrente ($1/m^* \partial \Psi / \partial z$) ao invés da continuidade da derivada. No que diz respeito à reformulação da hipótese (4) consideraremos a solução exata da Equação de Schroedinger em termos das funções de Airy incluindo o potencial linear devido ao campo elétrico constante nas várias regiões de poços e barreiras. Esta modificação é importante principalmente para altas voltagens aplicadas.

Com as novas condições de contorno e usando o Método da Matriz de Iteração obtemos o Coeficiente de Transmissão em função da energia longitudinal do elétron incidente para certos parâmetros como: o número de barreiras (N), altura das barreiras de potencial (V_0), posições de cada interface (z_n), massas efetivas diferentes do elétron nas barreiras e poços (m_b^* e m_p^*) e a magnitude do campo elétrico (F). Como caso particular estudaremos as propriedades de transporte em sistemas de dupla barreira que tem sido objeto de investigações experimentais.

Vassell et al.⁽⁸⁶⁾ obtiveram também o Coeficiente de Trans

missão considerando as diferentes massas efetivas do elétron em seu movimento tridimensional pelas camadas semicondutoras de uma super-rede finita via solução numérica da Equação de Schroedinger. Trata-se pois de um procedimento totalmente computacional.

Para efeito de comparação apresentaremos também nosso cálculo no modelo aproximado de Tsu e Esaki onde consideramos o rebaiamento das barreiras de potencial ao invés do efeito de inclinação devido ao potencial do campo elétrico e as massas efetivas diferentes em cada camada.

No final deste capítulo aplicaremos nosso formalismo exato para o cálculo da densidade de corrente de tunelamento em um sistema de dupla barreira. Os resultados à temperatura zero e 77°K são mostrados e comparados com recentes medidas experimentais⁽¹³⁾.

5.1 - TRANSMISSÃO ATRAVÉS DE MULTI-BARREIRAS: FORMALISMO GERAL.

Nesta seção apresentaremos um formalismo geral, baseado no Método de Matriz de Iteração desenvolvido no capítulo anterior, para um sistema de N barreiras acopladas sob ação de um campo elétrico constante. O cálculo é bastante sensível à variação espacial da massa, às posições de cada interface e à altura das barreiras de potencial, o que nos possibilita estudarmos as heteroestruturas em ambas as configurações 85:15 e 57:43, com as larguras de cada barreira e poço dadas.

A energia potencial de uma super-rede com N barreiras sob ação de um campo elétrico, com perfil linear, pode ser escrita como

$$V_n(z) = \begin{cases} 0 & \text{para } z < 0, \\ -eFz & \text{se } n \text{ ímpar} \\ V_0 - eFz & \text{se } n \text{ par} \\ -eFL & \text{para } z > L, \end{cases} \quad (5.1.1)$$

com $n=2,3,\dots,2N$; L a largura total da super-rede; N o número de barreiras; F a magnitude do campo elétrico e V_0 a altura das barreiras de potencial.

O diagrama da energia potencial é esquematizado na figura 5.1.

Fig. 5.1: Energia potencial de uma super-rede com N barreiras sob ação de um campo elétrico constante.

A alta concentração de dopantes nos eletrodos $n^+\text{GaAs}$ faz com que a energia de Fermi E_f nestas regiões encontre-se acima do mínimo da banda de condução significando a existência de níveis eletrônicos preenchidos. Esses elétrons têm então condições de incidir nas barreiras de potencial localizadas em z_1 e z_{2N} iniciando um processo de tunelamento ressonante e consequentemente um transporte de carga pela super-rede.

As funções de ondas nas regiões $z < 0$ e $z > L$ são expressadas na forma:

$$\psi_i = 1 e^{ik_i z} + R e^{-ik_i z} \quad (5.1.2)$$

e

$$\psi_L = T e^{iK_L z} ; \quad (5.1.3)$$

onde

$$K_i = \left[2m_p^* E / \hbar^2 \right]^{1/2} \quad (5.1.4)$$

e

$$K_L = \left[2m_p^* (|V_L| + E) / \hbar^2 \right]^{1/2}. \quad (5.1.5)$$

R e T são, respectivamente, as amplitudes de Reflexão e Transmissão das ondas refletida pela primeira barreira e transmitida através da super-rede.

As funções de onda nas camadas internas da estrutura, de uma forma geral, podem ser escritas como uma combinação linear das funções de Airy $Ai(z)$ e $Bi(z)$ na forma

$$\psi_n(z) = A_n Ai(-z/\ell_n - C_n) + B_n Bi(-z/\ell_n - C_n), \quad (5.1.6)$$

onde

$$C_n = \begin{cases} E/eF\ell_p & \text{para } n \text{ ímpar} \\ -(V_0 - E)/eF\ell_b & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (5.1.7)$$

$$\ell_n = \begin{cases} \ell_p = (\hbar^2 / 2m_p^* eF)^{1/3} & \text{para } n \text{ ímpar} \\ \ell_b = (\hbar^2 / 2m_b^* eF)^{1/3} & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (5.1.8)$$

$$m_n^* = \begin{cases} m_p^* & \text{para } n \text{ ímpar} \\ m_b^* & \text{para } n \text{ par} \end{cases} \quad (5.1.9)$$

e o índice n variando de 2 até $2N$.

Pelas condições de continuidade das funções de onda e do fluxo de corrente em cada interface interna, temos

$$\Psi_n(z_n) = \Psi_{n+1}(z_n) \quad (5.1.10a)$$

e

$$\frac{1}{m_n^*} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n'(z_n) = \frac{1}{m_{n+1}^*} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{n+1}'(z_n) \quad (5.1.10b)$$

onde agora o índice n varia de 2 até $2N-1$.

Substituindo $\Psi_n(z)$ (Eq. 5.1.6) nas Equações (5.1.10) obtemos uma relação na forma matricial entre os coeficientes das funções de Airy A_n , B_n , A_{n+1} e B_{n+1} .

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (5.1.11)$$

onde

$$M_n = \pi \begin{pmatrix} -[\sigma_n A_i'(\alpha_{n+1}) B_i(\alpha_n) - A_i(\alpha_{n+1}) B_i'(\alpha_n)] & -[\sigma_n B_i'(\alpha_{n+1}) B_i(\alpha_n) - B_i(\alpha_{n+1}) B_i'(\alpha_n)] \\ [\sigma_n A_i'(\alpha_{n+1}) A_i(\alpha_n) - A_i(\alpha_{n+1}) A_i'(\alpha_n)] & [\sigma_n B_i'(\alpha_{n+1}) A_i(\alpha_n) - B_i(\alpha_{n+1}) A_i'(\alpha_n)] \end{pmatrix}, \quad (5.1.12)$$

com

$$\sigma_n = \frac{m_n^* l_n}{m_{n+1}^* l_{n+1}} \quad (5.1.13)$$

e

$$\begin{cases} \alpha_n = - \left(z_n / l_n + C_n \right) \\ \alpha_{n+1} = - \left(z_n / l_{n+1} + C_{n+1} \right) \end{cases} \quad (5.1.14)$$

M_n é a Matriz de Iteração de ordem dois para um sistema de super-rede idêntica ã obtida no capítulo IV para o problema de múltiplos poços acoplados.

