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

> "TRANSIÇÃO DE FASE NO EFEITO HALL, EM CAMADAS DE INVERSÃO, DE MATERIAIS COM GAPS ESTREITOS"

> > MARTA SILVA DOS SANTOS

•

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

> SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

Orientador: Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques

USP / IFQSC / S		Ŷ
8-2-000626	·	

SÃO CARLOS

 MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

 Marta Silva dos Santos
 APRESENTADA

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

 DADE DE SÃO PAULO, EM 18 DE julho DE 1989.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Gilmar Eugênio MarquesOrientador

Elico

Dr. José Roberto Drugowich de Felício

ulo Blanks

Dr. Paulo Motisuke

Dedico esta tese aos:

Meus pais, Antonio Pereira e Maria Silva, e irmãos Antonio José, Valmir, Marcia e Wagner Santos, sem os quais jamais seria possível a realização deste trabalho. Toda a minha gratidão pelo apoio, incentivo e amor, a mim dedicado neste período.

A família Cohen, a minha família de S. Carlos, que me acolheu como um verdadeiro membro deste lar.

Ao meu namorado, Luiz Francisco Malmonge, por todo carinho e dedicação.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques, meu orientador e amigo, pelo grande apoio e incentivo. Pelas sugestões e discussões no decorrer deste trabalho.

Ao grande amigo, Prof. Abraham Cohen, um dos maiores responsáveis pela realização desta dissertação.

A Dra. Ute Gummich, que sugeriu uma solução para o nosso problema.

Aos Profs. Nelson Studart e Luis Nunes de Oliveira, pelas estimulantes discussões e proposições no desenvolver deste trabalho.

A Luiz Francisco Malmonge, pela ajuda profissional durante a confecção desta dissertação.

A família Alfredo Jorge, pelo estímulo e pela amizade.

A amiga Myrtes Cohen, no auxílio de revisão deste manuscrito.

A todos os colegas, funcionários e demais Professores do Departamento de Física do IFQSC, pelo companheirismo e colaboração.

Ao desenhista, Samuel, pelo empenho e interesse na preparação das figuras.

As secretárias, Cecília e Irene, pelo apoio profissional e carinho durante estes anos.

Ao técnico Valdir, responsavel pela manutenção dos computadores.

A Fundação Universidade do Amazonas e CAPES, pelo apoio financeiro.



ÍNDICE

Lista de	Ilustr	ações I
Lista de	Tabela	asIII
Resumo	•••••	IV
Abstract	••••	
Capítulo	Ι.	INTRODUÇÃO1
	1.1.	Motivação 1
	1.2.	Constituição e Funcionamento de um MISFET2
	1.3.	Sumário dos Capítulos 5
Capítulo	II.	CRISTAIS MISTURADOS 8
	2.1.	Introdução
	2.2.	Estrutura Cristalina e Zona de Brillouin9
	2.3.	Estrutura das Bandas de Energia12
	2.4.	Importância dos Cristais Misturados17
	2.5.	Investigações em Gás de Elétrons Bi-Dimensional
		em amostras de Hg(Cd)Te19
Capítulo	III.	APROXIMAÇÃO DE MASSA EFETIVA
	3.1.	Introdução
	3.2.	Aproximação de Massa Efetiva : Modelo de uma
		banda
	3.3.	Aproximação de Massa Efetiva na presença de
		uma interface
Capítulo	IV.	О MÉTODO К.Р 34
	4.1.	Introdução
	4.2.	Representação $\vec{k} \cdot \vec{p} \cdot \dots \cdot 34$
	4.2.a.	Sem interação spin-órbita
	4.2.6.	Com interação spin-órbita
	4.3.	Modelo de Kane (Modelo de Oito Bandas)

	4.4. Um Modelo para o Hg(Cd)Te (Modelo de Seis
	Bandas)
Capítulo	V. APROXIMAÇÃO DE MASSA EFETIVA NA PRESENÇA DE UMA
	INTERFACE (MODELO DE MUITAS BANDAS)
	5.1. Introdução 47
	5.2. Representação Multi-Componente dos Estados de
	Flat-Band (Modelo de Quatro Bandas)
	5.3. Função de Onda Multi-Componente para o Espalha-
	mento de Elétrons por uma Barreira Localizada
	à Esquerda (Caso A)53
	5.4. Equação de Massa Efetiva Multi-Componente e a
	Derivação das Condições de Contorno para as
	Componentes da Função Envelope de Elétrons
	Espalhamentos por uma Barreira à Esquerda57
	5.5. Codições de Contorno para as Componentes da
	Função Envelope para uma Barreira Localizada
	à Direita (Caso B)60
	5.6. Equação de Massa Efetiva Multi-Componente e
	Condição de Contorno para as Componentes da
	Função Envelope (Modelo de Seis Bandas)61
Capítulo	VI. PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DA CAMADA DE INVERSÃO
	DE $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$
	6.1. Introdução 66
	6.2. Efeito de um Potencial Externo em um MISFET67
	6.3. Solução da EMA usando a Aproximação W.K.B69
	6.4. Definição do Potencial Auto-Consistente, V(x).73
	6.5. Método Computacional para as Componentes da
	₿unção Envelope77
	6.6. Cálculo Auto-Consistente e Resultados
Capítulo	VII. TRANSIÇÃO DE FASE NAS SUBBANDAS DE MISFET'S DE
	MATERIAIS COM GAPS ESTREITOS

-

· · · · - · · - · · - · · -

	7.1. Introdução	. 82
	7.2. Um Modelo para a Camada de Inversão	. 84
	7.3. Função de Green e Energia Total do Sistema	. 86
	7.4. Mínimos da Energia Total do Sistema	. 92
	7.5. Diagrama de Fase	.94
	7.6. Efeitos na Magneto-condutividade	.97
Capítulo	/III. SUBBANDAS DE ENERGIA NA PRESENÇA DE CAMPO	
	MAGNÉTICO	101
	8.1. Introdução	101
	8.2. Estados de Superfície	102
	8.3. Espectro dos Níveis de Landau para as Subbanda	I S
	com "Separação dos Spins"	105
Apêndice	Ι	110
Apêndice	II	122
Referênci	s Bibliográficas	123
	·	

ſ

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura	1.1.	Esquema de um MISFET 2
Figura	1.2.	Diagrama de energia como função da distância da
		interface semicondutor-isolante
Figura	1.3.	Formação da camada de inversão e das subbandas
		elétricas
Figura	2.1.	Características de uma estrutura semelhante à
		cúbica do sulfeto de zinco10
Figura	2.2.	Esquema simplificado da estrutura de bandas dos
		compostos semicondutores do grupo II-VI14
Figura	2.3.	Estrutura das bandas de energia do CdTe 15
Figura	2.4.	Estrutura das bandas de energia do HgTe 16
Figura	2.5.	Gap de energia versus a composição x do
		Hg(Cd)Te 17
Figura	2.6.	Gap de energia versus comprimento de onda máximo
		detectado 19
Figura	2.7.	Magneto-resistências Hall e longitudinal de hete-
		truturas de GaAs/AlGaAs e de MISFET de Hg(Cd)Te,
		medidas por Kirk e outros 21
Figura	3.1.	Esquema da estrutura de bandas de materiais com
		gap direto
Figura	3.2.	Esquema da estrutura de bandas de materiais tais
		como Ge e Si (gap indireto) 25
Figura	5.1.	como Ge e Si (gap indireto) 25 Ilustra a estrutura de bandas produzida pelo
Figura	5.1.	como Ge e Si (gap indireto)
Figura Figura	5.1. 5.2.	como Ge e Si (gap indireto) 25 Ilustra a estrutura de bandas produzida pelo Hamiltoniano H_{k_x} (modelo de quatro bandas) 50 Mostra a posição do isolante e do semicondutor,
Figura Figura	5.1. 5.2.	como Ge e Si (gap indireto) 25 Ilustra a estrutura de bandas produzida pelo Hamiltoniano H_{k_x} (modelo de quatro bandas) 50 Mostra a posição do isolante e do semicondutor, de modo a formar uma barreira à esquerda 53
Figura Figura Figura	5.1. 5.2. 5.3.	como Ge e Si (gap indireto) 25 Ilustra a estrutura de bandas produzida pelo Hamiltoniano H_{k_x} (modelo de quatro bandas) 50 Mostra a posição do isolante e do semicondutor, de modo a formar uma barreira à esquerda 53 Mostra a posição do isolante e do semicondutor,

I

Figura 5.4. Esquema de uma estrutura de bandas para um mo-

		delo de Hamiltoniano de seis bandas
Figura	6.1.	Diagrama ilustrativo do potencial efetivo,
		$V_{\text{eff}}^{U}(x, E_j)$, para um poço triangular
Figura	6.2.	Diagrama esquemático mostrando o potencial, as
		bandas de condução e valência, a posição do nível
		de Fermi, e a condição para se encontrar a largura
		da camada de depleção76
Figura	6.3.	llustra o método computacional para as funções
		de onda A ₁ e A ₂
Figura	6.4.	Estrutura auto-consistente das subbandas de uma ca-
		mada de inversão tipo-n em um semicondutor Hg(Cd)Te
		tipo-p, e o potencial determinado pelas subbandas
		ocupadas
Figura	6.5.	Densidade de ocupação em cada subbanda "j", N _j ,
		como função de N _{inv}
Figura	7.1.	Diagrama Ilustrativo do Modelo
Figura	7.2.	Contribuição da Impureza para a Auto-Energia do
		Elétron
Figura	7.3.	Auto-Energia e Equação de Dyson para o Propagador
		do Elétron
Figura	7.4.	Diagrama de Fase no plano γ versus ν
Figura	7.5.	Magneto-condutividade, σ_{xx} , versus a ocupação
		do nível de Landau, $ u$, para diferentes
		valores de γ
Figura	8.1.	Energias dos níveis de Landau versus campo magné-
		tico, B_{\perp} , calculadas em nosso trabalho 107
Figura	8.2.	Magneto-condutividade versus N _{inv} e Energias
		dos níveis de Landau versus B_{\perp} , no modelo de
		Wollrab e outros 108

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

ΙI

Figura	8.1.	Energias dos níveis de Landau versus campo magné-
		tico, ilustrando a posição dos pontos de junção e
		cruzamento de níveis 109
Figura	Ι.1.	Aparato para medidas do efeito Hall
		quantizado 114
Figura	Ι.2.	O efeito Hall quantizado inteiro
Figura	Ι.3.	Densidade de Estados para os níveis de Landau 117
Figura	1.4.	Níveis de energia permitidos aos elétrons, quando
		submetidos a um campo magnético perpendicular
		ao plano de confinamento destes elétrons 118

LISTA DE TABELAS

Tabela I. Tabela Característica do grupo duplo no ponto Γ11

RESUMO

A Aproximação de Massa Efetiva para a função envelope multi-componente, na presença de uma interface, desenvolvida por Marques e Sham, será utilizada aqui, para materiais de gap estreito do grupo II-VI, da seguinte maneira:

a. A forte interação entre bandas de condução e valência, nestes materiais, é justificada em um Hamiltoniano de Kane (6x6) modificado, contendo todas as ondas de Bloch propagantes e evanescentes. Na presença de uma interface, a função de onda eletrônica, Ψ , é composta de uma onda de Bloch incidente, uma refletida e duas evanescentes, com a mesma energia E e momento paralelo k. Já que a estrutura da maioria isolantes utilizados são desconhecidos, a dos interface semicondutor-isolante pode ser considerada como uma barreira infinita, de modo que, Ψ , se anule na interface. Existe uma fina região de espessura lpha na interface, onde o decaimento das ondas evanescentes é indispensável. Distante desta região, as ondas evanescentes possuem um papel insignificante е eventualmente anulam-se. O limite de $\alpha \rightarrow 0$ determina as condições de contorno para cada componente da função de onda envelope na interface.

b. As condições de contorno são usadas para computar a estrutura de subbandas e o potencial auto-consistente para o $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$. A mais interessante característica é o afastamento dos estados de spin duplamente degenerados. Estes resultados serão utilizados para encontrarmos a dependência da energia das subbandas com um campo magnético perpendicular à interface.

c. A magneto-condutividade longitudinal é calculada como função do campo magnético B₁. Efeitos das interações

IV

elétron-elétron e elétrons-impureza são levadas em conta nas aproximações de Hartee-Foch e auto-consistente de Born, respectivamente. Para uma interação elétron-impureza finita, encontram-se fatores de preenchimentos críticos dos níveis de Landau, onde transições de fase são observadas. Estes resultados explicam as descontinuidades presentes, em medidas experimentais, na magneto-resistividade longitudinal e transversal (Hail), em MISFET de Hg(Cd)Te.

ABSTRACT

The Effective Mass Aproximation for multi-component envelope wave function in the presence of an interface in the MISFET system, developed by Marques and Sham, will be used here, for II-VI narrow-gap semiconductors, in the following way:

a. The strong interaction between conduction and valence bands, in these materials, is justified. The (6x6) Kane type modified Hamiltonian is used and the total wave function contains every propagating and evanescent waves. For an interface, the total function, Ψ , is composed of one incident and one reflected and two evanescents Bloch waves, with energy E and parallel wave-vector k. Since the band structure of the most used insulators is usually not well Known, the insulatorsemiconductor interface can be assumed as an infinite barrier, therefore, the total wave-function there can set to zero. The semiconductor evanescent Bloch waves are indispensable in a thin layer, of thickness α , close to this region. Far away from the interface their role are insignificant and can be neglected. In the limite $\alpha \rightarrow 0$, the boundary condition for each

V

the limit the total Bloch wave function, are derived.

b. These boundary conditions are used to calculate the self-consistent electric subband and potential for MISFET of $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$. The subbands present a very important spin splitting, due to the internal electric field.

c. The effect of a perpendicular magnetic field is also studied and the longitudinal magneto-condutivity are calculated. The effect of electron-electron and electronimpurity interactions are respectively accounted for in the Hartree-Fock and self-consistent Born approximations. For critical electron-impurity interaction, the Landau level filling shows a phase transition at a given fractional occupation (or magnetic field). These results are experimentally observed in both longitudinal and transverse (Hall) magneto-resistence for Hg(Cd)Te.

٧I

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1.1. Motivação.

As propriedades dos elétrons em camada de cargas espaciais, formada na interface de um sistema semicondutor-isolante que possui um caráter dinamicamente bi-dimensional, tem sido extensivamente investigadas. Por dinamicamente bi-dimensional, nós entendemos que os elétrons possuem níveis de energia quantizados em uma dimensão do espaço, porém são livres para se moverem nas outras duas dimensões. Esses sistemas não são bidimensionais no sentido rigoroso, por dois motivos: as funções de onda possuem uma extensão espacial finita em três dimensões; e os campos eletromagnéticos não estão confinados ao plano, mas se estendem por todo o espaço. Portanto, teorias desenvolvidas para um sistema idealizado bi-dimensional devem ser modificadas para estudos desses sistemas antes de serem comparadas com o experimento.

Teoricamente, a camada de cargas espaciais de materiais do grupo II-VI, em estudo neste trabalho, é de grande interesse devido à proximidade entre a banda de condução e a banda de valência (gap estreito de energia). Elétrons em ambos os lados do gap interagem fortemente, de tal modo que, a função de onda eletrônica precisa ter um caráter multi-componente.

Tecnologicamente, materiais do grupo II-VI, como o $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$, são de grande utilidade em detectores de infravermelho, ou seja, na faixa de comprimentos de onda acima de $8\mu m$, não coberta pelos semicondutores tradicionais. O $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$ é um material criado da mistura de HgTe e CdTe, e possui a

vantagem de podermos variar seu gap de energia com a mudança da concentração x.

Porém, a principal motivação deste trabalho é de explicar, qualitativamente, algumas descontinuidades observadas em medidas do efeito Hall quantizado inteiro, por Kirk e outros [1], na resistência longitudinal e transversal (Hall) do Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te, veja fig.2.7.

1.2. Constituição e Funcionamento de um MISFET.

Vamos fazer uma descrição simples e qualitativa de um MISFET(metal-insulator-semiconductor-field-effect-transistor), ilustrado na fig.1.1. Ele consiste de substrato semicondutor tipo-p com um contato ôhmico em um lado e uma camada de isolante do outro. Um filme metálico é depositado sobre a camada de isolante formando uma porta metálica. Dois buracos são abertos em extremidades opostas na região metal-isolante e contatos tipo-n⁺ são fundidos no substrato tipo-p, formando os contatos de fonte e dreno. A posição da camada de cargas, na interface semicondutor-isolante, é também esquematizada na fig.1.1.



Figura 1.1. Esquema de um MISFET, indicando seus terminais e a camada de cargas.

A camada de cargas é criada da seguinte forma. Considere o tradicional diagrama de energia na fig.1.2.a, que é definido como a condição de flat-band. O diagrama mostra a banda de condução e a de valência como função da distância do plano da interface semicondutor-isolante para o semicondutor e para o isolante. A posição da energia de Fermi, $E_{\rm F}$, é determinada pelo substrato semicondutor, como mostrado na figura. A região hachureada indica os níveis eletrônicos preenchidos nos três materiais.





b. Diagrama de energia com uma voltagem Vg aplicada (condição de bandas curvadas).

3

SERVICO DE	BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC	A COLUMN TO A COLUMN
) den rive -	FISICA	1

States in Course of

Quando uma voltagem Vg é aplicada entre o terminal da porta e o contato ôhmico do substrato, de modo que, a porta fique positiva com respeito ao substrato, uma corrente transitória é estabelecida a fim de levar o sistema a uma nova situação de equilíbrio. Elétrons da porta metálica fluem através do fio externo para o substrato. Ao mesmo tempo, buracos livres no semicondutor tipo-p afastam-se da interface semicondutor-isolante, criando um espaço de cargas espaciais negativas no lado do semicondutor, devido a distribuição uniforme de íons de impurezas carregados negativamente, fixados nas posições da rede. Esta camada é conhecida como camada de depleção.

Uma tradicional descrição para explicar a formação desta camada é através do conceito de bandas curvadas, onde a banda de condução, $E_c(x)$, e a banda de valência, $E_v(x)$, estão ilustradas por linhas sólidas na fig.1.2.b. Um outro conceito útil é o de considerar a energia potencial, V(x), de uma carga teste pontual como função da distância x da interface ou superfície, que é mostrada pela linha tracejada na fig.1.2.b. A distância onde a carga teste não sente mais qualquer força é definida como o fundo da camada de depleção, d. Neste contexto, a condição de flat-band é definida como a situação onde um elétron, na região da interface, somente sente o potencial cristalino do semicondutor.

Para valores mais altos de voltagem Vg aplicada, a energia potencial, V(x), atinge a situação onde níveis quantizados aparecem na região da interface; esta situação é ilustrada na fig.1.3. Elétrons podem agora ocupar estes níveis quantizados, e a camada criada por estes elétrons é chamada de camada de inversão, cujo nome se deve a inversão ocorrida no tipo de semicondutor perto da interface. Um pouco mais distante

da interface, o semicondutor ainda continua tipo-p. No plano da interface os elétrons comportam-se com relações de dispersão de elétrons livres, e as estruturas eletrônicas são compostas de subbandas. As propriedades eletrônicas da camada de cargas, em semicondutor de gap estreito, foram estudadas por Marques e Sham [2,3] para materiais do grupo III-V, e é um dos interesses deste trabalho para materiais do grupo II-VI.





1.3. Sumário dos Capítulos.

A forte interação entre banda de condução e banda de valência requer um função de onda multi-componente para descrever os estados eletrônicas em um semicondutor de gap estreito. Efeitos como não parabolicidade das subbandas e pequena massa efetiva estão diretamente relacionados a esta forte interação.

Existem vários mecanismos diferentes que conduzem ao afastamento das subbandas elétricas para uma camada interfacial. Para elétrons em materiais de gaps estreitos, como o Hg(Cd)Te tipo-p, o acoplamento spin-órbita e a assimetria do potencial na camada de inversão são os responsáveis pela quebra de degenerescência de spin.

O capítulo II descreve algumas propriedades de materiais conhecidos como cristais misturados, que são produzidos a partir de dois ou mais semicondutores do grupo II-VI. Estes materiais de interesse neste trabalho, são de grande utilidade prática em detectores de infravermelho.

O capítulo III contém uma revisão dos aspectos mais importantes da Aproximação de Massa Efetiva, para o corpo do semicondutor e na presença de uma interface, usando o modelo de banda. O capítulo IV apresenta uma revisão geral do uma Hamiltoniano do corpo de um semicondutor na aproximação k.p, bem como uma adaptação do modelo, desenvolvido originalmente por Marques e Sham [2,3] com o InSb, para o Hg_(1,v)Cd_xTe devido a semelhança de seus parâmetros. O capítulo V expressa uma Aproximação de Massa Efetiva para semicondutores de gaps de energias estreitos, na presença de uma interface. A função de onda eletrônica e as condições de contorno deduzidas para as componentes da função de onda envelope são discutidas no modelo de quatro bandas, e generalizadas em um modelo de seis bandas, desenvolvido originalmente para o InSb [2,3]. As soluções da Aproximação de Massa Efetiva multi-componente, sob as condições de contorno, são apresentadas no capítulo VI, incluindo ainda os nossos cálculos auto-consistentes da estrutura de subbandas do material em estudo neste trabalho, o Hg_(1-x)Cd_xTe, para baixas concentrações de portadores na camada de inversão.

No capítulo VII é exposto um modelo que explica, qualitativamente, as descontinuidades medidas por Kirk, Kobiela e outros [1], na resistência longitudinal e Hall através de transições de fase que ocorrem nas subbandas. No capítulo VIII é apresentado um simples modelo para obtenção dos níveis de energia das subbandas como função do campo magnético. Este modelo simplificado apresenta características semelhantes a outros modelos.

CAPÍTULO II

8

CRISTAIS MISTURADOS

2.1. Introdução.

Este capítulo estuda algumas propriedades de materiais conhecidos como cristais misturados [4], que são criados a partir da mistura de dois ou mais semicondutores (com um elemento ou composto). Como exemplo, temos a mistura de HgTe e CdTe, que nos dá o Hg_(1-x)Cd_xTe, onde x representa a fração molar de CdTe.

Experimentos realizados em uma grande quantidade de cristais misturados tem mostrado que esses materiais possuem estruturas de bandas bem definidas, ou seja, um cristal misturado possui parâmetros (gap de energia, Eg, e outros) que variam continuamente com a composição x entre os valores dessas parâmetros nos compostos constituintes do cristal misturado. Os tipos de cristais misturados de interesse nesse trabalho estão em uma única fase. São constituídos de pares de compostos do grupo II-VI, os quais possuem o mesmo tipo de estrutura cristalina e fórmula química, e são mutuamente solúveis em todas as suas composições. Os cristais misturados também exibem periodicidade da rede semelhante a um dos seus materiais constituintes. Na mistura aos dois compostos para gerar o cristal, existe um tipo de átomo que ocupa sítios da rede regularmente, porém as duas outras espécies de átomos (ou moléculas) ocupam sitios desordenadamente; no entanto, esta desordem na rede não produz efeitos específicos importantes.

O cristal misturado de interesse aqui é o $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$, que consiste da mistura de CdTe, um semicondutor de gap grande de energia (Eg = 1, 6eV), com o composto semi-metálico HgTe, que pode ser imaginado como um semicondutor de gap de energia negativo (Eg = -0, 3eV). O gap de energia do novo cristal varia linearmente com x, passando por zero em uma composição intermediária de $x \approx 0, 15$. Esses materiais possuem grande conveniência na construção de detectores de infravermelho.

