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

“PROPRIEDADES ELETRÔNICAS
DE UM POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO
COM DOPAGEM DELTA”

Márcio Adriano Rodrigues Souza

OK
USP / IFSC / SBI

8-2-001042

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

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Marcos Henrique Degani*

SÃO CARLOS

1994

IFSC —

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E
INFORMAÇÃO

168

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

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

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **MARCIO ADRIANO RODRIGUES** ^{CEP 13560-970 - São Carlos - SP}
APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM
23/03/1994

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Cidade Universitária - Postal 369
CEP 13560-970 - São Carlos - SP
Brasil

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani

Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta

Prof. Dr. Jose Antonio Brum

Aos meus pais *S.Celso*[†] e
Everalda e meu irmão *Celso*.

Agradecimentos

- Ao professor Dr. Marcos H. Degani pela sugestão do tema, orientação e discussões no decorrer deste trabalho.
- Aos amigos Salviano A. Leão, Washington L. C. Lima e J. Vitor B. Ferreira pelas discussões e sugestões que muito contribuíram para a realização desse trabalho.
- Aos professores Dr. Valmir Chitta e Dr. Lidério Ioriatti pelas proveitosas discussões.
- A todos os colegas do IFQSC-USP pelo ótimo clima de trabalho.

Este trabalho foi financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Conteúdo

Lista de Figuras	iii
Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 Conceitos Básicos e Modelo Teórico	6
2.1 Teoria de Banda	7
2.2 Estrutura Eletrônica	8
2.3 Distribuição dos Portadores em Equilíbrio Térmico	10
2.3.1 Densidade de Estados	11
2.3.2 Distribuição Eletrônica	14
2.4 Energia de Fermi	15
2.5 Cálculo Autoconsistente da Estrutura Eletrônica	16
2.5.1 Parâmetros Utilizados	18
3 Solução da Equação de Schrödinger	20
3.1 Evolução Temporal de uma Função de Onda	20
3.2 Propagação no Tempo Imaginário	24
3.3 Solução Autoconsistente da equação de Schrödinger	26
4 Poço Duplo Assimétrico com Dopagem Delta	31
4.1 Efeitos da Difusão dos Doadores	31
4.2 Efeitos da Temperatura	34
4.3 Efeitos da Concentração dos Doadores	36

5	Efeitos do Campo Elétrico	42
5.1	Efeitos do Campo Elétrico e da Espessura da Barreira	43
5.2	Tunelamento Ressonante	49
5.3	Transistor de Velocidade Modulada	56
5.3.1	Evolução Temporal do Sistema – Transiente	62
6	Efeitos do campo magnético	65
6.1	Considerações Teóricas	65
6.2	Campo Magnético Perpendicular	68
7	Conclusão	74
	Apêndices	77
A	Aproximação para o Operador $\exp[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}]$	77
B	Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário	78
C	Interação do Campo Magnético com o Spin do Elétron	81
D	Solução da equação de Schrödinger com Campo Magnético	83
E	Ocupação dos Níveis de Energia na Presença de um Campo Magnético	84
	Referências	87

Lista de Figuras

1.1	Dois poços quânticos assimétricos com dopagem delta no centro dos poços	3
2.1	Energia de Fermi para o GaAs com dopagem residual de aceitadores igual a $5 \times 10^{15} cm^{-3}$ medida em relação ao fundo da banda de condução.	16
3.1	Discretização do espaço. A distância entre os pontos da rede é $z_{i+1} - z_i = \Delta_i$ . . .	22
4.1	Potencial efetivo e densidade de probabilidade para $T = 300K$, $\Delta z = 20 \text{ \AA}$ e $N_d = 5 \times 10^{12} cm^{-2}$ em cada poço. É mostrado também a ocupação de cada sub-banda em unidades de $10^{12} cm^{-2}$	32
4.2	Potencial efetivo e densidade eletrônica para uma difusão gaussiana dos doadores de $5\text{\AA}$ e $40\text{\AA}$ com $T = 0K$ e $N_d = 5 \times 10^{12} cm^{-2}$ em cada poço.	33
4.3	Potencial efetivo e densidade eletrônica para temperaturas $T = 0K$ e $T = 300K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$ e $N_d = 5 \times 10^{12} cm^{-2}$ em cada poço. São mostrados também os quatro primeiros níveis de energia para cada temperatura.	35
4.4	Potencial efetivo e densidade eletrônica para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. A concentração dos átomos doadores no PE varia de zero a $8 \times 10^{12} cm^{-2}$. No PD concentração é mantida constante e igual a $2 \times 10^{12} cm^{-2}$	37
4.5	Níveis de energia e ocupação das sub-bandas para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. A concentração dos átomos doadores no PE varia de zero a $8 \times 10^{12} cm^{-2}$. No PD a concentração é mantida constante e igual a $2 \times 10^{12} cm^{-2}$	39
4.6	Potencial efetivo e densidade eletrônica para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. As concentrações dos átomos doadores são $2 \times 10^{12} cm^{-2}$, $5 \times 10^{12} cm^{-2}$ e $8 \times 10^{12} cm^{-2}$ em cada poço.	40

4.7	Níveis de energia e ocupação das sub-bandas para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. A concentração dos átomos doadores no PE é sempre igual à do PD.	41
5.1	Dois poços quânticos assimétricos com dopagem delta no centro dos poços. Na superfície é feito um contato metálico para que uma tensão externa possa ser aplicada.	42
5.2	Potencial efetivo e densidade eletrônica para quatro valores de tensão elétrica: -350, 0, 350 e 700 mV. A espessura da barreira é de $25\text{\AA}$	44
5.3	Potencial efetivo e densidade eletrônica para quatro valores de tensão elétrica: -350, 0, 350 e 700 mV. A espessura da barreira é de $50\text{\AA}$	45
5.4	Autofunções correspondentes aos três primeiros estados para tensões elétricas de -350,0 mV e 700,0 mV. Os gráficos (a), (b) e (c) são para $L_B = 25\text{\AA}$ e os gráficos (d), (e) e (f) são para $L_B = 50\text{\AA}$	48
5.5	Influência da tensão elétrica externa sobre os dois primeiros níveis de energia do sistema. As linhas contínuas e tracejadas são para barreiras de $25\text{\AA}$ e $50\text{\AA}$ de espessura, respectivamente.	49
5.6	Influência da tensão elétrica externa sobre os valores médios das autofunções dos dois primeiros níveis de energia do sistema. As linhas contínuas e tracejadas são para barreiras de $25\text{\AA}$ e $50\text{\AA}$ de espessura, respectivamente.	50
5.7	Autofunções dos três primeiros níveis de energia e densidade eletrônica total no estado ressonante para $L_B = 25\text{\AA}$	51
5.8	Autofunções dos três primeiros níveis de energia e densidade eletrônica total no estado ressonante para $L_B = 50\text{\AA}$	52
5.9	Efeito da tensão elétrica sobre as autofunções dos três primeiros estados do sistema para valores de V_G próximos ao ressonante. A espessura da barreira é de $25\text{\AA}$	54
5.10	Efeito da tensão elétrica sobre as autofunções dos três primeiros estados do sistema para valores de V_G próximos ao ressonante. A espessura da barreira é de $50\text{\AA}$	55
5.11	Condutividade do VMT como uma função da tensão elétrica aplicada V_G	59

5.12	Potencial efetivo e densidades de probabilidade das quatro primeiras sub-bandas do VMT para três valores de V_G ; 230,0 mV, 345,6 mV (ressonância) e 460,0 mV. Indicamos também a ocupação de cada sub-banda em unidades de 10^{12} cm^{-2}	60
5.13	Níveis de energia e ocupação das sub-bandas no VMT como uma função de V_G . A linha tracejada nos fornece a ocupação total.	61
5.14	Posições médias das funções de onda dos três primeiros níveis de energia como uma função do tempo quando a tensão elétrica passa de 230,0 mV para 345,6 mV. A linha tracejada nos fornece a posição média da densidade eletrônica total.	63
5.15	Densidades de probabilidade dos estados ressonantes para $t = 0, 100, 200$ e 300 fs	64
6.1	Relação de dispersão para o sistema poço duplo assimétrico com dopagem delta para uma tensão elétrica de 700 mV e quatro valores de campo magnético: 0, 5T, 10T e 20T. $k_0 = 1/a_0^* = 0.009535 \text{ \AA}^{-1}$. As energias foram calculadas em relação ao nível de Fermi.	69
6.2	Ocupação das sub-bandas como função do campo magnético externo para uma tensão elétrica de 700 mV.	71
6.3	Influência da tensão elétrica sobre a relação de dispersão para um campo magnético de 20 T. Consideramos três valores para a tensão elétrica: 500, 700 e 900 mV. $k_0 = 1/a_0^* = 0.009535 \text{ \AA}^{-1}$. As energias foram calculadas em relação ao nível de Fermi.	73

Resumo

Calculamos a estrutura eletrônica do sistema formado por dois poços quânticos assimétricos ($Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$) com dopagem delta (Si) no centro de cada poço. Resolvemos a equação de Schrödinger usando a teoria do funcional densidade na aproximação de densidade local. Obtemos o potencial efetivo, os níveis de energia, a ocupação das sub-bandas e a densidade eletrônica total em função da temperatura, espessura da barreira de potencial que separa os dois poços, concentração e difusão dos átomos doadores.

Verificamos que a estrutura eletrônica é pouco influenciada pela temperatura e difusão dos doadores. Por outro lado, nossos resultados mostram que ela depende de forma significativa da concentração dos doadores.

Investigamos também como o sistema é influenciado por uma tensão elétrica aplicada na direção de crescimento. Calculamos os níveis de energia e ocupação das sub-bandas em função da tensão elétrica aplicada. Determinamos então a tensão elétrica necessária para tornar ressonante os dois primeiros níveis de energia para barreiras de potencial de espessuras 25Å e 50Å.

Uma possível aplicação para esse sistema é analisada. Verificamos que ele apresenta efeitos de mobilidade modulada e transcondutância negativa quando as mobilidades nos dois poços são diferentes.

Consideramos ainda o caso em que um campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento. Nossos resultados mostram que a forma da relação de dispersão $\varepsilon_n(k_x)$, inicialmente parabólica, é bastante modificada pelo campo magnético, surgindo estados ressonantes para k_x diferente de zero. Conseqüentemente, a massa efetiva eletrônica nessa direção também é modificada, dependendo agora da energia do elétron. Para campo magnético nulo verificamos que a massa efetiva é diferente em cada sub-banda.

Abstract

In this work we calculate the electronic structure of a double asymmetric quantum well of $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ with a delta doping at the center of the wells. The local density approximation was used in order to obtain the effective potential energy levels, population and the total electronic density as a function of the temperature, barrier thickness, impurity concentration and impurity spread.

We have observed that the electronic structure is almost not sensitive to the temperature and the spread of the donors but it depends strongly of the donors concentration.

The effect of a gate voltage (V_G) is also studied. The energy levels and the occupation of this levels are calculated as a function of V_G . The resonance of the two first levels are studied for a system with barrier thickness $25\text{\AA}$ and $50\text{\AA}$.

A possible practical application for this system is analyzed. We observe that mobility modulation and negative transconductance can be achieved when the mobilities of the two wells are different.

We have considered the effect of a uniform magnetic field applied perpendicular to the growth direction. The dispersion relation is strongly modified and the effective mass for each subband has been calculated.

Capítulo 1

Introdução

Com o avanço nas técnicas de crescimento epitaxiais, como MBE–*Molecular Beam Epitaxy* e MOCVD–*Metalorganic Chemical Vapor Deposition*, tornou-se possível construir uma grande variedade de microestruturas cujas dimensões são comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie dos elétrons, revelando assim a natureza quântica presente nesses sistemas. Estas estruturas nos possibilitam então investigar a Física em sistemas com dimensões reduzidas, da ordem de dezenas de angstroms, as quais também são muito importantes tecnologicamente.

Esses processos de fabricação baseiam-se na evaporação de materiais semicondutores que são depositados lenta e alternadamente sobre um substrato formando uma estrutura de múltiplas fatias na direção de crescimento, chamada de heteroestrutura semicondutora. A baixa velocidade de crescimento ($\sim 1\mu m/h$) permite um controle na espessura dessas fatias da ordem de camadas atômicas[1].

Com a utilização de materiais semicondutores de diferentes *gaps* entre as bandas de valência e condução é possível construir sequências de barreiras de potenciais e poços quânticos. Para aqueles semicondutores cujos parâmetros de rede são muito próximos, como é para o GaAs e o AlGaAs, é possível construir amostras com interfaces abruptas, resultando em uma forma de potencial que pode ser descrito por uma sucessão de barreiras e poços quadrados. A dopagem destas estruturas com impurezas aceitadoras e/ou doadoras de forma controlada nos possibilita obter os mais variados perfis de potencial na direção de crescimento.

Inicialmente proposto por Esaki e Tsu[2–4] e posteriormente observado por Dingle *et al.*[5], os efeitos de acoplamento nessas heteroestruturas semicondutoras, permitindo ocorrer o tunelamento de portadores de um poço para outro, atraiu muita atenção devido à possibilidade de aplicação em dispositivos de alta velocidade, pois, o processo de tunelamento nestes dispositivos possui tempo característico da ordem de picosegundos ou menos[6–10]. Isto levou ao desenvolvimento dos dispositivos quânticos verticais, onde a corrente elétrica flue perpendicularmente as camadas dopadas e não ao longo delas.

A partir de então uma grande variedade de estruturas envolvendo efeitos de tunelamento ressonante foram produzidas, encontrando as mais variadas aplicações. Como exemplo podemos citar os diodos e transistores de tunelamento ressonante, detectores de radiação infravermelha e chaves lógicas de alta velocidade[11–16].

Para que possamos compreender os aspectos fundamentais do comportamento eletrônico nessas estruturas, particularmente no domínio do tempo, a dinâmica desse processo deve ser investigada. No entanto, a descrição completa do movimento eletrônico é complexa, envolvendo a solução autoconsistente da equação de Poisson e da equação de Schrödinger incluindo processos de espalhamento[17–21].

Talvez a estrutura mais conveniente para essa finalidade seja o poço duplo assimétrico, onde as autofunções eletrônicas podem ser transformadas de estados isolados para estados deslocados pelo efeito do tunelamento ressonante. Uma tensão elétrica ou um campo magnético pode ser usado para controlar o acoplamento entre os estados nos diferentes poços.

Recentemente vários trabalhos teóricos e experimentais envolvendo processos de tunelamento no sistema poço duplo assimétrico têm sido publicados. Sistemas não dopados são estudados experimentalmente criando-se portadores por excitações óticas, de onde foram observados a separação dos níveis de energia (estados ligantes e antiligantes) na ressonância[22], oscilações eletrônicas entre os poços[23] e o tempo dessas oscilações[24,25]. Resultados teóricos [26–28]

explicam satisfatoriamente essas observações experimentais. Para sistemas dopados os estudos estão voltados para as propriedades de transporte. Vários trabalhos foram publicados[12,29,30] desde as propostas iniciais de Sakaki[31] e Vinter[32] que mostraram a possibilidade de se conseguir um transistor com velocidade de chaveamento maior que a do transistor de efeito de campo convencional e também apresentar transcondutância negativa.

Nesse trabalho estudamos o sistema formado por dois poços quânticos assimétricos separados por uma distância tal que permita a interação entre os níveis de energia de cada poço (figura 1.1). Este é considerado como sendo composto de $(Al_{0.3}Ga_{0.7})As/GaAs$ com dopagem delta no centro de cada poço. O elemento dopante é o silício. Este irá ocupar os sítios do Gálio na região dopada, sendo portanto uma impureza substitucional doadora, surgindo dessa forma um gás de elétrons quase bidimensional no plano das impurezas (entende-se por gás de elétrons quase bidimensional aquele em que os elétrons têm níveis de energia quantizados numa dimensão espacial, mas podem se mover livremente nas outras duas).