A relação entre os coeficientes na primeira barreira para com os da última barreira é então dada por:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_2 M_3 \dots M_{2N-1} \begin{pmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{pmatrix} \quad (5.1.15)$$

Pelas condições de continuidade nas interfaces externas, em $z=0$ e $z=L$, utilizando as funções Ψ_1 e Ψ_L (Eqs. 5.1.2 e 5.1.3), obtemos:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (5.1.16)$$

e

$$\begin{pmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.17)$$

com

$$P = \frac{1}{2iK_i l_b} \begin{pmatrix} iK_i l_b A_i(\beta) - \frac{m_p^*}{m_b^*} A_i'(\beta) & iK_i l_b B_i(\beta) - \frac{m_p^*}{m_b^*} B_i'(\beta) \\ iK_i l_b A_i(\beta) + \frac{m_p^*}{m_b^*} A_i'(\beta) & iK_i l_b B_i(\beta) + \frac{m_p^*}{m_b^*} B_i'(\beta) \end{pmatrix} \quad (5.1.18)$$

onde $\beta = (V_0 - E) / eF l_b$.

$$Q = \pi \begin{pmatrix} \left[B_i(\gamma) + i k_L \ell_b \frac{m_b^*}{m_p^*} B_i(\gamma) \right] e^{i k_L L} & \left[B_i(\gamma) - i k_L \ell_b \frac{m_b^*}{m_p^*} B_i(\gamma) \right] e^{-i k_L L} \\ - \left[A_i(\gamma) + i k_L \ell_b \frac{m_b^*}{m_p^*} A_i(\gamma) \right] e^{i k_L L} & - \left[A_i(\gamma) - i k_L \ell_b \frac{m_b^*}{m_p^*} A_i(\gamma) \right] e^{-i k_L L} \end{pmatrix}, \quad (5.1.19)$$

e

$$\gamma = -L/\ell_b + \beta$$

Através das identidades matriciais (Eqs. 5.1.15, 5.1.16 e 5.1.17) construímos uma expressão geral que relaciona R e T, da qual obtemos o Coeficiente de Transmissão como função da energia na direção z do tunelamento e dos parâmetros do sistema. Assim,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.20)$$

onde

$$\mathcal{L} = \left[P \left(\prod_{n=2}^{2N-1} M_n \right) Q \right]. \quad (5.1.21)$$

A amplitude de transmissão T é então dada por

$$T = (1/\mathcal{L}_{11}). \quad (5.1.22)$$

O Coeficiente de Transmissão é calculado fazendo-se a multiplicação de T pelo seu complexo conjugado T* e pelo fator (k_L/k_i)

$$T^* T(E, V_0, L_b, L_p, m_b^*, m_p^*, F) = (k_L/k_i) (1/\mathcal{L}_{11})^* (1/\mathcal{L}_{11}). \quad (5.1.23)$$

5.2 - O MODELO APROXIMADO DE TSU E ESAKI: O POTENCIAL ESCADA.

Apresentamos o modelo aproximado de Tsu Esaki, que denominamos de potencial escada, onde as barreiras quadradas são simplesmente rebaixadas de um valor constante para simular o efeito do campo elétrico.

O diagrama da energia é esquematizado na figura 5.2.

Fig. 5.2: Energia potencial no modelo aproximado de super-rede sob ação de um campo elétrico.

A solução geral da Equação de Schroedinger neste caso, é obviamente bastante simples e é dada por

$$\Psi_n(z) = A_n e^{K_n z} + B_n e^{-K_n z} \quad , \quad (5.2.1)$$

onde

$$k_n = \begin{cases} i \left[(2m_p^*/\hbar^2) (|V_n| + E) \right]^{1/2} & \text{para } n \text{ ímpar} \\ i \left[(2m_b^*/\hbar^2) (E - V_n) \right]^{1/2} & \text{para } n \text{ par e } E > V_n \\ \left[(2m_b^*/\hbar^2) (V_n - E) \right]^{1/2} & \text{para } n \text{ par e } E < V_n \end{cases} \quad (5.2.2)$$

e

$$V_n = \begin{cases} -(n-1)\Delta V/2 & \text{para } n \text{ ímpar} \\ V_0 - (n-2)\Delta V/2 & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (5.2.3)$$

com o índice $n = 1, 2, \dots, 2N+1$ e $\Delta V = (Fxz_{2N})/N$, N o número de barreiras.

A matriz $\mathcal{L}^{TE}$, no modelo aproximado de Tsu e Esaki, assume a forma:

$$\mathcal{L}^{TE} = \prod_{n=1}^{2N} L_n \quad (5.2.4)$$

onde

$$L_n = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2} + \frac{m_n^* K_{n+1}}{2m_{n+1}^* K_n} \right) e^{(K_{n+1}-K_n)z_n} & \left(\frac{1}{2} - \frac{m_n^* K_{n+1}}{2m_{n+1}^* K_n} \right) e^{-(K_{n+1}+K_n)z_n} \\ \left(\frac{1}{2} - \frac{m_n^* K_{n+1}}{2m_{n+1}^* K_n} \right) e^{(K_{n+1}+K_n)z_n} & \left(\frac{1}{2} + \frac{m_n^* K_{n+1}}{2m_{n+1}^* K_n} \right) e^{-(K_{n+1}-K_n)z_n} \end{pmatrix} \quad (5.2.5)$$

O Coeficiente de Transmissão, da mesma forma como na seção anterior, é dado pela expressão:

$$T^*T(E, V_0, L_p, L_b, m_b^*, m_p^*, F) = (K_{2N+1}/K_1) (1/\mathcal{L}_{11}^{TE})^* (1/\mathcal{L}_{11}^{TE}). \quad (5.2.6)$$

Este modelo constitui uma boa aproximação no limite de campos baixos onde a inclinação da banda de condução é pequena e o efeito de rebaixamento das barreiras reproduz muito bem a situação real do potencial quando um campo é aplicado.

5.3 - DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Nesta seção apresentaremos nossos resultados do Coeficiente de Transmissão em super-redes finitas de AlGaAs-GaAs nas configurações 85:15 e 57:43 usando, para efeito de comparação, os modelos

de potencial linear e do tipo escada.

A figura 5.3 apresenta os resultados do Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistemas com duas, três e cinco barreiras na ausência de campo elétrico e uma concentração de alumínio de 35% onde as larguras dos poços e barreiras são, respectivamente, $L_b=20\text{\AA}$ e $L_p=50\text{\AA}$.

Fig. 5.3: Coeficiente de transmissão em função da energia do elétron incidente na configuração 57:43 para campo elétrico nulo. Parâmetros: $m_p^*=0,0665m_0$, $m_b^*=0,096m_0$, $V_0=0,269\text{eV}$, $L_p=50\text{\AA}$, $L_b=20\text{\AA}$ e $x=35\%$. a) Sistema com duas barreiras; b) Sistema com três barreiras; c) Sistemas com cinco barreiras.

Note que as energias ressonantes para o caso de barreira tripla (Fig. 5.3b) aparecem em dubletos, e que para o caso de barreiras quíntuplas se abrem em quadrupletos. Para N barreiras haverá $(N-1)$ picos surgindo no Coeficiente de Transmissão onde cada largura de linha é grosseiramente determinada pela probabilidade de tunelamento em cada barreira. No limite de N tender a infinito o modelo se aproxima de um modelo de bandas com a formação de minibandas de energia separadas por minigaps da mesma forma que o modelo de Kronig-Penney para potenciais periódicos interatômicos.

As figuras 5.4 e 5.5 mostram os Coeficientes de Transmissão nas configurações 57:43 e 85:15 para duas, três e cinco barreiras na presença de um campo elétrico considerando nosso modelo de potencial linear.

Fig. 5.4a: Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistema com duas barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m na configuração 57:43. Parâmetros $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,096m_0$, $V_0 = 0,269$ eV, $L_p = 50\text{\AA}$, $L_b = 20\text{\AA}$ e $x = 35\%$.