2.2. Estrutura Cristalina e Zona de Brillouin.

Os cristais misturados considerados neste trabalho, incluindo seus compostos binários em todas as suas composições, cristalizam-se em estruturas análogas à estrutura cúbica do sulfeto de zinco(ZnS). Esta estrutura consiste de duas redes cúbicas de faces centradas (fcc), onde cada fcc pode ser considerada como uma sub-rede. As duas sub-redes são deslocadas por um quarto de comprimento ao longo da diagonal do corpo cúbico, e cada uma consiste inteiramente de um tipo de átomo(ou molécula). Representaremos os compostos do grupo II-VI genericamente como AB, onde os átomos A (cátions) ocupam os sítios em uma das sub-redes fcc e os átomos B(ânion) os sítios da outra sub-rede. Esta estrutura está ilustrada na figura 2.1.a. Cada cátion e ânion possuem dois e seis elétrons de valência, respectivamente. A ligação cristalina é basicamente covalente, onde os elétrons de valência de um dos átomos são compartilhados por quatro átomos adjacentes da espécie oposta, colocados a igual distância e dispostos nos vértices de um tetraedro regular imaginário, formando ligações covalentes direcionadas no espaço. Existe também uma contribuição iônica para as ligações devido às diferentes cargas nucleares dos átomos A e B. No cristal misturado de interesse existem dois cátions de espécies diferentes (A' e A") e o material pode ser representado genericamente como $A'_{(1-x)}A''_xB$. As espécies A' e A'' são distribuídas

aleatoriamente nos sítios da sub-rede A, de modo a manter a estrutura cúbica do sulfeto de zinco.

A primeira zona de Brillouin de estruturas semelhante à estrutura cúbica do sulfeto de zinco é um octaedro truncado, mostrado na fig.2.1.b juntamente com os principais pontos e linhas de simetria.

A estrutura do diamante possui uma simetria que apresenta um centro de inversão¹ situado na metade do segmento que une dois átomos vizinhos mais próximos. No entanto, estrutura semelhante à cúbica do ZnS não possui centro de inversão, uma vez que os dois átomos vizinhos mais próximos são de espécies diferentes. Esta estrutura está associada a um conjunto de operações de simetria ilustradas na figura 2.1.c.



- Figura 2.1. Características da estrutura semelhante à cúbica do sulfeto de zinco. a. Estrutura cristalina com as ligações covalentes tetragonais.
 - b. A primeira zona de Brillouin e os três principais pontos de simetria: Γ em (0,0,0), X em (0,1,0) e L em (1,1,1).
 - c. Um cubo que contém as mesmas operações de simetria desta estrutura.

¹Na operação de inversão, cada ponto \vec{r} se transforma no ponto $-\vec{r}$.

O grupo duplo de simetria de estruturas análogas à cúbica do sulfeto de zinco é o grupo tetragonal T_d , cuja tabela característica para o ponto $\Gamma(\vec{k}=\vec{0})$ é dada na tabela I. Os grupos duplos são utilizados quando o spin é incluído no problema. A inclusão do spin produz o efeito de formar função de onda que é o produto de uma função espacial pela função spin que se transforma com $D_{1/2}$ ou Γ_6 . A função de onda total irá então se transformar como o produto direto da representação do grupo puntual com $D_{1/2}$. Este produto direto pode ser decomposto em termos das representações do grupo duplo, e está incluído na tabela abaixo:

r	E	Ē	6 C ₄₂	8 C ₃	8Ē₃	6 I xC₄	6 I x Ĉ ₄	12 I xC ₂
$\Gamma_1^{(s)}$	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ2	1	1	1	1	1	- 1	-1	-1
Γ ₃	2	2	2	-1	-1	0	0	0
$\Gamma_{4}(x,y,z)$	3	3	-1	0	0	-1	-1	1
Γ_5	3	3	-1	0	0	1	1	-1
Γ_6	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{2}$	- \2	0
Γ_7	2	-2	0	1	-1	- \{2}	$\sqrt{2}$	0
$\Gamma_{artheta}$	4	- 4	0	-1	1	0	0	0
Γ_i	Γ_1	Γ_2	Гз	Γ_4	Γ_5			
$\Gamma_i \mathbf{x} D_{1/2}$	Γ_6	Γ_7	Γ_8	$\Gamma_7 + \Gamma_8$	Γ_{5}	$+\Gamma_{s}$		

Tabela Ι. Tabela Característica do grupo duplo no ponto Γ

Para introduzirmos o spin do elétron no problema precisamos conhecer o momento angular total j, que é dado por $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$, onde \vec{l} é o momento angular orbital e \vec{s} é o momento angular do spin. No entanto, o método vetorial (ordinário) é ina-

dequado para a situação quântica, uma vez que o princípio de incerteza "proibe" de conhecermos, simultaneamente, as três componentes de \vec{l} (ou \vec{s}). Portanto, utiliza-se os números l,s,j que são os números quânticos orbital, do spin, angular total, respectivamente, e m_j que possui os valores m_j = j, j-1,...,-j. Os valores que j pode assumir são j=l+s, l+s-1,..., |l-s|, onde para cada valor de j existem (2j+1) estados degenerados, conhecidos como multipleto j(ou nível X_j, onde X representa os orbitais S,P,D,F). O conjunto de todos os níveis (ou multipletos j) de diferentes valores de j que surgem para um dado l e s são conhecidos como multipleto l-s, cuja degenerescência é $\sum_{j} (2j+1) = (21+1).(2s+1)$ [5]. Os níveis de um multipleto l-s são separados na presença de interação spin-órbita.

2.3. Estrutura das Bandas de Energia.

Existe uma característica geral entre as estruturas de bandas de energia de todos os materiais que cristalizam-se em estruturas semelhantes à estrutura cúbica do ZnS. O interesse deste trabalho é em estrutura de bandas de energia que tenha gap de energia direto no ponto Γ , isto é, quando o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorram no ponto Γ .

Os átomos dos semicondutores com estruturas cristalinas do tipo da cúbica do ZnS são mantidos unidos principalmente por ligações covalentes tetragonais, originadas por orbitais híbridos SP³ ou orbitais tetragonais, onde cada átomo está ligado a quatro outros átomos através da comparti-lhação de um par de elétrons. A partir destes orbitais atômicos podemos construir uma base para descrever a banda em $\vec{k}=\vec{0}$ (ponto Γ).

O orbital S apresenta o mesmo tipo de simetria da representação irredutível Γ_1 e possui o número quântico orbital l=0. Com a introdução do spin do elétron $s = \frac{1}{2}$, conforme escrito na seção anterior, surge o nível S_{1/2} duplamente degenerado $\left(m_{j}=\pm\frac{1}{2}\right)$, localizado no fundo da banda de condução e é ocupado por dois elétrons em uma célula unitária. A representação irredutivel correspondente a este nível, na notação de grupo duplo, é Γ_6 . Os seis elétrons restantes ocupam o nível derivado dos três orbitais P, que apresentam a simetria da representação irredutível Γ_4 . Os orbitais P possuem número quântico orbital l=1, que associados ao spin $\frac{1}{2}$ do elétron geram um nível ou um multipleto l-s que é composto de dois multipletos j, um com $j = \frac{3}{2} \left(m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2} \right)$ e o outro com $j = \frac{1}{2}$ $\left(m_{i}=\pm\frac{1}{2}\right)$. Portanto, o nível possui seis estados degenerados no ponto Γ, exceto quando a interação spin-órbita é considerada, pois faz com que este nível seja dividido em dois: o nível $P_{3/2}$ com degenerescência quatro e o nível $P_{1/2}$ com dupla degenerescência. O nível $P_{3/2}$ possui maior energia que o nível $P_{1/2}$, e encontra-se no topo da banda de valência. A representação irredutivel na notação do grupo duplo correspondente ao nivel $P_{3/2}$ é Γ_8 e ao nível $P_{1/2}$ é $\Gamma_7.$ Esta discussão está ilustrada na figura 2.2, onde a banda de valência está dividida em banda de buraco pesado (bp), banda de buraco leve (bl) e banda de splitoff (bso).

Vamos agora discutir a estrutura das bandas dos compostos CdTe e o HgTe. Isto precisa ser entendido primeiro, de tal modo que, mais tarde possamos saber como eles se misturam para dar a estrutura de bandas do Hg_(1-x)Cd_xTe.



Figura 2.2. Vista simplificada da estrutura das bandas dos compostos semicondutores do grupo II-VI, indicando os extremos das bandas na vizinhança do ponto Γ e a energia spin-órbita Δ. A representação, a que pertence cada banda, é mostrada sem e com interação spin-órbita (onde o número entre parênteses indica a degenerescência total no ponto Γ).

As curvas de E versus \vec{k} para o CdTe na vizinhança do gap de energia, em $\vec{k} = \vec{0}$, são mostradas na fig.2.3. O máximo da banda de valência é Γ_8 e o mínimo da banda de condução é Γ_6 , como na maioria dos semicondutores com uma estrutura semelhante à cúbica do sulfeto de zinco.



Figura 2.3. Estrutura das bandas de energia do CdTe. Os valores mostrados de Eg e Δ são para temperaturas próximas de 0 K.

Para o HgTe, as curvas de E versus \tilde{k} estão ilustradas na fig.2.4. A partir desta figura podemos notar que, o HgTe é na verdade um material mais semi-metálico do que um semicondutor. Isto é devido ao estado Γ_6 , que normalmente é o mínimo da banda de condução em estruturas análogas à cúbica do ZnS, e aqui encontra-se em mais baixa energia do que o máximo da banda de valência Γ_8 . Portanto, o gap de energia ou a diferença $\Gamma_6 - \Gamma_8$ é negativa no HgTe, de tal modo que, a banda de buraco leve torna-se a banda de condução, unida por simetria a banda de buraco pesado no ponto Γ . A estrutura de banda do HgTe pode ser imaginada simplificadamente, tratando a diferença de energia $\Gamma_6 - \Gamma_8$ como sendo uma banda de energia proibida negativa.

> SERVIÇO DE BIDLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSO FÍSICA



Figura 2.4. Estrutura das bandas de energia do HgTe. Os valores mostrados para banda proibida negativa e Δ são para temperaturas próximas de 0 K.

Vamos agora considerar as conseqüências em termos da estrutura de bandas da mistura de dois compostos do grupo II-VI. Os cristais misturados de interesse são aqueles cujos gaps de energia são relativamente estreitos. Conforme mencionado na introdução, esses materiais podem ser tratados simplesmente como semicondutores ordinários com parâmetros que variam continuamente. No caso em que os dois compostos do cristal misturado possuem estruturas de bandas qualitativamente similares, o gap de energia e os outros parâmetros irão variar quase que linearmente com a composição x. O gap de energia versus a composição x está ilustrada na fig.2.5., onde existe apenas resultados experimentais nas vizinhanças das composições x = 0,2 à 0,4, que tem sido de maior interesse no desenvolvimento de dispositivos de emissão e detectores de infravermelho, que serão estudados na próxima seção.



Figura 2.5. Gap de energia proibida, Eg, versus a composição x no $Hg_{(1-x)}Cd_{x}Te$, para temperaturas próximas a 0K.

2.4. Importância dos Cristais Misturados.

A fim de entendermos a importância dos cristais misturados, vamos inicialmente descrever o princípio básico do funcionamento de um detector intrínsico de radiação. Um detector é constituído basicamente de uma amostra de semicondutor intrínsico provido de dois contatos elétricos. A resistência elétrica desta amostra depende da intensidade da radiação que incide sobre a superfície. Os fótons absorvidos excitam elétrons em estados próximos do topo da banda de valência através do gap de energia para estados próximos do fundo da banda de condução, produzindo excesso de pares elétron-buraco que atuam como portadores de cargas e mudam as propriedades elétricas do material. A forma como esta mudança é detectada depende das propriedades e da configuração do semicondutor. Por exemplo, para uma amostra fotocondutiva, esta mudança é detectada através de um aumento na condutividade elétrica. O principal critério para um semicondutor permitir efeitos de fotocondutividade e fotovol-

tagem, grandes o suficiente para ser útil, é o conhecimento do gap de energia, Eg, correspondente ao maior comprimento de onda, λ_c , da radiação detectada, dado por:

$$Eg = \frac{hc}{\lambda_c} \Rightarrow Eg(eV) = \frac{1.24}{\lambda_c(\mu m)}, \qquad (2.4.1)$$

onde h é a constante de planck e c a velocidade da luz. O maior comprimento de onda detectado é conhecido como comprimento de onda de corte. A resposta do material semicondutor é nula para fótops com energias menores que a largura do gap, $(\lambda \gg \lambda_c)$, neste caso a energia é insuficiente para excitar os elétrons da banda de valência para a banda de condução. A resposta é também pequena para fótons de energias elevadas, $(\lambda \ll \lambda_c)$, porque os fótons são densamente absorvidos nas camadas superficiais, nas quais a maioria dos semicondutores são inativos. A resposta, portanto, é máxima para energias correspondentes a Eg $(\lambda \approx \lambda_c)$.

A energia luminosa proveniente de ondas de comprimento desde o infravermelho até o ultravioleta é detectada e medida através de detectores de radiação, dos quais estamos interessados, particularmente, em detectores de infravermelho intrínsico. Na figura 2.6 está plotado, através da eq.(2.4.1), o gap de energia, Eg, versus o comprimento de onda, λ_c , para alguns semicondutores bem conhecidos utilizados em detectores de infravermelho. Os gaps de energia de todos os semicondutores variam com a temperatura.

Os detectores de infravermelho intrínsico são bem cobertos para comprimentos de ondas de $1-8\mu$ m, pelos semicondutores simples ou compostos já conhecidos, porém não existem materiais com gaps de energias adequado para comprimentos de ondas maiores que 8μ m. Portanto, existe a necessidade de novos materiais apropriados para detectores de infravermelho que tenham gaps de energias para os comprimentos de ondas ainda não supridos. Para satisfazer esta necessidade usam-se os cristais misturados de dois ou mais semicondutores, ajustando-se a concentração x para a faixa de comprimentos de ondas desejados. É importante salientar que muitos governos (principalmente USA e URSS) consideram os compostos binários do grupo II-VI, materiais estratégicos, principalmente na fabricação de detectores-IV de uso militar e detectores na faixa de 10µm (satélites espiões).



Figura 2.6. Gap de energia versus o comprimento de onda máximo detectado, inclui<u>n</u> do os pontos de alguns semicondutores comuns.

2.5. Investigações em Gás de Elétrons Bi-Dimensional em amostra de Hg(Cd)Te.

O efeito Hall Quântico (QHE) é um efeito de baixas temperaturas que ocorre em gás de elétrons bi-dimensional (2D), caracterizado pela quantização da resistência transversal (Hall) em coincidência com a ida a zero da resistência elétrica paralela à corrente; maiores detalhes sobre o QHE podem ser

obtidos no apêndice I. A primeira demonstração do QHE em amostras de Hg(Cd)Te (ou MCT) foi realizada por Kirk e outros [1], onde o gás 2D foi formado em camada de inversão de MISFET. Entre as inúmeras medidas feitas por Kirk e outros, as realizadas simultaneamente com gás 2D em MISFET de MCT e gás 2D de alta mobilidade em heteroestrutura de GaAs/AlGaAs são de especiais interesses neste trabalho. Portanto, a seguir descreveremos as condições de cada amostra.

O MISFET foi basicamente construído com uma amostra semicondutora de $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$ tipo-p e sulfeto de zinco (ZnS) como isolante. A concentração de impurezas na amostra de MCT foi da ordem de $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. O comprimento de onda de corte era da ordem de $9,7\mu$ m, que corresponde a um valor de x de 0,22 e um gap de energia de 0,127 eV. Com uma voltagem de porta apropriada, a densidade de portadores na camada de inversão, N_{inv} , pode variar de $1,36 \times 10^{11}$ à $5,32 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, logo, a mobilidade é trocada de $\mu = 6,28 \times 10^4$ para $\mu = 4,89 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, em $T \le 1 \text{ K}$. A mobilidade e a densidade de portadores na heteroestrutura de GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, em $T \le 1 \text{ K}$, foi de $\mu = 1,9 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e $3,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente.

O MISFET e a heteroestrutura, especificados acima, foram conectados em série com a corrente da fonte. A voltagem de entrada na porta do MISFET foi ajustada, de tal modo que, a densidade de portadores da MCT fosse aproximadamente igual a densidade do dispositivo de GaAs, com a finalidade de demonstrar explicitamente a universalidade do efeito Hall quântico. Na fig.2.7 estão ilustradas as reproduções dessas medidas, onde os círculos indicam regiões com descontinuidades na resistência Hall, ρ_{xy} , e na magneto-resistência longitudinal, ρ_{xx} , da amostra de Hg(Cd)Te.

Este trabalho possui como objetivo principal explicar qualitativamente as descontinuidades observadas na fig.2.7.



Figura 2.7. Magneto-resistencia (a) Hall e (b) longitudinal de heteroestruturas de GaAs/AlGaAs (linhas pontilhadas) e de MISFET de Hg(Cd)Te (linhas sólidas) versus campo magnético, ilustrando as descontinuidades medidas por Kirk e outros [1].

CAPÍTULO III

APROXIMAÇÃO DE MASSA EFETIVA

3.1. Introdução.

A mais simples versão da Aproximação de Massa Efetiva(EMA) trata o comportamento dos elétrons, numa rede periódica, como se eles tivessem massas características do mínimo da banda de condução, desprezando a não parabolicidade e o acoplamento com outros extremos da banda.

Essa massa característica é conhecida como massa efetiva (m^{*}), pois nela estão incluídas todos os efeitos das forças internas da rede periódica (potencial cristalino) sobre o elétron. A massa específica é apenas uma construção teórica, um parâmetro conveniente, uma aproximação com validade limitada à uma pequena região do espaço recíproco, próximo ao mínimo da banda de condução. Em princípio, deveríamos conhecer a estrutura eletrônica do cristal, em torno de um extremo, para calcularmos as massas efetivas locais. Na realidade usamos valores de massas efetivas determinadas experimentalmente através da medida de absorção óptica no cristal.

Considere uma partícula de massa m movendo-se em um potencial cristalino V_c(ř), de periodicidade T. A completa descrição quântica deste movimento envolve a solução da equação de Schrödinger:

$$H_{o}\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n}(\vec{k}) \Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (3.1.1)$$

onde $H_o = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V_c(\vec{r})$.

Em 1928, F. Bloch demonstrou o importante teorema que afirma que, a solução da equação de Schrödinger para um

potencial periódico deve ter a forma especial:

$$\Psi_{\vec{nk}}(\vec{r}) = u_{\vec{nk}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}.\vec{r}), \qquad (3.1.2)$$

onde $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ possui período igual ao da rede cristalina, sendo $u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}), \vec{k}$ é o vetor de onda reduzido, ou seja, restrito a primeira zona de Brillouin e n o índice da banda.

Consideremos agora que todos os efeitos das forças internas estão contidos na chamada massa efetiva do elétron. A massa efetiva passa a ter três componentes quando os eixos do sistema são escolhidos ao longo das direções principais do tensor de massa efetiva:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_1^*} + \frac{1}{m_2^*} + \frac{1}{m_3^*} , \qquad (3.1.3)$$

onde de [6] temos:

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i^2} , \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.1.4)$$

Essas três componentes não são necessariamente diferentes, mas dependem de como a energia da banda, $E_n(\vec{k})$, varia em função de \vec{k} , próximo de um dos extremos.

Implicações práticas podem ser ilustradas plotando-se a energia das bandas $E_n(\vec{k})$ como função de \vec{k} , em algumas possíveis configurações, que dependem da estrutura cristalina.

Consideremos o caso em que as energias das bandas aparecem como parábolas simétricas no espaço \vec{k} , com gap direto em $\vec{k} = \vec{0}$ (fig.3.1.a.). A massa efetiva em cada banda será especificada pela eq.(3.1.4). Sendo parábolas simétricas, ou seja, que não dependem da orientação no espaço \vec{k} , suas três componentes são iguais: $m_1^* = m_2^* = m_3^*$.


Figura 3.1.a. Energia do elétron vs. o vetor de onda reduzido. b. Superfície de energia constante no espaço k.

Em seguida, se considerarmos uma energia constante $E_n(\vec{k})$, e tomarmos todos os valores de \vec{k} que levem a esta energia, teremos plotado a superfície de energia constante no espaço \vec{k} . Para a simples parábola da fig.3.1.a., este processo nos leva a uma superfície esférica, como mostrada na fig.3.1.b.

Esta simples variação de $E_n(\vec{k})$ com \vec{k} não é exibida por todos os materiais. Materiais como germânio e silício exibem funções $E_n(\vec{k})$ complicadas, conforme esboçada na fig.3.2.a. Note que, a variação da energia não é uma simples parábola, porém uma curva complexa com dois mínimos em $k = \pm k_0$ e um máximo. Isto revela que a derivada segunda da energia, $\frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k^2}$, que é proporcional ao inverso da massa efetiva, é a mesma em ambos os mínimos. A superfície de energia constante da banda de condução aparece como elipsóides centrados em $\pm k_0$ (fig.3.2.b). O eixos maior e menor do elipsóide indicam as componentes do tensor de massa efetiva para os elétrons na banda de condução.

> SERVIÇO DE BIGLIUTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA



Figura 3.2. a. Variação qualitativa na energia dos elétrons de materiais tais como Ge e Si, ao longo da direção k.

b. Superfície de energia constante no espaço k para o Ge e Si.

Perto do mínimo k_0 , conforme fig.3.2.a, a energia é bem aproximada por:

$$E_{n=0}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_1} (k_0 - k_1)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_1} (k_2^2 + k_3^2), \qquad (3.1.5)$$

onde $m_1 = m_1^*$:= longitudinal $m_t = m_2^* = m_3^*$ t = transversal

Isto significa que, para soluções perto de um extremo, o efeito do potencial cristalino pode ser substituído por um operador energia cinética efetivo, da forma:

$$T^{\bullet} = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{1}{2m_t} (P_2^2 + P_3^2)$$
 (3.1.6)

Esta é a idéia básica da teoria de massa efetiva. É mais simples tratar um problema complicado de estrutura eletrônica superposto a um potencial V(\vec{r}), trocando H_o por T^{*}:

$$[T^* + V(\vec{r})]\Psi = E\Psi$$
 (3.1.7)

3.2. Aproximação de Massa Efetiva : Modelo de uma banda

Consideremos, agora, um potencial V(\vec{r}) (não necessariamente periódico) superposto ao potencial cristalino V_c(\vec{r}). A função de onda $\Psi(\vec{r})$ do estado eletrônico da partícula deve satisfazer a equação:

$$(H_{o} + V(\vec{r}))\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}),$$
 (3.2.1)

onde H_o é o Hamiltoniano periódico não pertubado, com soluções para a energia E dentro da mais baixa banda de energia, e com todas as demais bandas afastadas o suficiente desta. A mais baixa banda (a qual omitiremos o índice) possui um mínimo em \vec{k}_{o} . $\Psi(\vec{r})$ pode ser expandida num conjunto de funções de Bloch $\{\Psi_{\vec{k}}\}$, que são. autofunções de H_o , de auto-estados $\{E(\vec{k})\}$. Assim, a solução geral da eq.(3.2.1), pode ser escrita como uma combinação linear dos estados $\Psi_{\vec{r}}$ de H_o , isto é,

$$\Psi(\vec{r}) = \int a(\vec{k}) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{k}. \qquad (3.2.2)$$

A substituição de

$$H_{0}\Psi_{\vec{r}}(\vec{r}) = E(\vec{k})\Psi_{\vec{r}}(\vec{r}), \qquad (3.2.3)$$

e (3.2.2) em (3.2.1), nos dá:

$$[E(\vec{k}) - E]a(\vec{k}) + \int \mathcal{U}(\vec{k}, \vec{k}')a(\vec{k}')d\vec{k}' = 0, \qquad (3.2.4)$$

onde
$$\mathfrak{U}(\vec{k}, \vec{k}') = \int \Psi_{\vec{k}}^* V(\vec{r}) \Psi_{\vec{k}'} d\vec{r}$$

= $\int (u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}'}) V(\vec{r}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}).\vec{r}} d\vec{r}.$ (3.2.5)

O produto $u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}}$, é uma função periódica de r e, portanto, pode ser expandido em séries de Fourier [7]:

$$u_{\vec{k}}^{*}(\vec{r}) \ u_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \sum_{p} M_{\vec{k}\vec{k}}^{(p)} e^{-i\vec{G}_{p}\cdot\vec{r}}, \qquad (3.2.6)$$

onde $M_{\vec{k}\vec{k}}^{(p)}$ são os coeficientes numéricos, e \vec{G}_p são vetores da rede recíproca. Portanto, a eq.(3.2.5) torna-se:

$$\mathcal{U}(\vec{k},\vec{k}') = \sum_{p} M_{\vec{k}\vec{k}'}^{(p)} \int e^{i(\vec{k}'-\vec{k}-\vec{G}_{p}).\vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r}. \qquad (3.2.7)$$

A fim de se obter uma forma simples para a equação acima, duas hipóteses devem ser feitas:

(i) $V(\vec{r})$ é um potencial bem comportado, isto é, varia suavemente dentro da célula unitária. Esta suposição nos diz que, o termo p=0 é dominante na eq.(3.2.7), pois potenciais comportados requerem componentes de Fourier de comprimento de onda muito maior que o espaçamento da rede, portanto, \vec{k} 's pequenos.