Figura 1.1: Dois poços quânticos assimétricos com dopagem delta no centro dos poços

Devido à formação do gás de elétrons este passa a ser um problema de muitos corpos, não permitindo solução exata. Assim, para calcularmos a estrutura eletrônica desse sistema

usaremos a aproximação de massa efetiva, com os elétrons se movendo na direção de crescimento em um potencial que é a soma dos potenciais de Hartree e de troca com os potenciais da heteroestrutura e dos doadores e aceitadores residuais ionizados. O movimento dos elétrons perpendicularmente à direção de crescimento será descrito por estados de elétrons não interagentes. Efeitos de espalhamento não serão considerados.

Determinamos então o potencial efetivo, os níveis de energia, a ocupação das sub-bandas e a densidade eletrônica em função de vários parâmetros tais como difusão e concentração de impurezas, temperatura, campo elétrico e campo magnético. Para observarmos o tunelamento consideraremos uma estrutura com os poços quânticos próximos à superfície, onde é feito um contato metálico. Aplicaremos então um campo elétrico na direção de crescimento e um campo magnético perpendicular a essa direção com o objetivo de verificar seus efeitos nas propriedades eletrônicas do sistema.

No capítulo 2 apresentamos os conceitos básicos da física de semicondutores e as aproximações usadas na determinação do Hamiltoniano para o sistema em estudo.

No capítulo 3 discutimos o método utilizado para resolver a equação de Schrödinger autoconsistentemente com a equação de Poisson. Veremos que com o mesmo algoritmo é possível obter a estrutura eletrônica do sistema e fazer a evolução temporal de suas autofunções.

No capítulo 4 estudamos o sistema composto por um *poço duplo assimétrico com dopagem delta* analisando os efeitos da temperatura e da difusão e concentração dos doadores sobre os níveis de energia, ocupação das sub-bandas e potencial efetivo do sistema.

No capítulo 5 verificamos os efeitos de uma tensão elétrica aplicada na direção de crescimento da amostra e da espessura da barreira que separa os dois poços. Determinamos a tensão elétrica necessária para tornar ressonante os dois primeiros níveis de energia para barreiras de espessura $25\text{\AA}$ e $50\text{\AA}$. Verificamos também o efeito da tensão elétrica sobre as autofunções e ocupação dos estados para valores de tensão elétrica próximas à ressonância.

No capítulo 6 discutimos os efeitos de um campo magnético constante e uniforme aplicado perpendicularmente à direção de crescimento. Verificamos através da relação de dispersão $\varepsilon_n(k_x)$ como o campo magnético influencia no tunelamento entre os poços e como a ocupação total e a massa eletrônica efetiva na direção k_x são modificadas.

No capítulo 7 apresentamos nossas conclusões.

Capítulo 2

Conceitos Básicos e Modelo Teórico

As propriedades eletrônicas dos semicondutores são determinadas pelos elétrons presentes na banda de condução e pelos buracos na banda de valência. Esses portadores podem ser criados por dopagem ou por excitações térmicas. Como o número de elétrons excitados termicamente para a banda de condução (e portanto o número de buracos criados na banda de valência) varia com $\exp(-E_g/2kT)$ em um semicondutor intrínseco não degenerado, sua condutividade elétrica aumenta rapidamente com a temperatura, o que está em forte contraste com os metais. Este foi o primeiro fato que chamou a atenção dos Físicos no início do século XIX. Posteriormente foi observado que os semicondutores exibiam o fenômeno da fotocondutividade, e que efeitos de retificação eram obtidos na junção de dois semicondutores diferentes. No início do século XX medidas do efeito Hall confirmaram o fato da dependência do número de portadores com a temperatura, e verificaram que em muitas substâncias o sinal dominante dos portadores era positivo.

Estes fenômenos só foram explicados muitos anos depois com o desenvolvimento da teoria de banda. Ela tem por base a aproximação de um elétron, o que nos possibilita usar a estatística de Fermi-Dirac. Esta aproximação também nos permite introduzir na equação de Schrödinger um *potencial efetivo* de modo a considerar os efeitos dos outros elétrons. O potencial efetivo é interpretado como uma média do potencial de todos os elétrons, sendo a densidade de carga encontrada somando-se o módulo da função de onda ao quadrado de

todos os estados multiplicada pela ocupação destes estados. Por esse motivo essa aproximação é conhecida pela designação de *método autoconsistente*, já que o potencial (que depende da densidade de carga) depende das funções de onda dos estados de um elétron.

2.1 Teoria de Banda

Para descrevermos o comportamento eletrônico nos semicondutores temos que considerar o potencial cristalino. Na teoria de banda a rede é suposta perfeita, com os átomos permanecendo fixos em seus sítios. Assim, o potencial cristalino terá a periodicidade da rede e as soluções da equação de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + [E - V(\vec{r})] \psi = 0 \quad (2.1)$$

terão a forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (2.2)$$

onde m_e é a massa do elétron livre e $U_{\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função que também tem a periodicidade da rede.

Quando $\vec{k}$ é real as soluções são ondas planas moduladas com a periodicidade da rede. Soluções com $\vec{k}$ imaginário devem ser descartadas, pois, as autofunções 2.2 não serão bem comportadas. Desta forma, para um dado potencial $V(\vec{r})$ existem alguns intervalos de energia que correspondem a valores reais de $\vec{k}$ e outros para os quais $\vec{k}$ é imaginário. Os intervalos onde existem soluções aceitáveis são conhecidas como *bandas de energia permitidas*, e as regiões entre elas são chamadas *bandas de energia proibidas* ou “*gaps*” de energia.

Outra consequência importante das equações 2.2 é que estas são as mesmas em qualquer cela unitária de uma rede periódica, logo, o pacote de onda que descreve o movimento eletrônico em um estado permitido não é atenuado quando o elétron se move através do cristal. Só ocorrerá espalhamento se a periodicidade do cristal for quebrada; isto ocorre devido a vibrações térmicas da rede, impurezas, imperfeições e tamanho finito da amostra.

As imperfeições são fontes não só de espalhamento, mas também de estados localizados de energia. Enquanto os únicos estados de uma rede periódica perfeita são aqueles descritos pelas funções 2.2, que formam as *bandas permitidas*, os estados introduzidos por impurezas podem ter energias dentro das *bandas proibidas*.

2.2 Estrutura Eletrônica

Para determinarmos as propriedades eletrônicas do sistema proposto resolveremos a equação de Schrödinger 2.1 com a energia potencial $V(\vec{r})$ contendo as interações elétron-elétron, elétron-íon e mais campos externos aplicados. Devido à baixa mobilidade dos íons, quando comparados com os elétrons, eles serão considerados fixos em suas posições de equilíbrio, contribuindo apenas com uma constante ao Hamiltoniano (aproximação adiabática). Assim, a energia potencial $V(\vec{r})$ terá a forma

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{2} \sum_{\ell} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_{\ell}|} - Ze^2 \sum_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} + V_{ext}(\vec{r}) , \quad (2.3)$$

onde $\vec{R}$ são os vetores da rede de Bravais e Z o número de elétrons de valência.

Para resolvermos a equação 2.1 com $V(\vec{r})$ dado pela equação 2.3 adotaremos ainda algumas simplificações. O primeiro termo da equação 2.3 é a contribuição devido à interação

de um elétron em $\vec{r}$ com os outros elétrons do sistema. Se tratarmos os elétrons restantes como uma distribuição de cargas com densidade $\rho(\vec{r})$, a energia potencial deste elétron no campo produzido por todos os outros poderá ser calculada a partir da equação de Poisson

$$\nabla^2 V_H(\vec{r}) = 4\pi e \rho_e(\vec{r}) , \quad (2.4)$$

com a densidade de carga eletrônica dada por

$$\rho_e(\vec{r}) = -e \sum_{\ell} |\psi_{\ell}(\vec{r})|^2 , \quad (2.5)$$

onde a soma se estende sobre todos os níveis de energia ocupados. Esta é a aproximação de Hartree, a qual substitui a energia potencial devido a todos os elétrons por um único potencial médio $V_H(\vec{r})$. Correções de troca e correlação podem ser incluídas através da aproximação de densidade local de forma a considerar os efeitos de muitos corpos[33–35].

Outra simplificação que consideraremos será a aproximação de massa efetiva. A base física desta aproximação é que os elétrons se movem em um potencial periódico como se estivessem livres (não há espalhamento), mas com uma massa m^* característica dos detalhes da estrutura de banda, e não com a massa do elétron livre m_0 . Removeremos desta forma o termo de interação elétron-íon da equação 2.3, lembrando que o seu efeito está sendo considerado no valor da massa efetiva do elétron que aparece na equação 2.1. Efeitos da não parabolicidade da banda não serão considerados, pois, para concentrações eletrônicas típicas a maior parte dos elétrons estão próximos ao fundo da banda de condução. Zrenner *et al*[36] calcularam os números de ocupação para diversas sub-bandas para uma delta isolada considerando a não parabolicidade e mostraram que a modificação nos resultados é muito pequena para densidades

de doadores até $10^{13}/\text{cm}^2$.

2.3 Distribuição dos Portadores em Equilíbrio Térmico

Com a mudança do número de elétrons e de suas distribuições sobre os estados por meios externos surgem interessantes fenômenos físicos, e esta é uma das razões para o grande sucesso da aplicação dos materiais semicondutores em dispositivos eletrônicos. Portanto, conhecer os estados eletrônicos de um cristal não é suficiente para compreendermos suas propriedades macroscópicas. Devemos também saber se estes estados estão ocupados.

Como estamos estudando um sistema de muitos elétrons ($\sim 10^{12}/\text{cm}^2$) devemos descrevê-lo estatisticamente. O estado de uma partícula $|\ell\rangle$ pode estar ocupado com um elétron ou estar desocupado, isto é, seu número de ocupação N_ℓ será 1 ou 0. Entretanto, dentro da descrição estatística devemos trocar o número de ocupação N_ℓ por seu *valor médio estatístico* f_ℓ :

$$N_\ell \longrightarrow \langle N_\ell \rangle \equiv f_\ell ,$$

com

$$\langle N \rangle_{total} = 2 \sum_{\ell} f_{\ell} \quad (2.6)$$

(o fator 2 considera a degenerescência de spin). Nestas equações f_ℓ é a função de Fermi-Dirac. Dependendo se $|\ell\rangle$ for um estado da banda ou um estado localizado produzido por impurezas esta função de distribuição terá uma das seguintes formas[37]:

$$f_\ell^b = \langle N_\ell \rangle = \frac{1}{1 + \exp[\beta(\varepsilon_\ell - \varepsilon_F)]} ; \quad (2.7)$$

$$f^d = \langle N_d \rangle = \frac{1}{1 + (1/g_d)\exp[\beta(\varepsilon_d - \varepsilon_F)]} ; \quad (2.8)$$

$$f^a = \langle N_a \rangle = \frac{1}{1 + (g_a)\exp[\beta(\varepsilon_a - \varepsilon_F)]} , \quad (2.9)$$

onde f^d e f^a dão as probabilidades de ocupação dos estados produzidos por impurezas doadoras e aceitadoras, respectivamente. Os fatores g_d e g_a representam as degenerescências dos níveis de energia na primeira zona de Brillouin, com ε_d e ε_a sendo as energias de ionização destes níveis. ε_F é a energia de Fermi e $\beta = 1/k_b T$, com k_b sendo a constante de Boltzmann. Como exemplo podemos citar o Arsenieto de Gálio dopado com carbono. Neste caso o carbono comporta-se como uma impureza aceitadora com $\varepsilon_a = 26,7 \text{ meV}$. O valor de g_a é 4, já que a banda de valência do Arsenieto de Gálio é duplamente degenerada (buraco leve e buraco pesado) e, além disso, temos que considerar a degenerescência de spin.

2.3.1 Densidade de Estados

A concentração eletrônica de um sistema de volume Ω é calculado a partir da equação 2.6,

$$n_e = \frac{\langle N \rangle_{total}}{\Omega} = \frac{2}{\Omega} \sum_\ell f_\ell .$$

Como as funções de distribuição f_ℓ , equações 2.7 a 2.9, dependem dos estados de uma partícula por meio de sua energia, podemos escrever a identidade

$$\sum_{\ell} f_{\ell} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\varepsilon) \sum_{\ell} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\ell}) d\varepsilon ,$$

onde $\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\ell})$ é a função delta de Dirac. Usando este resultado a concentração eletrônica pode ser reescrita como

$$n_e = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon , \quad (2.10)$$

com

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\Omega} \sum_{\ell} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\ell}) \quad (2.11)$$

sendo a *densidade de estados*. A equação 2.11 nos fornece o número de estados de um elétron por unidade de energia e por unidade de volume.

Como exemplo vamos calcular as densidades de estados para uma banda parabólica isotrópica e para um gás de elétrons bidimensional. Estes resultados serão usados posteriormente para determinarmos o nível de Fermi e a ocupação dos estados respectivamente.

(i) *Banda parabólica isotrópica:*

$$\varepsilon_{\ell}(\vec{k}) = \varepsilon_{\ell 0} \pm \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_{\ell}^*} . \quad (2.12)$$

Nesta equação o índice ℓ representa a banda de condução (sinal positivo) ou a banda de valência (sinal negativo) e $\varepsilon_{\ell 0}$ é o mínimo (máximo) da respectiva banda. Substituindo a equação 2.12 na 2.11:

$$\rho_{\ell}^{3D}(\varepsilon) = \frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \delta \left[(\varepsilon - \varepsilon_{0\ell}) \mp \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_{\ell}^*} \right] = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \delta \left[(\varepsilon - \varepsilon_{0\ell}) \mp \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_{\ell}^*} \right] d^3 k .$$

Calculando esta integral temos

$$\rho_\ell^{3D}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_\ell^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} |\varepsilon - \varepsilon_{0\ell}|^{\frac{1}{2}}. \quad (2.13)$$

(ii) *Gás de elétrons bidimensional:*

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \vec{k}_\perp^2}{2m_e^*}.$$

Nesta equação ε_n é o nível de energia devido ao confinamento (direção z) e $\vec{k}_\perp = (k_x, k_y)$. Logo, podemos associar uma sub-banda bidimensional, que representa o movimento dos portadores no plano perpendicular à direção de confinamento, com cada um dos estados ligados. Assim, repetindo o procedimento anterior obtemos que a densidade de estados associada com cada nível de energia n é constante e dada por

$$\rho_n^{2D}(\varepsilon) = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2}, \quad (2.14)$$

com $\varepsilon \geq \varepsilon_n$. Portanto, a densidade de estados total para um gás de elétrons bidimensional é

$$\rho^{2D}(\varepsilon) = \sum_n \rho_n^{2D} = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} \sum_n \Theta[\varepsilon - \varepsilon_n],$$

sendo $\Theta(x)$ a função degrau:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \geq 0; \\ 0 & \text{se } x < 0. \end{cases}$$

2.3.2 Distribuição Eletrônica

Tendo determinado as densidades de estados para uma banda parabólica isotrópica vamos agora examinar a distribuição dos elétrons e buracos entre as diferentes bandas e níveis de energia. O número de elétrons por unidade de volume na banda de condução é calculado a partir da equação 2.10 com a densidade de estados dada pela equação 2.13:

$$n_e = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{\varepsilon_c}^{+\infty} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_c)^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{1 + \exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/kT]} .$$

Introduzindo as variáveis adimensionais $x = (\varepsilon - \varepsilon_c)/kT$ e $\eta_c = (\varepsilon_F - \varepsilon_c)/kT$ na equação anterior obtemos

$$n_e = \left(\frac{2kTm_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}}(\eta_c) , \quad (2.15)$$

onde

$$F_j(\eta) = \int_0^{+\infty} \frac{x^j dx}{1 + \exp(x - \eta)} ; \quad j > -1 \quad (2.16)$$

é a integral de Fermi–Dirac.