Fig. 5.4b: Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistema com três barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m na configuração 57:43. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,096m_0$, $V_0 = 0,269$ eV, $L_p = 50\text{\AA}$, $L_b = 20\text{\AA}$ e $x = 35\%$.

Fig. 5.4c: Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para sistema com cinco barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m na configuração 57:43. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,096m_0$, $V_0 = 0,269$ eV, $L_p = 50\text{\AA}$, $L_b = 20\text{\AA}$ e $x = 35\%$.

Fig. 5.5: Coeficiente de Transmissão em função da energia do elétron incidente para um campo de 10^7 V/m na configuração 85:15. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,096m_0$; $V_0 = 0,382$ eV, $L_p = 50\text{\AA}$, $L_b = 20\text{\AA}$ e $x = 35\%$. a) Sistema com duas barreiras; b) Sistema com três barreiras; c) Sistema com cinco barreiras.

Uma característica especial, para os casos de campo nulo ($F=0$) mostrados na figura 5.3, é que devido à simetria do potencial o Coeficiente de transmissão para uma energia de ressonância alcança a unidade independente dos parâmetros largura e altura escolhidos para as barreiras e poços do sistema.

Com a aplicação de um campo elétrico o primeiro efeito importante notado é a quebra de simetria do potencial fazendo com que os picos de ressonância no Coeficiente de Transmissão tornem-se sempre inferiores a um, somente se aproximando da unidade para energias mais altas como demonstram as figuras 5.4 e 5.5. Dessa forma, a assimetria do potencial causada pela ação do campo elétrico cria condições de interferência destrutiva parciais entre as componentes da função de onda transmitida e refletida nas interfaces internas que não permitem a transmissão total pelas barreiras. Da mesma forma, tanto na configuração 57:43 como na 85:15, toda a característica de simetria dos níveis mostrada na figura 5.3 para campo nulo desaparece.

Na figura 5.6 comparamos os Coeficientes de Transmissão para o caso de cinco barreiras com um campo elétrico de 10^7 V/m obtidos usando os modelos de potencial linear e potencial escada.

Os resultados apresentam boa concordância somente nas regiões dos picos de ressonância secundários. Em relação ao primeiro pico as suas posições em energia para os dois modelos encontram-se bem separadas, da ordem de 20meV, e apresentam uma magnitude de pico bem diferentes.

Fig. 5.6: Comparação entre os Coeficientes de Transmissão para os modelos de potencial linear e tipo escada num sistema de cinco barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7V/m .

A figura 5.7 apresenta os resultados do Coeficiente de Transmissão para as duas configurações 85:15 e 57:43. Notamos claramente a forte dependência do Coeficiente de Transmissão com a razão do "band-offset".

Assim, a utilização indevida da configuração afeta os resultados para a densidade de corrente ressonante em comparação com resultados experimentais.

Fig. 5.7: Comparação dos Coeficientes de Transmissão para sistema com cinco barreiras sob ação de um campo elétrico de 10^7 V/m nas configurações 85:15 e 57:43.

Um parâmetro importante na caracterização das amostras é a concentração x de alumínio já que as massas efetivas e a altura da barreira de potencial na banda de condução dependem diretamente de x ($m_e^* = (0,0665 + 0,0835x)m_0$ e $V_0 \approx 0,57(1,155x + 0,37x^2)$). Portanto, a posição dos picos no espectro do Coeficiente de Transmissão devem se alterar para diferentes concentrações. Para observar esta dependência mostramos na figura 5.8, para um potencial de dupla barreira, a variação dos níveis quase-ligados e virtuais em função da concentração de alumínio nas camadas de $Al_xGa_{1-x}As$ para os casos com campo nulo e 4×10^6 V/m.

Fig. 5.8: Níveis quase-ligados E_0 e E_1 e níveis virtuais E_2 em função da concentração x de alumínio numa estrutura de dupla barreira. $L_p=60\text{\AA}$ e $L_b=100\text{\AA}$. a) Campo nulo; b) $4 \times 10^6 \text{ V/m}$.

A variação dos níveis E_0 em função da concentração x é muito pequena, da ordem de 10meV , tanto com campo aplicado como sem campo como mostram a figura 5.8 para concentrações desde 25% até 45%. Por outro lado, as curvas dos níveis E_1 e E_2 variam bastante, da ordem de 70meV e 100meV , respectivamente, demonstrando a forte dependência das posições dos níveis de maior energia com a concentração de alumínio nas barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

5.4 - A CORRENTE DE TUNELAMENTO RESSONANTE

Nesta seção apresentaremos a expressão da densidade de corrente em heteroestruturas de multi-barreiras.

Considere, por simplicidade, a estrutura de barreira única mostrada na figura 5.9.

Fig. 5.9: Sistema de barreira única sob ação de um campo elétrico constante. E_{fe} e E_{fd} são respectivamente as energias de Fermi a esquerda e à direita da barreira.

Tomamos $E=0$ no mínimo da banda de condução para o eletrodo a esquerda da barreira de potencial. A quantidade $eV=eFL$ é a diferença de potencial relativa à aplicação do campo elétrico F .

A probabilidade dos elétrons ocuparem determinados estados na banda de condução em ambos eletrodos, à esquerda e à direita da barreira, é dada pela distribuição de Fermi

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_f)/kT}} \quad (5.4.1)$$

A probabilidade total de termos um tunelamento da esquerda para a direita é então dada pela multiplicação da probabilidade de encontrarmos um estado inicial ocupado do lado esquerdo $f(E_e)$, pela probabilidade do elétron tunelar a barreira $T^*T(E_e)$ e multiplicado pela probabilidade de encontrarmos um estado final à direita da barreira desocupado, $[1 - f_d(E_e + eV)]$. Temos então,

$$P_{ed} = f_e(E_e) [1 - f_d(E_e + eV)] T^*T(E_e) \quad (5.4.2)$$

A densidade de corrente da esquerda para a direita é então

dada pela multiplicação da corrente dos elétrons com uma velocidade v_z incidente pelo número de vetores de onda $\rho(\vec{k}) d\vec{k} = V/(2\pi)^3 d\vec{k}$ e pela probabilidade total P_{ed} , integrado sobre todos os $\vec{k}$ possíveis.

$$J_{ed} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} v_z P_{ed} \quad , \quad (5.4.3)$$

onde o fator 2 é devido ao spin do elétron.

Da mesma forma temos a corrente da direita para a esquerda

$$J_{de} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} v_z P_{de} \quad , \quad (5.4.4)$$

com

$$P_{de} = f_d(E_e + eV) [1 - f_e(E_e)] T^* T(E_e) \quad . \quad (5.4.5)$$

A densidade de corrente de tunelamento resultante é obtida a partir das expressões parciais Eqs. (5.4.3) e (5.4.4) substituindo as Eqs. (5.4.2) e (5.4.5) para P_{ed} e P_{de} . Portanto,

$$J_z = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \left\{ \int d\vec{k} dK_z v_z \left[f_d(E_e + eV) [1 - f_e(E_e)] - f_e(E_e) [1 - f_d(E_e + eV)] \right] T^* T(E_e) \right\} \quad (5.4.6)$$

Utilizando a relação

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dK_z} E_z \quad (5.4.7)$$

na expressão (5.4.6) da densidade de corrente, resulta em

$$J_z = \frac{2e}{(2\pi)^3 \hbar} \int d\vec{k} dE_z \left[f_e(E_e) - f_d(E_e + eV) \right] T^* T(E_e) \quad . \quad (5.4.8)$$