Pela normalização de Ψ_{t} temos

$$(\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}'}) = \int \Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \Psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(\vec{k}' - \vec{k}). \qquad (3.2.8)$$

$$\begin{aligned} (\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}'}) &= \int (u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}'}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} d\vec{r} \\ &= \sum_{p} M_{\vec{k}\vec{k}'}^{(p)} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{G}_{p}) \cdot \vec{r}} d\vec{r} \\ &= (2\pi)^3 \sum_{p} M_{\vec{k}\vec{k}'}^{(p)} \delta(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{G}_{p}) \,. \end{aligned}$$
(3.2.9)

Desde que, $\vec{k}' \in \vec{k}$ estejam ambos na primeira zona de Brillouin, $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}_p$. O termo mais importante é p = 0, $G_p \equiv 0$. Usando este resultado em (3.2.9) e igualando com (3.2.8), obtemos:

$$M_{\bar{k}\bar{k}}^{(0)} = \frac{1}{(2\pi)^3}.$$
 (3.2.10)

Usando este resultado em (3.2.7.) podemos escrever

$$\mathfrak{U}(\vec{k},\vec{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int V(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} d\vec{r}. \qquad (3.2.11)$$

(ii) $E(\tilde{k})$ é uma função quadrática na vizinhança de um extremo

 ${f k}_{
m o}$, e assume a seguinte forma:

$$E(\vec{k}) = \epsilon_0 + \sum_j \frac{\hbar^2}{2m_j^*} (k_{0j} - k_j)^2. \qquad (3.2.12)$$

Definiremos:

$$A(\vec{r}) = \int a(\vec{k}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{r}} d\vec{k} . \qquad (3.2.13)$$

Se substituirmos (3.2.11-3.2.13) em (3.2.4) temos:

$$\left[\sum_{j} \left(\frac{-h^2}{2m_j^*} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}\right) + V(\vec{r}) - (E - \epsilon_0)\right] A(\vec{r}) = 0. \qquad (3.2.14)$$

Que é facilmente identificado como a equação de Schrödinger de uma partícula com massas efetivas (m_j^*) , movendo-se no potencial V(\vec{r}).

O significado de A(\vec{r}) pode ser entendido, se lembrarmos que, a eq.(3.2.14) somente é válida na vizinhança de \vec{k}_0 e que, portanto, a eq.(3.2.2) pode ser aproximada por:

$$\Psi(\vec{r}) \simeq u_{\vec{k}_0}(\vec{r}) \int a(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{k}.$$
 (3.2.15)

$$\Psi(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}_0}(\vec{r}) \int a(\vec{k}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0) \cdot \vec{r}} d\vec{k} = \Psi_{\vec{k}_0}(\vec{r}) A(\vec{r}), \quad (3.2.16)$$

sendo $\Psi_{\vec{k}_0}(\vec{r})$, a função de Bloch em \vec{k}_0 , e A(\vec{r}) a função envelope, ou em outras palavras, uma amplitude de modulação da onda de Bloch. A densidade de probabilidade total $|\Psi(\vec{r})|^2$ é o produto da densidade de probabilidade $|u_{\vec{k}_0}(\vec{r})|^2$, determinado pelo potencial cristalino $V_c(\vec{r})$, vezes o fator modulação $|A(\vec{r})|^2$, determinado pelo potencial superposto V(\vec{r}). 3.3. Aproximação de Massa Efetiva na Presença de uma Interface.

Um campo elétrico aplicado perpendicular à interface da junção metal-isolante-semicondutor (MIS) apanha elétrons próximos da borda da banda de condução para a camada de inversão, criada perto da interface semicondutor-isolante. A dinâmica dos elétrons na camada de inversão é usualmente tratada na aproximação de massa efetiva. O efeito da estrutura cristalina de um semicondutor é representado pela massa efetiva do minimo da banda de condução. A grande função trabalho do isolante, que impede os elétrons do semicondutor de passarem para o isolante, simula uma grande barreira de potencial na interface. Este potencial extra é tratado como parte do potencial efetivo $V(\vec{r})$, que inclui também a voltagem de entrada na porta do MISFET e a interação entre elétrons. Na derivação usual da EMA, potencial efetivo V(r) é restrito a variar suavemente no espaço, condição (i) da seção anterior, violada pela barreira na interface. Sham e Nakayama[8] construiram uma teoria que supera esta dificuldade, e ainda mantém a EMA com um potencial externo variando suavemente devido a voltagem de entrada na porta, e será descrita a seguir.

Lembre-se que a maneira usual de derivar a EMA, feita na seção anterior, é expandir a função de onda do elétron na presença de um potencial suave, $V(\vec{r})$, em termos de ondas de Bloch do cristal semicondutor perfeito. O coeficiente desta expansão forma uma função de onda envelope, obedecendo a equação de Schrödinger, com somente o potencial externo como potencial efetivo. Na presença da interface, as funções de base para a expansão não são as ondas de Bloch no semicondutor, mas as autofunções de energia do sistema semicondutor-isolante na condição de "flat-band", isto é, o potencial fora da interface é o potencial cristalino do corpo do semicondutor ou o do isolante. Nesta condição não se permite que haja redistribuição de cargas eletrônicas nos íons próximos à interface.

O sistema de coordenadas é escolhido tal que, o eixox seja perpendicular à interface com o semicondutor no semieixo positivo. O eixo-y está ao longo da interface, paralelo ao momento do elétron.

A construção de um auto-estado de energia, satisfazendo as condições de contorno na interface, é conceitualmente correta. A idéia é solucionar a equação de Schrödinger em um lado da interface, que inclua ondas de Bloch propagantes (k. real) e ondas evanescentes (k. imaginário) combinando com ondas do outro lado da interface, onde todas as ondas possuem a mesma energia e vetor de onda fixo ky. Representaremos os estados de flat-band do elétron por: $\{\Psi_i^{(\cdot)}\}\$ e $\{\Psi_j^{(\cdot)}\}\$, que contém ondas de Bloch no semicondutor que se propagam na direção da interface (k. negativo) e na direção oposta à interface (k. positiva), respectivamente; $\{\chi_{\lambda}\}\$ é um conjunto de ondas de Bloch evanescentes no semicondutor, com k. imaginário, que decai na direção positiva de x; e $\{\bar{\chi}_{\mu}\}\$ é o conjunto de ondas de Bloch evanescentes no isolante, que decai ao longo do eixo-x negativo.

A solução da equação de Schrödinger, para um sistema que contém interface, é a combinação linear do conjunto de ondas citadas acima, que pode ser escrita como:

$$\Phi_{k_{y},E}^{(i)}(k_{x}, x, y) = \Psi_{i}^{(-)} - \sum_{j} S_{ij} \Psi_{j}^{(+)} - \sum_{\lambda} T_{\lambda i} \chi_{\lambda}, \qquad x > 0,$$

$$\Phi_{k_{x},E}^{(i)}(k_{x}, x, y) = \sum_{j} R_{ij} \overline{\chi}_{\mu}, \qquad x < 0,$$
(3.3.1)

 $\{\Phi_{k_y,E}^{(i)}\}\$ são os auto-estados do Hamiltoniano do sistema semicondutor-isolante, com auto-valor E e vetor de onda k_y . Os coeficientes S_{ij} formam a matriz S, que desempenha um importante

papel na determinação das propriedades de um elétron no espaço de cargas.

Os coeficientes S, T, R são determinados através da continuidade da função de onda $\Phi^{(i)}_{{
m k}_{
m V},{
m E}}$ e da sua derivada primeira na interface. Naturalmente, tal cálculo requer um conhecimento detalhado da estrutura de bandas do semicondutor e do isolante. A EMA na presença de uma interface foi originalmente utilizada por Sham e Nakayama para uma interface de silício e dióxido de silício (Si-SiO₂). O silício é um material semicondutor com estrutura de bandas bem conhecida, e é considerado um material de gap grande de energia, de modo que, os resultados da EMA devido a Sham e Nakayama nem sempre reproduzem a usual EMA, tendo um grande passo na interface. A grande barreira devido ao isolante, faz com que tenhamos $R_{\mu i}=0$. Assim, para que a função $\Phi_{k_{v},E}^{(i)}$ se anule na interface é suficiente determinarmos S_{ij} e $T_{\lambda i}$. Embora as ondas evanescentes não sejam importantes longe da interface, elas são os ingredientes necessários que determinam, via condições de contorno na interface, a combinação linear das soluções na aproximação de flat-band.

Agora, se além disso, temos um potencial externo causado pela voltagem de entrada na porta, que pode ser suavemente variado, então a função de onda do elétron pode ser expandida em termos das bases de auto-funções na condição de flat-band, isto é,

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i} \int d\mathbf{k}_{x} \mathbf{a}^{(i)}(\mathbf{k}) \Phi^{(i)}_{\mathbf{k}_{y}, \mathbf{E}}(\mathbf{k}_{x}, \mathbf{x}, \mathbf{y}). \qquad (3.3.2)$$

Como na derivação usual, os coeficientes da expansão satisfazem uma equação integral, que pode ser convertida em uma equação diferencial como a equação de Schrödinger. Contudo, as condições de contorno para a função de onda envelope podem ser diferentes das condições usuais. Deve-se frizar que as condições de contorno para a função envelope devem ser derivadas e não impostas para satisfazer as expectativas físicas.

Considere o caso de uma banda com um único extremo em (k₀,0,0). Existem somente três estados de Bloch de flat-band, $\Psi_{k_0-k}^{(\cdot)}$, $\Psi_{k_0-k}^{(*)}$ e χ_{k_0-k} . A matriz S torna-se um número da forma S = e^{-i2δ}, e tem dois casos limites distintos quando δ é expandido em de potências de k.

Caso A: S
$$\rightarrow e^{-i2ka_s}$$

Distante da interface, a eq.(3.3.1) nos dá:

$$\Phi(\mathbf{k},\mathbf{x},\mathbf{y}) \simeq \operatorname{sen}(\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{a}_{s}))\Psi_{\mathbf{k}_{0}}(\mathbf{x},\mathbf{y}). \qquad (3.3.3)$$

Seguindo rigorosamente a derivação da prévia seção, Sham e Nakayama mostraram que a função envelope, A(x), definida similarmente como na eq.(3.2.13), satisfaz:

$$\left[\left(\frac{-\hbar^2}{2\mathfrak{m}^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2}\right) + V(\mathbf{x}) - (\mathbf{E} - \epsilon_0)\right] \mathbf{A}(\mathbf{x}) = 0, \qquad (3.3.4)$$

com a seguinte condição de contorno:

$$A(x=0) = 0.$$
 (3.3.5)
Caso B. S $\rightarrow -1.$

$$\Phi(\mathbf{k},\mathbf{x},\mathbf{y}) \simeq \cos(\mathbf{k}\,\mathbf{x})\,\Psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x},\mathbf{y})\,. \tag{3.3.6}$$

Novamente, a função envelope, A(x), satisfaz a masma eq.(3.3.4), porém acompanhada da condição de contorno abaixo:

$$\frac{dA(x)}{dx}\Big|_{x=0} = 0.$$
 (3.3.7)

Os casos limites apresentados mostram que a condição de contorno não é necessariamente óbvia (quando a função envelope vai a zero na interface), mas é determinada pela forma limite da matriz S.

O método de Sham-Nakayama descrito aqui é a aproximação de massa efetiva de uma banda, que é muito boa para semicondutores de gap de energia grande. Para semicondutores de gap estreito, a forte interação entre a banda de valência e a de condução requer uma aproximação de massa efetiva multi-bandas, que é o objetivo do próximo capítulo.

CAPÍTULO IV

O MÉTODO KP

4.1. Introdução.

 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ é um método semi-impírico, que foi desenvolvido por Luttinger[6] e por Kane[9] nos anos 50, para explorar as propriedades das bandas de energias e funções de onda nas vizinhanças de algum ponto extremo importante (máximo ou mínimo) no espaço \vec{k} , com auxílio da teoria de perturbação. Este método é conseqüência direta do teorema de Bloch e foi empregado nos primórdios do desenvolvimento da teoria de bandas como uma aproximação. Mais tarde, Dresselhaus[10] estabeleceu a importância da aproximação $\vec{k} \cdot \vec{p}$ como uma base rigorosa para a determinação empírica da estrutura de bandas. O método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, associado com a simetria do cristal, mostra que a estrutura de bandas na vizinhança de um ponto no espaço \vec{k} depende de um pequeno número de parâmetros (gaps das bandas e massas) que podem ser determinados experimentalmente.

O uso de argumentos de simetria é de grande importância para o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, devido ao fato do número de constantes indeterminadas serem grandemente reduzidas, e também forçar a degenerescência em muitos casos de interesse. Vamos limitar a aplicação do método apenas a estruturas eletrônicas de simetria semelhantes à do sulfeto de zinco.

4.2. Representação $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

A parte periódica das funções de Bloch para um cristal, u_n, forma um conjunto completo de funções periódicas de uma dada célula para qualquer k fixo dentro da primeira zona de Brillouin. A partir disto, segue que, se conhecermos todos os elementos de matriz do operador momento e as auto-energias do conjunto $u_{\vec{n}\vec{k}}$, em todas as bandas para um determinado \vec{k} , então, a energia para todos os valores de \vec{k} serão completamente determinadas. Chamamos isto de representação $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

4.2.a. Sem interação spin-órbita.

Vamos inicialmente tratar o problema de um elétron de massa "m" movendo-se em um potencial cristalino $V_c(\vec{r})$. Os estados eletrônicos serão descritos pelo Hamiltoniano H_o ,

$$H_{o} = \frac{P^{2}}{2m} + V_{c}(\vec{r}), \qquad (4.2.1)$$

que satisfaz a equação de Schrödinger:

$$H_{o}\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n}(\vec{k})\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (4.2.2)$$

onde, pelo teorema de Bloch, as funções de onda são da forma:

$$\Psi_{\vec{n}\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{n}\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (4.2.3)$$

e onde u_{nk}(r) possui a mesma periodicidade do cristal; k é um vetor de onda da primeira zona de Brillouin e n é o índice das bandas.

Substituindo a eq.(4.2.3) em (4.2.2) e multiplicando ambos os lados de (4.2.2) por $e^{-\vec{k}\cdot\vec{l}}$ temos:

$$H_{\vec{k}} u_{\vec{nk}}(\vec{r}) = E_{n}(\vec{k}) u_{\vec{nk}}(\vec{r}), \qquad (4.2.4)$$

que é o Hamiltoniano operando em u (r), definido por:

$$H_{\vec{k}} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} H_{o} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} . \qquad (4.2.5)$$

Um modo geral de tratar H_{k} é expandir as exponenciais em (4.2.5), que nos leva a seguinte série de potência:

$$H_{\vec{k}} = H_{o} - i \vec{k} \cdot [\vec{r}, H_{o}] - \frac{1}{2!} \sum_{i,j} k_{i} k_{j} [r_{i}, [r_{j}, H_{o}]] + \frac{1}{3!} \sum_{i,j} k_{i} k_{j} k_{i} [r_{i}, [r_{j}, [r_{i}, H_{o}]]] \dots , \qquad (4.2.6)$$

onde os colchetes [] representam o comutador entre os operadores.

Usaremos a relação de comutação geral[11],

$$[\vec{r}, f(\vec{r}, \vec{p})] = i\hbar \nabla_{\vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}), \qquad (4.2.7)$$

onde ∇_p é o gradiente com respeito à variável p. Para o Hamiltoniano H_o, temos os seguintes comutadores para a eq.(4.2.6):

$$-i[\vec{r},H_{o}] = \frac{\hbar}{m}\vec{P},$$
 (4.2.8)

$$-\frac{1}{2}[\mathbf{r}_{i},[\mathbf{r}_{j},\mathbf{H}_{o}]] = \frac{\hbar^{2}}{2m}\delta_{ij}. \qquad (4.2.9)$$

Observe que, para o Hamiltoniano H_o , todos os comutadores de ordem superiores à segunda são nulos. Substituindo os resultados das eqs.(4.2.8-9) em (4.2.6) podemos escrever:

$$H_{\vec{k}} = \frac{P^2}{2m} + V_c(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{P} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad (4.2.10)$$

onde o terceiro termo, linear em \vec{k} , dá o nome ao método e o quarto termo, quadrático em \vec{k} , é a energia cinética do elétron livre .

O objetivo agora é escrevermos a função de onda para qualquer \vec{k} , em termos de um conjunto conhecido de funções de onda em um ponto \vec{k}_0 de todas as bandas, $u_{\vec{nk}_0}(\vec{r})$, ou seja,

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n'} c_{n'n}(\vec{k} - \vec{k}_0) u_{n'\vec{k}_0}(\vec{r}), \qquad (4.2.11)$$

que é chamada de representação \vec{k}_0 .

Usando a solução conhecida da equação de Schrödinger para \vec{k}_0 ,

$$H_{\vec{k}_{0}} u_{\vec{n}\vec{k}_{0}}(\vec{r}) = E_{n}(\vec{k}_{0}) u_{\vec{n}\vec{k}_{0}}(\vec{r}), \qquad (4.2.12)$$

podemos reescrever a eq.(4.2.10) em termos de H_{k_0} , e utilizar este resultado em (4.2.4), o que nos dá a seguinte equação:

$$\left\{H_{\vec{k}_{0}} + \frac{\hbar}{m}(\vec{k} - \vec{k}_{0}) \cdot \vec{P} + \frac{\hbar^{2}}{2m}(k^{2} - k_{0}^{2})\right\} \mathbf{u}_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n}(\vec{k}) \mathbf{u}_{n\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (4.2.13)$$

que pode ser convertida em uma equação de autovalores matricial, substituindo a eq.(4.2.11) em (4.2.13), e multiplicando ambos os lados da eq.(4.2.13) por $u^*_{\vec{nk}_0}(\vec{r})$. Em seguida, integramos na célula unitária em que os u's são normalizados:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_{n'}(\vec{k}_{0}) + \frac{\hbar^{2}}{2m}(\vec{k}^{2} - \vec{k}_{0}^{2}) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m}(\vec{k} - \vec{k}_{0}) \cdot \vec{P}_{nn'} \right\} c_{n'n} = E_{n}(\vec{k}) c_{nn}, \quad (4.2.14)$$
$$\vec{P}_{nn'} = \int_{c.u.} u_{n\vec{k}_{0}}^{*}(\vec{r}) \vec{P} u_{n'\vec{k}_{0}}(\vec{r}) d\vec{r}, \qquad (4.2.15)$$

Embora a eq.(4.2.14) seja correta para qualquer \vec{k} , ela é muito mais útil quando \vec{k} está bem próximo de \vec{k}_0 , de modo que a parte não diagonal do Hamiltoniano

$$\frac{\hbar}{m}(\vec{k}-\vec{k}_{o})\cdot\vec{P}_{nn'}$$

possa ser tratada como uma perturbação.

O tipo de teoria de pertubação utilizada é a descrita por Löwdin[12]. O método de Löwdin assume que o conjunto dos estados eletrônicos podem ser divididos em duas classes A e B. Na primeira categoria, {A}, estão os estados que interagem fortemente entre si e que determinam as soluções (energias e funções de onda) em primeira ordem na teoria de pertubação. Na segunda categoria, {B}, estão os outros estados cuja interação com os estados da primeira classe é pequena e que, portanto, podem ser tratados como perturbação de segunda ordem. Após remover as interações conectando os estados A e B, como em teoria de pertubação ordinária, os estados em A são deixados com interações "renormalizadas" uns com os outros. A matriz de interação renormalizada precisa ser diagonalizada exatamente. As limitações do método não estão na teoria de perturbação, mas sim, no número de parâmetros que podemos realmence conhecer ou determinar experimentalmente.

4.2.b. Com interação spin-órbita

Trataremos agora o problema do elétron que possui o Hamiltoniano da eq.(4.2.1) acoplado à interação spin-órbita, dado pelo Hamiltoniano H_{SO}, escrito como:

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4 m^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla_{\vec{r}} V_c(\vec{r})) \cdot \vec{P}, \qquad (4.2.16)$$

onde $\vec{\sigma}$ é o vetor matriz spin de Pauli e "c" a velocidade da luz. A vantagem da introdução deste termo reside no fato de que a interação spin-órbita diminui a simetria do Hamiltoniano, de modo que os estados degenerados são afastados. Portanto, o Hamiltoniano¹ na presença da interação spin-órbita é:

$$H_{o} = \frac{P^{2}}{2m} + V_{c}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m^{2}c^{2}} (\vec{\sigma} \times \nabla_{\vec{r}} V_{c}(\vec{r})) \cdot \vec{P}. \qquad (4.2.17)$$

Já que $V_c(\vec{r})$ é periódico e \vec{P} invariante por translação da rede, o Hamiltoniano H_o ainda possui ondas de Bloch como solução, tais como:

$$\Psi_{\vec{nk}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{nk}}(\vec{r}), \qquad (4.2.18)$$

com auto-energia $E_n(\vec{k})$, e onde $u_{\vec{nk}}(\vec{r})$ é uma função periódica dependente do spin.

¹Todas as notações utilizadas a partir deste ponto (ex. $H_{\circ}, E_{n}(\vec{k}),...$) são idênticas ao item a., porém não devem ser confundidas. Foram utilizadas apenas para que não houvesse sobrecarga nas notações.

Utilizaremos os resultados do item a., para encontrarmos o Hamiltoniano H₁ que opere em $u_{nk}(\vec{r})$. Os comutadores de H₀ são:

$$-i[\vec{r},H_{o}] = \frac{\hbar}{m}\vec{P} + \frac{\hbar^{2}}{4m^{2}c^{2}}(\vec{\sigma} \times \nabla_{\vec{r}}V_{c}(\vec{r})), \qquad (4.2.19)$$

$$-\frac{1}{2}[\mathbf{r}_{i},[\mathbf{r}_{j},\mathbf{H}_{o}]] = \frac{\hbar^{2}}{2m}\delta_{ij}. \qquad (4.2.20)$$

Para H_0 com interação spin-órbita, todos os comutadores de ordem superiores à segunda são também nulos. Substituindo os resultados das eqs.(4.2.19-20) na eq.(4.2.7) temos:

$$H_{\vec{k}} = H_{o} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \left[\vec{P} + \frac{\hbar}{4 m c^{2}} (\vec{\sigma} \times \nabla_{\vec{r}} V_{c}(\vec{r})) \right] + \frac{\hbar^{2} k^{2}}{2m}, \qquad (4.2.21)$$

onde o segundo termo é o termo perturbativo. $H_{\vec{k}}$ também pode ser escrito em termos de um $H_{\vec{k}_0}$, para um ponto \vec{k}_0 conhecido, como foi feito no item a:

$$H_{\vec{k}} = H_{\vec{k}_{0}} + \frac{\hbar}{\vec{m}}(\vec{k} - \vec{k}_{0}) \cdot \left[\vec{P} + \frac{\hbar}{4 m c^{2}} (\vec{\sigma} \times \nabla_{\vec{r}} V_{c}(\vec{r})) \right] + \frac{\hbar^{2}}{2m} (k^{2} - k_{0}^{2}) \cdot (4.2.22)$$

4.3. Modelo de Kane (Modelo de Oito Bandas).

Consideremos que sejam conhecidas as soluções da seguinte equação:

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_c(\vec{r})\right]U_i = E_i U_i \qquad (4.3.1)$$

e usaremos o conjunto completo de U_i como uma base para a nossa representação. A teoria de grupo nos dá as propriedades de simetria das funções U_i, que são uma base para a estrutura semelhante à cúbica do ZnS, no ponto Γ. Representaremos por $|s\rangle$ a função para a banda de condução, $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ as funções para a banda de valência e as funções spin serão simbolizadas por †, que significa spin para cima, e por ↓, que significa spin para baixo. A representação a qual as funções pertencem estão listadas na tabela I, conforme mencionado no capítulo II.