Procedendo da mesma forma para a distribuição de buracos na banda de valência encontramos

$$n_b = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \rho_b^{3D}(\varepsilon)[1 - f(\varepsilon)]d\varepsilon = \left(\frac{2kTm_b^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}}(\eta_v) , \quad (2.17)$$

onde $\eta_v = (\varepsilon_v - \varepsilon_F)/kT$.

Para o gás de elétrons bidimensional o número de elétrons por unidade de área que ocupam a n -ésima sub-banda é calculada substituindo em 2.10 a densidade de estados dada

pela equação 2.14:

$$N_n = \int_{\varepsilon_n}^{+\infty} \rho_n^{2D}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{m_e^* k T}{\pi \hbar^2} \ln\{1 + \exp[(\varepsilon_F - \varepsilon)/kT]\} . \quad (2.18)$$

2.4 Energia de Fermi

Vamos agora calcular a dependência da energia de Fermi com a temperatura para o Arsenieto de Gálio. Este resultado será usado posteriormente nas condições de contorno do problema proposto.

Para o GaAs o valor do intervalo de energia proibida entre o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução (*gap de energia*) em função da temperatura é dada por[38]

$$E_g(T) = 1.519 - \frac{0,05405T^2}{(204 + T)} \quad [meV] ,$$

com T expresso em Kelvin.

A energia de Fermi ε_F é determinada pela neutralidade das cargas. Nós consideraremos o caso em que o GaAs possui uma dopagem residual de aceitadores, pois, no crescimento de uma heteroestrutura por técnicas epitaxiais sempre há uma incorporação de carbono na amostra. Ela depende basicamente das características do material hospedeiro, concentração e energia de ionização do aceitador e da temperatura, sendo que para $T = 0K$ ela coincide com o nível aceitador.

A energia de Fermi será então encontrada resolvendo-se numericamente a equação

$$n_e + n_a = n_b ,$$

onde n_e e n_b são dados pelas equações 2.15 e 2.17, respectivamente, e n_a é a concentração dos aceitadores ionizados (ver equação 2.9):

$$n_a = \frac{n_{ao}}{1 + 4 \exp[(\varepsilon_a - \varepsilon_F)/kT]} ,$$

com n_{ao} sendo a concentração total dos aceitadores.

O gráfico da energia de Fermi (medida em relação ao fundo da banda de condução) em função da temperatura é mostrado na figura 2.1. A energia de Fermi diminui para temperaturas até 4K, partindo do nível aceitador para $T = 0K$. Entretanto, para temperaturas maiores que 4K a energia de Fermi cresce monotonicamente.

Figura 2.1: Energia de Fermi para o GaAs com dopagem residual de aceitadores igual a $5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ medida em relação ao fundo da banda de condução.

2.5 Cálculo Autoconsistente da Estrutura Eletrônica

Com as aproximações mencionadas anteriormente determinaremos a estrutura eletrônica de um *poço duplo assimétrico com dopagem delta em seus centros* sem e com campos elétrico

e magnético aplicados. O elemento dopante neste caso é o silício. Este ocupa os sítios do gálio na região dopada, sendo portanto uma impureza substitucional doadora. Consideraremos a difusão dos doadores ao longo da direção de crescimento como sendo gaussiana, e que no plano perpendicular eles estarão uniformemente distribuídos.

Tomaremos a direção de crescimento como sendo a direção z , logo, os elétrons estarão confinados nesta direção (figura 1.1). Devido à simetria translacional no plano x - y as autofunções podem então ser escritas como

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{\rho})}{\sqrt{S}} \phi_n(z) ,$$

onde $\vec{k}$ é o vetor de onda no plano x - y , $\vec{\rho} = (x, y)$ é o vetor posição e $S = L_x L_y$ a área da amostra neste plano. Como a massa efetiva eletrônica é diferente no $GaAs$ e no $AlGaAs$ a equação de Schrödinger irá se desacoplar nas direções $\vec{x}$, $\vec{y}$ e $\vec{z}$ somente quando $\vec{k} = 0$.

Neste caso a energia do fundo da n -ésima sub-banda (ε_n) e as respectivas autofunções $\phi_n(z)$ que descrevem os efeitos do potencial do sistema sobre os elétrons são obtidas resolvendo-se a equação de Schrödinger unidimensional

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_e^*(z)} \frac{d}{dz} + V_H(z) + V_{xc}(z) + \Delta V_c(z) \right] \phi_n(z) = \varepsilon_n \phi_n(z) , \quad (2.19)$$

onde $m_e^*(z)$ é a massa efetiva dos elétrons para o $GaAs$ e para o $AlGaAs$. $V_H(z)$ é o potencial de Hartree, $V_{xc}(z)$ o potencial de troca e correlação e $\Delta V_c(z)$ o potencial devido à descontinuidade da banda de condução.

O potencial de Hartree $V_H(z)$ nos fornece a interação eletrostática entre os elétrons e dos elétrons com as impurezas e é obtido a partir da equação de Poisson,

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} [n(z) - n_I(z)] . \quad (2.20)$$

Nesta equação ϵ é a constante dielétrica do meio, que será considerada a mesma no GaAs e no AlGaAs. $n_I(z) = N_d(z) - N_a(z)$ é a densidade total dos dopantes ionizados e

$$n(z) = \sum_n N_n |\phi_n(z)|^2 \quad (2.21)$$

é a densidade eletrônica. A ocupação das sub-bandas N_n é dada pela equação 2.18.

O potencial de troca e correlação $V_{xc}(z)$ será calculado usando a parametrização sugerida por Hedin e Lundqvist[39],

$$V_{xc}(z) = -\frac{e^2}{2\epsilon a_0^* \pi \alpha r_s} \frac{2}{\pi \alpha r_s} [1 + 0.7734 X \ln(1 + X^{-1})] , \quad (2.22)$$

onde $\alpha = (4/9\pi)^{\frac{1}{3}}$, $r_s = [4\pi a_0^{*3} n(z)/3]^{-\frac{1}{3}}$, $X = r_s/21$ e $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / m_e^* e^2$ é o raio de Bohr efetivo.

A solução autoconsistente das equações 2.19 a 2.22 nos fornece a densidade de cargas, os níveis de energia, a ocupação das sub-bandas e o potencial efetivo.

2.5.1 Parâmetros Utilizados

Em nossos cálculos a massa efetiva dos elétrons varia com a composição e com a temperatura segundo a relação

$$\frac{m_e^*}{m_0} = [0,0665 - 1,11 \times 10^{-5} T] + [0,1006 - 5,03 \times 10^{-5} T] \cdot x + [0,0137 + 3,15 \times 10^{-5} T] \cdot x^2 ,$$

onde x é a porcentagem de concentração de alumínio em relação ao gálio. Esta expressão foi obtida a partir dos resultados de L. Hrivnák[38] por interpolação linear.

A constante dielétrica ϵ foi considerada a mesma para o GaAs e AlGaAs, com valor igual a 13.18[40].

A descontinuidade da banda de condução na interface GaAs/AlGaAs foi tomada como sendo de 62% da diferença dos *gaps* de energia de cada estrutura[41]. Usando este resultado encontramos que

$$\Delta V_c(x) = 0,62 \cdot \Delta E_g(x) \quad ,$$

com $\Delta E_g(x)$, dado por[38]

$$\Delta E_g(x) = 1,36 \cdot x + 0,22 \cdot x^2 \quad \text{eV} \quad .$$

Capítulo 3

Solução da Equação de Schrödinger

Neste capítulo discutiremos o método numérico utilizado na solução da equação de Schrödinger 2.19. Consideraremos, por simplicidade, apenas o caso unidimensional com o Hamiltoniano sendo independente do tempo.

Este método, conhecido por "split-operator", tem por base a equação de Schrödinger dependente do tempo, o que possibilita não só determinar as autofunções, mas também fazer a evolução temporal de uma dada função de onda[42–45].

Será mostrado inicialmente como se calcula a evolução temporal de uma função de onda. A seguir veremos como encontrar as autofunções de um Hamiltoniano através da evolução de uma função de onda no domínio de tempos imaginários, isto é, fazendo $t = -i\tau$. Finalmente veremos como resolver autoconsistentemente as equações de Schrödinger e Poisson, e discutiremos as condições de contorno que devem ser usadas.

3.1 Evolução Temporal de uma Função de Onda

A equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t} = H\Psi(z, t) \ ,$$

com

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) = \frac{p^2}{2m} + V(z) , \quad (3.1)$$

pode ser escrita na forma

$$\Psi(z, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H dt\right) \Psi(z, 0) .$$

Para um instante Δt posterior, lembrando que nosso Hamiltoniano não depende do tempo, obtemos,

$$\Psi(z, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) \Psi(z, t) . \quad (3.2)$$

Usando a equação 3.1, a equação 3.2 pode ser escrita como

$$\Psi(z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar} \left(\frac{V(z)}{2} + \frac{p^2}{2m} + \frac{V(z)}{2}\right)\right] \Psi(z, t) . \quad (3.3)$$

Com o auxílio da identidade $e^{A+B+A} = e^A e^B e^A$, que é válida para dois operadores A e B que satisfaçam às relações de comutação $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$, a equação 3.3 pode ser reescrita na forma

$$\Psi(z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right] \exp\left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(z, t) , \quad (3.4)$$

devendo ser satisfeitas as seguintes condições:

$$\left(\frac{i\Delta t}{2\hbar}\right)^3 \left[V(z), \left[\frac{p^2}{m}, V(z)\right]\right] = 0 ; \quad (3.5)$$

$$\left(\frac{i\Delta t}{2\hbar}\right)^3 \left[\frac{p^2}{m}, \left[\frac{p^2}{m}, V(z) \right] \right] = 0 . \quad (3.6)$$

Portanto, termos da ordem de $(\Delta t)^3$ devem ser desprezados, introduzindo assim um erro na equação 3.4 devido à não comutatividade dos operadores energia cinética e potencial. É importante notarmos que os três operadores que aparecem na equação 3.4 são unitários, logo, a norma da função de onda permanece constante nesta operação.

Para obtermos a evolução temporal da função de onda $\Psi(z, t)$ a equação 3.4 é resolvida numericamente. O espaço é então discretizado, com Δ_i sendo a distância entre os pontos da rede (figura 3.1). O potencial $V(z)$ e a função de onda $\Psi(z, t)$ são então calculados em cada ponto da rede.

Figura 3.1: Discretização do espaço. A distância entre os pontos da rede é $z_{i+1} - z_i = \Delta_i$.

A função $\Psi(z, t + \Delta t)$ é então calculada seguindo o procedimento abaixo:

(i) Multiplica-se $\exp[-iV(z)\Delta t/2\hbar]$ pela função de onda inicial $\Psi(z, t)$:

$$\xi(z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(z, t) . \quad (3.7)$$

(ii) O operador contendo a energia cinética $\exp[-ip^2\Delta t/2m\hbar]$ é então aplicado ao resultado obtido em (i):

$$\eta(z, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{ip^2 \Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(z, t + \Delta t) . \quad (3.8)$$

Para que esta operação possa ser efetuada o operador contendo a energia cinética é aproximado para (ver apêndice A)

$$\exp \left[-\frac{ip^2 \Delta t}{2m\hbar} \right] \approx \left(1 + i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \left(1 - i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)^{-1} , \quad (3.9)$$

onde o erro cometido é também da ordem de $(\Delta t)^3$. Pode-se observar ainda que o operador do lado direito da equação anterior permanece unitário. Portanto, a equação 3.8 pode ser escrita na forma

$$\left(1 - i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \eta(z, t + \Delta t) = \left(1 + i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \xi(z, t + \Delta t) . \quad (3.10)$$

Para resolvermos a equação 3.10, isto é, encontrarmos $\eta(z, t + \Delta t)$, as derivadas em cada ponto da rede são calculadas usando-se o método das diferenças finitas, com a derivada segunda de uma função $f(z)$ dada por[46]

$$f''_i = \frac{2f_{i-1}}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} - \frac{2f_i}{\Delta_i \Delta_{i-1}} + \frac{2f_{i+1}}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} , \quad (3.11)$$

onde o índice i indica cada ponto da rede, f_i o valor da função $f(z)$ neste ponto, $\Delta_i = z_{i+1} - z_i$, $\Delta_0 = \Delta_1$ e $\Delta_n = \Delta_{n-1}$.

Substituindo a equação 3.11 em 3.10 e definindo $\delta = i\hbar\Delta t/2m$ obtemos

$$\frac{\delta}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \eta_{i-1} - \left(1 + \frac{\delta}{\Delta_i \Delta_{i-1}} \right) \eta_i + \frac{\delta}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \eta_{i+1} = \Theta_i , \quad (3.12)$$

sendo

$$\Theta_i = -\frac{\delta}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})}\xi_{i-1} - \left(1 - \frac{\delta}{\Delta_i\Delta_{i-1}}\right)\xi_i - \frac{\delta}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})}\xi_{i+1} .$$

A equação 3.12 pode ser escrita na forma matricial

$$\sum_{j=1}^n M_{ij}\eta_j = \Theta_i ,$$

com a matriz M dada por

$$M_{ij} = \begin{cases} \frac{\delta}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} & \text{se } j = i - 1; \\ -\left(1 + \frac{\delta}{\Delta_i\Delta_{i-1}}\right) & \text{se } j = i; \\ \frac{\delta}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} & \text{se } j = i + 1; \\ 0 & \text{outros valores de } j . \end{cases}$$

Logo, temos que resolver um sistema linear tridiagonal[46,47], cuja solução fornecerá os valores da função $\eta(z, t + \Delta t)$ em cada ponto da rede.

(iii) A função de onda no instante $t + \Delta t$ é então obtida multiplicando-se novamente em cada ponto da rede $\exp[-iV(z)\Delta t/2\hbar]$ por $\eta(z, t + \Delta t)$:

$$\Psi(z, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{iV(z)\Delta t}{2\hbar}\right)\eta(z, t + \Delta t)$$

3.2 Propagação no Tempo Imaginário

As autofunções do sistema descrito por um dado Hamiltoniano H podem ser obtidas através do procedimento descrito na seção anterior trocando-se t por $-i\tau$, isto é, propagando

as funções de onda no domínio de tempos imaginários. As funções de onda iniciais podem ser quaisquer, sendo que neste trabalho usamos os polinômios de Hermite.

Com essa modificação pode se mostrar que as funções de onda evoluem para o estado fundamental do sistema (apêndice B). Os estados excitados são obtidos impondo-se a ortonormalidade entre as funções de onda a cada evolução temporal usando-se o método de ortonormalização de Gram-Schmidt,

$$\Psi_i^\perp(z, t) = \Psi_i(z, t) - \sum_{j < i} \langle \Psi_j^\perp(z, t) | \Psi_i(z, t) \rangle \Psi_j^\perp(z, t) .$$

Os índices i e j representam os vários estados do sistema.

Ao contrário da propagação no tempo real, as funções de onda agora devem ser normalizadas a cada evolução de $\Delta t = -i\Delta\tau$.

Esse procedimento deve ser repetido até que a convergência na energia seja alcançada.