Como já temos demonstrado (Seção 5.1) o Coeficiente de Transmissão $T^*T(E_e)$ é uma função da energia E_z somente, na direção do tunelamento, e dos parâmetros da heteroestrutura. A energia que aparece na expressão da densidade de corrente é a energia total do elétron incidente

$$E_e = E_z + \frac{\hbar^2 K_{||}^2}{2m_e^*} \quad (5.4.9)$$

Assim, substituindo as funções de Fermi e o Coeficiente de Transmissão como uma função de E_z , e fazendo a integração em $\vec{K}_{||}$, obtemos para uma determinada temperatura T uma expressão para a densidade de corrente na forma,

$$J_z = \frac{em_e^*KT}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty T^*T(E_z) \ln \left[\frac{1 + e^{(E_f - E_z)/KT}}{1 + e^{(E_f - E_z - eV)/KT}} \right] dE_z. \quad (5.4.10)$$

No limite de baixas temperaturas as funções de Fermi transformam-se em funções degrau $\theta(x)$. A expressão (5.4.8) para a densidade de corrente torna-se,

$$J_z = \frac{4me^*\pi}{(2\pi)^3\hbar^3} \int_0^\infty T^*T(E_z) dE_z \int_{E_z}^\infty [\theta(E_e - E_f) - \theta(E_e - E_f + eV)] dE_e. \quad (5.4.11)$$

A expressão final para a densidade de corrente de tunelamento em $T=0K$ é

$$J_z = \frac{em_e^*}{2\pi^2\hbar^3} \left\{ \int_{E_f - eV}^{E_f} T^*T(E_z)(E_f - E_z) dE_z + eV \int_0^{E_f - eV} T^*T(E_z) dE_z \right\}, \quad (5.4.12a)$$

para $E_f > eV$ e

$$J_z = \frac{em_e^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_f} T^* T(E_z) (E_f - E_z) dE_z, \quad (5.4.12b)$$

para $E_f < eV$.

5.5 - APLICAÇÃO PARA HETEROESTRUTURAS DE DUPLA BARREIRA

O objetivo desta seção é mostrar nossos resultados para a densidade de corrente em função da voltagem utilizando o Coeficiente de Transmissão calculado pelo nosso Método de Matriz de Iteração e compararmos com os resultados experimentais de E.E. Mendez et al. (13). Neste sentido nosso trabalho pode ser visto como uma extensão do cálculo teórico da curva corrente X voltagem do grupo da IBM.

Trataremos principalmente de três amostras de AlGaAs-GaAs formando uma dupla barreira. As duas primeiras amostras diferem em relação à largura do poço, apresentam em cada caso $L_p = 40\text{\AA}$ e $L_p = 60\text{\AA}$, e possuem as mesmas larguras das barreiras $L_b = 100\text{\AA}$. São estudadas experimentalmente à temperatura do hélio líquido e por nós, numa aproximação, à temperatura nula. Denominaremos essas duas primeiras amostras pelas sequências 100-40-100 e 100-60-100 as quais possuem uma concentração de alumínio de 40%.

A terceira amostra possui as larguras do poço e das barreiras iguais a $50\text{\AA}$ e é estudada à temperatura do nitrogênio líquido. A concentração de alumínio nas barreiras de AlGaAs é de 35%, denominamos esta estrutura de 50-50-50.

É interessante mostrar para estas estruturas os nossos resultados do Coeficiente de Transmissão, bem como o diagrama de energia equivalente nas figuras 5.10, 5.11 e 5.12.

Fig. 5.10: Estrutura de dupla barreira 100-40-100 sob ação de um campo elétrico de 6×10^6 V/m. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665 m_0$, $m_b^* = 0,101 m_0$, $V_0 = 0,296$ eV e $x = 40\%$. a) Coeficiente de Transmissão X energia do elétron incidente; b) Energia potencial mostrando a existência de um nível quase-ligado e o primeiro nível virtual correspondentes aos dois primeiros picos no Coeficiente de Transmissão da parte a).

Fig. 5.11: Estrutura de dupla barreira 100-60-100 sob ação de um campo elétrico de 4×10^6 V/m. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665 m_0$, $m_b^* = 0,101 m_0$, $V_0 = 0,296$ eV e $x = 40\%$. a) Coeficiente de Transmissão X energia do elétron incidente; b) Energia potencial mostrando a existência de dois níveis quase-ligados e o primeiro nível virtual correspondentes aos três primeiros picos no Coeficiente de Transmissão da parte a).

Fig. 5.12: Coeficiente de Transmissão em função da energia para uma estrutura de dupla barreira 50-50-50 sob ação de um campo elétrico de 3×10^6 V/m com os parâmetros: $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,096m_0$, $V_0 = 0,269$ eV e $x = 35\%$. As posições em energia para os dois primeiros picos são respectivamente $E_1 = 0,055$ eV e $E_2 = 0,253$ eV.

A figura 5.10 para a estrutura 100-40-100 apresenta somente um nível quase-ligado que se encontra justamente entre zero e a energia de Fermi possibilitando, conforme nossas discussões anteriores, o processo de tunelamento ressonante causando um aumento na corrente de tunelamento. Entretanto, para este sistema a largura do poço de $40\text{\AA}$ não permite a existência de mais um nível quase-ligado e portanto a corrente deve apresentar somente um pico à medida que a voltagem aumenta.

Temos considerado uma densidade de impurezas nos eletrodos, da ordem de $10^{18}/\text{cm}^3$, o que acarreta numa energia de Fermi $E_f = 40$ meV.

Para a estrutura 100-60-100, mostrada na figura 5.11, vemos claramente a existência de dois picos de estados quase-ligados. O primeiro nível encontra-se justamente na faixa de energia ($0 \leq E \leq E_f$) por onde os elétrons vindos do eletrodo emissor tem a maior probabi

lidade de serem transmitidos via tunelamento ressonante. Com o aumento gradativo do campo elétrico, o nível do segundo estado quase-ligado vai sendo rebaixado até que, para um determinado valor de campo, o nível se encontra na mesma altura da energia de Fermi, dando origem novamente ao tunelamento ressonante. A corrente de tunelamento para este caso, portanto, deverá apresentar duas regiões de máximo com duas regiões de resistência negativa. A mesma análise pode ser aplicada para interpretar os resultados na estrutura 50-50-50.

Até agora temos apenas conjecturado sobre a formação da curva característica $I \times V$ baseado em nossas discussões anteriores do processo de tunelamento ressonante. Uma verificação preliminar motivada pela simplicidade do cálculo é determinar o Coeficiente de Transmissão em função da voltagem desde que experimentalmente o que se realiza é manter fixa a energia do elétron incidente e variar a voltagem verificando-se o comportamento da corrente. Para tanto, utilizando-se do nosso Método de Matriz Iteração, fixando uma energia dentro da faixa entre zero e a energia de Fermi para os elétrons incidentes, podemos variar a voltagem do mesmo modo como E.E. Mendez et al. procederam na análise de seus resultados experimentais. Nos nossos resultados estão apresentados nas figuras 5.13 e 5.14 para as estruturas 100-40-100 e 100-60-100.

A curva para o Coeficiente de Transmissão no caso da amostra 100-40-100 com a energia dos elétrons incidentes fixa em 0,007eV apresenta claramente um pico na posição de 0,186eV bem defasada do resultado experimental de $0,259 \pm 0,002V$ observado por E.E. Mendez et al. Acreditamos que os efeitos do deslocamento dos estados virtuais e não um processo de tunelamento através deles bem como processos de espalhamento nas barreiras, sejam responsáveis pelas oscilações secundárias observadas para voltagens maiores.