Os componentes II-VI e III-V de gap estreito possuem uma forte interação entre a banda de condução mais baixa e as três bandas de buraco. Quando esta forte interação é considerada, ou seja, quando introduzimos o acoplamento spinórbita na eq.(4.3.1) é conveniente construir uma combinação linear das funções $|s\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$, juntamente com o spin $s=\pm\frac{1}{2}$ (14), de tal maneira que, o acoplamento spin-órbita torne-se diagonal. Os coeficientes dessa combinação linear são chamados de coeficientes de Clebsch-Gordan. Quando se considera o spin, o subespaço S-P³, de dimensionalidade quatro, torna-se um subespaço de dimensionalidade oito. A representação das funções da base de Kane na forma $|j,m_j\rangle$, conforme a notação do cap. II, e seus respectivos autovalores estão mostrados abaixo:

$$|u_1^0\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = |is\rangle^{\dagger}, \qquad E_c,$$

$$|u_2^{\circ}\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|X+iY\rangle^{\dagger}, \qquad E_{v} + \frac{\Delta}{3},$$

$$|u_3^{\circ}\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z\rangle \downarrow - \frac{1}{\sqrt{6}}|X-iY\rangle \uparrow, \qquad E_{\star} + \frac{\Delta}{3},$$

$$|\mathbf{u}_{4}^{0}\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|Z\rangle \downarrow + \frac{1}{\sqrt{3}}|X-iY\rangle \uparrow, \qquad \mathbf{E}_{v} - \frac{2}{3}\Delta,$$

$$|u_5^0\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -|is\rangle$$
, E_c ,

$$|u_6^{\circ}\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|X-iY\rangle\downarrow, \qquad E_v + \frac{\Delta}{3}$$

$$|\mathbf{u}_{7}^{\circ}\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}|Z\rangle^{\dagger} + \frac{1}{\sqrt{6}}|X+iY\rangle^{\downarrow}, \qquad \mathbf{E}_{*} + \frac{\Delta}{3}$$

$$|\mathbf{u}_{8}^{0}\rangle = \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|Z\rangle^{\dagger} - \frac{1}{\sqrt{3}}|X+iY\rangle^{\dagger}, \qquad \mathbf{E}_{v} - \frac{2}{3}\Delta.$$

As relações acima referem-se ao ponto $\vec{k}_0 = \vec{0}$. Com o termo

$$\frac{\hbar^2}{4\,\mathfrak{m}^2 c^2}\,\vec{k}\cdot(\vec{\sigma}\,\,\mathbf{x}\,\nabla_{\vec{r}}V_c(\vec{r}\,))$$

desprezado, devido ao fato do momento do cristal $\hbar \vec{k}$ ser muito pequeno comparado ao momento atômico \vec{P} , e para a ordem escolhida da base, os elementos da matriz de $H_{\vec{k}}$ geram uma matriz (8x8) da forma:

$$H_{\vec{k}} = \begin{bmatrix} H_{\cup} & H_{\gamma} \\ -H_{\gamma}^{*} & H_{\bot} \end{bmatrix}, \qquad (4.3.2)$$

onde os blocos H_U e H_L de (4x4) satisfazem a simetria de inversão abaixo:

$$H_{U}(k_{x},k_{y}) = H_{U}(k_{x},-k_{y}).$$
 (4.3.3)

Observe que a base escolhida possue inversão temporal.

Se escolhermos a origem das energias no centro do gap de energia, como na fig.2.2, e definirmos:

$$E_{c} = \frac{E_{g}}{2} = \lambda_{o}, \qquad (4.3.4)$$

$$E_v + \frac{\Delta}{3} = -\frac{2g}{2},$$
 (4.3.5)

$$k_{\pm} = k_x \pm i k_y$$
, (4.3.6)

os blocos (4x4) serão dados por:

$$H_{U} = \begin{bmatrix} \frac{Eg}{2} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} & \frac{1}{\sqrt{2}}P_{o}k_{+} & -\frac{1}{\sqrt{6}}P_{o}k_{-} & \frac{1}{\sqrt{3}}P_{o}k_{-} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}P_{o}k_{-} & -\frac{Eg}{2} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{6}}P_{o}k_{+} & 0 & -\frac{Eg}{2} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}P_{o}k_{+} & 0 & 0 & -\Delta - \frac{Eg}{2} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} \end{bmatrix}, \quad (4.3.7)$$

$$H_{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} P_{o} k_{z} & -\frac{1}{\sqrt{3}} P_{o} k_{z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P_{o} k_{z} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} P_{o} k_{z} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} P_{o} k_{z} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
 (4.3.8)

O bloco H₂ é obtido da eq.(4.3.3). Os parâmetros de Kane são quantidades reais expressas como:

$$P_{o} = \frac{\hbar}{m} \langle is | \hat{P}_{x} | X \rangle, \qquad (4.3.9)$$

$$\Delta = -\frac{3}{4} \frac{i\hbar}{m^{2}c^{2}} \langle X | \langle \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{c}(\vec{r}) x \vec{P} \rangle_{y} | Z \rangle. \qquad (4.3.10)$$

 P_o é a medida da interação entre as bandas de condução e valência, e Δ é a energia spin-órbita. Neste modelo, o efeito de desprezar as bandas de ordem superiores à primeira é adicionado como uma perturbação[9]. Qualitativamente, as bandas desprezadas produzem dois tipos de termos² nos blocos da diagonal H_o e H_c da matriz Hamiltoniano H_{-} .

a) Termos fora da diagonal que possuem a forma Bk_xk_y, sendo B um elemento de matriz perturbativo de segunda ordem³,

$$B = 2 \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{j}' \frac{\langle s | \hat{P}_x | u_j \rangle \langle u_j | \hat{P}_y | z \rangle}{\left[\{ (E_c + E_v)/2 \} - E_j \right]}.$$

A constante B é devida a falta de simetria de inversão nas estruturas tipo sulfeto de zinco. Para semicondutores com estrutura tipo diamante, B é zero.

b) Termos diagonal da forma $A'k^2$ na banda de condução e da forma $L'k_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2)$ nas bandas de valência. Sem A', L' e M a banda 2 As notações a seguir A', B, L' e M são utilizadas por Kane[9].

³O traço vertical, ('), na somatória significa que os estados do subespaço tetradimensional não estão sendo somados.

de buraco pesado é plana. Na presença desses termos esta banda mostra a curvatura ilustrada na fig.2.2. O efeito desses termos em outras bandas é extremamente pequeno. É importante manter em mente que, todos esses termos são correções de segunda ordem na estrutura de banda de energia.

Baseado nessas observações, Marques e Sham[2], modificaram ligeiramente o modelo de Kane, introduzindo uma curvatura extra em cada banda, como uma contribuição diagonal isotrópica de segunda ordem $\pm \alpha (k_x^2 + k_y^2)$. O termo positivo entra na banda de condução e o negativo nas bandas de valência. Esta suposição simplifica os cálculos futuros e ainda preserva a característica da estrutura de bandas de materiais do grupo II-VI e III-V. Posteriormente, o limite de $\alpha \rightarrow 0$ é tomado, a fim de manter a condição de $\alpha \ll P_o^2$.

4.4. Um Modelo para o Hg(Cd)Te (Modelo de Seis Bandas).

Nós vamos utilizar aqui o mesmo modelo simples desenvolvido, para o antimoneto de índio (InSb), por Marques e Sham[2]. Isto só é possível porque para frações molares de x > 0,18, o cristal misturado $Hg_{1-x}Cd_xTe$ tem características semelhantes ao InSb, ou seja, gap de energia fundamental muito pequeno e um acoplamento spin-órbita, Δ , muito grande. Portanto, a seguir faremos as mesmas considerações da ref.[2]. Sendo a banda de split-off considerada bem separada das bandas de buraco leve e pesado, o modelo consistirá apenas das duas bandas de condução de Γ_6 mais as quatro de valência de Γ_9 , desprezando inteiramente a banda de split-off de Γ_7 . O termo de energia cinética do elétron livre $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ na diagonal de H_{k} pode ser desprezado, uma vez que, o Hg(Cd)Te possui massa efetiva da banda de condução extremamente baixa (m^{*}=0.006m) comparada com a massa do elétron livre, o que torna este termo muito pequeno e P₀ muito grande.

Por simplicidade de tratamento é conveniente escolher uma combinação linear particular das funções da base de Kane, que irá simplificar a descrição dos elétrons na camada de inversão:

$$\begin{split} |u_{1}\rangle &= \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |is\rangle^{\dagger}, \\ |u_{2}\rangle &= \left[\frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right] = \sqrt{\frac{2}{3}}\left[\left|X + \frac{i}{2}Y\right\rangle^{\dagger} - \frac{1}{2}|Z\rangle^{\dagger}\right], \\ |u_{3}\rangle &= \left[\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}(|iY\rangle^{\dagger} - |Z\rangle^{\dagger}), \quad (4.4.1.a)) \\ e \\ |u_{4}\rangle &= \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -|is\rangle^{\dagger}, \\ |u_{5}\rangle &= \left[\frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right] = \sqrt{\frac{2}{3}}\left[-\left|X - \frac{i}{2}Y\right\rangle^{\dagger} + \frac{1}{2}|Z\rangle^{\dagger}\right], \\ |u_{6}\rangle &= \left[\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}(|iY\rangle^{\dagger} - |Z\rangle^{\dagger}), \quad (4.4.1.b) \end{split}$$

onde as funções |j,m $_j$ formam a base de Kane.

Para esta base, obtem-se imediatamente $H_{\vec{k}}$ da mesma maneira que na eq.(4.3.2), porém agora os blocos são matrizes (3x3), da seguinte forma:

$$H_{U} = \begin{bmatrix} \lambda(\vec{k}) & P\left(k_{x} + \frac{i k_{y}}{2}\right) & \frac{i \sqrt{3}}{2} P k_{y} \\ P\left(k_{x} - \frac{i k_{y}}{2}\right) & -\lambda(\vec{k}) & 0 \\ -\frac{i \sqrt{3}}{2} P k_{y} & 0 & -\lambda(\vec{k}) \end{bmatrix}, \quad (4.4.2)$$

$$H_{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{P}{2}k_z & -\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_z \\ -\frac{P}{2}k_z & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}Pk_z & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.4.3)$$

onde redefiniu-se

$$P = \sqrt{\frac{2}{3}} P_{\circ} , \qquad (4.4.4)$$

com P_o dado pela eq.(4.3.11) e

$$\lambda(\vec{k}) = \frac{E_g}{2} + \alpha \left(k_x^2 + k_y^2 \right). \qquad (4.4.5)$$

Adotaremos, a partir deste ponto, um sistema de coordenadas em que o eixo x é perpendicular à interface do MISFET e o eixo y está na interface ao longo do momento paralelo k_y. Para esta escolha de coordenadas, os blocos na diagonal de H_k (H_U e H_L) são desacoplados, já que H_y $\equiv 0$. No entanto, os autovalores de cada bloco H_U ou H_L, na condição de flat-band, são degenerados. Estes autovalores serão designados por E_c(k_x,k_y), E_{bl}(k_x,k_y) e E_{bp}(k_x,k_y), energias das bandas de condução, buraco leve e buraco pesado, respectivamente. Essas energias são determinadas por:

det $(H_i - E_jI) = 0$, i = U, L e j = c, bl, bp (4.4.6) onde I é a matriz identidade. Essa equação nos leva às seguintes soluções:

$$E_{c}(k_{x},k_{y}) = + \sqrt{\left[\lambda_{o} + \alpha(k_{x}^{2} + k_{y}^{2})\right]^{2} + P^{2}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2})}, \quad (4.4.7)$$

$$E_{bi}(k_x,k_y) = -\sqrt{\left(\lambda_o + \alpha(k_x^2 + k_y^2)\right)^2 + P^2(k_x^2 + k_y^2)}, \quad (4.4.8)$$

$$E_{bp}(k_x, k_y) = - \left(\lambda_o + \alpha (k_x^2 + k_y^2) \right).$$
 (4.4.9)

A curvatura de cada banda é proporcional a:

$$\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} \frac{E_c}{E_c} (k_x = 0, k_y = 0) = \pm \frac{2P^2}{E_g}, \qquad (4.4.10)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} E_{bp}(k_x, k_y) = -2\alpha. \qquad (4.4.11)$$

Aqui, somente a banda de buraco pesado é parabólica. Note que, se $\alpha = 0$, a curvatura desta banda é infinita e sem sentido físico. A eq.(4.4.10) é normalmente usada para cálculo de massa efetiva. Substituindo a eq.(4.4.10) na eq.(3.1.4), a massa no fundo da banda de condução é:

$$\mathbf{m}_{c}^{*} = \frac{\hbar^{2} E_{g}}{2 P^{2}}.$$
 (4.4.12)

Pelo valor da massa efetiva, obtida experimentalmente, podemos prever o valor de P. No capitulo seguinte, este modelo para semicondutores de gap estreito é usado para analisar os detalhes delicados devido a presença de uma interface sobre uma função de onda multi-componente.

CAPÍTULO V

APROXIMAÇÃO DE MASSA EFETIVA NA PRESENÇA DE UMA INTERFACE (MODELO DE MUITAS BANDAS)

5.1. Introdução.

Os elétrons que estão no semicondutor da junção metalisolante-semicondutor (MIS) sentem um potencial composto do potencial periódico da rede, da grande barreira de potencial na interface e do potencial auto-consistente, resultante da redistribuição dos elétrons e buracos causada pela voltagem externa aplicada (voltagem de porta). O potencial auto-consistente, estendido sobre muitas células unitárias, não pode ser tratado pelas técnicas padrões de estrutura de bandas para o corpo do semicondutor. O potencial periódico pode ser repassado por uma aproximação de massa efetiva, a qual será depois utilizada para tratar o bem comportado potencial auto-consistente, ou seja, um potencial que varia lentamente dentro da célula unitária. A grande barreira de potencial na interface precisa ser tratada cuidadosamente, conforme explicado no cap. II, através do método proposto por Sham e Nakayama [8] em lidar com esta grande barreira, fora da aproximação de massa efetiva, por um processo de casamento da função de onda total através da interface. Este processo de casamento determina as condições de contorno para a função envelope (coeficiente de expansão da função de onda total em ondas de Bloch na extremidade da banda) na interface.

O método tem sido aplicado a semicondutores com gap de energia grande, Eg, tal como o Si, onde a grande separação entre a banda de condução e a banda de valência torna possível representar o corpo do semicondutor por um modelo de uma banda.

SERVIÇO DE BIBLIUTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

No entanto, o modelo de uma banda não pode descrever corretamente os semicondutores com gap estreito de energia, tais como o Hg(Cd)Te, InAs ou InSb, onde a forte mistura das bandas de condução e valência ocorre como uma conseqüência direta da grande relação de dispersão das bandas na vizinhança do gap estreito de energia. A forte mistura entre as bandas requer que a função de onda total tenha uma representação de multi-bandas com uma função envelope para cada banda na vizinnança do gap de energia. Marques e Sham[2] desenvolveram um modelo de multibandas para materiais com gaps estreitos de energia, que será aqui reproduzido.

Primeiro vamos considerar o caso onde não exista redistribuição de cargas no semicondutor devido a junção metalisolante-semicondutor. Esta situação é definida como uma condição de "flat-band" onde o elétron, em qualquer uma das três regiões, comporta-se como se estivesse no corpo de um material homogêneo. A grande barreira na interface pode ser considerada infinita se fixarmos a atenção somente nos elétrons com energia E um pouco acima da banda de condução, ou seja, a grande função trabalho do isolante em relação a baixa energia E dos elétrons no semicondutor age como uma barreira infinita. Na condição de flat-band, a função de onda total do elétron é composta por uma combinação linear de ondas de Bloch propagantes (incidente e refletida) e evanescente no semicondutor e apenas por ondas evanescentes no isolante, todas com a mesma energia E. Para uma energia E um pouco acima da banda de condução, as ondas propagantes e evanescentes podem ser escritas em termos das ondas de Bloch no ponto Γ , de tal modo que a função de onda total também é escrita em termos destas ondas. Os coeficientes destas combinações serão determinados pela imposição da continuidade da função de onda total e sua derivada através da

interface. No modelo de barreira infinita, os coeficientes das ondas evanescentes no isolante são iguais a zero, fazendo com que a função de onda total desapareça, isto é, que seja nula na interface. A ida a zero da função de onda total na interface determina a correta condição de contorno para cada componente da função de onda envelope.

Distante da região da interface, as ondas evanescentes possuem um papel insignificante indo completamente a zero, porém na região da interface elas desempenham um papel indispensável por serem as ondas responsáveis pelo decaimento rápido da função de onda total, necessário para permitir que a função de onda satisfaça as condições de contorno nesta região. Em outras palavras, um cristal infinito pode ser tratado simplesmente por uma estrutura de bandas que contenha apenas ondas propagantes, mas um cristal semi-infinito precisa de um modelo de estrutura de bandas que contenha também ondas evanescentes. No modelo de seis bandas para o Hamiltoniano apresentado no cap. IV, algumas ondas evanescentes aparecem devido ao termo $\alpha(k_x^2 + k_y^2)$. O fato de α ser pequeno sugere ser possível desprezar as ondas evanescentes, no entanto, o abandono dessas ondas envolve mudança nas condições de contorno para as funções envelopes na interface.

5.2. Representação Multi-Componente dos Estados de Flat-Band (Modelo de Quatro Bandas).

Por simplicidade vamos resolver o problema da interface, na condição de "flat-band", no caso onde a componente do vetor de onda paralelo à interface (k_y) é igual a zero. Para $k_y=0$, o Hamiltoniano da eq.(4.3.2), no modelo de seis bandas para semicondutores de gap estreito, divide-se em um Hamiltoniano de duas bandas no qual os estados interagem fortemente

entre si e em um Hamiltoniano de uma banda cujos estados interagem fracamente uns com os outros. Não existe interação entre esses dois conjuntos de estados. Os Hamiltonianos de duas bandas (estados que interagem fortemente) dos blocos $H_U(k_x,k_y=0)$ e $H_L(k_x,k_y=0)$ são idênticos e dados por:

$$H_{\mathbf{k}_{\mathbf{x}}} = \begin{bmatrix} \lambda(\mathbf{k}_{\mathbf{x}}) & P \mathbf{k}_{\mathbf{x}} \\ P \mathbf{k}_{\mathbf{x}} & -\lambda(\mathbf{k}_{\mathbf{x}}) \end{bmatrix}, \qquad (5.2.1)$$

onde

$$\lambda(\mathbf{k}_{\mathbf{x}}) = \lambda_{\mathbf{o}} + \alpha \, \mathbf{k}_{\mathbf{x}}^{2} \,. \tag{5.2.2}$$

O Hamiltoniano $H_{k_{x}}$ produz uma estrutura de bandas semelhante a mostrada na fig.5.1. As linhas sólidas representam a estrutura de bandas usual para um semicondutor, onde a energia $E(k_{x})$ é uma função real para valores de k_{x} reais, enquanto que as linhas tracejadas, também chamadas de linhas reais, são linhas ao longo das quais $E(k_{x})$ é real para valores de k_{x} imaginários. $E(k_{x})$



Figura 5.1. Ilustra a estrutura de bandas produzida pelo Hamiltoniano H_{kx}(modelo de quatro bandas). As linhas sólidas e as linhas tracejadas representam os ramos onde E(k_x) é uma função real para valores de k_x reais e imaginários, respectivamente. As linhas tracejadas aparecem como uma conseqüência direta do termo αk_x² em H_{ky}.

Para uma dada energia E, a componente do vetor de onda k, dos estados de Bloch, na condição de flat-band, é determinada por:

$$Det |H_{k_{x}} - EI| = 0, \qquad (5.2.3)$$

sendo I a matriz unidade. O determinante acima nos leva a seguinte equação:

$$\alpha^{2} k_{x}^{4} + 2 \left[\alpha \lambda_{o} + \frac{P^{2}}{2} \right] k_{x}^{2} - \left[E^{2} - \lambda_{o}^{2} \right] = 0. \qquad (5.2.4)$$

As quatro soluções são escritas como $k_x = \pm k$ e $k_x = \pm i \bar{k}$, onde k e \bar{k} são dados a seguir:

$$\mathbf{k} = \frac{1}{\alpha} \left\{ -\left(\alpha \lambda_{o} + \frac{\mathbf{P}^{2}}{2}\right) + \left(\left(\alpha \lambda_{o} + \frac{\mathbf{P}^{2}}{2}\right)^{2} + \alpha^{2} \left(\mathbf{E}^{2} - \lambda_{o}^{2}\right)\right)^{1/2} \right\}$$
(5.2.5)

$$\overline{k} = \frac{1}{\alpha} \left\{ \left[\alpha \lambda_{\circ} + \frac{P^2}{2} \right] + \left[\left[\alpha \lambda_{\circ} + \frac{P^2}{2} \right]^2 + \alpha^2 \left[E^2 - \lambda_{\circ}^2 \right] \right]^{1/2} \right\}. \quad (5.2.6)$$

Os quatro estados de Bloch, na condição de flat-band, são escritos como $\Psi_{(\pm k)}^{\pm}(x)$ para as ondas propagantes e $\chi_{(\pm i \overline{k})}(x)$ para as ondas evanescentes. A onda $\Psi_{(+k)}^{+}$ se propaga na direção positiva do eixo-x e onda $\Psi_{(-k)}^{-}$ na direção negativa do eixo-x. Para uma pequena energia E acima da banda de condução, os estados de Bloch, na condição de flat-band, podem ser expandidos em termos das ondas de Bloch no ponto Γ . Devido ao desacoplamento de cada bloco H_{U} e H_{L} do Hamiltoniano quando escolhemos $k_{y}=0$, os estados de Bloch, na condição de flat-band, possuem componentes de $|u_{1}\rangle$ e $|u_{2}\rangle$ para o bloco $H_{k_{\chi}}$ de H_{U} , e componentes de $|u_{4}\rangle$ e $|u_{5}\rangle$ para o bloco $H_{k_{\chi}}$ de H_{L} . Vamos considerar apenas o bloco $H_{k_{\chi}}$ de H_{U} , uma vez que os dois são idênticos. A expansão dos estados de Bloch, na condição de flatband, é escrita como:

$$\Psi_{(\pm k)}^{\pm}(x) = e^{\pm ik \cdot x} \{ B_1(\pm k) | u_1 \rangle + B_2(\pm k) | u_2 \rangle \}, \qquad (5.2.7)$$

e

$$\chi_{(\pm i\bar{k})}(\mathbf{x}) = \mathbf{e}^{\pm \bar{k} \times} \left\{ B_1(\pm i\bar{k}) | \mathbf{u}_1 \rangle + B_2(\pm i\bar{k}) | \mathbf{u}_2 \rangle \right\}. \quad (5.2.8)$$

Estes são os estados de Bloch multi-componente. Note que, $\chi_{(+i\overline{k})}$ decai ao longo do semi-eixo x>0, enquanto que $\chi_{(-i\overline{k})}$ decai ao longo do semi-eixo x<0.