Para que as aproximações 3.4 e 3.9 sejam válidas o incremento temporal Δt deve ser pequeno. Uma estimativa do valor de Δt que devemos usar na propagação das funções de onda pode ser obtido a partir do princípio da incerteza de Heisenberg

$$\Delta t \Delta E \sim \hbar .$$

Tomando ΔE como sendo o intervalo de energia necessário para acomodar todo o espectro de energia dos estados ligados temos

$$\Delta E = \Delta V_{max} = V_{bulk} - V_{min} \sim 2.000 \text{ meV} ,$$

onde V_{bulk} é o valor do potencial no volume ("bulk") e V_{min} o menor valor do potencial. Logo,

$$\Delta t \sim \frac{658,2}{2.000} \approx 0,3 \text{ fs} .$$

Melhores resultados são normalmente garantidos quando[42]

$$\Delta t < \frac{\hbar}{3\Delta V_{max}} \approx 0.1 \text{ fs} .$$

3.3 Solução Autoconsistente da equação de Schrödinger

Conforme seção 2.5 o estudo de um sistema de muitos corpos utilizando a aproximação de Hartree transforma a equação de Schrödinger do sistema em um conjunto de equações de um corpo que se movem em um potencial efetivo. Este potencial efetivo, que é obtido a partir da equação de Poisson, depende, por sua vez, da solução da equação de Schrödinger. Isto transforma a equação de Schrödinger em um problema de autovalores não linear, cuja solução é obtida resolvendo-se autoconsistentemente as equações de Schrödinger e Poisson.

Assim, para resolvermos a equação de Schrödinger pelo método descrito na seção anterior temos que resolver a equação de Poisson a cada evolução temporal. Como esta é uma equação diferencial de segunda ordem a resolveremos pelo método das diferenças finitas usando a equação 3.11. Novamente a solução é reduzida à inversão de uma matriz tridiagonal.

Um esquema da solução da equação de Poisson é dado a seguir. Conforme vimos na seção 2.5, a equação a ser resolvida é

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} N_T(z) , \quad (3.13)$$

onde $N_T(z) = n(z) - N_d(z) + N_a(z)$ é a densidade total de portadores ionizados.

Usando a notação $V_H(z_i) \rightarrow V_i$ e $N_T(z_i) \rightarrow N_i$ juntamente com a equação 3.11, podemos transformar a equação 3.13 na forma

$$\frac{2V_{i-1}}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} - \frac{2V_i}{\Delta_i \Delta_{i-1}} + \frac{2V_{i+1}}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} N_i , \quad (3.14)$$

onde o índice i indica cada ponto da rede (figura 3.1).

Para considerarmos as condições de contorno introduzimos os pontos "0" e " $n+1$ " em nossa rede, com $\Delta_0 = \Delta_1$ e $\Delta_n = \Delta_{n-1}$. Nesses pontos o potencial tem os valores V_0 e V_{n+1} , que discutiremos em seguida.

Assim, para os pontos "1" e " n " a equação 3.14 pode ser escrita como

$$-\frac{2V_1}{\Delta_1\Delta_0} + \frac{2V_2}{\Delta_1(\Delta_1 + \Delta_0)} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon}N_1 - \frac{2V_0}{\Delta_0(\Delta_1 + \Delta_0)} \quad (3.15)$$

$$-\frac{2V_n}{\Delta_n\Delta_{n-1}} + \frac{2V_{n-1}}{\Delta_{n-1}(\Delta_n + \Delta_{n-1})} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon}N_n - \frac{2V_{n+1}}{\Delta_n(\Delta_n + \Delta_{n-1})} \quad (3.16)$$

Logo, a representação matricial das equações 3.14, 3.15 e 3.16 fica

$$\sum_{j=1}^n D_{ij}V_j = R_i \quad ; \quad i = 1, n \quad ,$$

onde,

$$D_{ij} = \begin{cases} \frac{2}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} & \text{se } j = i - 1; \\ -\frac{2}{\Delta_i\Delta_{i-1}} & \text{se } j = i; \\ \frac{2}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} & \text{se } j = i + 1; \\ 0 & \text{outros valores de } j . \end{cases}$$

e,

$$R_i = \begin{cases} -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} N_i & \text{para } i \neq 1, n; \\ -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} N_1 - \frac{V_0}{\Delta_1^2} & \text{para } i = 1; \\ -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} N_n - \frac{V_{n+1}}{\Delta_n^2} & \text{para } i = n; \end{cases}$$

As Condições de contorno necessárias para a solução da equação de Poisson são as seguintes:

- O campo elétrico deve ser nulo no *bulk*, com o potencial sendo dado pelo valor da energia do fundo da banda de condução em relação ao nível de Fermi (a energia de Fermi foi escolhida como referência em nossos cálculos):

$$\frac{dV(z_{bulk})}{dz} = 0 \quad ; \quad V(z_{bulk}) = V_{bulk} = E_c - E_F .$$

O que fazemos na prática é encontrar um valor para $z = z_{bulk}$ tal que $dV(z_{bulk})/dz = 0$ quando $V(z) = E_c - E_F$.

- Para sistemas submetidos a um campo elétrico externo as condições de contorno são diferentes. Para esses sistemas o fundo da banda de condução em relação ao nível de Fermi na superfície é diferente do volume, mas é bem determinado. Neste caso o potencial na superfície da amostra é dado por

$$V_0 = e\phi_T - eV_G \quad , \quad (3.17)$$

onde $e\phi_T$ é chamado de potencial de contato e depende do material usado para fazer o contato metal-semicondutor (barreira Schottky) e V_G é a tensão elétrica externa.

A seguir é dado um esquema dos passos que seguimos para obtermos a solução auto-consistente das equações de Schrödinger e Poisson:

1. Determinamos as condições de contorno V_0 e $V_{n+1} = V_{bulk}$.
2. Escolhemos as funções de onda iniciais $\phi_i(z, t = 0)$. O número de funções iniciais deve ser igual ou maior ao número de estados ocupados.
3. Resolvemos a equação de Poisson obtendo o potencial de Hartree inicial considerando apenas as cargas devido aos íons.
4. Fazemos uma propagação no tempo imaginário, obtendo assim as novas funções de onda $\phi_i(z, t + \Delta t)$.
5. Calculamos as energias $E_i^{t+\Delta t}$, e com elas determinamos a densidade eletrônica.
6. Calculamos o novo potencial de Hartree $V_H^{t+\Delta t}$.
7. Repetimos novamente o processo voltando ao item 4.

Esse processo termina quando a convergência é alcançada, sendo que o critério de convergência adotado neste trabalho foi que a diferença de energia para todos os níveis entre duas propagações consecutivas seja menor que $5 \times 10^{-3} \text{ meV}$, isto é,

$$|E_i^{t+\Delta t} - E_i^t| \leq 0.005 \text{ meV}, \quad i = 1, \dots, n.$$

As características mais importantes desse método de resolver a equação de Schrödinger são:

- Boa estabilidade;
- Rápida convergência;
- Pouco sensível às funções de onda iniciais;
- Permite estudar qualquer poço de potencial;
- Permite estudar transientes quando a propagação é feita no tempo real.

Capítulo 4

Poço Duplo Assimétrico com Dopagem Delta

Estudaremos neste capítulo o sistema formado por dois poços quânticos assimétricos com dopagem delta no centro de cada poço separados por uma barreira de potencial com 50 Å de largura (figura 1.1). Calcularemos os níveis de energia, o número de ocupação em cada sub-banda, a densidade eletrônica total e o potencial efetivo. Veremos então como estas grandezas variam com a temperatura e com a concentração e difusão dos doadores.

Consideraremos que o sistema possui uma concentração residual de impurezas aceitadoras igual a $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ distribuídas uniformemente. Dentro do intervalo de concentração que vai de 10^{14} cm^{-3} a 10^{16} cm^{-3} cálculos para deltas isoladas (no *bulk* de GaAs) mostram que a variação na estrutura eletrônica não é significativa[48].

Na figura 4.1 é mostrado o potencial efetivo e as densidades de probabilidade $|\phi_i(t)|^2$ indicando os respectivos níveis de energia para uma temperatura de 300K. Neste caso a densidade de doadores em cada delta é de $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e a difusão gaussiana dos doadores considerada é de 20Å.

4.1 Efeitos da Difusão dos Doadores

Neste trabalho a difusão dos átomos doadores será considerada como gaussiana. Cálculos para deltas isoladas mostram que a estrutura eletrônica para distribuições gaussianas e uniforme são praticamente equivalentes quando a difusão é menor que 100Å[49]. Conside-

Figura 4.1: Potencial efetivo e densidade de probabilidade para $T = 300K$, $\Delta z = 20 \text{ \AA}$ e $N_d = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em cada poço. É mostrado também a ocupação de cada sub-banda em unidades de 10^{12} cm^{-2} .

raremos também a temperatura igual a zero e a concentração dos átomos doadores igual a $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em cada poço.

As condições de contorno são

$$V_0 = V_{n+1} = 1.757,9 \text{ meV} ,$$

que é o valor da energia do fundo da banda de condução no *bulk* medida em relação ao nível de Fermi para $T = 0K$ (figura 2.1).

A figura 4.2 mostra o potencial efetivo e a densidade eletrônica total para dois valores de difusão dos doadores: $5\text{\AA}$ e $40\text{\AA}$. Na tabela 4.1 são dados os níveis de energia e a ocupação de cada sub-banda. Destes resultados vemos que o potencial torna-se mais suave no fundo de cada poço quando a difusão aumenta, fazendo com que os níveis de energia dos dois primeiros estados subam, abaixando o nível de energia do terceiro estado. Esta aproximação dos níveis de

energia provoca um aumento na ocupação do segundo estado excitado, diminuindo as ocupações do estado fundamental e do primeiro estado excitado. Desta forma há uma transferência de elétrons do poço esquerdo (PE) para o poço direito (PD).

Figura 4.2: Potencial efetivo e densidade eletrônica para uma difusão gaussiana dos doadores de $5 \text{ \AA}$ e $40 \text{ \AA}$ com $T = 0 \text{ K}$ e $N_d = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em cada poço.

Do gráfico da densidade eletrônica vemos que para o PE o confinamento não foi alterado, já que a largura da densidade eletrônica não se modificou, significando que o poço é

que está confinando os elétrons. No entanto, houve um alargamento da densidade eletrônica no PD, revelando que os elétrons estão sendo confinados também pela delta.

DIFUSÃO DOS DOADORES			
$\Delta z=5\text{\AA}$		$\Delta z=40\text{\AA}$	
<i>energia</i> <i>meV</i>	<i>ocupação</i> $10^{12}cm^{-2}$	<i>energia</i> <i>meV</i>	<i>ocupação</i> $10^{12}cm^{-2}$
-153,93	4,27	-149,87	4,16
-148,30	4,12	-145,49	4,04
-32,34	0.90	-39,12	1,09
58,27	0,00	46,53	0,00

OCUPAÇÃO DAS SUB-BANDAS ($10^{12}cm^{-2}$)			
$\Delta z=5\text{\AA}$		$\Delta z=40\text{\AA}$	
PE	PD	PE	PD
4,12	5,17	4,04	5,25

Tabela 4.1

Portanto, a forma do potencial é ligeiramente modificada quando variamos a largura da difusão dos átomos doadores dentro dos poços, havendo uma redistribuição dos elétrons.

4.2 Efeitos da Temperatura

Para verificarmos os efeitos da temperatura consideraremos que a difusão e concentração dos doadores em cada delta são de 20Å e $5 \times 10^{12}cm^{-2}$, respectivamente. Devemos lembrar que as condições de contorno são dependentes da temperatura, conforme vimos nas seções 2.4 e 3.3.

A influência da temperatura no potencial efetivo, níveis de energia e na densidade eletrônica é mostrada na figura 4.3 para temperaturas de 0K e 300K. Na tabela 4.2 apresentamos os níveis de energia e a ocupação de cada sub-banda.

Figura 4.3: Potencial efetivo e densidade eletrônica para temperaturas $T = 0\text{K}$ e $T = 300\text{K}$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$ e $N_d = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ em cada poço. São mostrados também os quatro primeiros níveis de energia para cada temperatura.

Com o aumento da temperatura alguns elétrons são excitados termicamente para sub-bandas de maior energia, passando a ocupar estados acima do nível de Fermi. Desta forma, as ocupações do estado fundamental e primeiro estado excitado diminuem, aumentando a ocupação dos outros níveis.

TEMPERATURA (K)			
0.0		300.0	
<i>energia</i> <i>meV</i>	<i>ocupação</i> $10^{12}cm^{-2}$	<i>energia</i> <i>meV</i>	<i>ocupação</i> $10^{12}cm^{-2}$
-152,63	4,24	-159,85	4,22
-147,44	4,10	-147,78	3,90
-34,48	0,96	-32,77	1,03
54,50	0,00	38,78	0,14
96,14	0,00	76,15	0,03
112,66	0,00	90,13	0,02

OCUPAÇÃO DAS SUB-BANDAS ($10^{12}cm^{-2}$)			
<i>T = 0K</i>		<i>T = 300K</i>	
PE	PD	PE	PD
4,10	5,20	4,09	5,25

Tabela 4.2

4.3 Efeitos da Concentração dos Doadores

Para estudarmos os efeitos da concentração dos doadores consideraremos novamente $T = 0K$ e uma difusão gaussiana dos átomos doadores de 20 Å. Vamos então variar a concentração dos doadores de duas formas; (i) manteremos fixa a concentração no PD, variando a concentração no PE e (ii) vamos variar a concentração dos dois poços de forma que a do PE seja sempre igual à do PD.

A figura 4.4 mostra o potencial efetivo e a densidade eletrônica quando a concentração dos doadores no PD é mantida constante e igual a $2 \times 10^{12} cm^{-2}$.

Figura 4.4: Potencial efetivo e densidade eletrônica para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. A concentração dos átomos doadores no PE varia de zero a $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. No PD concentração é mantida constante e igual a $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Podemos notar uma grande variação na profundidade do potencial com o aumento da densidade dos átomos doadores. O mínimo do potencial no PE passa de $-28,7 \text{ meV}$ para $-338,6 \text{ meV}$ quando a concentração dos doadores neste poço varia de *zero* a $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Do gráfico da densidade eletrônica total observamos que o aumento na densidade dos doadores no PE provoca também um aumento na densidade eletrônica do PD, ocorrendo portanto uma transferência de elétrons do PE para o PD.

Podemos compreender melhor o comportamento do sistema quando variamos a concentração dos doadores através da figura 4.5. Ela nos mostra a dependência dos níveis de energia e da ocupação de cada sub-banda com a concentração dos átomos doadores no PE. As diferentes regiões dos gráficos podem ser analisadas como segue:

- A variação dos níveis de energia e da ocupação com a densidade dos átomos doadores é praticamente linear quando não há "interação" entre os níveis de energia de cada poço.
- Na região entre *zero* e $0,4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ temos apenas uma sub-banda ocupada, com o estado fundamental localizado no PD e o primeiro estado excitado no PE.
- Para uma densidade de doadores maior que $0,4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ o primeiro estado excitado passa a estar ocupado, diminuindo a taxa de crescimento da ocupação do estado fundamental.
- Em torno de $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ocorre uma interação entre os dois primeiros níveis de energia. Nesta região as autofunções dos dois estados ficam distribuídas nos dois poços.
- Para uma concentração maior que $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ o estado fundamental passa a ocupar o PE, com o primeiro estado excitado indo para o PD.
- Para uma densidade de doadores entre $7,1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ mais uma sub-banda no PE passa a estar ocupada, diminuindo a ocupação do primeiro estado excitado.

Figura 4.5: Níveis de energia e ocupação das sub-bandas para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. A concentração dos átomos doadores no PE varia de zero a $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. No PD a concentração é mantida constante e igual a $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Vamos agora considerar o caso em que a concentração nos dois poços são iguais. A figura 4.6 mostra o potencial efetivo e a densidade eletrônica total. Os níveis de energia e ocupação das sub-bandas são mostrados na figura 4.7 em função da concentração de cada poço.