No caso da estrutura 100-60-100, com a energia dos elétrons incidentes fixa em 0,015eV (ver figura 5.14), ocorrem dois picos

bem pronunciados no Coeficiente de Transmissão para as voltagens 0,0965V e 0,447V em melhor concordância com os resultados experimentais de $0,115 \pm 0,015\text{V}$ e $0,455 \pm 0,025\text{V}$ do mesmo grupo de E.E. Mendez et al.

Fig. 5.13: Coeficiente de Transmissão em função da voltagem aplicada para uma estrutura 100-40-100 com a energia dos elétrons no eletrodo emissor fixa em 7meV.

Fig. 5.14: Coeficiente de Transmissão em função da voltagem aplicada para uma estrutura 100-60-100 com a energia dos elétrons no eletrodo emissor fixa em 15meV.

Devemos assinalar, no entanto, que nossos resultados dependem bastante da energia do elétron incidente, de modo que sempre é possível ajustar a energiado elétron para fitar bem os resultados experimentais. Assim sendo, a curva $T \cdot T \times V$ não deve ser usada diretamente para comparação com os resultados experimentais de $I \times V$.

As figuras 5.15 e 5.16 apresentam nossos resultados para a

densidade de corrente versus voltagem obtidos a partir da Eq.

(5.4.12) para as estruturas 100-40-100 e 100-60-100. Em relação aos cálculos computacionais, a integral definindo a densidade de corrente é determinada ponto a ponto para cada voltagem através do Método de Integração de Gauss-Legendre com 96 pontos de quadratura. Tivemos ainda o cuidado de separar o intervalo de integração ($0 \leq E \leq E_f$), para cada voltagem, em 40 e até 100 mini-intervalos de integração para termos a certeza de obtermos corretamente a área abaixo de um pico no Coeficiente de Transmissão quando passávamos por uma região de tunelamento ressonante. O cálculo do Coeficiente de Transmissão é obtido em termos das subrotinas das funções de Airy e suas derivadas que foram testadas e comparadas com a Tabela de Abramowitz e Stegun⁽⁸⁴⁾. No cálculo das funções de Airy consideramos até o trigésimo termo da série com uma precisão na nona casa. Todos os cálculos foram feitos no sistema VAX-780 de computadores do Instituto de Física e Química de São Carlos.

Nossas curvas características de $J \times V$ mostram bem definidas regiões de resistência negativa. Os mais proeminentes picos podem ser comparados diretamente onde as setas nas figuras 5.15 e 5.16 assinalam as posições experimentais. Nossos resultados para a estrutura 100-40-100 mostram regiões de resistência negativa nas posições 0,168V e 0,9V em comparação com os resultados experimentais 0,259±0,002V e ≈1V. Para a estrutura 100-60-100 nossos resultados teóricos são 0,092V, 0,442V e 1V e os resultados experimentais 0,115±0,015V, 0,455±0,025V e ≈0,9V.

Fig. 5.15: Curva teórica da densidade de corrente versus voltagem para a estrutura 100-40-100. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,101m_0$, $V_0 = 0,296\text{ eV}$ e $x = 40\%$.

Fig. 5.16: Curva teórica da densidade de corrente versus voltagem para a estrutura 100-60-100. Parâmetros; $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,101m_0$, $V_0 = 0,296\text{ eV}$ e $x = 40\%$.

No entanto, a estrutura obtida teoricamente é bem mais rica daquela encontrada experimentalmente. É interessante, entretanto, notar que os fatores multiplicativos representando as intensidades da corrente teórica e experimental são da mesma ordem. O aparecimento das pequenas regiões de resistência negativa não verificadas experimentalmente e aquelas encontradas a altas voltagens na nossa curva teórica é devido a processos de espalhamento quântico-mecânico nas bordas das barreiras, e/ou efeitos do deslocamento dos estados virtuais a altas energias. Aliás, este tipo de comportamento a altas voltagens é observado no artigo original de Tsu e Esaki.

O grupo da IBM sugere que o comportamento na corrente para altas voltagens seja devido a processos de tunelamento ressonante via ponto X do AlGaAs. Este processo iniciaria-se tão logo, para altas voltagens, houvesse estados disponíveis no mínimo da banda no ponto X na barreira de AlGaAs com a mesma energia dos elétrons oriundos do eletrodo emissor. Para estes estados, pertencentes ao vale na estrutura de banda no ponto X, as camadas de GaAs agem como barreiras de potencial e as camadas de AlGaAs como poços conforme mostrado na figura 5.17. Surge, assim, um estado quase-ligado na nova estrutura de banda através do qual o tunelamento ressonante poderia ocorrer. Deste modo, investigaram vários caminhos possíveis de tunelamento, do tipo Γ -X-X-X-X, Γ -X-X-X- Γ e Γ -X-X- Γ - Γ .

Fig. 5.17: Energia potencial mostrando tunelamento ressonante via ponto X para altas voltagens.

Embora baseando-se em argumentos físicos plausíveis (as energias dos pontos Γ e χ para $x=40\%$ são bastante próximas) a idéia de tunelamento ressonante via estado no ponto X tem levantado uma razoável controvérsia.

Goodhue et al.⁽⁴⁹⁾ estudaram uma estrutura de dupla barreira de AlAs-GaAs, que em princípio, favoreceria o tunelamento via ponto X devido ao gap indireto desta estrutura. Observaram, à temperatura ambiente, regiões de resistência diferencial negativa associada a uma primeira e segunda ressonância que são bem explicadas pela teoria de tunelamento via estados quase-ligados supondo-se um valor de $1,0 \pm 0,1$ eV para a descontinuidade da banda de condução do AlAs-GaAs vista para o tunelamento dos elétrons. Este valor é muito próximo da diferença em energia na banda de condução para o ponto Γ usando os valores aceitos dos "band-gaps" do GaAs e AlAs considerando 65% da diferença dos "band-gaps" para a banda de condução. Isto sugere que uma parte bastante desprezível dos elétrons tunelam via estados quase-ligados do vale no ponto X da barreira de AlAs.

Por outro lado, Bonnefoi et al.⁽⁸⁰⁾ investigando a mesma estrutura de dupla barreira de AlAs-GaAs, obtiveram evidências experimentais do tunelamento ressonante via estados quase-ligados confinados ao vale do ponto X nas barreiras de AlAs. As regiões de resistência negativa observadas na curva característica de corrente X voltagem eram associadas ao tunelamento através dos níveis de energia no poço de GaAs devidos não apenas à energia potencial das barreiras de AlAs no ponto Γ mas também às barreiras de AlAs no ponto X de menor magnitude com os estados quase-ligados associados a uma grande massa efetiva longitudinal.

Deste modo, para analisar esta questão do ponto de vista teórico, é necessário cálculos que não utilizem a aproximação de massa efetiva que claramente não é apropriada para a discussão do tunelamento via estados no ponto X. Neste sentido, Ando⁽⁸⁷⁾ investi

gou os efeitos da mistura Γ -X no sistema $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x=35\%$ e 50%) usando um modelo "Tight-binding". Suas conclusões apontam que nestes sistemas a mistura entre o vale Γ usual e o vale em torno do ponto X podem ser importantes. Exceto na ausência desses fortes efeitos de interferência, a probabilidade de tunelamento é praticamente similar aquela calculada na aproximação de função envelope a qual despreza completamente a mistura Γ -X.

Para uma comparação final mostramos na figura 5.18 nosso resultado para a curva característica $J \times V$ para a amostra 50-50-50 obtida pela Eq.(5.4.10) a uma temperatura de 77K.