Como os estados de Bloch, na condição de flat-band, são auto-estados de H_{k_x} de energia E, teremos os coeficientes $\{B_i\}$ determinados por:

$$\begin{bmatrix} \lambda (\mathbf{k}_{x}) & P \mathbf{k}_{x} \\ P \mathbf{k}_{x} & -\lambda (\mathbf{k}_{x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{1}(\mathbf{k}_{x}) \\ B_{2}(\mathbf{k}_{x}) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} B_{1}(\mathbf{k}_{x}) \\ B_{2}(\mathbf{k}_{x}) \end{bmatrix}.$$
 (5.2.9)

As soluções acima para $\left\{B_{t}\right\}$ devem ser normalizadas, isto é,

 $|B_1(k_x)|^2 + |B_2(k_x)|^2 = 1. \qquad (5.2.10)$

Portanto, as soluções são:

$$B_{1}(k_{x}) = \left[\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\lambda(k_{x})}{E(k_{x})}\right)\right]^{1/2}, \qquad (5.2.11)$$

$$\frac{B_2(k_x)}{B_1(k_x)} = \frac{Pk_x}{(\lambda(k_x) + E(k_x))} . \qquad (5.2.12)$$

Observe que $B_1(k_x)$ é uma função par de k_x e $B_2(k_x)$ é uma função ímpar de k_x . Os estados de Bloch multi-componente, na condição de flat-band, dados pelas eq.(5.2.7-8) serão agora utilizados para construir as auto-funções do Hamiltoniano cristalino na presença de uma interface. Existem dois casos distintos (caso A e caso B), a serem considerados, de acordo com a região ocupada pelo semicondutor e pelo isolante. 5.3. Função de Onda Multi-Componente para o Espalhamento de Elétrons por uma Barreira Localizada à Esquerda (Caso A).



Figura 5.2. Mostra as posições do isolante e do semicondutor de modo a formar uma barreira à esquerda, para o espalhamento de elétrons com vetor de onda $\vec{k}(k_x, k_y=0)$.

Consideremos o caso de uma junção MIS, conforme ilustrado na fig.5.2. acima, representada por dois planos semiinfinito. O semicondutor ocupa o semi-espaço $x \ge 0$, enquanto que o isolante ocupa semi-espaço x < 0. A barreira de potencial, considerada como infinita, encontra-se em x=0. De acordo com a definição da condição de flat-band, um elétron no semi-espaço ocupado pelo semicondutor, com energia E acima da banda de condução, somente sente o potencial periódico da rede e a grande barreira de potencial na interface. Portanto, sua função de onda total $\Phi_{\rm P}^{\rm e}(x)$ é a combinação linear de estados de Bloch na condição de flat-band. Esta combinação linear é composta de ondas propagantes incidente e refletida e uma onda evanescente, todas com a mesma energia E.

Esta combinação linear, que é também uma auto-função de energia para a junção, é escrita como:

$$\Phi_{\hat{e}}^{*}(\mathbf{x}) = \Psi_{(-k)}^{-}(\mathbf{x}) - S^{*}\Psi_{(+k)}^{+}(\mathbf{x}) - T^{*}\chi_{(+i\bar{k})}, \qquad (5.3.1)$$

onde os estados de Bloch multi-componente são dados na seção anterior. A onda evanescente $\chi_{(-i\overline{k})}$ não aparece na eq.(5.3.1) devido ao fato desta onda divergir no infinito, ou seja, não

pode ser normalizada. O coeficiente S^A possui importante papel na determinação das propriedades eletrônicas na região da interface.

No modelo de uma barreira infinita, a função de onda $\Phi_{\rm E}^{\rm A}({\rm x})$ precisa ser zero (o coeficiente das ondas evanescentes no isolante é nulo) na interface (x=0). Se escrevermos $\Phi_{\rm E}^{\rm A}({\rm x})$ dada pela eq.(5.3.1) em termos dos estados de Bloch multicomponentes dados pelas eqs.(5.2.7-8), temos $\Phi_{\rm E}^{\rm A}({\rm x})$ como função de $|u_1\rangle$ e $|u_2\rangle$, ou seja,

$$\begin{split} \Phi_{E}^{A}(\mathbf{x}) &= \left\{ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} B_{1}(-\mathbf{k}) - S^{A} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} B_{1}(\mathbf{k}) - T^{A} e^{-\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{x}} B_{1}(+i\,\overline{\mathbf{k}}) \right\} |\mathbf{u}_{1}\rangle + \\ &+ \left\{ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} B_{2}(-\mathbf{k}) - S^{A} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} B_{2}(\mathbf{k}) - T^{A} e^{-\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{x}} B_{2}(+i\,\overline{\mathbf{k}}) \right\} |\mathbf{u}_{2}\rangle, \quad (5.3.2) \end{split}$$

onde $|u_1\rangle$ e $|u_2\rangle$ são diferentes de zero e ortonormais (uma não pode ser escrita em termos da outra). Portanto, para que na interface $\Phi_{\rm E}^{\rm A}({\rm x}=0)=0$ precisamos que os coeficientes de $|u_1\rangle$ e $|u_2\rangle$, da combinação linear, sejam iguais a zero na interface. Esta condição nos dá equações para S^A e T^A:

$$B_1(-k) = S^A B_1(k) + T^A B_1(i\bar{k}), \qquad (5.3.3a)$$

$$B_2(-k) = S^A B_2(k) + T^A B_2(ik). \qquad (5.3.3b)$$

Usando agora a propriedade dos B,'s de serem uma função par ou uma função impar de k_x , podemos calcular S^A e T^A em termos dos coeficientes $\{B_i\}$:

$$S^{A} = \frac{\frac{B_{2}(i\bar{k})}{B_{1}(i\bar{k})} + \frac{B_{2}(k)}{B_{1}(k)}}{\frac{B_{2}(i\bar{k})}{B_{1}(i\bar{k})} - \frac{B_{2}(k)}{B_{1}(k)}} .$$
(5.3.4)

Pela substituição das razões entre os B's, dadas pela

 $eq.(5.2.12), S^{A}$ torna-se:

$$S^{A} = \frac{\frac{iP}{Q_{1}(\bar{k})} + \frac{P}{Q_{2}(k)}}{\frac{iP}{Q_{1}(\bar{k})} - \frac{P}{Q_{2}(k)}}, \qquad (5.3.5)$$

onde os Q_i's são funções da variável real η e definidos por:

$$Q_{\frac{1}{2}}(\eta) = \sqrt{\left(\mp \alpha \eta + \frac{\lambda_{o}}{\eta}\right)^{2} \mp P^{2}} + \left(\mp \alpha \eta + \frac{\lambda_{o}}{\eta}\right). \quad (5.3.6)$$

A onda evanescente $\chi_{(+i\bar{k})}$ possui um importante papel na região da interface, pois é a responsável pelo decaimento rápido da função de onda total do elétron nesta região, necessário para satisfazer a condição de contorno em x=0. Distante da interface podemos desprezar estas ondas? A resposta é encontrada se observarmos os termos de primeira ordem na expansão de k e \bar{k} dados pelas equações (5.2.5) e (5.2.6), respectivamente.

$$k = \left\{ \frac{\left(E^{2} - \lambda_{o}^{2}\right)}{P^{2}} - \frac{2\lambda_{o}}{P^{4}} \left(E^{2} - \lambda_{o}^{2}\right) \alpha + O(\alpha^{2}) \right\}^{1/2}, \quad (5.3.7)$$

$$\bar{\mathbf{k}} = \left\{ \frac{P}{\alpha} + \frac{\lambda_o}{P} + O(\alpha) \right\}.$$
 (5.3.8)

A equação (5.3.8) mostra que existe uma região muito pequena, $x \sim \alpha$, onde a onda evanescente $\chi_{(+i\bar{k})}$ desempenha o importante papel de levar a função de onda total rapidamente a zero. Podemos observar também que, quanto menor for o valor de α mais rápido a onda evanescente $\chi_{(+i\bar{k})}$ ($\sim e^{-\bar{k} \times}$) vai a zero. De modo que, tomar o limite de $\alpha \rightarrow 0$ é uma maneira de desprezar as ondas evanescentes consistentemente. No entanto, dois pontos precisam ser considerados. Primeiro, note que, para um valor de α finito, a condição $\Phi_{\tilde{E}}^{\alpha}(x=0)=0$ implica que todas as componentes de $\Phi_{\rm E}^{\rm A}$ precisam ser nulas em x=0. Segundo, o limite de $\alpha \rightarrow 0$ também reduz a classe das equações diferenciais envolvidas. Tal redução precisa ser compensada através de uma mudança na forma da condição de contorno de cada componente de $\Phi_{\rm E}^{\rm A}$ na interface.

A forma limite da auto-função de energia Φ_{E}^{A} , quando $\alpha \rightarrow 0$, é calculada a seguir, e a derivação das novas condições de contorno será realizada na próxima seção. A forma limite de Φ_{E}^{A} requer o conhecimento de S^A no limite de $\alpha \rightarrow 0$. Note que:

$$\begin{split} \lim_{\substack{k = \infty, \\ \alpha \to 0}} & \overline{k} = \infty, \\ & k = k_{\circ}, \\ & \pm \alpha \overline{k} = \pm P, \\ & \pm \alpha k = 0, \end{split}$$
 (5.3.9)

onde

$$\mathbf{k}_{o} = \left(\frac{\mathbf{E}^{2} - \lambda_{o}^{2}}{\mathbf{P}^{2}}\right)^{1/2}.$$
 (5.3.10)

Usando (5.3.9) obtemos:

$$\lim_{\alpha \to 0} Q_1(\bar{k}) = -P, \qquad (5.3.11)$$

е

$$\lim_{\alpha \to 0} Q_2(k) = \frac{\sqrt{P^2 k_o^2 + \lambda_o^2} + \lambda_o}{k_o}.$$
 (5.3.12)

Utilizando os resultados acima na eq.(5.3.5), temos a forma limite de S^A como:

$$S_{\alpha \to 0}^{A} = \frac{1 + i - \frac{Pk_{o}}{\sqrt{P^{2}k_{o}^{2} + \lambda_{o}^{2}} + \lambda_{o}}}{1 - i - \frac{Pk_{o}}{\sqrt{P^{2}k_{o}^{2} + \lambda_{o}^{2}} + \lambda_{o}}}, \qquad (5.3.13)$$

ou ainda, sob a forma polar abaixo:

$$S^{A}_{\alpha \to 0} = e^{-2i\theta(k_{0})},$$
 (5.3.14)

onde

tg
$$\Theta(k_{o}) = \frac{-Pk_{o}}{\sqrt{P^{2}k_{o}^{2} + \lambda_{o}^{2}} + \lambda_{o}}$$
 (5.3.15)

Podemos analizar agora o efeito de tomarmos o limite de $\alpha \rightarrow 0$, na condição de contorno das componentes da função de onda total do elétron na interface.

5.4. Equação de Massa Efetiva Multi-Componente e a Derivação das Condições de Contorno para as Componentes da Função Envelope para Elétrons Espalhados por uma Barreira à Esquerda.

Conforme observado nas expressões da última seção, o limite de $\alpha \rightarrow 0$ torna a função de onda do elétron composta de uma onda que chega à interface e uma outra que sai, com uma defasagem expressa pelo coeficiente S^A, dada pela eq.(5.3.14). No limite de $\alpha \rightarrow 0$, os ramos representados por linhas pontilhadas na fig.5.1 estão no infinito e a onda evanescente $\chi_{(+i\bar{k})}$ não possui uma função importante. É interessante frizarmos que este limite resulta na diminuição das equações diferenciais envolvidas, e precisa ser compensado por uma mudança nas condições de contorno de cada componente de $\Phi_{\rm E}^{\circ}$ na interface.

A forma limite da função de onda Φ_E^A é usada para deduzir novas condições de contorno. No limite de $\alpha \rightarrow 0$, a eq.(5.3.2) torna-se:

$$\Phi_{k_o(E)}^{A}(\mathbf{x}) = B_1(k_o) \left\{ \left(e^{-ik_o \times} - S^{A} e^{ik_o \times} \right) | u_1 \rangle + \right.$$

$$- \frac{B_2(k_o)}{B_1(k_o)} \left\{ e^{-ik_o \times} + S^A e^{ik_o \times} \right\} |u_2\rangle \right\}, \qquad (5.4.1)$$

SERVIÇO DE BIELIUTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA que pode ser escrita como:

$$\Phi_{k_0(E)}^{A}(\mathbf{x}) = 2\cos(\Theta(k_0)) e^{-\Theta(k_0)} \left\{ -i \operatorname{sen}(k_0 \mathbf{x} - \Theta(k_0)) | \mathbf{u}_1 \right\} + \frac{1}{2} \left\{ -i \operatorname{sen}(k_0 \mathbf{x} - \Theta(k_0)) | \mathbf{u}_1 \right\} + \frac{1}{2} \left\{ -i \operatorname{sen}(k_0 \mathbf{x} - \Theta(k_0)) | \mathbf{u}_1 \right\} \right\}$$

+
$$tg\Theta(k_o)\cos(k_ox-\Theta(k_o))|u_2\rangle$$
 (5.4.2)

Através do abandono das ondas evanescentes, a forma limite da eq.(5.4.2) mostra a seguinte relação entre os coeficientes das ondas de Bloch $|u_1\rangle$ e $|u_2\rangle$, no ponto Γ :

" Para a função de onda $\Phi_{c_0(E)}^A$, o coeficiente da onda de Bloch $|u_1\rangle$ (estado S), em x=0, é igual ao coeficiente da onda de Bloch $|u_2\rangle$ (estado P), em x=0, vezes o número imaginário i".

Esta relação será, a partir deste ponto, utilizada como as novas condições de contorno na interface para as componentes da função de onda total do elétron $\Psi(x)$ na presença de um potencial bem comportado V(x).

Considere um potencial não periódico V(x) que varie lentamente, adicionado a condição de flat-band do sistema, e que leve a seguinte solução da equação de Schrödinger:

$$\{H_{k_0} + V(x)\}\Psi(x) = E\Psi(x), \qquad (5.4.3)$$

com $H_{k_{\alpha}}$ dado pela eq.(5.2.1), com $\alpha = 0$.

Para um potencial que varie lentamente, a função de onda total do elétron $\Psi(\mathbf{x})$ pode ser expandida em termos do conjunto de funções $\Phi_{k_0(E)}^{A}$ como:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} d\mathbf{k}_{o} A(\mathbf{k}_{o}) \Phi_{\mathbf{k}_{o}(\mathbf{E})}^{\mathbf{A}}(\mathbf{x}), \qquad (5.4.4)$$

onde $A(k_o)$ é a função de onda envelope. Uma vez que $\Phi_{k_o(E)}^A(x)$ satisfaz a condição de contorno na interface, $\Psi(x)$ também a

satisfará. Vamos por simplicidade suprimir o sub-indice de k_o e escrevermos:

$$\Psi(x) = A_1(x) | u_1 \rangle + A_2(x) | u_2 \rangle, \qquad (5.4.5)$$

onde $A_1(x)$ e $A_2(x)$ são as componentes da função envelope e são expressas por:

$$A_{1}(x) = \int_{0}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[-2 i \cos(\Theta(k)) e^{-i\theta(k)} \sin(kx - \Theta(k)) \right] A(k), \quad (5.4.6)$$

$$A_{2}(x) = \int_{0}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[2 \sin(\Theta(k)) e^{-i\theta(k)} \cos(kx - \Theta(k)) \right] A(k). \quad (5.4.7)$$

A condição de contorno para as componentes da função envelope são facilmente deduzidas pelas duas equações acima e pode ser escrita como:

$$A_1(x=0) = i A_2(x=0).$$
 (5.4.8)

A substituição de $k \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x}$ em H_k (eq.5.2.1 com $\alpha = 0$) e este resultado na eq.(5.4.3), temos o seguinte conjunto de equações diferenciais para as componentes da função envelope:

$$\begin{bmatrix} \frac{Eg}{2} + V(x) & -iP\frac{\partial}{\partial x} \\ -iP\frac{\partial}{\partial x} & -\frac{Eg}{2} + V(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1(x) \\ A_2(x) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} A_1(x) \\ A_2(x) \end{bmatrix}.$$
 (5.4.9)

Esta é a versão de massa efetiva multi-componente, para um simples modelo de quatro bandas, e as novas condições de contorno. A presente teoria contém o número correto de condições de contorno e mostra explicitamente a diferença entre a condição de contorno da função de onda total e as condições de contorno para as componentes da função de onda envelope, no caso onde as ondas evanescentes são desprezadas.
5.5. Condições de Contorno para as Componentes da Função Envelope para uma Barreira Localizada à Direita (Caso B).



Figura 5.3. Mostra as posições do isolante e do semicondutor de modo a formar uma barreira à direta, para o espalhamento de elétrons com vetor de onda $\vec{k}(k_x, k_y=0)$.

A extensão da seção anterior para o espalhamento de elétrons por uma barreira à direita é simples. A situação é ilustrada na fig.5.3. A troca de onda incidente por onda evanescente e vice-versa implica na substituição de $k_o \rightarrow -k_o$, já que no limite de $\alpha \rightarrow 0$, a onda evanescente $\chi_{(-i\bar{k})}$ vai a zero. A forma limite da função de onda $\Phi_{k_o(E)}^{\alpha}$ torna-se:

$$\begin{split} \Phi_{k_{0}(E)}^{\beta}(x) &= B_{1}(k_{0}) \left\{ \left(e^{ik_{0} \times} - S^{B} e^{-ik_{0} \times} \right) | u_{1} \rangle + \frac{B_{2}(k_{0})}{B_{1}(k_{0})} \left\{ e^{ik_{0} \times} + S^{B} e^{-ik_{0} \times} \right\} | u_{2} \rangle \right\}. \end{split} \tag{5.5.1}$$

O coeficiente S^B no limite de $\alpha \rightarrow 0$ tem uma forma similar a eq.(5.3.14). Usando este resultado na equação acima podemos escrever:

$$\begin{split} \Phi_{k_{o}(E)}^{\beta}(\mathbf{x}) &= 2\cos(\Theta(\mathbf{k}_{o})) e^{i\Theta(\mathbf{k}_{o})} \left\{ -i \operatorname{sen}(\mathbf{k}_{o}\mathbf{x} + \Theta(\mathbf{k}_{o})) | \mathbf{u}_{1} \right\} + \\ &+ tg\Theta(\mathbf{k}_{o}) \cos(\mathbf{k}_{o}\mathbf{x} + \Theta(\mathbf{k}_{o})) | \mathbf{u}_{2} \right\}, \end{split}$$
(5.5.2)

com $\Theta(k_o)$ definido na eq.(5.3.15). O desenvolvimento agora é idêntico ao da última seção. A equação de massa efetiva (5.4.8) não é mudada, porém a condição de contorno para $A_1(x)$ e $A_2(x)$ é:

$$A_1(x=0) = -i A_2(x=0).$$
 (5.5.3)

5.6. Equação de Massa Efetiva Multi-Componente e Condições de Contorno para as Componentes da Função Envelope (Modelo de Seis Bandas).

A generalização das seções anteriores para a componente do vetor de onda k_y diferente de zero, com o Hamiltoniano em um modelo de seis bandas foi realizado por Marques [3]. Nesta seção apenas será apresentado os resultados da referência [3], tais como, a equação de massa efetiva multi-componente e as condições de contorno para as componentes da função envelope quando o sistema MIS estiver submetido a um potencial externo V(x).

Na figura 5.4.a. está ilustrada a estrutura de bandas produzidas pelo bloco H_y , dado pela eq.(4.4.2), para um α finito e um k_y fixo. Para uma energia $E(k_x,k_y)$, os possíveis valores para a componente do vetor de onda k_x de um elétron incidente e refletido, na condição de flat-band, para barreiras localizadas à esquerda e à direita estão mostradas nas partes b. e c. da figura 5.4, respectivamente.

Quando um potencial não periódico que varia lentamente dentro da célula unitária é adicionado a condição de flat-band do sistema MIS, a função de onda do elétron $\Psi^{\cup}(x,y)$ para o bloco Hamiltoniano H_{\cup} , deve satisfazer a seguinte equação de Schrödinger:

$$\{H_{U}(k_{x},k_{y}) + V(x)\}\Psi_{U}(x,y) = E_{U}(k_{x},k_{y})\Psi_{U}(x,y), \quad (5.6.1)$$

ou

$$\mathfrak{H}_{\cup}(k_{x},k_{y})\Psi_{\cup}(x,y) = E_{\cup}(k_{x},k_{y})\Psi_{\cup}(x,y), \qquad (5.6.2)$$

onde

$$\mathfrak{H}_{U}(k_{x},k_{y}) = H_{U}(k_{x},k_{y}) + V(x) \qquad (5.6.3)$$

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC		
FÍSICA		



- Figura 5.4. Esquema de uma estrutura de bandas para um modelo de hamiltoniano seis bandas.
 - a. Mostra o esquema de estrutura de bandas produzida pelo bloco hamiltoniano H_U, para um α finito e um k_y fixo. As linhas sólidas e as linhas pontilhadas representam os ramos onde E(k_x, k_y) é um função real para valores de k_x reais e imaginários, respectivamente. Para uma dada energia E, existem quatro ondas evanescentes e duas ondas propagantes. As seis soluções constituem o conjunto de todas as ondas de Bloch, na condição de flat-band, que são auto-funções de H_U com auto-valor E e vetor de onda paralelo k_y.
 - b. Mostra os possíveis valores de k_x para os estados de flat-band do hamiltoniano H_y, com auto-valor E e vetor de onda paralelo k_y, para elétrons espalhados por uma barreira localizada à esquerda.
 - c. O mesmo do item b., porém para uma barreira localizada à direita.

De uma maneira análoga à última seção, a função de onda Ψ_{ij} é expandida em termos dos auto-estados de energia na condição de flat-band, e como estes auto-estados de energia estão escritos em termos das ondas de Bloch no ponto Γ , temos:

$$\Psi_{U}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = e^{i\mathbf{k}_{y}\mathbf{y}} \Big\{ A_{1}(\mathbf{x},\mathbf{k}_{y}) | \mathbf{u}_{1} \rangle + A_{2}(\mathbf{x},\mathbf{k}_{y}) | \mathbf{u}_{2} \rangle + A_{3}(\mathbf{x},\mathbf{k}_{y}) | \mathbf{u}_{3} \rangle \Big\}, \quad (5.6.4)$$

onde A_1 , A_2 e A_3 são as componentes da função envelope da expansão citada acima para a função de onda $\Psi_{\cup}(x,y)$. As condições de contorno para estas componentes são tiradas, no limite de $\alpha \rightarrow 0$, das componentes da função de onda do elétron na condição de flat-band, seguindo passos semelhantes aos das seções anteriores.