Figura 4.6: Potencial efetivo e densidade eletrônica para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. As concentrações dos átomos doadores são $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em cada poço.

Novamente observamos uma grande variação na profundidade do potencial. O comportamento do sistema neste caso é análogo ao anterior, onde a concentração de um dos poços

foi mantida constante. Entretanto, como a concentração total é maior, a ocupação e o número de sub-bandas ocupadas também é maior.

Figura 4.7: Níveis de energia e ocupação das sub-bandas para $T = 0K$ com uma difusão gaussiana dos doadores de $20\text{\AA}$. A concentração dos átomos doadores no PE é sempre igual à do PD.

Capítulo 5

Efeitos do Campo Elétrico

Neste capítulo vamos estudar os efeitos de uma tensão elétrica aplicada na direção de crescimento da amostra (*direção z*) e da espessura da barreira de potencial entre os dois poços. Vamos calcular o potencial efetivo, as autofunções, os níveis de energia e a ocupação das sub-bandas. Consideraremos que os poços se localizam próximos à superfície do semiconductor, onde é feito um contato metálico para que a tensão elétrica possa ser aplicada (figura 5.1). Para estudarmos os efeitos da barreira entre os dois poços consideraremos duas espessuras para a barreira: $L_B = 50\text{\AA}$ e $L_B = 25\text{\AA}$.

Figura 5.1: Dois poços quânticos assimétricos com dopagem delta no centro dos poços. Na superfície é feito um contato metálico para que uma tensão externa possa ser aplicada.

Determinaremos também os níveis de energia como uma função da tensão elétrica externa com o objetivo de obtermos a tensão necessária para tornar os dois primeiros estados ressonantes.

Vamos considerar novamente que a concentração dos átomos doadores é igual a $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em cada poço, com uma difusão gaussiana de $20 \text{ \AA}$. A concentração dos átomos aceitadores continuará sendo de $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ distribuídas uniformemente em toda a amostra. Consideraremos ainda a temperatura igual a zero Kelvin e a distância da superfície do semicondutor ao poço esquerdo como sendo de $400 \text{ \AA}$.

Vimos na seção 3.3 que as condições de contorno necessárias para resolvermos auto-consistentemente as equações de Schrödinger e Poisson dependem do valor do potencial na superfície, V_0 , e no *bulk*, V_{n+1} . O valor de V_{n+1} é igual à energia do fundo da banda de condução no *bulk*, medida em relação ao nível de Fermi. O valor de V_0 é determinado pela barreira de potencial gerada pelo contato metal-semicondutor e pela tensão elétrica aplicada ao contato (equação 3.17). Para o contato $Au - Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, o valor da barreira de potencial em relação ao nível de Fermi foi considerado de $1,0 \text{ eV}$ [50].

5.1 Efeitos do Campo Elétrico e da Espessura da Barreira

Veremos inicialmente como o sistema responde a uma tensão elétrica externa. Nas figuras 5.2 e 5.3 mostramos o potencial efetivo e a densidade eletrônica para quatro valores de tensão elétrica ($-350, 0, 350$ e 700 mV) para barreiras de potencial de $25 \text{ \AA}$ e $50 \text{ \AA}$ de espessura, respectivamente.

Podemos observar que a forma do potencial efetivo no PE, que está mais próximo da superfície, tem sua forma modificada pela presença da tensão elétrica, com o fundo do poço abaixando em aproximadamente 60 meV quando a tensão elétrica aumenta de -350 mV para

Figura 5.2: Potencial efetivo e densidade eletrônica para quatro valores de tensão elétrica: -350, 0, 350 e 700 mV. A espessura da barreira é de 25 $\text{\AA}$.

Figura 5.3: Potencial efetivo e densidade eletrônica para quatro valores de tensão elétrica: -350, 0, 350 e 700 mV. A espessura da barreira é de $50 \text{ \AA}$.

700 mV. Já o PD praticamente não se altera quando variamos a tensão elétrica neste mesmo intervalo.

Este aprofundamento no potencial efetivo provoca um aumento na densidade eletrônica que tenta blindar a tensão elétrica externa de forma a minimizar seu efeito. Por esse motivo a variação do potencial efetivo no poço ($\sim 60 \text{ meV}$) é bem menor que na superfície ($\sim 1.000 \text{ meV}$).

A influência da espessura da barreira pode ser observada comparando a densidade eletrônica nas figuras 5.2 e 5.3. A modificação na densidade eletrônica no PD é ligeiramente maior para a barreira de $25\text{\AA}$, indicando, como esperado, que existe um maior acoplamento entre os poços neste caso (dizemos que existe um acoplamento entre os poços quando a autofunção de um poço penetra no poço adjacente). Vemos também que a densidade eletrônica dentro da barreira é maior quando $L_B = 25\text{\AA}$. Isso ocorre porque a penetração das autofunções na barreira e no outro poço é maior quando a espessura da barreira é de $25\text{\AA}$.

A figura 5.4 mostra as autofunções dos três primeiros níveis de energia para dois valores de tensão elétrica: -350 mV e 700 mV . Os gráficos (a), (b) e (c) são para $L_B = 25\text{\AA}$, enquanto (d), (e) e (f) são para $L_B = 50\text{\AA}$. Os níveis de energia e a ocupação das sub-bandas para os quatro valores de tensão elétrica (V_G) são mostrados na tabela 5.1. Podemos observar que a energia de todas as quatro primeiras sub-bandas diminuem quando aumentamos a tensão elétrica externa e, conseqüentemente, a ocupação de cada uma delas aumenta. Isto é uma conseqüência direta do comportamento do potencial efetivo que se aprofunda com o aumento da tensão elétrica.

Outro efeito da espessura da barreira pode ser visto a partir do aumento na ocupação de cada sub-banda. Esse aumento é devido à transferência de elétrons da superfície metálica para o semicondutor (quando aumentamos a tensão elétrica elétrons são transferidos do metal para o semicondutor e, quando diminuimos, elétrons são transferidos do semicondutor para o

metal). O estado fundamental e o segundo estado excitado, que se localizam no PD, têm um maior aumento em suas ocupações quando $L_B = 25\text{\AA}$. Ao contrário, o aumento na ocupação do primeiro estado excitado, que se localiza no PE, é maior quando $L_B = 50\text{\AA}$. Portanto, quando aumentamos V_G de -350 mV para 700 mV ocorre uma maior transferência de elétrons do PE para o PD quando $L_B = 25\text{\AA}$.

$L_B = 25\text{\AA}$						
<i>Tensão Elétrica</i> mV	Estado Fundamental		1º Estado Excitado		2º Estado Excitado	
	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}
-350,0	-141,47	3,930	-68,85	1,913	-35,92	0,998
0,0	-143,58	3,988	-89,35	2,482	-40,23	1,117
350,0	-145,88	4,052	-110,45	3,068	-43,88	1,219
700,0	-148,64	4,129	-131,40	3,650	-47,36	1,315

$L_B = 50\text{\AA}$						
<i>Tensão Elétrica</i> mV	Estado Fundamental		1º Estado Excitado		2º Estado Excitado	
	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}
-350,0	-147,12	4,087	-71,61	1,989	-27,16	0,755
0,0	-148,75	4,132	-94,57	2,627	-29,43	0,818
350,0	-150,43	4,179	-117,54	3,265	-31,75	0,882
700,0	-152,17	4,227	-140,52	3,903	-34,12	0,948

Tabela 5.1

Figura 5.4: Autofunções correspondentes aos três primeiros estados para tensões elétricas de -350,0 mV e 700,0 mV. Os gráficos (a), (b) e (c) são para $L_B = 25 \text{ Å}$ e os gráficos (d), (e) e (f) são para $L_B = 50 \text{ Å}$.

5.2 Tunelamento Ressonante

Vamos agora estudar o tunelamento ressonante de elétrons entre os dois poços. A influência da tensão elétrica sobre os dois primeiros níveis de energia é mostrado na figura 5.5 para barreiras com espessuras de $25\text{\AA}$ e $50\text{\AA}$. Podemos observar uma maior “interação” entre os níveis de energia quando $L_B = 25\text{\AA}$. Isto já era esperado, pois, neste caso o acoplamento entre os dois poços é maior. Caso esse acoplamento não existisse os níveis de energia iriam se cruzar.

Figura 5.5: Influência da tensão elétrica externa sobre os dois primeiros níveis de energia do sistema. As linhas contínuas e tracejadas são para barreiras de $25\text{\AA}$ e $50\text{\AA}$ de espessura, respectivamente.

A tensão elétrica necessária para tornar os dois primeiros níveis de energia ressonantes corresponde àquela para o qual a aproximação dos níveis é máxima. Na ressonância as auto-

funções dos dois estados encontram-se distribuídas nos dois poços, com suas posições médias $\langle Z_i \rangle = \langle \phi_i | Z | \phi_i \rangle$ sendo iguais.

Portanto, uma forma de determinar a tensão elétrica necessária para tornar ressonante os dois primeiros níveis de energia é calcular a posição média das autofunções como uma função da tensão elétrica externa V_G . Na figura 5.6 mostramos a variação de $\langle Z_i \rangle$ com V_G para barreiras de 25Å e 50Å, de onde tiramos que os valores de V_G na ressonância são de 969,5 mV e 890,8 mV, respectivamente.

Figura 5.6: Influência da tensão elétrica externa sobre os valores médios das autofunções dos dois primeiros níveis de energia do sistema. As linhas contínuas e tracejadas são para barreiras de 25Å e 50Å de espessura, respectivamente.

Nas figuras 5.7 e 5.8 mostramos as autofunções dos três primeiros níveis de energia e a densidade eletrônica total no estado ressonante. Os níveis de energia e ocupação das sub-bandas são mostrados na tabela 5.2.

$L_B = 25\text{\AA}$ $V_G = 969,5\text{ mV}$					
Estado Fundamental		1º Estado Excitado		2º Estado Excitado	
<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}
-153,21	4,256	-145,18	4,033	-50,06	1,391

$L_B = 50\text{\AA}$ $V_G = 890,8\text{ mV}$					
Estado Fundamental		1º Estado Excitado		2º Estado Excitado	
<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}
-153,70	4,269	-152,51	4,236	-35,45	0,985

Tabela 5.2

Como dissemos anteriormente, as autofunções dos níveis ressonantes estão distribuídas nos dois poços. O efeito do acoplamento entre os poços, isto é, da espessura da barreira, pode também ser notado.

Figura 5.7: Autofunções dos três primeiros níveis de energia e densidade eletrônica total no estado ressonante para $L_B = 25\text{\AA}$.

Para a barreira de $50\text{\AA}$ as autofunções ressonantes praticamente coincidem, com o estado fundamental quase se anulando dentro da barreira. Observamos também que a penetração da autofunção do segundo estado excitado no PE é maior quando $L_B = 25\text{\AA}$.

Figura 5.8: Autofunções dos três primeiros níveis de energia e densidade eletrônica total no estado ressonante para $L_B = 50\text{\AA}$.

O efeito da tensão elétrica para valores de V_G próximos à ressonância sobre as autofunções correspondentes aos três primeiros níveis de energia é mostrado nas figuras 5.9 e 5.10. Na tabela 5.3 são dadas as energias e ocupações das sub-bandas. Para $L_B = 50\text{\AA}$ e $V_G = 790,8 \text{ mV}$ as autofunções correspondentes ao estado fundamental e ao primeiro

estado excitado se localizam no PD e PE, respectivamente. Na ressonância, isto é, quando $V_G = 890,8\text{ mV}$, estas autofunções se distribuem nos dois poços. Para $V_G = 990,8\text{ mV}$ a autofunção correspondente ao estado fundamental está no PE, e a do primeiro estado excitado no PD. Assim, variando V_G de $790,8\text{ mV}$ para $990,8\text{ mV}$ (200 mV) estas autofunções passam de um poço para outro.

Quando a espessura da barreira é de $25\text{\AA}$ o comportamento do sistema é semelhante ao descrito anteriormente, entretanto, as autofunções não se localizam em um único poço mesmo para variações de V_G iguais a $\pm 200\text{ mV}$ em torno do seu valor de ressonância. Portanto, vemos que o sistema é fortemente influenciado pela espessura da barreira (com a qual podemos aumentar ou diminuir o acoplamento entre os poços) e pela tensão elétrica externa, principalmente para aqueles estados que estão próximos à ressonância (as autofunções correspondentes ao segundo estado excitado não foram modificadas neste intervalo de variação de V_G).

$L_B = 25\text{\AA}$						
<i>Tensão Elétrica</i> mV	Estado Fundamental		1º Estado Excitado		2º Estado Excitado	
	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}
769,5	-149,37	4,149	-135,40	3,761	-48,05	1,335
969,5	-153,21	4,256	-145,18	4,033	-50,06	1,391
1169,5	-156,20	4,339	-147,39	4,094	-54,99	1,527

$L_B = 50\text{\AA}$						
<i>Tensão Elétrica</i> mV	Estado Fundamental		1º Estado Excitado		2º Estado Excitado	
	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}	<i>energia</i> meV	<i>ocupação</i> 10^{12}cm^{-2}
790,8	-152,65	4,240	-146,41	4,067	-34,75	0,965
890,8	-153,70	4,270	-152,51	4,236	-35,45	0,985
990,8	-159,69	4,436	-153,55	4,265	-36,15	1,004

Tabela 5.3

Figura 5.9: Efeito da tensão elétrica sobre as autofunções dos três primeiros estados do sistema para valores de V_G próximos ao ressonante. A espessura da barreira é de 25Å.

Figura 5.10: Efeito da tensão elétrica sobre as autofunções dos três primeiros estados do sistema para valores de V_G próximos ao ressonante. A espessura da barreira é de 50Å.

5.3 Transistor de Velocidade Modulada

Uma possível aplicação para o sistema estudado nesse trabalho é o transistor de velocidade modulada (Velocity-Modulation Transistor – VMT) inicialmente proposto por Sakaki[31]. Em um transistor de efeito de campo convencional (Field-Effect Transistor – FET) a condutividade entre fonte e dreno é controlada pela densidade de portadores induzida em um canal por uma tensão elétrica aplicada em um terceiro terminal (*gate*). Este princípio envolve uma redistribuição lateral dos portadores no canal, levando algum tempo para ser realizado. Para evitar essa limitação intrínseca do FET Sakaki propôs o VMT, onde a idéia é controlar a condutividade no canal controlando a mobilidade dos elétrons, enquanto o número de elétrons permanece aproximadamente constante. Para que o VMT funcione com as características desejadas sua estrutura deve ser tal que a tensão elétrica aplicada no gate influencie muito mais na mobilidade dos portadores do que na concentração.

Posteriormente Vinter e Tardella[32] propuseram uma estrutura que poderia ser usada como um VMT com uma capacidade de modulação muito melhor que a proposta inicialmente por Sakaki, e ainda apresentava transcondutância negativa. A característica principal desse dispositivo é a existência de um duplo canal com mobilidades diferentes separados por uma barreira de potencial suficientemente fina de modo a permitir o tunelamento de elétrons entre os dois canais. Nesse sistema os elétrons são confinados de forma mais eficiente em cada canal, permitindo uma maior variação da mobilidade quando comparada com a estrutura sem barreira. Entretanto, se a barreira é muito larga a transferência de elétrons através dela será lenta, e a finalidade do VMT poderá não ser alcançada.