Fig. 5.18: Curva da densidade de corrente $\times$ voltagem para a amostra 50-50-50 a uma temperatura de 77K. Parâmetros: $m_p^* = 0,0665m_0$, $m_b^* = 0,096m_0$, $V_0 = 0,269\text{eV}$ e $x=35\%$.

Nossa curva teórica apresenta dois picos bem pronunciados para as voltagens 0,123V e 0,645V e um de menor amplitude em 0,457V. Os resultados experimentais⁽¹³⁾ apresentam duas regiões de resistência negativa em 0,16V e 0,6V. Para altas voltagens, acima de 1V, nenhuma outra característica tipo ponto de inflexão é observada experimentalmente.

CAPÍTULO VI
CONCLUSÕES

Desenvolvemos um Formalismo de Matriz de Iteração considerando um modelo simples de duas bandas na aproximação de função envelope e massa efetiva para resolver a Equação de Schroedinger de um sistema de N poços quânticos acoplados modelando uma heteroestrutura de AlGaAs-GaAs na presença de um campo elétrico constante. Calculamos os níveis de energia dos estados ressonantes quase-ligados e virtuais para um poço isolado e múltiplos poços quânticos, tanto de elétrons como buracos, através da Análise "Phase-shift".

Comparamos nossos resultados para um único poço e verificamos uma excelente concordância com outros métodos encontrados na literatura demonstrando que no limite de $N=1$ nosso método é confiável. É evidente que neste caso, a solução pode ser encontrada exatamente, resolvendo-se numericamente uma equação determinantal com coeficientes complexos, como assim procederam Ahn e Chuang⁽⁴⁰⁾. No entanto, tal solução torna-se impraticável para $N>1$. Dai o motivo de utilizarmos o método de "Phase-shift", através da verificação direta das variações de π na razão entre as amplitudes refletida e transmitida no infinito. Assim, pela largura do pico ressonante é possível evidenciar o caráter de estados quase-ligados ou virtuais (de energia maior que a altura das barreiras).

A ação do campo elétrico afeta significativamente os níveis quase-ligados para sistemas de poço único à medida que se aumenta a largura do poços. Nossos resultados estão de acordo com os resultados variacionais de Bastard et al.⁽⁹⁾ no limite de campos fracos e explicam de forma qualitativa a diminuição do pico de luminescência na experiência de múltiplos poços quânticos de AlGaAs-GaAs de E.E. Mendez et al.⁽⁷⁾. A ação do campo elétrico induz uma separação entre as cargas diminuindo a recombinação do par elétron-buraco e consequente diminuição da emissão de fótons. Esse efeito, portanto, é esperado ser mais acentuado em poços mais largos possibilitando uma maior polarização das cargas e possível tunelamento.

Nossos resultados para sistema com 2 até 4 poços acoplados demonstram que para larguras das barreiras (L_b) da ordem de $100\text{\AA}$, para o caso dos elétrons, o sistema se comporta como um sistema de múltiplos poços quânticos isolados onde a barreira é suficientemente larga para impedir a superposição das funções de onda dos elétrons em poços adjacentes. A estrutura dos níveis quase-ligados em cada poço torna-se a mesma, apenas diferenciada do poço anterior pela quantidade de energia constante $E = -eFz_{2n+1}$ ($n=0,1,\dots,N-1$) devido à ação do campo elétrico (F) que rebaixa a origem de cada poço de potencial. Para larguras de barreiras menores, a estrutura dos níveis quase-ligados de elétron em cada poço apresenta uma diferença de energia além do termo constante demonstrando os efeitos da superposição das funções de onda. Neste caso, o sistema não pode ser considerado como um sistema de poços isolados e suas propriedades óticas e elétricas deverão modificar-se devido aos processos de tunelamento, cujas probabilidades de ocorrerem tornam-se maiores com o estreitamento das barreiras de potencial.

Para o caso de buracos, nossos resultados demonstram que a estrutura dos níveis quase-ligados e mesmo virtuais possui fraca dependência com a largura das barreiras. Essa insensibilidade em relação às larguras das barreiras pode ser explicada devido a uma maior massa efetiva dos buracos e a uma menor profundidade do poço de potencial de modo que o fator de penetração $K_h L$ (onde K_h é o vetor de onda e L a largura da barreira) é grande. Dessa forma, as funções de onda para os buracos decaem mais rapidamente que as do elétron dentro das barreiras fazendo com que uma barreira de $30\text{\AA}$ torne-se tão impenetrável quanto uma de $100\text{\AA}$. Em função do campo elétrico, entretanto, os níveis de buraco sofrem uma maior variação comparados aos de elétrons devido ao poço de potencial mais raso.

Nossos resultados, utilizando a razão 85:15 para o "band-offset", estão em boa concordância com os resultados experimentais

de eletroreflectância e fotoluminescência devido a Klipstein et al. (6). As discrepâncias encontradas para os níveis de mais alta energia no sistema de múltiplos poços são devido à aproximação de poço único que não considera os efeitos de superposição das funções de onda para os estados de mais alta energia. Além disso, a imprecisão do campo elétrico nas amostras e as incertezas no "band-offset" tornam difíceis uma comparação mais precisa com os resultados experimentais.

Utilizando o Método de Matriz de Iteração, desenvolvemos um formalismo onde calculamos o Coeficiente de Transmissão como função da energia do elétron incidente em um sistema de multi-barreiras sob ação de um campo elétrico constante com o objetivo de analisar as propriedades de transporte nas heteroestruturas de AlGaAs-GaAs.

Nos sistemas analisados de dupla, tripla, e quádrupla-barreira para campo externo nulo, com as larguras das barreiras $L_b = 20 \text{ \AA}$, os efeitos de superposição das funções de onda influenciam fortemente as posições dos níveis quase-ligados. Para estes casos, os resultados exatos do Coeficiente de Transmissão indicam a formação de minibandas de energia no limite do número de barreiras (N) grande. Tomando como exemplo o sistema com cinco barreiras (quatro poços de potencial), o Coeficiente de Transmissão mostra a existência de quatro estados quase-ligados caracterizados por quatro picos de transmissão máximos bem próximos um do outro, significando um nível para cada poço com uma pequena diferença de energia entre eles. Esta diferença de energia é um exemplo claro dos efeitos de superposição entre as funções de onda.

A aplicação de um campo elétrico modifica completamente essas características. Os efeitos do campo destroem a simetria do potencial fazendo com que os picos de transmissão não alcancem a unidade. Isto significa que as condições de tunelamento ressonante ótimas anteriormente existentes são parcialmente quebrados originando

certas condições de interferência destrutiva entre as componentes incidente e refletida da função de onda, internamente às barreiras, que não permitam uma probabilidade de transmissão máxima pelo sistema. A ação do campo também elimina a disposição de simetria dos níveis como obtido para campo nulo.

A comparação entre os resultados obtidos pelos modelos de potencial linear e do tipo escada para o Coeficiente de Transmissão demonstra razoáveis diferenças principalmente em relação à posição do primeiro pico. A causa dessas diferenças advem do fato que no modelo tipo escada a ação do campo elétrico é simulada pelo rebaixamento das barreiras quadradas uma em relação a outra. Este método é uma aproximação muito boa somente na faixa de campos pequenos. O modelo linear, entretanto, leva em consideração a inclinação das bandas devido ao potencial do campo elétrico constante o que possibilita tratar de uma maneira mais realista o problema.