As componentes da função de onda envelope para os estados U com vetor de onda paralelo k_y , na presença de um potencial V(x), são determinadas através da equação (5.6.2) substituindo $k \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x}$, o que nos leva ao seguinte hamiltoniano de massa efetiva multi-componente

$$\begin{bmatrix} \lambda_{\circ} - E_{\cup} + V(x) & P\left(-i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{ik_{y}}{2}\right) & i\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_{y} \\ P\left(-i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{ik_{y}}{2}\right) & -\lambda_{\circ} - E_{\cup} + V(x) & 0 \\ -i\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_{y} & 0 & -\lambda_{\circ} - E_{\cup} + V(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{1}(x,k_{y}) \\ A_{2}(x,k_{y}) \\ A_{3}(x,k_{y}) \end{bmatrix} = 0. \quad (5.6.5)$$

As condições de contorno para as componentes da função envelope, para as duas posições de barreira são:

1. Estados U

Caso A - Espalhamento de elétrons por uma barreira à esquerda.

$$A_1(x=0,k_y) = i A_2(x=0,k_y).$$
 (5.6.6)

Caso B - Espalhamento de elétrons por uma barreira à direita.

$$A_1(x=0, k_y) = -i A_2(x=0, k_y).$$
 (5.6.7)

Para a componente A_3 não existe uma condição de contorno, pois ela não é relacionada (veja eq.(5.6.5)) por uma equação diferencial a outra componente e sim por:

$$A_{3}(x,k_{y}) = i \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{Pk_{y}}{\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)} A_{1}(x,k_{y}) \qquad (5.6.8)$$

Para o bloco Hamiltoniano H_L temos o mesmo Hamiltoniano de massa efetiva multi-componente trocando $k_y \rightarrow -k_y$ e as componentes A_1 , A_2 e A_3 por A_4 , A_5 e A_6 , respectivamente. As condições de contorno são:

2. Estados L

Caso A - Espalhamento de elétrons por uma barreira à esquerda.

$$A_4(x=0,k_y) = i A_5(x=0,k_y).$$
 (5.6.9)

Caso B - Espalhamento de elétrons por uma barreira à direita.

$$A_4(x=0,k_y) = -iA_5(x=0,k_y).$$
 (5.6.10)

A mesma explicação, dada acima, para a componente A_3 vale para a componente A_6 , onde esta e dada por:

$$A_{6}(x,k_{y}) = -i \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{Pk_{y}}{\left(\lambda_{o} + E_{L} - U(x)\right)} A_{1}(x,k_{y}). \quad (5.6.11)$$

Usaremos a aproximação de massa efetiva multicomponente para um semicondutor, de gap estreito de energia, com o material de interesse neste trabalho, na presença de uma interface. A estrutura de bandas é representada por um modelo de seis bandas, composta da mais baixa banda de condução, da

banda de buraco pesado e da banda de buraco leve. A banda de split-off é considerada muito distante das outras bandas sendo, portanto, desprezada. A forte interação entre os estados da banda de condução e a de valência é justificada pelo método \vec{k} . \vec{p} , com elemento de matriz de Kane, P (parâmetro de primeira ordem), sendo a medida desta interação. O efeito da fraca interação entre as mais altas bandas de condução e as mais baixas bandas de valência é simulado por um parâmetro de segunda ordem, α , de modo que $\alpha \ll P^2$. No limite de $\alpha \rightarrow 0$, novas condições de contorno para as componentes da função envelope são determinadas na interface. De maneira mais genérica, podemos definir um sistema onde as interações são importantes, através dos valores das massas efetivas. Em geral elas são pequenas comparadas com os sistemas, onde essas interações podem ser desprezadas. Como exemplo, temos as seguintes massas efetivas do:

Gap Grande	Gap Estreito
$Si = 0,9 m_o$	$InSb = 0,013 m_o$
$Ge = 0, 1 m_o$	$InAs = 0,0215 m_o$
	$Hg(Cd)Te = 0,006 m_o$

As propriedades eletrônicas na camada de inversão, em semicondutor de gap estreito de energia, conforme esta teoria, serão estudadas nos capítulos seguintes.

CAPÍTULO VI

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DA CAMADA DE INVERSÃO DO Hg_{0-x}Cd_xTe

6.1. Introdução.

O objetivo principal deste capítulo é mostrar a quebra de degenerescência de spin, apresentada nas subbandas de energia da camada de inversão de um MISFET, devido a um potencial auto-consistente V(x). Este potencial é gerado pela redistribuição de cargas, quando uma voltagem de entrada na porta é aplicada em um MISFET. A teoria presente neste capítulo foi originalmente desenvolvida por Marques e Sham[2] para o InSb e, conforme citado no cap. IV, será utilizada para o $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$ em concentração de x=0,22.

A fim de atingirmos nosso objetivo com maior simplicidade numérica, vamos redefinir nossas funções de base no ponto Γ , de tal modo que, o número imaginário "i" seja eliminado da aproximação de massa efetiva e das condições de contorno, obtidas no último capítulo. Para isto, basta redefinirmos as componentes da banda de condução, ou seja, $|u_1\rangle$ e $|u_4\rangle$ como:

$$|\mathbf{u}_1\rangle = |\mathbf{s}\rangle^{\dagger}$$
 e $|\mathbf{u}_4\rangle = -|\mathbf{s}\rangle^{\dagger}$, (6.1.1)

com as componentes da função de onda envelope $A_1(x,k_y)$ e $A_4(x,k_y)$ absorvendo o imaginário "i", isto é,

 $i A_1(x, k_y) \rightarrow A_1(x, k_y)$ e $i A_4(x, k_y) \rightarrow A_4(x, k_y)$,

onde a seta \rightarrow significa a redefinição para A_1 e A_4 .

Utilizando-se destas redifinições, o Hamiltoniano de massa efetiva para os estados U e L, incluindo o potencial externo V(x), torna-se:

> SERVIÇO DE BIBLICIECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

$$H_{U} = \begin{bmatrix} \lambda_{o} + V(x) & P\left(\frac{\partial}{\partial x} \mp \frac{k_{y}}{2}\right) & \mp \frac{\sqrt{3}}{2} Pk_{y} \\ P\left(-\frac{\partial}{\partial x} \mp \frac{k_{y}}{2}\right) & -\lambda_{o} + V(x) & 0 \\ \mp \frac{\sqrt{3}}{2} Pk_{y} & 0 & -\lambda_{o} + V(x) \end{bmatrix}, \quad (6.1.2)$$

com as seguintes condições de contorno associadas: Caso A - Espalhamento de estados por uma barreira à esquerda.

 A_1) Estados U

$$A_1(x=0, k_y) = -A_2(x=0, k_y).$$
 (6.1.3)

 A_2) Estados L

$$A_4(x=0,k_y) = -A_5(x=0,k_y).$$
 (6.1.4)

Caso B - Espalhamento de estados por uma barreira à direita.

B₁) Estados U

$$A_1(x=0, k_y) = +A_2(x=0, k_y).$$
 (6.1.5)
B₂) Estados L
 $A_4(x=0, k_y) = +A_5(x=0, k_y).$ (6.1.6)

6.2. Efeito de um Potencial Externo em um MISFET.

Para um dado potencial externo V(x), o problema de um elétron requer, para os estados U, um conjunto de equações diferenciais acopladas de primeira ordem, dadas por:

$$H_{U}\Psi_{U}(x,y) = E_{U}\Psi_{U}(x,y),$$
 (6.2.1)

com

.....

$$\Psi_{\cup}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{e}^{\mathsf{k}_{\mathbf{y}}\mathbf{y}} \begin{vmatrix} A_{1}(\mathbf{x}, \mathbf{k}_{\mathbf{y}}) \\ A_{2}(\mathbf{x}, \mathbf{k}_{\mathbf{y}}) \\ A_{3}(\mathbf{x}, \mathbf{k}_{\mathbf{y}}) \end{vmatrix}.$$
(6.2.2)

A interface é considerada através do uso da eq.(6.1.3) ou (6.1.5). Os estados L satisfazem relações semelhantes, apenas trocando-se A_1 , A_2 e A_3 por A_4 , A_5 e A_5 , respectivamente. A interface é levada em conta pela eq.(6.1.4) ou (6.1.6).

Para encontrarmos as relações entre as componentes A_1 , A_2 e A_3 , substituimos o bloco Hamiltoniano H_0 , dado pela eq.(6.1.2), e a eq.(6.2.2) na eq.(6.2.1), de modo a gerar um sistema de três equações. Em seguida, eliminamos A_2 em termos de A_1 , de onde resultam as seguintes equações diferenciais:

$$\frac{d^{2}}{dx^{2}}A_{1} + \frac{\left(\frac{dV}{dx}\right)}{\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)}\left(\frac{dA_{1}}{dx}\right) - \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right) + P^{2}k^{2}\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right) + P^{2}k^{2}\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right) + P^{2}k^{2}\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{1} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + E_{U} - V(x)\right)\left(\lambda_{o} - E_{U} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left[\left(\lambda_{o} + V(x)\right)\right]A_{2} + \frac{1}{P^{2}}\left$$

$$-\frac{1}{2}\left[\frac{P^2 k\left(\frac{dV}{dx}\right)}{\left(\lambda_o + E_U - V(x)\right)}\right] A_1 = 0, \quad (6.2.3a)$$

$$A_2 = - \frac{P}{\left(\lambda_0 + E_U - V(x)\right)} \left[\frac{d}{dx} + \frac{k}{2}\right] A_1, \qquad (6.2.3b)$$

$$A_{3} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{Pk}{(\lambda_{o} + E_{U} - V(x))} A_{1}, \qquad (6.2.3c)$$

onde $k \equiv k_y$. Os estados L possuem um conjunto de equações diferenciais similares, apenas mudando-se $k \rightarrow -k$, já que, $H_{L}(k_x,k) = H_{U}(k_x,-k)$, e as componentes da função envelope.

Agora podemos entender o efeito do potencial autoconsistente V(x) em MISFET's. Observe que a diferença entre a eq.(6.2.3a) para a componente A_1 e a mesma equação para a componente A_4 é no sinal do último termo da eq.(6.2.3a), este último termo é o responsável pela estrutura de cada uma das subbandas

apresentar o que chamaremos de "separação dos spins". O termo "separação dos spins" será aqui utilizado para representar o afastamento em energia dos estados U(spin †) e L(spin i), para um mesmo vetor de onda paralelo k, devido a uma voltagem externa aplicada na porta. O potencial auto-consistente V(x) aparece no último termo da eq.(6.2.3a) através de sua derivada $\left(\frac{dV}{dx}\right)$, ou seja, a degenerescência de spin nas subbandas de uma camada de inversão é, na verdade, quebrada por um campo elétrico auto-consistente. Observe que, se o campo elétrico é nulo (V(x) constante) não existe separação dos spins, pois as equações para A₁ e A₄ são idênticas. Em k=0, mesmo com uma voltagem de entrada aplicada na porta, as subbandas ainda permanecem degeneradas, já que o termo diferente nas equações para A₁ e A₄ vai a zero.

Note que, a "separação dos spins" das bandas são determinadas pelo potencial elétrico interno $\left(\frac{dV}{dz}\right)$. Porém, os dubletos de Kramer continuam degenerados, isto é, $E_U(-k) = E_L(+k)$. Com a aplicação de campo magnético, B_Z , a degenerescência destes dubletos de Kramer serão quebradas, e os níveis de Landau de cada ramo terão dependência ligeiramente diferente com o aumento de B_Z . Este ponto será demonstrado no cap.VIII, quando será estudado, explicitamente, o efeito de um campo magnético nestes níveis (ramos).

6.3. Solução da EMA usando a Aproximação W.K.B.

O termo proporcional à derivada primeira de $A_1(x,k)$ na eq.(6.2.3a) pode ser eliminado através da seguinte mudança de variável:

$$A_1(\mathbf{x},\mathbf{k}) = \sqrt{\left[\lambda_{\circ} + E_{\cup}(\mathbf{k}) - V(\mathbf{x})\right]/\lambda_{\circ}} \quad \mathcal{A}_1(\mathbf{x},\mathbf{k}). \quad (6.3.1)$$

A substituição desta equação em (6.2.3a), determina a seguinte

equação para \mathcal{A}_1 :

$$\frac{d^2}{dx^2} \mathcal{A}_1(x,k) + \frac{Eg}{P^2} \left\{ S^{\cup}(E_{\cup},k) - V^{\cup}_{eff}(x,E_{\cup}) \right\} \mathcal{A}_1(x,k) = 0, \quad (6.3.2)$$

onde

е

$$V_{\text{aff}}^{U}(\mathbf{x}, E_{U}) = \frac{1}{\text{Eg}} \left[2 E_{U} V(\mathbf{x}) - V(\mathbf{x})^{2} + \frac{\frac{P^{2} \left(\frac{d^{2} V}{d \mathbf{x}^{2}} - \mathbf{k} \frac{d V}{d \mathbf{x}} \right)}{\left(\lambda_{0} + E_{U} - V(\mathbf{x}) \right)} + \frac{\frac{3}{4} P^{2} \left(\frac{d V}{d \mathbf{x}} \right)^{2}}{\left(\lambda_{0} + E_{U} - V(\mathbf{x}) \right)^{2}} \right],$$
(6.3.3)

 $S^{\cup}(E_{\cup},k) = \frac{1}{Eg} \Big(E_{\cup}(k)^{2} - \lambda_{o}^{2} - P^{2}k^{2} \Big).$ (6.3.4)

A condição de contorno para uma barreira à esquerda é usada, juntamente com as eqs.(6.2.3b) e (6.3.1), para determinar a seguinte equação correspondente à condição de contorno de $\mathcal{A}_1(x,k)$:

$$\mathcal{A}_{1}(\mathbf{x}=0,\mathbf{k}) = \frac{P}{\left(\lambda_{\circ} + E_{\cup} - V(\mathbf{x}=0)\right)} \left\{ \left\{ \frac{\mathbf{k}}{2} - \frac{\left(\frac{dV}{d\mathbf{x}}\right)_{\mathbf{x}} = 0}{2\left(\lambda_{\circ} + E_{\cup} - V(\mathbf{x}=0)\right)} \right\} \mathcal{A}_{1}(\mathbf{x}=0,\mathbf{k}) + \left\{ \frac{d}{d\mathbf{x}} \mathcal{A}_{1}(\mathbf{x},\mathbf{k}) \right\}_{\mathbf{x}} = 0 \right\}.$$

$$(6.3.5)$$

Do mesmo modo, pode-se obter a condição de contorno para uma barreira à direita.

Para a componente $A_4(x,k)$, valem as mesmas expressões acima, somente mudando-se: $\mathcal{A}_1(x,k) \rightarrow \mathcal{A}_4(x,k)$, os estados $U \rightarrow L$ e $k \rightarrow -k$ nos termos lineares. Portanto, vamos fixar nossa atenção somente na função \mathcal{A}_1 .

Note que, a vantagem no uso da eq.(6.3.2) é devido à sua semelhança com a equação de massa efetiva para um banda,

pois o termo $\operatorname{Eg}/\operatorname{P}^2$ é igual a $2\mathfrak{m}_c^*/\hbar^2$ (cap.IV). Apesar das eqs.(6.3.3) e (6.3.4) desencorajarem qualquer tentativa de solução analítica para a eq.(6.3.2), esta equação possui uma forma conveniente para o uso da aproximação W.K.B. (Wentzel-Kramers-Brillouin).

O ponto de inversão do movimento clássico x_{T} é definido como o ponto onde o auto-valor $\mathcal{S}^{U}(E_{U},k)$ é igual ao potencial efetivo $V_{aff}^{U}(x,E_{U})$. O método W.K.B. determina que, do lado esquerdo do ponto de inversão x_{T} , a função $\mathcal{A}_{1}(x,k)$ possui a seguinte forma assintótica:

$$A_1(x,k) \to \frac{1}{\sqrt{Q_1(x)}} \cos[\varphi_1(x) - \pi/4],$$
 (6.3.6)

onde

$$Q_{i}(x) = \sqrt{\frac{Eg}{P^{2}} \left(S^{\cup}(E_{\cup}, k) - V^{\cup}_{off}(x, E_{\cup}) \right)}, \qquad (6.3.7)$$

е

$$\varphi_{1}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_{T}} Q_{1}(\mathbf{x}') \, d\mathbf{x}'. \qquad (6.3.8)$$

Do lado direito do ponto de inversão x_{τ} , a função $\mathcal{A}_1(x,k)$ comporta-se assintoticamente como:

$$A_1(x,k) \to \frac{1}{\sqrt{Q_{\|}(x)}} e^{-\varphi_{\|}(x)},$$
 (6.3.9)

onde

$$Q_{\mu}(x) = \sqrt{\frac{Eg}{P^2} \left[V_{off}^{\cup}(x, E_{\cup}) - \delta^{\cup}(E_{\cup}, k) \right]}, \qquad (6.3.10)$$

$$\varphi_{\mu}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{X}_{T}}^{\mathbf{X}} Q_{\mu}(\mathbf{x}') \, d\mathbf{x}'. \qquad (6.3.11)$$

Para encontrarmos as soluções da eq.(6.3.2), a energia $E_{U}(k)$ é variada até que a eq.(6.3.5) seja satisfeita. Para cada valor de k, existem várias auto-energias que satisfazem esta equação e cada uma corresponde a uma subbanda de

بواست بالكان العالم

energia j, que representaremos por E_j , onde $j=0,1,2,\ldots$

Na fig.6.1 está ilustrado a forma do potencial efetivo, $V_{eff}^{\cup}(x, E_{\cup})$, de um poço triangular. Observe nesta figura, que o polo de segunda ordem do potencial efetivo em um $x=x_{o}$,

$$V(x_o) = \lambda_o + E_0,$$
 (6.3.12)

simula a presença de uma barreira infinita. Isto significa que as funções de onda devem ir a zero neste ponto; esta é mais uma condição que utilizaremos para o nosso potencial autoconsistente.

A aproximação W.K.B. foi verificada por Marques [3], para um poço triangular, e mostrou uma boa precisão ao descrever as funções A_1 e A_2 , além da vantagem de possuir uma forma analítica para estas funções.



Figura 6.1. Diagrama ilustrativo do potencial efetivo $V_{eff}^{\cup}(x,E_j)$, para um poço triangular.

6.4. Definição do Potencial Auto-Consistente V(x).

O potencial perturbativo de um elétron é dividido em três partes,

$$V(x) = V_{im}(x) + V_{xc}(x) + V_{H}(x). \qquad (6.4.1)$$

O primeiro termo é o potencial imagem,

$$V_{im}(x) = \frac{\epsilon_{sc} - \epsilon_{iso}}{\epsilon_{sc} + \epsilon_{iso}} \frac{e^2}{4\epsilon_{sc}} \frac{1}{x}, \qquad (6.4.2)$$

onde $\epsilon_{sc} = \epsilon_{iso}$ são as constantes dielétricas do semicondutor e do isolante, respectivamente. Este potencial é devido às diferentes constantes dielétricas do semicondutor e do isolante. No nosso caso, o semicondutor possui maior constante dielétrica, de modo que, o termo do potencial imagem é repulsivo no lado da interface com semicondutor, onde os elétrons se encontram. O segundo termo, $V_{xc}(x)$, é o potencial de troca e correlação, dado por [13]:

$$V_{xc} = -\left\{1 + (0,7734/21) r_s(x) ln \left[1 + (21/r_s(x))\right]\right\} (2/\pi \alpha r_s(x)) Ry^*, (6.4.3)$$
onde

$$\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$$
 e $r_s(x) = \left[\frac{4}{3}\pi a_B^{*3}\rho_{inv}(x)\right]^{-1/3}$,

sendo a_B^* o raio de Born efetivo e $\rho_{inv}(x)$ o número de elétrons por unidade de volume da camada de inversão, que será melhor definido mais adiante. Para os valores de massa e constante dielétrica do material Hg(Cd)Te, dados na fig.6.4, $1 \text{Ry}^* = 0,252 \text{ meV}.$

O terceiro termo, $V_{\mu}(x)$, conhecido como potencial de Hartree, é a contribuição para a energia potencial devido a distribuição espacial de cargas (elétrons e buracos) no semicondutor. O potencial $V_{\mu}(x)$ é obtido da equação de Poisson,

$$\frac{d^2}{dx^2} V_{\mu}(x) = \frac{4\pi e}{\epsilon_{sc}} \rho(x), \qquad (6.4.4)$$

onde $\rho(x)$ é a densidade volumétrica total de cargas, que é dada pela soma da densidade volumétrica de cargas na camada de depleção mais a densidade volumétrica de cargas na camada de inversão.

A distribuição espacial de impurezas é suposta uniforme. Vamos supor ainda, que todas as impurezas doadoras (N_D) e aceitadoras (N_A) estão ionizadas na camada de depleção, deste modo a densidade volumétrica de cargas nesta camada é:

$$\rho_{dep}(x) = -e |N_A - N_D|, \qquad 0 < x \le d,$$

= 0, $x > d,$ (6.4.5)

sendo $|N_A - N_D|$ a concentração uniforme de impurezas por unidade de volume e "d" a largura da camada de depleção.

Nos cálculos a seguir, a energia de Fermi $E_{\rm F}$ é mantida constante. Consideremos que, para uma dada voltagem de entrada, todas as soluções na camada de inversão de

$$H_{\sigma}\Psi_{jk\sigma}(x,y) = E_{jk\sigma}\Psi_{jk\sigma}(x,y), \qquad (6.4.6)$$

com $E_{jk\sigma} \leq E_F$, sejam conhecidas. O índice " σ " representa o spin ($\sigma = L,U$). Portanto, a densidade volumétrica de cargas na camada de inversão é:

$$-e \rho_{inv}(x) = -e \sum_{\substack{j \mid k\sigma \\ (ocup)}} |\Psi_{jk\sigma}(x,y)|^2. \qquad (6.4.7)$$

Substituindo as duas densidades acima na equação de Poisson, temos:

$$\frac{d^2}{dx^2} V_{\mu}(x) = - \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{sc}} \left\{ \left| N_{A} - N_{D} \right| + \rho_{inv}(x) \right\}, \qquad (6.4.8)$$

que juntamente com condições de contorno,

$$\left(\frac{\mathrm{d}V_{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{x}=0} = \frac{4\pi \mathrm{e}^{2}}{\epsilon_{\mathrm{sc}}} \left\{ \mathrm{N}_{\mathrm{dep}} + \mathrm{N}_{\mathrm{inv}} \right\}, \qquad (6.4.9)$$

SERVIÇO DE BIBLIUTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{x}=\mathrm{d}} = 0, \qquad (6.4.10)$$

determinam o potencial de Hartree. N_{dep} é o número de cargas por unidade de área na camada de depleção, isto é,

$$N_{dep} = |N_A - N_D| \cdot d,$$
 (6.4.11)

e N_{inv} é o número de cargas por unidade de área na camada de inversão, que é definida como a soma das densidades superficiais de cargas em cada subbanda, N_i,

$$N_{i nv} = \sum_{j} N_{j}$$
, (6.4.12)

onde N_j é dado por:

$$N_{j} = \sum_{\substack{k\sigma \\ (ocup)}} \int_{0}^{\infty} dx |\Psi_{jk\sigma}(x,y)|^{2}. \qquad (6.4.13)$$

A eq.(6.4.9) expressa o fato do campo elétrico na interface ser determinado pela carga total no semicondutor (lei de Gauss) e a eq.(6.4.10), que o campo elétrico é nulo, ou seja, o potencial $V_{\rm H}(x)$ é constante para x>d, veja fig.6.2. Partindo-se de uma forma geral para $V_{\rm H}(x)$, e determinando as constantes através das condições de contorno, encontramos que:

$$V_{H}(x) = \frac{4\pi e^{2}}{\epsilon_{sc}} \left[N_{dep} \left[x - \frac{1}{2d} x^{2} \right] + N_{inv} \cdot x - \int_{0}^{x} (x - x') \rho_{inv}(x') dx' \right]. (6.4.14)$$

Este potencial é obtido por cálculos auto-consistentes, pois, depende da função de onda através de $\rho_{inv}(x)$ e a função de onda depende do potencial através da eq.(6.4.6).



Figura 6.2. Diagrama esquemático mostrando o potencial, as bandas de condução e valência, a posição do nível de Fermi e a condição para se encontrar largura da camada de depleção d.