O tunelamento ressonante desempenha um papel importante nesse sistema. Se o único efeito de aumentar a tensão elétrica externa fosse adicionar elétrons de baixa mobilidade no canal dopado a mobilidade média decresceria, mas a condutividade ainda aumentaria e a

transcondutância permaneceria positiva. Entretanto, o tunelamento ressonante mistura os dois estados, com ambos tendo uma grande probabilidade de ocupação no canal dopado, produzindo uma forte redução na mobilidade total. Torna-se possível dessa forma ocorrer um decréscimo na condutividade com aumento na densidade eletrônica, isto é, uma transcondutância negativa para um certo intervalo de tensão elétrica no gate. Deve ser observado que esse efeito não é baseado em uma transferência de carga (*Real Space Transfer*) entre os canais, mas sim na natureza ondulatória dos estados eletrônicos que, dependendo de V_G , se estendem sobre os dois poços, estando sujeitos às propriedades de transporte de ambos.

Vários trabalhos foram publicados na tentativa de se encontrar uma estrutura onde o efeito da transcondutância fosse grande o bastante para tornar possível sua aplicação. Palevski *et al.*[29] verificaram experimentalmente (para temperaturas menores que 50K) a existência de um pico na resistência elétrica de um sistema formado por um poço duplo simétrico quando as propriedades de transporte nos dois poços são diferentes. Chen *et al.*[30] verificaram o efeito de transcondutância negativa e de uma corrente de dreno tipo função passo em uma estrutura similar àquela proposta por Vinter. Degani e Scalvi[55] propuseram uma estrutura onde um dos canais (o de baixa mobilidade) é obtido por dopagem delta, de onde verificaram teoricamente o efeito de transcondutância negativa mesmo à temperatura ambiente. Ohno *et al.*[12] observaram experimental e teoricamente que se pode obter uma grande modulação na condutividade, incluindo o efeito de transcondutância negativa, a baixas temperaturas inserindo impurezas de forma apropriada em um dos canais no sistema formado por um duplo poço.

Faremos então uma simulação desse dispositivo usando a estrutura estudada nesse trabalho. Para isso consideraremos que apenas o PE esteja dopado e com uma concentração de átomos doadores igual a $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Consideraremos ainda que a espessura da barreira de potencial seja igual a 30Å. Esses parâmetros foram escolhidos de tal forma que o dispositivo apresente as características de mobilidade modulada e transcondutância negativa. Considera-

remos ainda a temperatura igual a zero Kelvin e uma concentração residual de aceitadores igual a $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Vamos calcular a condutividade σ em função da tensão elétrica V_G usando um modelo semelhante ao descrito por Degani e Scalvi[55]. A condutividade será calculada a partir da expressão

$$\sigma = e\{\zeta(n_1 + n_2)\mu_{12} + (1 - \zeta)[(n_1\mu_2 + n_2\mu_1 - n_1\mu_1 - n_2\mu_2)\Theta(V_G - V_R) + n_1\mu_1 + n_2\mu_2]\},$$

onde e é a carga do elétron, V_R é a tensão elétrica ressonante e n_1 e n_2 são as densidades eletrônicas do estado fundamental e do primeiro estado excitado, respectivamente. $\Theta(x)$ é a função degrau definida na seção 2.3.1, μ_1 a mobilidade no poço não dopado (PD) e μ_2 a mobilidade no poço dopado (PE). A mobilidade efetiva μ_{12} é dada por

$$\mu_{12}^{-1} = \mu_1^{-1} + \mu_2^{-1}.$$

A função ζ descreve o acoplamento entre os estados e é definida como

$$\zeta = 2\{1 + \exp[(\Delta\varepsilon - \varepsilon_{21})/\Gamma]\}^{-1},$$

onde ε_{21} é a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental na ressonância (onde o acoplamento é máximo) e $\Delta\varepsilon$ é a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental para um dado V_G . Esta função interpola dois diferentes regimes. Quando os estados estão localizados em canais independentes $\zeta \rightarrow 0$, e a resistência pode ser determinada usando a regra clássica para uma configuração em paralelo. Por outro lado, quando os estados estão distribuídos em ambos os poços na condição de ressonância $\zeta = 1$ e a mobilidade total corresponderá a uma configuração em série, sendo igual à mobilidade efetiva μ_{12} . Γ é um parâmetro que controla a largura da função ζ , devendo ser usado para ajustar a

teoria à experiência. A mobilidade no PD será considerada igual a $\mu_1 = 2 \times 10^5 \text{ cm}^2/Vs$ [31], e no PE $\mu_2 = 1,5 \times 10^3 \text{ cm}^2/Vs$ [56].

Na figura 5.11 mostramos a condutividade em função da tensão elétrica aplicada para dois valores de Γ ; $1,0 \text{ meV}$ e $2,0 \text{ meV}$. Para compreendermos melhor o comportamento do sistema o analisaremos em intervalos de V_G . Para facilitar nossa análise apresentamos na figura 5.12 o potencial efetivo e as densidades de probabilidade $|\phi_i|^2$ das quatro primeiras sub-bandas para três valores de V_G ; $230,0 \text{ mV}$, $345,6 \text{ mV}$ (ressonância) e $460,0 \text{ mV}$. Mostramos ainda a ocupação de cada sub-banda em unidades de 10^{12} cm^{-2} . Os níveis de energia e ocupação das sub-bandas como uma função de V_G são mostrados na figura 5.13. A linha tracejada nos fornece a ocupação total.

Figura 5.11: Condutividade do VMT como uma função da tensão elétrica aplicada V_G .

Figura 5.12: Potencial efetivo e densidades de probabilidade das quatro primeiras sub-bandas do VMT para três valores de V_G ; 230,0 mV, 345,6 mV (ressonância) e 460,0 mV. Indicamos também a ocupação de cada sub-banda em unidades de 10^{12} cm^{-2} .

Figura 5.13: Níveis de energia e ocupação das sub-bandas no VMT como uma função de V_G . A linha tracejada nos fornece a ocupação total.

Quando V_G é menor que 70 mV não há nenhuma sub-banda ocupada, de modo que a condutividade do VMT é nula.

Para V_G entre 70 mV e 240 mV apenas a sub-banda correspondente ao poço de maior mobilidade (PD) está ocupada. Neste intervalo a densidade eletrônica e, conseqüentemente, a condutividade aumentam linearmente com a tensão elétrica.

Para V_G maior que 240 mV mais uma sub-banda é ocupada, aumentando a densidade eletrônica total. Entretanto, no intervalo entre 240 mV e 430 mV as autofunções dos dois primeiros estados se estendem sobre os dois poços devido ao tunelamento através da barreira de potencial, sendo este efeito maximizado na ressonância, quando $V_G = 345,6\text{ mV}$. Neste caso todos os elétrons interagem fortemente com os doadores ionizados localizados no PE, diminuindo a condutividade do transistor (transcondutância negativa).

Aumentando V_G além de 430 mV esses dois níveis se desacoplam, e suas autofunções tornam-se localizadas em cada poço. Conseqüentemente, para V_G maior que 430 mV a condutividade volta a aumentar com o aumento da tensão elétrica. Devemos observar que nesse intervalo a taxa de crescimento da condutividade é menor que a inicial. Isto ocorre porque o estado fundamental, que possui maior ocupação, agora está localizado no poço que possui menor mobilidade.

5.3.1 Evolução Temporal do Sistema – Transiente

Vamos estimar o tempo de resposta do dispositivo fazendo a evolução temporal do sistema. Para isso consideraremos o sistema inicialmente no equilíbrio com $V_G = 230,0\text{ mV}$. Mudaremos então a tensão elétrica externa para $345,6\text{ mV}$, correspondendo à situação de ressonância dos dois primeiros níveis de energia, e verificaremos como as funções de onda e a densidade eletrônica evoluem no tempo.

As posições médias das funções de onda dos três primeiros níveis de energia como uma função do tempo t são mostradas na figura 5.14. A linha tracejada nos fornece a posição média da densidade eletrônica total. Na figura 5.15 apresentamos as densidades de probabilidade dos estados ressonantes para $t = 0, 100, 200$ e 300 fs.

Figura 5.14: Posições médias das funções de onda dos três primeiros níveis de energia como uma função do tempo quando a tensão elétrica passa de $230,0 \text{ mV}$ para $345,6 \text{ mV}$. A linha tracejada nos fornece a posição média da densidade eletrônica total.

Observamos que os elétrons pertencentes aos estados ressonantes oscilam entre os dois poços com uma frequência bem determinada, enquanto o terceiro estado permanece localizado no PD.

A frequência de oscilação da densidade eletrônica obtida a partir da figura 5.14 é $\omega = 15,5 \text{ THz}$, estando em bom acordo com o resultado fornecido pela expressão $\omega = 2\pi/\tau_{osc} =$

$\Delta\varepsilon/\hbar = 13,3 \text{ THz}$, onde τ_{osc} é o período de oscilação da densidade eletrônica e $\Delta\varepsilon$ é a diferença de energia dos estados ressonantes.

Figura 5.15: Densidades de probabilidade dos estados ressonantes para $t = 0, 100, 200$ e 300 fs . A linha contínua corresponde ao estado fundamental e a tracejada ao primeiro estado excitado.

Capítulo 6

Efeitos do campo magnético

Neste capítulo vamos estudar os efeitos de um campo magnético constante e uniforme $\vec{B}$ aplicado perpendicularmente à direção de crescimento (direção z) para o sistema poço duplo assimétrico com dopagem delta para diferentes valores na tensão elétrica externa V_G .

Primeiramente mostraremos como o Hamiltoniano que descreve o movimento dos elétrons é modificado quando um campo magnético $\vec{B} = B\hat{y}$ é aplicado ao sistema e que modificações são necessárias fazer para usarmos o método descrito no capítulo 3 para resolvermos este problema. Em seguida apresentaremos os resultados obtidos.

Não consideraremos o caso em que $\vec{B}$ esteja na direção de crescimento, pois, as autofunções no plano perpendicular (plano dos doadores) são completamente independentes das autofunções da direção z , sendo aqueles estados quantizados nos níveis de Landau. Cálculos mostram que o potencial autoconsistente $V_H(z)$ não é modificado pelo campo magnético e, conseqüentemente, os níveis de energia e densidade eletrônica também permanecem inalterados[51, 52].

6.1 Considerações Teóricas

O Hamiltoniano para o sistema em estudo sujeito a um campo magnético $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ pode ser escrito como(ver equação 2.19)

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left[-i\hbar \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + V_H(z) + V_{xc}(z) + \Delta V_c(z) , \quad (6.1)$$

onde a interação do campo magnético com o spin do elétron não está sendo considerada [Apêndice C].

O potencial vetor $\vec{A}$, definido como um ente cujo rotacional é $\vec{B}$, pode ser escrito de diferentes maneiras para um dado campo magnético, não tendo efeito sobre qualquer resultado físico. Para um campo magnético constante e uniforme na direção do eixo y uma forma conveniente para o potencial vetor é

$$\vec{A} = Bz\vec{x},$$

onde $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$. Com esta escolha o Hamiltoniano (6.1) pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2m_e^*(z)} \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eB}{c} z \right]^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_e^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V_H(z) + V_{xc}(z) + \Delta V_c(z) . \quad (6.2)$$

As soluções da equação de Schrödinger para este Hamiltoniano são dadas por [Apêndice D]

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \phi_{nk_x}(z) , \quad (6.3)$$

com $\phi_{nk_x}(z)$ sendo as soluções da equação de Schrödinger unidimensional

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_e^*(z)} \frac{d}{dz} + V_H(z) + V_{xc}(z) + \Delta V_c(z) + \frac{1}{2} m_e^*(z) \omega_c^2 (z - z_0)^2 \right] \phi_{nk_x}(z) = \varepsilon_n(k_x) \phi_{nk_x}(z) , \quad (6.4)$$

onde $\varepsilon_n(k_x)$ nos fornece a energia da n -ésima sub-banda para um dado k_x ($k_y = 0$) e

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e^*(z)c} \quad (\text{frequência ciclotrônica}) ; \quad (6.5)$$

$$z_0 = -\frac{\hbar ck_x}{eB} = -\ell_c^2 k_x ; \quad (6.6)$$

Na equação 6.6 z_0 é o centro do potencial parabólico gerado pelo campo magnético e ℓ_c o raio da menor órbita ciclotrônica do elétron. Da definição de z_0 observamos que ele é proporcional ao vetor de onda k_x , existindo portanto um acoplamento nas direções x e z segundo a relação de dispersão $\varepsilon_n(k_x)$.

Para obtermos a estrutura eletrônica do sistema sob a ação de um campo magnético externo devemos portanto resolver a equação de Schrödinger unidimensional 6.4 autoconsistentemente com a equação de Poisson. Para isso podemos usar o mesmo procedimento descrito no capítulo 3 com as seguintes modificações:

a) Na equação 6.4 os valores de k_x são contínuos, logo, temos um número infinito de equações.

O que fizemos então foi discretizar o *espaço k* na direção do eixo k_x e considerar apenas aqueles vetores de onda cujas ocupações fossem diferentes de zero. A equação de Schrödinger unidimensional 6.4 foi então resolvida para cada valor de k_x .

b) A densidade eletrônica necessária para resolver a equação de Poisson agora é calculada da seguinte forma[Apêndice E]:

$$n(z) = \sum_n \sum_{k_x} N_{nk_x} |\phi_{n,k_x}(z)|^2 , \quad (6.7)$$

onde N_{nk_x} é o número de elétrons por unidade de área que ocupam a n -ésima sub-banda entre k_x e $k_x + \Delta k_x$,

$$N_{nk_x} = \frac{\sqrt{2m_e^* kT}}{2\pi^2 \hbar} \Delta k_x F_{-\frac{1}{2}}(\eta_n), \quad (6.8)$$

onde $\eta_n = [\varepsilon_F - \varepsilon_n(k_x)]/kT$, m_e^* é a massa efetiva do elétron no GaAs e $F_j(\eta_n)$ é a integral de Fermi-Dirac definida pela equação 2.16. Esta integral foi calculada numericamente usando a aproximação de Aymerich-Humet *et al*[53].

6.2 Campo Magnético Perpendicular

Para verificarmos os efeitos de um campo magnético uniforme perpendicular à direção de crescimento consideraremos a temperatura igual a zero Kelvin e uma concentração residual de aceitadores igual a $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. A concentração dos átomos doadores será considerada igual a $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em cada delta com uma difusão gaussiana de $20 \text{ \AA}$, e a espessura da barreira de potencial que separa os dois poços como sendo de $50 \text{ \AA}$.

A relação de dispersão $\varepsilon_n(k_x)$ das quatro primeiras sub-bandas é apresentada na figura 6.1 para uma tensão elétrica $V_G = 700 \text{ mV}$ e para quatro valores de campo magnético: 0, 5T, 10T e 20T.

Podemos observar que a forma da relação de dispersão $\varepsilon_n(k_x)$ é influenciada de forma significativa pela presença do campo magnético. Para $B = 0$ a relação de dispersão é parabólica. Quando aumentamos B até $20T$ observamos um deslocamento para a esquerda nas sub-bandas correspondentes aos níveis de energia localizados no PD (estado fundamental e segundo estado excitado) e um deslocamento para a direita nas sub-bandas correspondentes aos níveis de

Figura 6.1: Relação de dispersão para o sistema poço duplo assimétrico com dopagem delta para uma tensão elétrica de 700 mV e quatro valores de campo magnético: 0, 5T, 10T e 20T. $k_0 = 1/a_0^* = 0.009535 \text{ \AA}^{-1}$. As energias foram calculadas em relação ao nível de Fermi.

energia localizados no PE (primeiro e terceiro estados excitados). Isto ocorre porque o centro do potencial parabólico produzido pelo campo magnético, z_0 , é proporcional a k_x (equação 6.6).

Como consequência ocorre uma aproximação entre as diferentes sub-bandas produzindo estados ressonantes para $k_x \neq 0$. O não cruzamento das sub-bandas é devido ao acoplamento entre os poços. Nessas regiões as autofunções estão distribuídas nos dois poços, formando canais para o magnetotunelamento.