As discrepâncias entre os Coeficientes de Transmissão nas configurações 57:43 e 85:15 são originadas obviamente pelas diferentes alturas das barreiras de potencial tomados em cada caso. Embora apresentem estruturas de picos bem deslocadas uma em comparação a outra, os resultados para a configuração 85:15 são mais ricos apresentando os picos mais agudos delimitando melhor a posição de um nível ressonante do que os resultados na configuração 57:43 que é a mais indicada pelos recentes resultados experimentais.

Obtivemos ainda o Coeficiente de Transmissão em função da voltagem aplicada para uma energia fixa do elétron incidente, abaixo da energia de Fermi. Embora este resultado nos permita estabelecer a região de voltagem onde ocorrem os picos na corrente de tunelamento ressonante via estados quase-ligados do ponto Γ nas heteroestruturas de dupla barreira estudadas, acreditamos que não deva ser diretamente comparado com a experiência pois podemos sempre ajustar a energia do elétron incidente para fitar melhor os resulta-

dos experimentais.

A partir do Coeficiente de Transmissão em função da energia determinamos a densidade de corrente versus voltagem considerando a geometria das amostras do grupo da IBM⁽¹³⁾. Nossos resultados reproduzem bem os picos observados nas curvas experimentais, tanto sua posição quanto intensidade. A altas voltagens a curva teórica apresenta mais estruturas de resistência negativa do que as observadas experimentalmente. Estas regiões, acreditamos, possam ocorrer devido à contribuição de estados virtuais de alta energia e/ou reflexões múltiplas nas barreiras. É importante assinalar que a densidade de corrente é obtida via uma média do Coeficiente de Transmissão com pesos determinados pela densidade de estados incidentes sobre uma variação de energia até o nível de Fermi. Então, a altas voltagens, mesmo sem a presença de picos correspondendo a estados ressonantes, é a média do Coeficiente de Transmissão mais do que a presença do pico que determina a corrente de tunelamento.

E.E. Mendez et al.⁽¹³⁾, acreditam que o comportamento da curva $I \times V$, a altas voltagens, é devido ao tunelamento ressonante via estados no vale da banda em torno do ponto X e não através de estados do ponto Γ geradores dos primeiros picos na curva da corrente. As amostras estudadas possuem uma concentração de alumínio da ordem de 40%, próxima da concentração limiar, em torno de 45%, onde as camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ passam a ter um gap indireto favorecendo o processo de tunelamento via pontos Γ -X do GaAs para AlGaAs.

A questão sobre os processos de tunelamento responsáveis pelo comportamento da curva característica de $I \times V$, a altas voltagens, ainda está em aberto. Alguns trabalhos experimentais^(49,80) em heteroestruturas de AlAs (Arseneto de Alumínio), onde o gap é sabidamente indireto, apresentam resultados contraditórios. Pelo lado teórico Ando⁽⁸⁷⁾ contribuiu para elucidar a validade da aproximação de função envelope. Utilizando o modelo "Tight-binding" investigou

os efeitos da mistura dos estados Γ -X em um sistema de barreira de AlGaAs com concentrações diferentes de alumínio (35%-50%-35%). Sua conclusão é que a menos que existam fortes efeitos de interferência das funções de onda passando através da barreira via o vale Γ e aquelas via o vale X, a probabilidade de tunelamento pode ser calculada muito bem na aproximação de função envelope a qual despreza completamente a mistura Γ -X.

BIBLIOGRAFIA

- (1) L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. & Dev. 14, 61 (1970).
- (2) L.A. Cury and N. Studart, Proc. of 2nd Int. Conf. on "Superlattice, Microstructure and Microdevices", Göteborg Sweden, August 1986 (a ser publicado em "Superllattices and Microstructures" (1987)).
- (3) L.A. Cury and N. Studart, Anais da 3^a Escola Brasileira de Física de Semicondutores, World Scientific 1987 (no prelo).
- (4) D.A.B. Miller, D.S. Chemla and T.C. Damen, A.C. Gossard and W. Wiegmann, T.H. Wood and C.A. Burrus, Phys. Rev. Lett. 53, 2173 (1984).
- (5) D.A.B. Miller, D.S. Chemla and T.C. Damen, A.C. Gossard and W. Wiegmann, T.H. Wood and C.A. Burrus, Phys. Rev. B 32, 1043 (1985).
- (6) P.C. Klipstein, P.R. Tapste, N. Apsley, D.A. Anderson, M.S. Skolnick, T.M. Kerr and K. Woodbridge, J. Phys. C, Solid State Phys. 19, 857 (1986).
- (7) E.E. Mendez, G. Bastard, L.L. Chang, and L. Esaki, Phys. Rev. B 26, 7101 (1982).
- (8) T. Furuta, K. Hirakawa, J. Yoshino and H. Sakaki, Jap. Journal of Appl. Phys. 25, L151 (1986).
- (9) G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang and L. Esaki, Phys. Rev. B 28, 3241 (1983).
- (10) R. Tsu e L. Esaki, Appl. Phys. Lett. 22, 462 (1973).
- (11) L.L. Chang, L. Esaki and R. Tsu, Appl. Phys. Lett. 24, 593 (1974).
- (12) T.C.L.G. Sollner, W.D. Goodhue, P.E. Tannenwald, C.D. Parker and D.D. Peck, Appl. Phys. Lett. 43, 588 (1983).
- (13) E.E. Mendez, E. Calleja, C.E.T. Gonçalves da Silva, L.L. Chang and W.I. Wang, Phys. Rev. B 33, 7368 (1986).

- (14) L.L. Chang, K. Ploog, eds., Molecular Beam Epitaxy and Heterostructure, NATO Advanced Science Institute Series, Nijhoff, Dordrecht (1985).
- (15) J.B. Mullin, S.J.C. Irvine, R.H. Moss, P.N. Robson, D.R. Wight, eds., Metal Organic Vapor Phase Epitaxy 1984, North-Holland, Amsterdam (1984).
- (16) R. Dingle, W. Wiegmann and C.H. Henry, Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
- (17) R. Dingle, A.C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. 34, 1327 (1975).
- (18) R. People, K.W. Wecht, K. Alair, and A.Y. Cho, Appl. Phys. Lett. 43, 118 (1983).
- (19) A.C. Gossard, W. Brown, C.L. Allyn, and W. Wiegmann, J. Vac. Sci. Technol. 20, 694 (1982).
- (20) R.C. Miller, D.A. Kleinman, and A.C. Gossard, Phys. Rev. B 29, 7085 (1984).
- (21) J. Batey, S.L. Wright, and D.J. DiMaria, J. Appl. Phys. 57, 484 (1985).
- (22) R.C. Miller, D.A. Kleinman, W.A. Nordland Jr., and A.C. Gossard, Phys. Rev. B 22, 863 (1980).
- (23) P.M. Petroff, C. Weisbuch, R. Dingle, A.C. Gossard and W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 38, 965 (1981).
- (24) B.A. Vojak, N. Holonyak Jr., W.D. Laidig, K. Hess, J.J. Coleman, and P.D. Dapkus, Solid State Commun. 35, 477 (1980).
- (25) R.C. Miller and A.C. Gossard, Appl. Phys. Lett. 43, 954 (1983).
- (26) H.J. Polland, Y. Horikoshi, R. Höger, E.O. Göbel, J. Kuhl, and K. Ploog, "in Proc. 4th Int. Conf. Hot Electrons Semicon