Para encontrarmos a largura auto-consistente da camada de depleção "d", utilizamos a relação indicada na fig.6.2,

$$[V(d) - V(0)] = E_F + \frac{Eg}{2},$$
 (6.4.15)

levando em conta apenas a contribuição do termo de Hartree para o potencial V(x), e considerando "d' muito grande, $d \rightarrow \infty$, no limite da integral deste potencial, ou seja,

$$d = \left[\frac{2}{|N_{A} - N_{D}|}\left(E_{F} + \frac{Eg}{2}\right) / \left(\frac{4\pi e^{2}}{\epsilon_{sc}}\right) - X_{av}(N_{inv})\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (6.4.16)$$

onde

$$X_{av}(N_{inv}) = \int_{0}^{\infty} x \rho_{inv}(x) dx. \qquad (6.4.17)$$

Note na eq.(6.4.16) que, "d" é função da densidade na camada de inversão $N_{i nv}$ e da concentração de dopagem $|N_A - N_D|$.

Os termos $V_{im}(x) \in V_{xc}(x)$ na eq.(6.4.1) foram observados por Marques [3], no seu trabalho original com InSb, como

dando uma pequena contribuição para o potencial V(x) e, portanto, não foram também considerados neste contexto.

6.5. Método Computacional para as Componentes da Função Envelope.

O potencial auto-consistente V(x), ilustrado na fig.6.2, possui uma forma planar para grandes valores de x; esta forma faz com que as funções de ondas (componentes da função envelope) das mais altas subbandas (ocupadas e desocupadas) com k's próximos do vetor de onda de Fermi, possuam uma larga extensão espacial. Portanto, a solução numérica na extensa região de gap pode causar a propagação de erros numéricos, que não garantiriam que $A_1(x,k)$ e $A_2(x,k)$ fossem à zero na barreira infinita, simulada pelo polo do potencial efetivo em x_o. A utilização da função de onda W.K.B. nesta região solucionou este problema, pois, as funções A₁(x,k) e A₂(x,k) possuem a forma analítica de uma exponencial decrescente, do lado direito do ponto de inversão clássico, que assegura a condição de contorno em x_o. O método de casamento da solução numérica com a solução analítica W.K.B., para as funções de ondas componentes, está ilustrado na fig.6.3 e é descrito a seguir.

Para um dado potencial auto-consistente V(x), as energias das subbandas W.K.B., em k=0, são calculadas a partir da eq.(6.3.5) e usadas como um chute inicial. Para cada uma destas auto-energias, o potencial efetivo $V_{eff}^{U}(x,E_{U})$ é calculado nas vizinhanças do ponto de inversão, e em seguida, encontra-se a razão $(A_1(x_v,k=0)/A_2(x_v,k=0))_{WKB}$ no ponto de verificação $x_v = x_T + 0.5$. Depois, as equações diferenciais (6.2.3) são numericamente integradas no intervalo de $0 \le x \le x_v$, utilizando-se a condição de contorno da eq.(6.1.3), através do método de integração Runge-Kutta de quarta ordem. Neste ponto, a razão

 $\left(A_1(x_{\nu}, k=0)/A_2(x_{\nu}, k=0)\right)_{Num}$ é comparada com $\left(A_1(x_{\nu}, k=0)/A_2(x_{\nu}, k=0)\right)_{WKB}$. Quando a diferença absoluta for menor do que um certo valor, as componentes da função envelope são analiticamente continuadas de x_{ν} até o centro do gap.



Figura 6.3. Ilustra o método computacional para as funções de onda A₁ e A₂. A solução numérica é comparada com a solução W.K.B no ponto x_ν, para uma dada energia E₀. Em um pré-determinado valor, as funções são analiticamente continuadas. Omitiu-se nos argumentos de A₁ e A₂, o termo k=0.

6.6. Cálculo Auto-Consistente e Resultados.

O termo do potencial de Hartree, $V_{\mu}(x)$, no potencial de um elétron V(x) torna a equação de Schrödinger um problema de auto-valor não linear, pois, o potencial V(x) depende do quadrado das funções de onda de cada subbanda. Tais equações, conhecidas como equações auto-consistentes, são geralmente resolvidas iterativamente, através de um potencial de entrada que leva a funções de saída com as quais o potencial é novamente derivado. O cálculo auto-consistente utilizado neste trabalho usa como potencial de entrada, para resolver a eq. de Schrödinger na iteração (r+1), uma combinação linear do potencial de entrada e saída da prévia interação (iteração (r)):

$$V_{ent}^{(r+1)}(x) = V_{ent}^{(r)}(x) + f \begin{bmatrix} V_{ent}^{(r)}, (x) - V_{ent}^{(r)}(x) \end{bmatrix},$$
 (6.6.1)

onde f é um pequeno valor que deve ser escolhido cuidadosamente, a fim de evitar grandes oscilações entre os potenciais de entrada e saída.

O potencial de saída no fim de cada iteração (r) é comparado com o potencial de entrada, no inteiro intervalo de x, até que a diferença absoluta entre eles seja máxima, a qual definiremos por:

$$\Delta_{M} = Max \left| V_{ent}^{(r)}(x) - V_{saida}^{(r)}(x) \right|, \qquad (6.6.2)$$

A auto-consistência é encontrada quando Δ_{M} for menor que um certo valor Δ_{AC} , fixado no início do cálculo. A parte não ocupada da estrutura de subbandas é somente calculada depois que a auto-consistência é satisfeita.

Uma típica estrutura de subbandas auto-consistente de um camada de inversão tipo-n do material $Hg_{0.79}Cd_{0.22}Te$ tipo-p é mostrada na fig.6.4a. O potencial auto-consistente determinado pelas quatro (duas por spin) subbandas ocupadas é ilustrado na fig.6.4b. Observe que, as subbandas não são parabólicas, e apresentam uma considerável "separação dos spins" devido ao campo elétrico auto-consistente e as condições de contorno utilizadas. A "separação dos spins" nas subbandas decresce rapidamente com o aumento do índice das subbandas, como uma conseqüência da forma planar do potencial auto-consistente, que está de acordo com as observações da seção 6.2, onde mostrou-se que a "separação dos spins" nas subbandas tende a zero quando $\left(\frac{dV}{dx}\right)$ é nulo.



- Figura 6.4. a. Estrutura auto-consistente das subbandas de uma camada de inversão tipo-n no semicondutor Hg_(1-x)Cd_xTe tipo-p, em concentrações de 0,22. A não parabolicidade das subbandas e a "separação dos spins" é observada.
 - b. Potencial auto-consistente determinado pelas subbandas ocupadas à esquerda. As componentes da função de onda envelope da primeira subbanda, em k_{//}=0, estão plotadas na energia E₁. As bandas de valência e condução são também mostradas em função de x.

FISICA

A fig.6.5 comprova a densidade de ocupação em cada subbanda como função da densidade de ocupação total na camada de inversão, obtidas no cálculo auto-consistente, através das eqs.(6.4.12) e (6.4.13).



Figura 6.5. Densidade de ocupação em cada subbanda "j", N_j , como função de N_{inv} .

A baixa concentração utilizada na camada de inversão, $N_{inv} = 3,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, é uma conseqüência da concentração empregada experimentalmente por Kirk e outros [1], conforme descrito na seção 2.5, que é o objetivo principal deste trabalho. Estes resultados serão utilizados no último capítulo.

CAPÍTULO VII

TRANSIÇÃO DE FASE NAS SUBBANDAS DE MISFET

DE MATERIAIS COM GAPS ESTREITOS

7.1. Introdução.

Nosso propósito, neste capitulo, está direcionado em apresentar um modelo qualitativo, que explique uma delicada e interessante característica observada experimentalmente, tanto na resistência Hall como na resistência longitudinal de um MISFET-Hg(Cd)Te, um semicondutor com gap de energia estreito.

Vamos restringir nossa atenção a altos campos magnéticos e baixas densidades ($<< 10^{12}$ cm⁻²) na camada de inversão, tal que, somente o mais baixo nível de Landau esteja ocupado. Por simplicidade, nosso modelo é limitado a ter apenas a mais baixa subbanda com "separação dos spins" ocupada, ou seja, com os estados U e L desta subbanda afastados em energia, conforme mostrado esquematicamente na fig.7.1.

Em camada de inversão de silício existe um número de vales na banda de condução (veja fig.3.2) igualmente populados, cujos números são 2, 4, ou 6 dependendo se a interface do MOSFET [14] é a face (100), (110) ou (111) do Si, respectivamente. Note que, o caso com dupla degenerescência de vales, estudado por Gummich e Sham [15], possui um ramo de energia com dois vales, o que é estruturalmente equivalente ao nosso modelo de dois ramos (subbandas U e L) de energia e um único vale. Os compostos tetraedrais possuem superfícies de Fermi esféricas próximas ao centro da zona de Brillouin e, portanto, possuem um único vale em $\vec{k}=\vec{0}$, como na fig.3.1.



Figura 7.1. Diagrama ilustrativo do modelo.

- a. Subbanda com dois ramos de energia (U e L) e um único vale, na ausência de campo magnético.
- b. Densidade de estados do mais baixo nível de Landau, na presença de campo magnético.

Vamos nos deter ao estudo dos efeitos de troca e correlação intra-ramos na presença de altos campos magnéticos. A existência de uma transição de fase é determinada por uma competição entre a energia cinética e as energias de troca e correlação do sistema. Esta transição é investigada como função da ocupação do nível de Landau, ν , definida como:

$$\nu = \frac{N_{inv}}{D}, \qquad (7.1.1)$$

sendo D a degenerescência do nível de Landau de um único tipo de spin, definida no apêndice I.

Por conveniência, a partir da próxima seção faremos uma mudança de eixos, de tal modo que, o eixo perpendicular à interface seja o eixo-z, e os eixos x e y estejam no plano da interface. Supomos que o semicondutor seja isotrópico, e uma vez encontrado o potencial confinador, V(x), ele será o mesmo

qualquer que seja o eixo escolhido como perpendicular à interface. Maiores esclarecimentos sobre esta mudança de eixos serão dados no próximo capítulo.

7.2. Um Modelo para a Camada de Inversão.

Seja um alto campo magnético aplicado perpendicularmente à interface de um MISFET, $\vec{B} = B\hat{z}$, onde um gás de elétrons encontra-se confinado na camada de inversão pelo potencial V(z). O movimento dos elétrons normal à interface está quantizado inicialmente e representaremos na mais baixa subbanda de energia por $\xi(z)$. Enquanto que, o movimento dos elétrons no plano x-y da interface torna-se quantizado em órbitas ciclotrônicas, e encontra-se descrito no apêndice I. Portanto, para conjunto de base escolhemos as funções de onda da seguinte forma:

$$\Psi_{ks}(\vec{r}) = e^{iky}\Phi_{s}(x-x_{o}), \qquad s=U,L, \qquad (7.2.1)$$

para descrever o movimento bi-dimensional de um elétron no ramo s da mais baixa subbanda, com uma componente y do vetor de onda igual a k. A função de onda $\Phi_s(x-x_o)$ descreve o movimento de um oscilador harmônico unidimensional centrado em x_o , cuja definição é dada no apêndice I. Os dois únicos números quânticos de interesse aqui são k e s. Devemos lembrar que apenas o mais baixo nível de Landau está ocupado e a interação com os níveis mais altos é negligenciada, o que é bastante coerente, já que estamos trabalhando com altos campos magnéticos, que levam a uma separação entre níveis de Landau, $\hbar\omega_c$, muito grande.

O operador Hamiltoniano destes elétrons consiste de três partes:

$$H = H_0 + H_1 + H_c.$$
 (7.2.2)

 H_o é o termo referente à energia eletrônica total no mais baixo nível de Landau, e é dado pela soma dos Hamiltonianos de cada elétron:

$$H_{o} = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha} \left[\vec{p}_{\alpha} + \frac{e}{c} \vec{A}_{\alpha} \right]^{2}, \qquad (7.2.3)$$

onde o índice "a" numera os elétrons; o operador \vec{p}_a , o potencial vetor \vec{A}_a e a coordenada \vec{r}_a são relativos ao a-ésimo elétron. H_i representa o espalhamento elétron-impureza (e-i) intra-ramos:

$$H_{i} = \sum_{\alpha} v^{(i)} (\vec{r}_{\alpha} - \vec{r}_{d}, z_{d}). \qquad (7.2.4)$$

O potencial bi-dimensional efetivo, $v^{(i)}(\vec{r}_a - \vec{r}_d, z_d)$, devido a um centro espalhador tipo (i), localizado em (\vec{r}_d, z_d) , não permite que elétrons de um ramo s sejam transferidos para o outro ramo. Finalmente, o termo H_c representa a interação elétron-elétron (e-e) de Coulomb:

$$H_{c} = \frac{1}{2} \sum_{a,b} \frac{e^2}{\epsilon_{sc}} \left[\left(\vec{r}_a - \vec{r}_b \right)^2 + (z_a - z_b)^2 \right]^{-1/2}, \qquad (7.2.5)$$

sendo (r_b,z_b) a coordenada do b-ésimo elétron. A interação Coulombiana entre elétrons de ramos diferentes é permitida, porém, são desprezados os espalhamentos e-e que transfiram elétrons de seu ramo.

Podemos reescrever o operador Hamiltoniano, dado pela eq.(7.2.2), no formalismo de segunda quantização [16], isto é, sob a forma de operador agindo sobre as funções dos números de ocupação¹. Para isto, vamos definir os operadores $\widehat{\Psi}(\vec{r})$:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{k,s} \Psi_{ks}(\vec{r}) a_{ks} \quad e \quad \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{k,s} \Psi_{ks}^{*}(\vec{r}) a_{ks}^{\dagger} , \qquad (7.2.6)$$

¹A função dos números de ocupação é representada por: $|N_1, N_2, ... \rangle$, onde os números $N_1, N_2, ...$ indicam quantos elétrons se encontram em cada estado $\Psi_{k_1s_1}, \Psi_{k_1s_2}$... com a[†]_{ks} e a_{ks} sendo os operadores de criação e aniquilação do estado (k,s), respectivamente. Portanto, as três partes do Hamiltoniano H em segunda quantização são:

$$H_{o} = \sum_{k,s} \epsilon_{o}(k) a_{ks}^{\dagger} a_{ks} , \qquad (7.2.7)$$

$$H_{i} = \sum_{k,k',s} \langle k s | v^{(i)} (\vec{r}_{a} - \vec{r}_{d}, z_{d}) | k' s \rangle a^{\dagger}_{ks} a_{k's} , \qquad (7.2.8)$$

$$H_{c} = \frac{1}{2} \sum_{\text{todos } k, s} V(k_{1}, k_{1}'; k_{2}, k_{2}') a_{k_{1}s_{1}}^{\dagger} a_{k_{2}s_{2}}^{\dagger} a_{k_{2}'s_{2}} a_{k_{1}'s_{1}}. \qquad (7.2.9)$$

 ϵ_o representa a energia do mais baixo nível de Landau, e $V(k_1,k_1';k_2,k_2')$ é o elemento de matriz de Coulomb, dado por:

$$V(k_{1}, k_{1}'; k_{2}, k_{2}') = \int d^{3}r_{a} \int d^{3}r_{b} \Psi_{k_{1}s_{1}}^{*}(\vec{r}_{a}) \Psi_{k_{1}'s_{1}}(\vec{r}_{a}) V(\vec{r}_{a} - \vec{r}_{b}) \Psi_{k_{2}s_{2}}^{*}(\vec{r}_{b}) \Psi_{k_{2}'s_{2}}(\vec{r}_{b}),$$
(7.2.10)

onde

$$V(\vec{r}_{a} - \vec{r}_{b}) = \int dz_{a} \int dz_{b} |\xi(z_{a})|^{2} |\xi(z_{b})|^{2} V(\vec{r}_{a} - \vec{r}_{b}, z_{a}, z_{b}), \qquad (7.2.11)$$

sendo

$$V(\vec{r}_{a} - \vec{r}_{b}, z_{a}, z_{b}) = \frac{e^{2}}{\epsilon_{sc}} \left[\left(\vec{r}_{a} - \vec{r}_{b} \right)^{2} + (z_{a} - z_{b})^{2} \right]^{-1/2}.$$
(7.2.12)

7.3. Função de Green e Energia Total do Sistema.

Como citado no apêndice I, cada nível de Landau passa a ter uma largura finita Γ na presença de impurezas, existindo uma banda de energia para cada momento \vec{p} do elétron espalhado; veja fig.I.3. Elétron espalhado por impurezas possui um livre caminho médio² finito e, portanto, apresenta incerteza em seu momento, ou na energia ou em ambos. Desta forma, segue-se que os estados excitados não tem uma energia perfeitamente definida, pois suas energias se distribuem sobre um intervalo

²Livre caminho médio é a distância média entre dois espalhamentos.

 Γ , que pelo princípio de incerteza energia-tempo, satifaz aproximadamente a relação $\Gamma \sim \frac{\hbar}{\tau}$, onde τ é o tempo médio entre dois espalhamentos, conhecido com tempo de espalhamento (ou tempo de relaxação, ou livre tempo médio). Espalhamentos ou colisões são eventos instantâneos, que abruptamente alteram a velocidade de um elétron. Nós cálculos, a seguir, será empregado o formalismo de função de Green.

Os efeitos de alargamento do nível de Landau são tratados na aproximação auto-consistente de Born [17]. Nesta aproximação, espalhamentos por impurezas são considerados na mais baixa aproximação de Born, enquanto que, o alargamento do nível é levado em conta auto-consistentemente. Os diagramas de auto-energia para o espalhamento do elétron por uma única impureza estão mostrados na fig.7.2. Esses são os termos importantes quando a concentração de impurezas é pequena. Na figura, a impureza é representada por um X, o elétron por uma linha sólida e a interação elétron-impureza por linhas tracejadas. O primeiro termo causa apenas um deslocamento na origem da energia [18] e será omitida a sua contribuição. A impureza é considerada rígida e não pode absorver ou transferir energia.

Figura 7.2. Contribuição da impureza para a auto-energia do elétron.

O termo de auto-energia do elétron devido ao espalhamento por impurezas, proposto por Ando e Uemura [17], é:

$$\sum_{s}^{i}(E) = \frac{1}{4} \Gamma^{2} G_{s}(E), \qquad (7.3.1)$$

onde Γ^2 é a média, na configuração das impurezas, do quadrado do elemento de matriz (ks $|v^{(i)}(\vec{r}_{\alpha} - \vec{r}_{d}, z_{d}))|k's\rangle$. Para potenciais

de curto alcance, onde podemos repassar $v^{(i)}(\vec{r},z)$ por $V^{(i)}(z)\delta(\vec{r})$, Γ pode ser escrito, em termos da mobilidade μ ou do tempo de relação τ , calculados na aproximação de Born e na ausência de campo magnético, como [17]:

$$\Gamma = \sqrt{4 \frac{1}{2\pi R^2} \frac{e\hbar^3}{m^2 \mu}} = \sqrt{\frac{2}{\pi} \hbar \omega_c \frac{\hbar}{\tau}} , \qquad (7.3.2)$$

onde R é o raio da órbita ciclotrônica e está definido no apêndice I.

A contribuição para a energia devido à interação elétron-elétron de Coulomb, veja eq.(7.2.9), é dada na aproximação de Hartree-Fock pelo seguinte par de emparelhamento de operadores:



em que permite-se a troca do vetor de onda do elétron de um ramo pelo vetor de onda de um elétron do outro ramo, ou seja, $k'_1 = k_2$ e $k'_2 = k_1$, mas não permite-se a mudança de ramo do elétron. Portanto, o termo de auto-energia devido à interação elétronelétron, [18,15], ilustrado pelo diagrama na fig.7.3, é:

$$\sum_{s}^{x} = -\alpha \nu_{s}, \qquad (7.3.3)$$

que nos levará à energia de troca do elétron. Aqui α é o elemento de matriz de Coulomb médio,

$$\alpha = \sum_{k_1, k_2} V(k_1, k_2; k_2, k_1), \qquad (7.3.4)$$

e u_s , a ocupação fracional do nível de Landau no ramo s, definida como:

$$\nu_{\rm s} = \frac{N_{\rm S}}{D} = 2\pi R^2 N_{\rm S}, \qquad {\rm s=U,L}, \qquad (7.3.5)$$

onde ${\rm N}_{\rm S}$ é o número de elétrons no ramo s. A soma $\nu_{\rm U}+\nu_{\rm L}$ nos dá a

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA ocupação fracional ou fração de preenchimento do nível de Landau, ν , através da qual podemos obter a densidade de elétrons na camada de inversão, N_{inv} , que é dada por $N_{inv} = N_{\cup} + N_{\perp}$. No nosso modelo, a densidade N_{inv} e o campo magnético são ajustados, de modo que, a ocupação fracional máxima em cada ramo s seja um número inteiro igual a um e, portanto, o valor máximo ν igual a dois.



Figura 7.3. a. Auto-energia do elétron, ilustrando as contribuições das interações elétron-elétron e elétron-impureza.

b. Equação de Dyson para o propagador do elétron.

Vamos agora, a partir da equação de Dyson na fig.7.3, obter a função de Green $G_s(E)$ de um propagador do elétron em cada ramos,

$$G_{s}(E) = G_{s}^{(0)}(E) + G_{s}^{(0)}(E) \left(\sum_{s}^{i}(E) + \sum_{s}^{s} \right) G_{s}(E), \qquad (7.3.6)$$

onde $G_{s}^{(0)}(E) = (E - \epsilon_{o})^{-1}$ é a função de Green não perturbada. Substituindo a auto-energia (e-i) na equação acima e resolvendo a equação de segundo grau, obtemos:

$$G_{s}(E) = \frac{2}{\Gamma^{2}} \left\{ \left[E - \epsilon_{o} - \sum_{s}^{x} \right] \pm \left[\left[E - \epsilon_{o} - \sum_{s}^{x} \right] - \Gamma^{2} \right]^{1/2} \right\}.$$
(7.3.7)

Quando $\Gamma \rightarrow 0$, a função de Green diverge para o sinal (+) da equação acima, enquanto que, a função vai a zero para o sinal (-), como esperado. Portanto, o sinal (-) é o escolhido para $G_s(E)$.