Com a modificação na forma da relação de dispersão na direção k_x provocada pela presença do campo magnético a massa efetiva eletrônica é completamente alterada nessa direção, sendo agora dependente da energia do elétron. Analizando a figura 6.1 observamos que existem regiões onde a massa efetiva do elétron será negativa ou até mesmo infinita. Na tabela 6.1 apresentamos os valores da massa efetiva para k_x correspondentes aos mínimos de energia de cada sub-banda.

$m_e^*/m_0 - V_G = 700 \text{ mV}$				
$B \text{ (T)}$	1 ^a	2 ^a	3 ^a	4 ^a
0,0	0,06696	0,06917	0,06944	0,08033
5,0	0,06734	0,04872	0,06971	0,08749
10,0	0,06892	0,02411	0,06980	0,09726
20,0	0,07232	0,01789	0,02389	0,06098

Tabela 6.1

Caso não houvesse interação entre as diferentes sub-bandas localizadas nos diferentes poços esperaríamos que a massa efetiva sempre aumentasse com o aumento do campo magnético, como ocorre com a primeira sub-banda. Entretanto, nas regiões onde ocorrem as interações este comportamento não é obedecido.

O motivo de esperarmos que a massa efetiva eletrônica aumente com o campo magnético pode ser compreendido analisando-se a equação 6.4. O potencial devido à presença do campo

magnético é parabólico, correspondendo a um oscilador harmônico centrado em z_0 . Na ausência do potencial de confinamento, isto é, $V_H(z) + V_{xc}(z) + \Delta V_c(z) = 0$, e campo magnético diferente de zero, a energia não depende de $z_0 = \ell_c^2 k_x$,

$$\varepsilon_n(k_x) = \varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c ,$$

de forma que o sistema é degenerado, isto é, a relação de dispersão torna-se plana. Para um confinamento diferente de zero a degenerescência é levantada e a energia passa a depender de k_x .

Outra característica desse sistema que podemos observar da tabela 6.1 é que o valor da massa efetiva para campo magnético nulo é diferente em cada sub-banda, sendo isso uma consequência da diferença da massa efetiva eletrônica no *AlGaAs* e *GaAs*.

Figura 6.2: Ocupação das sub-bandas como função do campo magnético externo para uma tensão elétrica de 700 mV.

A ocupação das sub-bandas em função do campo magnético é mostrado na figura 6.2. Podemos observar que a população do estado fundamental aumenta linearmente com o campo magnético, enquanto nos estados excitados as ocupações diminuem. Este comportamento pode ser compreendido a partir da figura 6.1. Para o estado fundamental quanto maior o valor do campo magnético maior é o valor de k_x que fornece ocupação diferente de zero, ao contrário do que ocorre com os estados excitados. Outro fator que contribui para este comportamento é o valor da energia $\varepsilon_n(k_x)$ em relação ao nível de Fermi. Para $T = 0K$ a ocupação é dada por

$$N_{nk_x} = \frac{\sqrt{2m_e^*}}{\pi^2 \hbar} \Delta k_x \sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_n(k_x)}, \quad (6.9)$$

sendo maior a ocupação para menores níveis de energia.

Vamos verificar agora como a tensão elétrica externa modifica a relação de dispersão quando um campo magnético igual a $20T$ é aplicado ao sistema. Consideraremos três valores para a tensão elétrica: 500, 700 e 900 mV.

O resultado é mostrado na figura 6.3, de onde podemos observar que a influência da tensão elétrica sobre uma dada sub-banda depende do valor de k_x . Conforme discutimos na seção 5.1 a influência da tensão elétrica sobre o sistema é maior no PE. Da tabela 5.1 observamos para $L_B = 50\text{\AA}$ que a variação dos níveis localizados no PD é da ordem de 2 meV quando a tensão elétrica varia de 350 mV. Por outro lado, para os níveis de energia localizados no PE a variação é maior que 20 meV. Deste resultado e da figura 6.3 podemos então determinar para cada k_x em qual poço de potencial estão localizados os estados nas respectivas sub-bandas, e portanto verificarmos que nas regiões onde ocorrem as interações entre as sub-bandas formam-se canais para o magnetotunelamento dos elétrons.

Figura 6.3: Influência da tensão elétrica sobre a relação de dispersão para um campo magnético de 20 T. Consideramos três valores para a tensão elétrica: 500, 700 e 900 mV. $k_0 = 1/a_0^* = 0.009535 \text{ \AA}^{-1}$. As energias foram calculadas em relação ao nível de Fermi.

Capítulo 7

Conclusão

Calculamos a estrutura eletrônica do sistema composto por dois poços quânticos assimétricos com dopagem delta no centro de cada poço usando a teoria do funcional densidade na aproximação de densidade local, com a equação de Schrödinger sendo resolvida numericamente usando-se a técnica do “split-operator”[42, 43]. Calculamos o potencial efetivo, os níveis de energia, a ocupação das sub-bandas e a densidade eletrônica total em função de vários parâmetros; temperatura, espessura da barreira de potencial que separa os dois poços, concentração e difusão das impurezas ao longo da direção de crescimento. Processos de espalhamento não foram considerados. Observamos também como as propriedades eletrônicas são influenciadas pela presença de um campo elétrico aplicado na direção de crescimento e de um campo magnético aplicado perpendicularmente a essa direção.

Observamos que a estrutura eletrônica é pouco influenciada pela temperatura e pela difusão (considerada gaussiana) dos doadores. Quando variamos a espessura da difusão dos doadores de 5Å para 40Å a forma do potencial efetivo foi ligeiramente modificada, provocando um pequeno aumento na ocupação do poço direito (PD), e uma pequena redução na ocupação do poço esquerdo (PE). Por outro lado, aumentando a temperatura de 0 para 300K alguns elétrons são excitados termicamente para sub-bandas de maior energia, passando a ocupar estados acima do nível de Fermi. Observamos uma pequena redução nas ocupações do estado fundamental e do primeiro estado excitado, aumentando a ocupação do outros estados.

Notamos que a estrutura eletrônica é muito influenciada pela variação da concentração dos átomos doadores. Mostramos que a variação dos níveis de energia e ocupação das sub-bandas é praticamente linear com a variação da concentração das impurezas doadoras nas regiões onde não ocorre interação entre os estados de cada poço.

Consideramos em seguida o caso em que o sistema está localizado próximo da superfície, onde é feito um contato Schottky para a aplicação de uma tensão elétrica V_G . Mostramos então que a forma do potencial efetivo no PE, que está mais próximo da superfície, é bem mais influenciada pela variação da tensão elétrica que a do PD. Com o aumento da tensão elétrica o potencial efetivo se aprofunda, diminuindo o valor dos níveis de energia e, conseqüentemente, aumentando a ocupação de cada um deles.

Determinamos a tensão elétrica necessária para tornar ressonante os dois primeiros níveis de energia. Esta corresponde à região de maior aproximação desses níveis, com as autofunções estando distribuídas nos dois poços, isto é, com suas posições médias sendo iguais. Verificamos em seguida que variando V_G em torno da tensão elétrica ressonante podemos transformar as autofunções eletrônicas de estados isolados (confinados em um dos poços) para estados deslocalizados.

Estudamos também a influência da espessura da barreira de potencial que separa os dois poços. Consideramos dois valores; $L_B = 25\text{\AA}$ e $L_B = 50\text{\AA}$. Como esperado, verificamos um maior acoplamento entre os poços quando $L_B = 25\text{\AA}$, sendo também maior a densidade eletrônica no interior da barreira.

Uma possível aplicação desse sistema foi analisada. Verificamos que escolhendo de forma apropriada alguns parâmetros do sistema, tais como concentração dos átomos doadores e espessura da barreira de potencial, este apresenta propriedades de mobilidade modulada e transcondutância negativa.

Consideramos ainda a influência de um campo magnético aplicado perpendicularmente

à direção de crescimento. Nossos resultados mostram que o sistema é bastante influenciado pela presença do campo magnético, produzindo uma modificação considerável na relação de dispersão $\varepsilon_n(k_x)$. Para campo magnético diferente de zero os mínimos de $\varepsilon_n(k_x)$ deixam de ocorrer em $k_x = 0$, surgindo estados ressonantes para $k_x \neq 0$. Nessas regiões as autofunções ficam distribuídas nos dois poços, formando canais para o magnetotunelamento.

Para campo magnético nulo verificamos que apesar da relação de dispersão ser parabólica o valor da massa efetiva é diferente em cada sub-banda.

Devido à modificação da forma da relação de dispersão na direção k_x provocada pelo campo magnético a massa efetiva eletrônica também é modificada nessa direção, sendo agora dependente da energia do elétron. Verificamos também que a ocupação do estado fundamental aumenta linearmente com o aumento do campo magnético, enquanto a dos estados excitados diminuem.

Apêndice A

Aproximação para o Operador $\exp[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}]$

Para calcularmos a evolução temporal de uma dada função de onda devemos resolver a equação 3.8:

$$\eta(z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(z, t + \Delta t) . \quad (\text{A.1})$$

Para que esta operação possa ser realizada, o operador contendo a energia cinética $\exp[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar}]$ deve ser expandido em uma *série de Taylor*. Definindo $K \equiv i\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ obtemos:

$$\begin{aligned} \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\frac{\vec{P}^2}{2m}\right) &= \exp\left(i\frac{\hbar\Delta t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = \exp(K\Delta t) = 1 + K\Delta t + \frac{(K\Delta t)^2}{2!} + \frac{(K\Delta t)^3}{3!} + \dots \\ &= 1 + \frac{K\Delta t}{2} + \frac{K\Delta t}{2} + \frac{(K\Delta t)^2}{4} + \frac{(K\Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3) \\ &= \left(1 + \frac{K\Delta t}{2}\right) \cdot \left(1 + \frac{K\Delta t}{2} + \frac{(K\Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3)\right) \\ &= \left(1 + \frac{K\Delta t}{2}\right) \cdot \left(1 - \frac{K\Delta t}{2}\right)^{-1} + O(\Delta t^3) , \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

que é a equação 3.9. O erro cometido nesta equação é da mesma ordem do erro cometido na equação 3.4.

Apêndice B

Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário

Vamos verificar que uma função de onda qualquer evolui para o estado fundamental de um sistema descrito por um Hamiltoniano H independente do tempo, quando a propagação é feita no domínio de tempos imaginários.

Consideremos que as autofunções deste Hamiltoniano sejam $\phi_n(\vec{r})$, com autovalores ε_n ($\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3 < \dots$). Assim, uma função de onda qualquer $\Psi_1(\vec{r}, t)$ pode ser expandida na base desse Hamiltoniano, sendo dada por:

$$\Psi_1(\vec{r}, t) = \sum_n a_n \exp\left(-i \frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r}) . \quad (\text{B.1})$$

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

$$\Psi_1(\vec{r}, \tau) = \sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r}) . \quad (\text{B.2})$$

A norma da equação (B.1) é dada por

$$\int |\Psi_1(\vec{r}, \tau)|^2 d^3r = \sum_n |a_n|^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) = \frac{1}{N^2} , \quad (\text{B.3})$$

logo, a função de onda não permanece normalizada, tendo um decaimento exponencial. Normalizando a função de onda temos:

$$\Psi_1^{norm}(\vec{r}, \tau) = \frac{\sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r})}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)}} . \quad (\text{B.4})$$

Da equação (B.3):

$$\begin{aligned} \Psi_1^{norm}(\vec{r}, \tau) &= \frac{a_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_1 \tau}{\hbar}\right) \phi_1(\vec{r}) + a_2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_2 \tau}{\hbar}\right) \phi_2(\vec{r}) + \dots}{a_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_1 \tau}{\hbar}\right) \sqrt{1 + \left|\frac{a_2}{a_1}\right|^2 \exp\left(2\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\tau}{\hbar}\right) + \dots}} , \\ \Psi_1^{norm}(\vec{r}, \tau) &= \frac{\phi_1(\vec{r}) + a_2 \exp\left(\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\tau}{\hbar}\right) \phi_2(\vec{r}) + \dots}{\sqrt{1 + \left|\frac{a_2}{a_1}\right|^2 \exp\left(\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\tau}{\hbar}\right) + \dots}} , \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

logo,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi_1^{norm}(\vec{r}, \tau) = \phi_1(\vec{r}) . \quad (\text{B.6})$$

O primeiro estado excitado

$$\Psi_2(\vec{r}, \tau) = \sum_n b_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r}) , \quad (\text{B.7})$$

é obtido usando-se o método de ortonormalização de Gram-Schmidt impondo-se que este estado seja ortonormal ao estado fundamental em todos os instantes τ , isto é,

$$\begin{aligned}
|\Psi_2^\perp(\vec{r}, \tau)\rangle &= |\Psi_2(\vec{r}, \tau)\rangle - \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle|\Psi_1(\vec{r}, \tau)\rangle \\
&= \sum_{n>1} b_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r}) .
\end{aligned} \tag{B.8}$$

Normalizando $\Psi_2^\perp(\vec{r}, \tau)$ obtemos:

$$\Psi_2^{norm}(\vec{r}, \tau) = \frac{\sum_{n>1} b_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \phi_n(\vec{r})}{\sqrt{\sum_{n>1} |b_n|^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)}} . \tag{B.9}$$

Repetindo o procedimento anterior, conforme equação B.5, encontramos,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi_2^{norm}(\vec{r}, \tau) = \phi_2(\vec{r}) . \tag{B.10}$$

Esse processo é então repetido em ordem crescente de energia para todas as autofunções.

Apêndice C

Interação do Campo Magnético com o Spin do Elétron

Para considerarmos o efeito da interação do spin eletrônico $\vec{\sigma}$ com o campo magnético externo $\vec{B}$ devemos adicionar ao Hamiltoniano 6.1 o termo

$$g^* \mu_B^* \vec{\sigma} \cdot \vec{B} , \quad (C.1)$$

onde $\mu_B^* = e\hbar/2m_e^*c$ é o magneton de Bohr efetivo e g^* o fator de Landé efetivo. Para o GaAs $g^* = 0,32$ [54]. O operador $\vec{\sigma}$ tem autovalores $\pm 1/2$.

As autofunções do Hamiltoniano obtido pela soma das equações 6.1 com C.1,

$$H = H + g^* \mu_B^* \vec{\sigma} \cdot \vec{B} , \quad (C.2)$$

podem ser separadas nas variáveis espaciais e de spin,

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\sigma}) = \psi(\vec{r})\alpha(\vec{\sigma}) . \quad (C.3)$$

Considerando $\vec{B}$ na direção do eixo z e denotando as autofunções de σ_z por $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, nós encontramos as energias do Hamiltoniano C.2 como sendo

$$E_{\nu,\pm} = \epsilon_\nu \pm \frac{1}{2} g^* \mu_B^* B , \quad (C.4)$$

onde o sinal positivo é para o estado $|\uparrow\rangle$, o sinal negativo para o estado $|\downarrow\rangle$ e ε_ν são as energias correspondentes à solução do Hamiltoniano H .

Portanto, ocorre uma separação dos níveis de energia para cada orientação do spin eletrônico igual a

$$\Delta E_{\nu\pm} = g^* \mu_B^* B . \quad (\text{C.5})$$

Para o *GaAs*, lembrando que $g^* = 0,32$ e $\mu_B^* = e\hbar/2m_e^*c$, obtemos para $B = 20T$ que

$$\Delta E_{\nu\pm} \approx 0,056 \text{ meV} . \quad (\text{C.6})$$

Apêndice D

Solução da equação de Schrödinger com Campo Magnético

Vamos verificar porque as soluções da equação de Schrödinger para o Hamiltoniano 6.2 podem ser separadas nas coordenadas espaciais como mostrado na equação 6.3.