- ductors, Innsbruck, Austria (1985), a ser publicado em Physica B.
- (27) R.T. Collins , K. von Klitzing, and K. Ploog, Phys. Rev. B 33, 4378 (1986).
 - (28) Y. Matsumoto, S. Tarucha, and H. Okamoto, Phys. Rev. B 33, 5961 (1986).
 - (29) L. Viña, R.T. Collins, E.E. Mendez, and W.I. Wang, Phys.Rev. B 33, 5939 (1986).
 - (30) C. Alibert, S. Gaillard, J.A. Brum, G. Bastard, P. Frijlink and M. Erman, Solid State Commun. 53, 457 (1985).
 - (31) Refs. (11), (12), (13) e (48) a (83).
 - (32) E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, New York - 1970, pag.109.
 - (33) G. Bastard, U.O. Ziemelis, C. Delalande and M. Voos, A.C. Gossard and W. Wiegmann, Solid State Comm. 49, 671 (1984).
 - (34) Refs. de (5) a (13) e refs.(28) e (48).
 - (35) E.J. Austin and M. Jaros, Phys. Rev. B 31, 5569 (1985).
 - (36) J.A. Brum and G. Bastard, Phys. Rev. B 31, 3893 (1985).
 - (37) N. Watanabe and H. Kawai, J. Appl. Phys. 60, 3696 (1986).
 - (38) A. Harwit and J.S. Harris Jr., J. Appl. Phys. 60, 3211 (1986).
 - (39) D. Ahn and S.L. Chuang, Phys. Rev. B 35, 4149 (1987).
 - (40) D. Ahn and S.L. Chuang, Phys. Rev. B 34, 9034 (1986).
 - (41) F. Capasso, K. Mohammed and A.Y. Cho, Appl. Phys. Lett. 48, 478 (1986).
 - (42) L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press, London-1959, pag. 440.
 - (43) H.C. Ohanian and C.G. Ginsburg, A.J. Phys. 42, 310 (1974).

- (44) E.E. Mendez, L. Esaki and W.I. Wang, Phys. Rev. B 33, 2893 (1986).
- (45) G. García-Calderon, Proc. of 2nd Int. Conf. on "Superlattices, Microstructure and Microdevices", Göteborg Sweden, August 1986.
- (46) C.B. Duke, Tunneling in Solids, Academic Press, New York-1969, pag. 79.
- (47) Refs. (12), (13), (49) e (53) a (67).
- (48) B. Ricco and M. Ya. Azbel, Phys. Rev. B 29, 1970 (1984).
- (49) W.D. Goodhue, T.C.L.G. Sollner, H.Q.Le, E.R. Brown, and B.A. Vojak, Appl. Phys. Lett. 49, 1086 (1986).
- (50) S. Luryi, Appl. Phys. Lett. 47, 490 (1985).
- (51) D.D. Coon and H.C. Liu, Appl. Phys. Lett. 49, 94 (1986).
- (52) S. Luryi and F. Capasso, Appl. Phys. Lett. 47, 1347 (1985).
- (53) T. Inata, S. Muto, Y. Nakata, T. Fujii, H. Ohnishi and S. Hiyamizu, Jap. Journal of Appl. Phys. 25, L983 (1986).
- (54) J.M. Gering, D.A. Crim, D.G. Morgan and P.D. Coleman, W. Kopp and H. Morkoç, J. Appl. Phys. 61, 271 (1987).
- (55) E.E. Mendes, E. Calleja, and W.I. Wang, Phys. Rev. B 34, 6026 (1986).
- (56) M. Tsuchiya and H. Sakaki, Jap. Journal of Appl. Phys. 25, L185 (1986).
- (57) T.J. Shewchuk, P.C. Chapin, and P.D. Coleman, W. Kopp, R. Fischer, and H. Morkoç, Appl. Phys. Lett. 46, 508 (1985).
- (58) M. Tsuchiya and H. Sakaki, App. Phys. Lett. 49, 88 (1986).
- (59) T. Nakagawa, H. Imamoto, T. Kojima, and K. Ohta, App. Phys. Lett. 49, 73 (1986).

- (60) S. Muto, T. Inata, H. Ohnishi, N. Yokoyama and S. Hiyamizu, Jap. Journal of Appl. Phys. 25, L577 (1986).
- (61) A.R. Bonnefoi, R.T. Collins, and T.C. McGill, R.D. Burnham and F.A. Ponce, Appl. Phys. Lett. 46, 285 (1985).
- (62) M. Tsuchiya, H. Sakaki and J. Yoshino, Jap. Journal of Appl. Phys. 24, L466 (1985).
- (63) M.A. Reed, J.W. Lee, and H-L. Tsai, Appl. Phys. Lett. 49, 158 (1986).
- (64) H. Morkoç, J. Chen, U.K. Reddy, and T. Henderson, S. Luryi, Appl. Phys. Lett. 49, 70 (1986).
- (65) E.E. Mendez, W.I. Wang, B. Ricco and L. Esaki, Appl. Phys. Lett. 47, 415 (1985).
- (66) G.S. Lee, K.Y. Hsieh, and R.M. Kolbas, Appl. Phys. Lett. 49, 1528 (1986).
- (67) S. Ray, P. Ruden, V. Sokolov, R. Kolbas, T. Boonstra, and J. Williams, Appl. Phys. Lett. 48, 1666 (1986).
- (68) H. Ohnishi, T. Inata, S. Muto, N. Yokoyama, and A. Shibatomi, Appl. Phys. Lett. 49, 1248 (1986).
- (69) A.F.J. Levi, J.R. Hayes, A.C. Gossard and J.H. English, Appl. Phys. Lett. 50, 98 (1987).
- (70) D.D. Coon and H.C. Liu, Appl. Phys. Lett. 47, 172 (1985).
- (71) N. Harada and S. Kuroda, Jap. Journal of Appl. Phys. 25, L871, (1986).
- (72) B. Jogai and K.L. Wang, Appl. Phys. Lett. 46, 167 (1985).
- (73) A.R. Bonnefoi and T.C. McGill, R.D. Burnham, Appl. Phys. Lett. 47, 307 (1985).
- (74) F. Capasso, K. Mohammed, A.Y. Cho, R. Hull, Appl. Phys. Lett. 47, 420 (1985).

- (75) T.J. Shewchuk, J.M. Gering, P.C. Chapin, and P.D. Coleman, Appl. Phys. Lett. 47, 986 (1985).
- (76) J.N. Schulman and C.L. Anderson, Appl. Phys. Lett 48, 1684 (1986).
- (77) M.A. Reed, R.J. Koestner, and M.W. Goodwin, Appl. Phys. Lett Lett. 49, 1293 (1986).
- (78) E.R. Brown, T.C.L.G. Sollner, W.D. Goodhue, and C.D. Parker, Appl. Phys. Lett. 50, 83 (1987).
- (79) T.H.H. Vuong and D.C. Tsui, W.T. Tsang, Appl. Phys. Lett. 50, 212 (1987).
- (80) A.R. Bonnefoi and T.C. McGill, R.D. Burnham and G.B. Anderson, Appl. Phys. Lett. 50, 344 (1987).
- (81) T.K. Woodward and T.C. McGill, R.D. Burnham, Appl. Phys. Lett. 50, 451 (1987).
- (82) I. Hase, H. Kawai, K. Kaneko, and N. Watanabe, J. Appl. Phys. 59, 3792 (1986).
- (83) H. Toyoshima, Y. Ando, A. Okamoto and T. Itoh, Jap. Journal of Appl. Phys. 25, L786 (1986).
- (84) M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Function, Dover publications, Inc. New York 1964.
- (85) L. Esaki, IEEE Journal of Quantum Electronics QE-22, 1611 (1986).
- (86) M.O. Vassell, J. Lee, and H.F. Lockwood, J. Appl. Phys. 54, 5206 (1983).
- (87) T. Ando, Anais da 3ª Escola Brasileira de Física de Semicondutores, World Scientific 1987 (no prelo).