Observamos que o Hamiltoniano 6.2 depende da coordenada y apenas por meio do momentum do elétron, logo, as autofunções nessa direção são ondas planas:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \exp(ik_y y) \xi_{nk_x}(x, z) . \quad (\text{D.1})$$

É fácil verificar que $[H, p_y] = [H, p_x] = 0$, de modo que é possível construir um conjunto completo de autofunções comuns para H , p_y e p_x . Isto é uma consequência do fato de que $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, isto é,

$$\vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 . \quad (\text{D.2})$$

Logo $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ pode ser escrito na forma

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \phi_{nk_x}(z) , \quad (\text{D.3})$$

onde $S = L_x L_y$ é o fator de normalização.

Apêndice E

Ocupação dos Níveis de Energia na Presença de um Campo Magnético

Para obtermos as equações 6.7 e 6.8 que nos fornecem a densidade eletrônica e ocupação dos orbitais quando um campo magnético é aplicado ao sistema vamos primeiramente calcular a densidade de estados usando a equação 2.11. Em seguida determinaremos a ocupação das sub-bandas usando a equação 2.10.

A equação que nos fornece a energia total de um sistema onde os elétrons estão confinados no plano $xôy$ e um campo magnético constante e uniforme é aplicado na direção $\vec{y}$ é dada por

$$E_{nk_xk_y} = \varepsilon_n(k_x) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e^*}. \quad (\text{E.1})$$

Substituindo a equação E.1 na equação 2.11 obtemos

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{S} \sum_{n,k_x,k_y} \delta \left[\varepsilon - \varepsilon_n(k_x) - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e^*} \right]. \quad (\text{E.2})$$

Transformando as somas sobre k em integrais na equação E.2 obtemos

$$\sum_{k_x, k_y} f(k_x, k_y) \longrightarrow \frac{S}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y \delta \left[\varepsilon - \varepsilon_n(k_x) - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e^*} \right] .$$

Logo, para uma dada sub-banda "i",

$$\rho_i(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y \delta \left[\varepsilon - \varepsilon_i(k_x) - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_e^*} \right] . \quad (\text{E.3})$$

Para calcularmos a integral em k_y na equação E.3 podemos usar a seguinte propriedade da função delta de Dirac:

$$\delta(\alpha^2 - k^2) = \frac{1}{2k} [\delta(\alpha - k) + \delta(\alpha + k)] ,$$

de onde obtemos

$$\rho_i(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{\sqrt{2m_e^*}}{\hbar} \int \frac{dk_x}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_i(k_x)}} . \quad (\text{E.4})$$

Para elétrons com vetores de onda entre k_x e $k_x + \Delta k_x$ teremos

$$\rho_{ik_x}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m_e^*}}{2\pi^2 \hbar} \frac{\Delta k_x}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_i(k_x)}} . \quad (\text{E.5})$$

A ocupação das sub-bandas entre k_x e $k_x + \Delta k_x$ é então obtida resolvendo-se a equação 2.10 para a densidade de estados E.5:

$$N_{ik_x} = \frac{\sqrt{2m_e^*}}{2\pi^2 \hbar} \Delta k_x \int_{\varepsilon_i}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_i(k_x)}} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}\right) + 1} . \quad (\text{E.6})$$

Definindo as variáveis adimensionais $\eta_B = [\varepsilon_F - \varepsilon_i(k_x)]/kT$ e $x = [\varepsilon - \varepsilon_i(k_x)]/kT$ obtemos finalmente

$$N_{ik_x} = \frac{\sqrt{2m_e^*kT}}{2\pi^2\hbar} \Delta k_x F_{-\frac{1}{2}}(\eta_B) , \quad (\text{E.7})$$

onde $F_{-\frac{1}{2}}(\eta_B)$ é a integral de Fermi–Dirac definida pela equação (2.16) para $j = -1/2$.

Referências

- [1] Basmaji, P. MBE crystal growth, *5th Brazilian School Semiconductor Physics-1991; World Scientific, Singapore, 1992*, p. 99.
- [2] Esaki, L.; Tsu, R. *Superllattice and negative differencial conductivity in semiconductors*. IBM J. Res. Develop. v. **14**, p. 61, 1970.
- [3] Tsu, R.; Esaki, L. *Tunneling in a finite superllattice*. Appl. Phys. Lett. v. **22**, n. 11, p. 562, 1973.
- [4] Chang, L. L.; Esaki, L.; Tsu, R. *Resonant tunneling in semiconductor double barrier*. Appl. Phys. Lett. v. **24**, n. 12, p. 593, 1974.
- [5] Dingle, R.; Gossard, A. C.; Wiegmann, W. *Direct observation of superlattice formation in a semiconductor heterostructure*. Phys. Rev. Lett. v. **34**, n. 21, p. 1327, 1975.
- [6] Capasso, F.; Datta S. *Quantum electron devices*. Physics Today v. **43**, n. 22, p. 74, 1990.
- [7] Capasso, F.; Sen, S.; Beltram, F.; Lunardi, L. M.; Vengurlekar, A. S.; Smith, P. R.; Shah, N. J.; Malik, R. J.; Cho, A. Y. *Quantum functional devices: Resonant-tunneling transistors, circuits with reduced complexity, and multiplied-valued logic*. IEEE Transactions On Electron Devices v. **36**, n. 10, p. 2065, 1989.
- [8] Yang, C.H.; Kao, Y.C.; Shih, H.D. *New field-effect resonant tunneling transistor: Observation of oscillatory transconductance*. Appl. Phys. Lett. v. **55**, n. 26, p. 2742, 1989.
- [9] Liu, H.C.; Coon, D.D. *Heterojunction double-barrier diodes for logic applications*. Appl. Phys. Lett. v. **50**, n. 18, p. 1246, 1987.

- [10] Paton, M.; Liu, H.C. *A novel asymmetrically coupled quantum well infrared modulator.* Superlatt. Microstruct. v. 4, n. 6, p. 737, 1991.
- [11] Bagwell, P. F.; Broekaert, T. P. E.; Orlando, T. P.; Fonstad, C. G. *Resonant tunneling diodes and transistors with a one-, two-, three-dimensional electron emitter.* J. Appl. Phys. v. 68, n. 9, p. 4634, 1990.
- [12] Ohno, Y.; Tsuchiya, M.; Sakaki, H. *Gigantic negative transconductance and mobility modulation in a double-quantum-well structure via gate-controlled resonant coupling.* Appl. Phys. Lett. v. 62, n. 16, p. 1952, 1993.
- [13] Yang C. H. *Realization of a field-effect resonant tunnelling transistor at room temperature: Observation of negative transconductance due to quantum tunneling.* Appl. Phys. Lett. v. 60, n. 10, p. 1250, 1992.
- [14] Roskos, H. G.; Nuss, M. C.; Shah, J.; Leo K.; Miller, D. A. B. *Coherent submillimeter-wave emission from charge oscillations in a double-well potential.* Phys. Rev. Lett. v. 68, n. 14, p. 2216, 1992.
- [15] Sollner, T. C. L. G.; Brown, E. R.; Goodhue, W. D.; Le H. Q. *Observation of millimeter-wave oscillations from resonant tunneling diodes and some theoretical considerations of ultimate frequency limits.* Appl. Phys. Lett. v. 50, n. 6, p. 332, 1987.
- [16] Bandara, K. M. S. V.; Levine, B. F.; Asom, M. T. *Tunneling emitter undoped quantum-well infrared photodetector.* J. Appl. Phys. v. 74, n. 1, p. 346, 1993.
- [17] Ferreira, R.; Bastard, G. *Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single- and multiple-quantum-well structures.* Phys. Rev. B v. 40, n. 2, p. 1074, 1989.
- [18] Luryi, S. *A Coherent versus incoherent resonant tunneling and applications for fast devices.* Superlatt. Microstruct. v. 5, n. 3, p. 375, 1989.
- [19] Matsusue, T.; Tsuchiya, M.; Schulman, J. N.; Sakaki, H. *Dynamics of resonant and nonresonant electron tunneling in double-quantum-well structures under electric fields.* Phys. Rev. B v. 42, n. 9, p. 5719, 1990.

- [20] Björksten, M. F.; Nieminen, R. M.; Laasonen, K. *Tunneling in oscillating double-barrier heterostructures.* J. Phys.: Condens. Matter v. **3**, n. 36, p. 7007, 1991.
- [21] Mohaidat, J. M.; Shum, K.; Alfano, R. R. *Electron-tunneling dynamics through a double-barrier structure in the presence of phonons.* Phys. Rev. B v. **48**, n. 12, p. 8809, 1993.
- [22] Kawai, H; Kaneko, J; Watanabe, N. *Doublet state of resonantly coupled AlGaAs/GaAs quantum wells grown by metalorganic chemical vapor deposition.* Phys. Rev. B v. **58**, n. 3, p. 1263, 1985.
- [23] Leo K.; Shah, J; Göbel, E. O.; Damen, T. C. *Coherent oscillations of a wave packet in a semiconductor double-quantum-well structure.* Phys. Rev. Lett. v. **66**, n. 2, p. 201, 1991.
- [24] Alexander, M. G. W.; Nido, M.; Rühle W. W. *Resonant-tunneling transfer times between asymmetric GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As quantum wells.* Phys. Rev. B v. **41**, n. 17, p. 12295, 1990.
- [25] Roussignol, Ph.; Gurioli, M.; Carraresi, L.; Colocci, M; Vinattieri, A; Deparis, C.; Massies, J.; Neu, G. *Electron and hole tunneling times in GaAs/AlGaAs asymmetric double quantum well heterostructures.* Superlatt. Microstruct. v. **9**, n. 2, p. 151, 1991.
- [26] Luryi, S. *Possibility of a direct observation of the time evolution in heterostructure barrier tunneling.* Solid State Comm. v. **65**, n. 8, p. 787, 1988.
- [27] Cabrera, A. H.; Aceituno, P.; Cruz, H. *Self-consistent calculations of coherent tunneling oscillations in asymmetric coupled quantum wells.* Superlatt. Microstruct. v. **11**, n. 4, p. 375, 1992.
- [28] Cabrera, A. H.; Aceituno, P.; Cruz, H. *Coherent magneto tunneling in coupled quantum wells for different Landau levels* Superlatt. Microstruct. v. **12**, n. 1, p. 47, 1992.
- [29] Palevski, A.; Beltram, F.; Capasso, F.; Pfeiffer, L.; West, K. W. *Resistance resonance in coupled potencial wells.* Phys. Rev. Lett. v. **65**, n. 15, p. 1929, 1990.

- [30] Chen, J. G.; Yang, C. H.; Wilson, R. A.; Wood, C. E. C. *dc current-voltage characteristics of a double-quantum-well field-effect resonant tunneling transistor.* Appl. Phys. Lett. v. **60**, n. 18, p. 2273, 1992.
- [31] Sakaki, H. *Velocity-modulation transistor (VMT) - A new field-effect transistor concept.* Jpn. J. Appl. Phys. v. **21**, n. 6, p. L381, 1982.
- [32] Vinter, B.; Tardella, A. *Tunneling transfer field-effect transistor: a negative transconductance device.* Appl. Phys. Lett. v. **50**, n. 7, p. 410, 1987.
- [33] Hohenberg, P.; Kohn, W. *Inhomogeneous electron gas.* Phys. Rev. v. **136**, n. 3B, p. 864, 1964.
- [34] Kohn, W.; Sham, L. J. *Self-consistent equations including exchange and correlation effects.* Phys. Rev. v. **140**, n. 4A, p. 1133, 1965.
- [35] Sham, L. J.; Kohn, W. *One-particle properties of an inhomogeneous interacting electron gas.* Phys. Rev. v. **145**, n. 2, p. 561, 1966.
- [36] Zrenner, A.; Koch, F.; Ploog, K. *Subband physics for a "realistic" δ -doping layer.* Surf. Sci. n. **196**, n. 1-3, p. 671, 1988.
- [37] Wolfe, C. W.; Holonyak, N.; Stillman, G. Physical properties of semiconductors, Cap. 4, p. 112. *Prentice-Hall International Editions, New Jersey*, 1989.
- [38] Hrivnák, L. *Determination of Γ electron and light hole effective masses in $Al_xGa_{1-x}As$ on the basis of energy gaps, band-gap offsets, and energy levels in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ quantum wells.* Appl. Phys. Lett. v. **56**, n. 24, p. 2425, 1990.
- [39] Hedin, L.; Lundqvist, B. I. *Explicit local exchange-correlation potentials.* J. Phys. C: Solid St. Phys. v. **4**, n. 14, p. 2064, 1971.
- [40] Adachi, S. *GaAs, AlAs, and $Al_xGa_{1-x}As$: Material parameters for use in research and device applications.* J. Appl. Phys. v. **58**, n. 3, p. R1, 1985.
- [41] Kroemer, H. *Band offsets at heterointerfaces: Theoretical Basis, and review, of recent experimental work.* Surf. Sci. v. **174**, n. 1-3, p. 299, 1986.

- [42] Feit, M. D.; Fleck Jr., J. A.; Steiger, A. *Solution of the Schrödinger equation by a spectral method.* J. Comput. Phys. v. **47**, n. 3, p. 412, 1982.
- [43] Degani, M. H. *Stark ladders in strongly coupled GaAs-AlAs superlattices.* Appl. Phys. Lett. v. **59**, n. 1, p. 57, 1991.
- [44] Kosloff, R. *Time dependent quantum mechanical methods for molecular dynamics.* J. Phys. Chem. v. **92**, n. 8, p. 2087, 1988.
- [45] Kosloff, D.; Kosloff, R. *A Fourier method solution for the time dependent Schrödinger equation as a tool in molecular dynamics.* J. Comput. Phys. v. **52**, n. 1, p. 35, 1983.
- [46] DeVries, P. L. A first course in computational physics, Wiley, New York, 1993.
- [47] Press, W. H.; Flamery, B. P.; Tevkolsky, S. A. Numerical recipes (fortran version), Cap. 2, p. 40. Cambridge, New York, 1989.
- [48] Liu, Wen-Chau; Sun, Chung-Yih; Lour, Wen-Shiung. *Investigation on electronic properties of semiconductor delta-doped structures.* Superlatt. Microstruct. v. **10**, n. 1, p. 19, 1991.
- [49] Degani, M. H. *Electron energy levels in a δ -doped layer in GaAs.* Phys. Rev. B v. **44**, n. 11, p. 5580, 1991.
- [50] Sze, S. M. Physics of semiconductor devices, Wiley, New York, cap. 5, p. 243, 2nd edition, 1981.
- [51] Lima W.L.C. *Estrutura eletrônica em sistemas com dopagem tipo delta*
Tese de Mestrado (IFQSC-1992)
- [52] Weisbuch, C.; Vinter, B. Quantum semiconductor estruturas, Cap. 4, p. 101, Academic Press, San Diego, 1991.
- [53] Aymerich-Humet, X.; Serra-Mestres, F.; Millán, j. *A generalized approximation of the Fermi-Dirac integrals.* J. Appl. Phys. v. **54**, n. 5, p. 2850, 1983.
- [54] Willardson, R. K.; Beer, A. C. Semiconductors and Semimetals, vol. 1, Cap. 6, p. 159, tabela 1. Academic Press, New York, 1966.

- [55] Degani, M. H.; Scalvi, L. V. A. *Subband mixing inducing negative resistance.* Solid State Comm. v. **86**, n. 5, p. 301, 1993.
- [56] Harris, J. J.; Murray, R.; Foxon, C. T. *Optical and electrical investigation of subband populations, mobilities and Fermi level pinning in delta-doped quantum wells.* Semicond. Sci. Technol. v. **8**, p. 31, 1993.