Podemos reescrever $G_s(E)$ como:

$$G_{s}(Z) = \frac{2}{\Gamma^{2}} \left\{ Z - \left(Z^{2} - \Gamma^{2} \right)^{1/2} \right\}, \qquad (7.3.8)$$

onde $Z = \left(E - \epsilon_{\circ} - \sum_{s}^{s}\right) = \left(E - \epsilon_{\circ} + \alpha \nu_{s}\right)$. Para que a função de Green tenha uma parte real, $\operatorname{ReG}_{s}(Z)$, e uma parte imaginária, $\operatorname{ImG}_{s}(Z)$, isto é,

$$G_s(Z) = ReG_s(Z) + i ImG_s(Z),$$
 (7.3.9)

devemos ter $\Gamma^2 \ge Z^2$. Já que Γ é uma largura, ela deve assumir apenas valores positivos, de tal modo que,

$$\Gamma \geq |Z|$$
 ou $-\Gamma \leq Z \leq \Gamma$. (7.3.10)

Satisfazendo esta condição, temos a eq.(7.3.8) escrita como:

$$G_{s}(Z) = \frac{2}{\Gamma^{2}} \left\{ Z - i \left(\Gamma^{2} - Z^{2} \right)^{1/2} \right\}.$$
 (7.3.11)

Para altos campos magnéticos, a densidade de estados no ramo s, $D_s(E)$, em formalismo de função de Green, é dado por [17]:

$$D_{s}(E) = -\frac{1}{\pi} D ImG_{s}(Z),$$
 (7.3.12)

Note que, a parte imaginária da função de Green deve existir, para que a densidade de estados seja diferente de zero e assim satisfazer a condição (7.3.10). Substituindo a eq.(7.3.11) em (7.3.12), temos:

$$D_{s}(E) = \frac{2}{\pi \Gamma} D \left(\Gamma^{2} - Z^{2} \right)^{1/2}.$$
 (7.3.13)

Podemos agora obter a ocupação fracional do ramo s, dada por [19]:

$$\nu_{s} = \frac{N_{s}}{D} = \frac{1}{D} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) D_{s}(E), \qquad (7.3.14)$$

f(E) sendo a função distribuição de Fermi em T=0, ou seja,

$$f(E) = \begin{cases} 1, & -\infty \le E \le E_{F}, \\ 0, & E > E_{F}. \end{cases}$$

 $E_{\rm F}$ é a energia de Fermi no corpo do semicondutor. Portanto, fazendo a mudança de variável de E para Z na integral da eq.(7.3.14), temos os seguintes limites de integração:

$$Z_1 = -\Gamma$$
 (limite inferior)
 $Z_8 = E_F - \epsilon_0 + \alpha \nu_s = \Gamma \epsilon_s$, (limite superior)

onde

$$\epsilon_{\rm s} \equiv \left(E_{\rm F} - \epsilon_{\rm o} + \alpha \nu_{\rm s} \right) / \Gamma \,. \tag{7.3.15}$$

Utilizando estes resultados na eq.(7.3.14), podemos expressar ν_{s} como:

$$\nu_{s} = \frac{1}{\pi} \left[\epsilon_{s} (1 - \epsilon_{s}^{2})^{1/2} + \frac{\pi}{2} + sen^{-1} \epsilon_{s} \right].$$
 (7.3.16)

Para encontrarmos a energia total do sistema, E, devemos utilizar a seguinte relação [19]:

$$E = \sum_{s} L^{2} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \sum_{s} (E) D_{s}(E), \qquad (7.3.17)$$

onde

$$\sum(E) = \epsilon_{o} + \sum_{s}^{x} + \sum_{s}^{i}(E),$$
 (7.3.18)

e L^2 é a área da amostra no plano x-y. Com um procedimento semelhante ao empregado para resolver a eq.(7.3.14), temos a seguinte energia total:

$$E = \frac{L^2}{2\pi R^2} \sum_{s} \left[\left(\epsilon_{o} - \frac{1}{2} \alpha \nu_{s} \right) \nu_{s} - \frac{2\Gamma}{3\pi} (1 - \epsilon_{s}^2)^{3/2} \right]. \quad (7.3.19)$$

Este resultado foi obtido para T=0K, de modo que, E é a energia do estado fundamental. O primeiro termo é a energia cinética. O segundo termo é a energia de troca, onde o 1/2 é devido a dupla contagem. O terceiro termo é a contribuição da interação elétron-impureza. Nele, apenas a parte real é integrada em (7.3.17), pois é a responsável pela mudança de energia que pode alterar a dinâmica do movimento. Enquanto que, a parte imaginária é interpretada como responsável pelo ISERVICO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC

FISICA

amortecimento do movimento da partícula.

7.4. Mínimos da Energia Total do Sistema.

Para determinarmos a ocupação do ramo s, ν_s , minimizaremos a energia total com o número total de elétrons, N_{inv}, ou o fator de preenchimento, ν , fixado:

$$\nu_{\rm U} + \nu_{\rm L} = \nu = {\rm cst.}$$
 (7.4.1)

Vamos definir as variáveis Ω , $\tilde{\epsilon}_{\circ}$ e γ como:

$$\Omega = \frac{2\pi R^2}{L^2} \frac{E}{\Gamma}, \qquad \tilde{\epsilon}_{\circ} = \frac{\epsilon_{\circ}}{\Gamma} \qquad e \qquad \gamma = \frac{\Gamma}{\alpha}. \qquad (7.4.2)$$

Portanto, pela eq.(7.3.19) temos:

$$\Omega = \tilde{\epsilon}_{o}\nu - \frac{1}{2\gamma}\nu_{u}^{2} - \frac{1}{2\gamma}\nu_{L}^{2} - \frac{2}{3\pi} \left[(1 - \epsilon_{u}^{2})^{3/2} + (1 - \epsilon_{L}^{2})^{3/2} \right], \qquad (7.4.3)$$

onde $\Omega = \Omega(\epsilon_{\cup}, \epsilon_{\perp})$, já que ν_{\cup} e ν_{\perp} dependem de ϵ_{\cup} e ϵ_{\perp} , respectivamente. Fica mais simples realizarmos a minimização de Ω (ou de E) em termos da diferença entre as energias mínimas dos ramos, em unidades de Γ , isto é:

$$\Lambda = \epsilon_{\rm u} - \epsilon_{\rm L}, \qquad (7.4.4)$$

de modo que, $\Omega = \Omega(\epsilon_{\cup}, \Lambda)$ com ϵ_{\sqcup} escolhido aleatoriamente para ser substituindo por Λ .

Derivando a eq.(7.4.1)em relação a Λ , temos:

$$\frac{\partial \nu_{\rm U}}{\partial \Lambda} + \frac{\partial \nu_{\rm L}}{\partial \Lambda} = 0, \qquad (7.4.5)$$

com $\frac{\partial \nu_s}{\partial \Lambda}$ obtida pela eq.(7.3.16) e expressa a seguir por:

$$\frac{\partial \nu_{s}}{\partial \Lambda} = \frac{2}{\pi} (1 - \epsilon_{s}^{2})^{1/2} \frac{\partial \epsilon_{s}}{\partial \Lambda}. \qquad (7.4.6)$$

O que nos dá, a partir de (7.4.5), a seguinte relação:

$$(1 - \epsilon_{U}^{2})^{1/2} \frac{\partial \epsilon_{U}}{\partial \Lambda} = - (1 - \epsilon_{L}^{2})^{1/2} \frac{\partial \epsilon_{L}}{\partial \Lambda}.$$
 (7.4.7)

Finalmente, derivamos a eq.(7.4.3) em relação a Λ , em

seguida, usamos as eqs.(7.4.5-7) e substituimos no final $\epsilon_{\perp} = (\epsilon_{\cup} - \Lambda)$ e $\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \Lambda} = -1$. Deste modo, obtemos $\frac{\partial \Omega}{\partial \Lambda}$, dado por:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial\Lambda} = \frac{2}{\pi} \Big[1 - (\epsilon_{\cup} - \Lambda)^2 \Big]^{1/2} \Big[\Lambda - \frac{1}{\gamma} \Big[\nu_{\cup} - \nu_{\bot} \Big] \Big].$$
(7.4.8)

Os pontos mínimos e máximos de Ω são obtidos das raízes de $\frac{\partial\Omega}{\partial\Lambda} = 0$, que são: 1. $\Lambda = \epsilon_{\cup} \pm 1$, 2. $\Lambda = \frac{1}{\gamma} [\nu_{\cup} - \nu_{\perp}]$. Observa-se da eq.(7.3.16) que, quando $\epsilon_{\perp} = -1$ temos a menor ocupação do ramo L, $\nu_{\perp} = 0$, e quando $\epsilon_{\perp} = 1$ temos a maior ocupação, $\nu_{\perp} = 1$. Portanto, a raiz $\Lambda = \epsilon_{\cup} - 1$ é um ponto de máximo, e $\Lambda = \epsilon_{\cup} + 1$ um ponto de mínimo. Desta forma, a raiz $\Lambda = \epsilon_{\cup} + 1$ significa que a energia do sistema é mínima quando o ramo L permanece vazio, $\nu_{\perp} = 0$, até que o ramo U esteja completamente preenchido, onde inicia-se sua ocupação. Chamaremos este mínimo de fase I do sistema.

A segunda raiz pode ser entendida se escrevermos $\Lambda = (\epsilon_{\cup} - \epsilon_{\perp})$, em termos da expressão para ϵ_s , dada pela eq.(7.3.15), isto é,

$$\Lambda = \left(\frac{E_{F} - \epsilon_{o}}{\Gamma}\right)_{U} - \left(\frac{E_{F} - \epsilon_{o}}{\Gamma}\right)_{L} + \frac{1}{\gamma}\left(\nu_{U} - \nu_{L}\right).$$
(7.4.9)

Para que esta expressão geral reproduza a segunda raiz, a diferença entre os primeiros dois termos deve ser nula. Através da eq.(7.3.16), obtivemos uma relação unívoca entre ν_s e ϵ_s , quer dizer, existe apenas um valor de ν_s para cada valor de ϵ_s e vice-versa. De posse deste resultado e para valores fixos de γ , observamos da eq.(7.3.15) que a razão $\left[(E_{\rm F}-\epsilon_{\rm o})/\Gamma\right]_{\rm s}$ só é igual para o mesmo valor de ν_s e ϵ_s . Portanto, a segunda raiz ocorre quando os dois ramos estão igualmente ocupados, ou seja, $\nu_{\rm U} = \nu_{\rm L}$ ou $\Lambda=0$, que passaremos a chamar de fase II.

Estas duas fases da energia do sistema dependem da ocupação fracional, ν , e da razão γ . Os termos da razão γ possuem a seguinte interpretação: a largura Γ caracteriza a energia cinética e a medida da interação Coulombiana α carcteriza a energia de troca.

A partir da energia total podemos notar que, quando o termo positivo de energia cinética domina, a energia é minimizada populando igualmente os dois ramos. Quando o termo negativo da energia de troca domina, a energia é menor (mais negativa) se todos os elétrons são empilhados em um único ramo. Para encontrarmos os pontos de coexistência das duas fases, isto é, os pontos onde as duas fases ocorrem, traçaremos numericamente o digrama da fase.

7.5. Diagrama de Fase.

Existem duas possibilidades para que o sistema se encontre com a menor energia: a. Ambos os ramos estão igualmente ocupados (fase II). b. Os ramos são ocupados sucessivamente (fase I). Neste caso, temos duas situações distintas, dependendo do intervalo da ocupação fracional: $\begin{cases} b_{\alpha}. & 0 \le \nu \le 1 \\ b_{\beta}. & 1 \le \nu \le 2 \end{cases}$

1. Caso a. $0 \le \nu \le 2$.

$$\nu_{\cup} = \nu_{\perp} = \nu/2 \qquad \Rightarrow \qquad \epsilon_{\cup} = \epsilon_{\perp} \equiv \epsilon_{a} \,.$$

$$\Omega_{a} = \epsilon_{o}\nu - \frac{1}{4\gamma}\nu^{2} - \frac{4}{3\pi}(1 - \epsilon_{a}^{2})^{3/2} \,. \qquad (7.5.1)$$

onde ϵ_a pode ser obtido para cada ν pela seguinte relação:

$$\frac{\nu}{2} = \frac{1}{\pi} \left[\epsilon_{a} (1 - \epsilon_{a}^{2})^{1/2} + \frac{\pi}{2} + \operatorname{sen}^{-1} \epsilon_{a} \right].$$
 (7.5.2)

2. Caso <u>ba</u>. $0 \le \nu \le 1$.

$$\nu_{\cup} = \nu; \quad \nu_{\perp} = 0 \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\cup} \equiv \epsilon_{b\alpha}; \quad \epsilon_{\perp} = -1.$$

$$\Omega_{b\alpha} = \epsilon_{o}\nu - \frac{1}{2\gamma}\nu^{2} - \frac{2}{3\pi}(1 - \epsilon_{b\alpha}^{2})^{3/2}. \qquad (7.5.3)$$

onde $\epsilon_{b\alpha}$ pode ser obtido para cada ν pela seguinte relação:

$$\nu = \frac{1}{\pi} \left[\epsilon_{b\alpha} (1 - \epsilon_{b\alpha}^{2})^{1/2} + \frac{\pi}{2} + \operatorname{sen}^{-1} \epsilon_{b\alpha} \right].$$
 (7.5.4)

3. Caso <u>b</u> β . 1 $\leq \nu \leq 2$.

 $\nu_{\cup} = 1; \quad \nu_{\perp} = (\nu - 1) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\cup} = 1; \quad \epsilon_{\perp} \equiv \epsilon_{b\beta}.$ $\Omega_{b\beta} = \epsilon_{o}\nu - \frac{1}{2\gamma} - \frac{1}{2\gamma}(\nu - 1)^{2} - \frac{2}{3\pi}(1 - \epsilon_{b\beta}^{2})^{3/2}. \quad (7.5.5)$

onde $\epsilon_{\rm b\beta}$ pode ser obtido para cada ν pela seguinte relação:

$$(\nu - 1) = \frac{1}{\pi} \left[\epsilon_{b\beta} (1 - \epsilon_{b\beta}^2)^{1/2} + \frac{\pi}{2} + \operatorname{sen}^{-1} \epsilon_{b\beta} \right].$$
 (7.5.6)

As relações (7.5.4) e (7.5.6) levam a uma igualdade entre $\epsilon_{b\alpha}$ e $\epsilon_{b\beta}$ ($\epsilon_{b\alpha} = \epsilon_{b\beta}$), pois correspondem à mesma ocupação fracional em seus intervalos. Apesar do intervalo na eq.(7.5.4) ser $0 \le \nu \le 1$ e na eq.(7.5.6) ser $1 \le \nu \le 2$, temos que a ocupação empregada nesta última equação é (ν -1), de modo que, $0 \le (\nu - 1) \le 1$.

O diagrama de fase no plano γ (= Γ/α) versus ν pode ser obtido igualando numericamente as equações abaixo:

5 t. E. .

1. $\Omega_{a} = \Omega_{b\alpha}$, $0 \le \nu \le 1$, 2. $\Omega_{a} = \Omega_{b\beta}$, $1 \le \nu \le 2$,

e está ilustrado na fig.7.4.


Figura 7.4. Diagrama de fase no plano γ versus ν , em T = 0 K. A fase I representa a fase de único ramo e a fase II representa a fase de duplo ramo.

Para um dado γ fixo no diagrama de fase, chamamos de ocupação crítica, ν_c , o ponto onde ocorre uma transição de fase. Para ν perto de ν_c , a energia total tem mínimo local em $\Lambda=0$ e $\Lambda=\epsilon_0+1$, portanto, existe uma transição de fase de primeira ordem.

Devido às aproximações utilizadas, o diagrama de fase é simétrico, em torno de $\nu=1$. Através do diagrama de fase observa-se que, para γ 's pequenos, ou seja, quando a largura Γ (devido a impurezas) é pequena comparada com a interação e-e (medida por α), a fase de um único ramo ocorre em quase todo intervalo da ocupação, $0 \le \nu \le 2$, ou da densidade N_{inv} . Quando Γ e α são comparáveis, o regime de baixa densidades para elétrons (ν pequeno) ou para buracos (ν perto de dois) favorece a energia cinética, pois ocorre a fase de duplo ramo.

A mesma análise pode ser feita em termos do campo magnético aplicado, se lembrarmos que a ocupação fracional decresce com o acréscimo de B. Para valores acima de um certo γ_c somente a fase II existe, independente do campo aplicado. Para todas as razões de $\gamma < \gamma_c$ existem dois fatores de preenchimento crítico: $\nu_{c1} e \nu_{c2}$. Em ν_{c2} , o sistema vai da fase II para a fase I (baixo B) e em ν_{c1} ocorre a transição da fase I para a fase II (alto B).

A pequena inclinação no diagrama de fase, em $\nu=1$ e γ largos, segundo Gummich e Sham [15], não parece ser devido à rápida variação na DOS, já que a densidade de estados Gaussiana [17] leva ao mesmo resultado. Quando o termo de energia de correlação é incluído, o diagrama de fase é diminuído, pois esta energia reduz o efeito do termo de troca. Porém, nenhuma mudança qualitativa ocorre. Este resultado foi obtido em [17] através de RPA.

7.6. Efeitos na Magneto-Condutividade.

A fim de explicar a interessante característica, citada na introdução deste capítulo, calcularemos a magnetocondutividade longitudinal [17] do sistema, em T=0K, usando a seguinte fórmula:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\hbar\pi^2} \sum_{s} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \frac{\left[ImG_s(E)\right]^2}{\left\{\left[ImG_s(E)\right]^2 + \left[ReG_s(E)\right]^2\right\}} . \quad (7.6.1)$$

Para o nosso modelo temos:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\hbar\pi^2} \sum_{s} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \left[1 - \frac{\left(E - \epsilon_{o} + \alpha\nu_{s}\right)^2}{\Gamma^2}\right], \quad (7.6.2)$$

onde

$$\left(\frac{\partial f}{\partial E}\right) = -\delta(E - E_F). \qquad (7.6.3)$$

Resolvendo a eq.(7.6.2), obtemos a seguinte magnetocondutividade longitudinal:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\hbar\pi^2} \sum_{s} (1 - \epsilon_s^2).$$
 (7.6.4)

Vamos agora encontrar σ_{xx} nos três casos estudados na seção anterior:

1.<u>Caso a.</u>

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi\pi^2} \left(2 - 2\epsilon_a^2 \right).$$
 (7.6.5)

2. e 3. Casos ba. e b β . levam a mesma σ_{xx} .

$$\sigma_{xx} = \frac{\mathbf{e}^2}{2\hbar\pi^2} \left(1 - \epsilon_{\mathbf{b}}^2 \right). \tag{7.6.6}$$

Para um γ fixo, sabemos onde ocorrem as transições de fase, de tal modo, a usar o σ_{xx} correto. A fig.7.5. ilustra a magnetocondutividade longitudinal com função de ν (ou de B) para três valores diferentes de γ .

Para valores pequenos de γ , isto é, baixa concentrações de impurezas, não existe característica visível em σ_{xx} , exceto a dupla forma devida a cada ramo. Isto é simples de entender, já que σ_{xx} é proporcional à densidade de estados, como pode ser visto da eq.(7.6.1). No entanto, à medida que se aumenta γ , uma brusca mudança é observada em σ_{xx} nos pontos críticos de ν , onde ocorrem as transições de fase. Com estes resultados, somos capazes de explicar qualitativamente as descontinuidades observadas na resistêcia Hall e na resistência longitudinal de MISFET-Hg(Cd)Te, medidas por Kirk e outros [1], cuja reprodução das medidas é mostrada na fig.2.7. Através da eq.(7.3.2), podemos observar que Γ é inversamente proporcional a mobilidade, μ , e a massa efetiva da banda de condução. O heteroestrutura de GaAs/AlGaAs possui alta mobilidade, $\mu = 1,9 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e m^{*}~0,06m, portanto, baixa concentração de impurezas (γ pequeno) como na fig.7.5.a. No entanto, o material Hg(Cd)Te possui alta concentração de impurezas intrínsicas (γ grande) que geram vários espalhamentos e, portanto, baixas mobilidades ($\mu \sim 5,0 \times 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) e m^{*}~0,006m, tornando as descontinuidades observavéis como na fig.7.5.c.



Figura 7.5. Magneto-condutividade σ_{xx} (em unidades de $e^2/2\hbar\pi^2$) versus a ocupação do nível de Landau, ν , para diferentes valores de γ (razão entre a concentração de impurezas, Γ , e a interação e-e do sistema, α). ν_c é onde ocorre a transição de fase.

۱. منابع

CAPÍTULO VIII

SUBBANDAS DE ENERGIA NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO

8.1. Introdução.

Quando altos campos elétricos são aplicados perpendicularmente à interface semicondutor-isolante de um MISFET, o movimento perpendicular à superfície torna-se quantizado em subbandas, e os portadores apresentam propriedades de um sistema quase bi-dimensional. Foram estudos feitos por Ohkawa e Uemura [20], em MISFET's de materiais de gaps estreitos, sobre os efeitos da mistura da banda de condução e de valência, na presença de altos campos magnéticos aplicados perpendicularmente aos estados de superfície quantizados. O potencial confinador utilizado, V(z), foi expresso sob a forma parametrizada, com os parâmetros obtidos experimentalmente para o $Hg_{0.79}Cd_{0.21}Te$.

Estamos propondo, neste capítulo, um modelo onde o potencial confinador, V(z), na presença de campo magnético, seja o potencial auto-consistente obtido no cap.VI para o $Hg_{0.79}Cd_{0.22}Te$. Apesar de ser um modelo simplificado, torna-se bastante interessante ao ser capaz de explicar dados do magneto-transporte, a partir da energia escrita como função do campo magnético.

As simplificações obtidas por Ohkawa e Uemura [20], utilizando nosso atual sistema de coordenadas, é o motivo principal da mudança de eixos realizada no capítulo anterior.

8.2. Estados de Superfície.

A função de onda dos estados de superfície, sob um campo magnético homogêneo \vec{B} =(0,0,B) e um potencial confinador V(z), é escrita como:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n} A_{n}(\vec{r}) u_{n}(\vec{r}), \qquad (8.2.1)$$

onde o subscrito n representa o índice das bandas e $u_n(\vec{r})$ a parte periódica das funções de Bloch no ponto $\Gamma(\vec{k}=0)$.

A matriz Hamiltoniana utilizada é a dada pela eq.(4.3.2), considerando o caso limite onde a interação spinórbita é muito grande ($\Delta \rightarrow \infty$). Deste modo, obtemos um modelo de seis bandas, onde Γ_6 e Γ_8 são considerados e todas as outras bandas incluindo Γ_7 , que está afastada de Γ_8 por uma energia Δ , são desprezadas.

O Hamiltoniano de massa efetiva para determinar as funções envelope, $A_n(\vec{r})$, pode ser derivado pela seguinte equação de Schrödinger:

$$\sum_{n=1}^{6} \left[H_{un} + V(z) \delta_{un} \right] A_n(\vec{r}) = E A_u(\vec{r}), \qquad (8.2.2)$$

substituindo, na matriz \vec{k} . \vec{p} , as componentes do vetor de onda pelos seus respectivos operadores:

$$k \rightarrow \hat{k}_{\alpha} = -\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + \frac{e}{c\hbar} A_{\alpha},$$
 (8.2.3)

sendo A_{α} o potencial vetor (Gauge de Landau), escolhido como:

$$\vec{A} = x B \hat{y}. \qquad (8.2.4)$$

A equação (8.2.2) se reduz a uma forma (2x2), incluindo somente quatro estados, que são dados por:

$$\begin{bmatrix} \lambda_{0}^{2} - (V(z) - E)^{2} + \frac{P^{2}}{2}(2\hat{k}^{2} - R^{-2}) - \frac{P^{2}}{(\lambda_{0} + E - V(z))} \left(\frac{dV}{dz}\right) \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} A_{1}(\vec{r}) + \frac{i}{2} \frac{P^{2}}{(\lambda_{0} + E - V(z))} \cdot \left(\frac{dV}{dz}\right) \hat{k}_{-} A_{4}(\vec{r}) = 0, \quad (8.2.5)$$

$$\begin{split} \left[\lambda_{o}^{2} - (V(z) - E)^{2} + \frac{P^{2}}{2}(2\hat{k}^{2} - R^{-2}) - \frac{P^{2}}{(\lambda_{o} + E - V(z))} \left(\frac{dV}{dz}\right) \frac{\partial}{\partial z} \right] A_{4}(\vec{r}) + \\ &+ \frac{i}{2} \frac{P^{2}}{(\lambda_{o} + E - V(z))} \cdot \left(\frac{dV}{dz}\right) \hat{k}_{+} A_{1}(\vec{r}) = 0, \quad (8.2.6) \end{split}$$

onde R é o raio ciclotrônico, definido no apêndice I. A diferença de sinal no último termo de cada uma das duas expressões acima e as equações de Ohkawa e Uemura, reside no fato de nosso Hamiltoniano possuir inversão temporal e o deles não.

Vamos investigar os estados de superfície na presença de um campo magnético homogêneo, $\vec{B} = (0,0,B)$, perpendicular à superfície. Já que o sistema tem uma larga interação spinórbita, o fator g é também muito largo. A solução trivial é descrita como:

$$A_{n}(\vec{r}) = \sqrt{\left[\lambda_{o} + E - V(z)\right]/\lambda_{o}} \sum_{N} \Psi_{N}(x, y) \mathcal{A}_{n}^{N}(z), \qquad (8.2.7)$$

onde N representa o nível de Landau e n a subbanda. A função $\Psi_{N}(x,y)$ é definida, como no apêndice I, por:

$$\Psi_{N}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}_{o}\mathbf{y}}{\mathbf{k}^{2}}\right) \Phi_{N}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{o}), \qquad (8.2.8)$$

sendo x_o , o centro da órbita ciclotrônica. A função $\Phi_N(x)$ pode ser escrita em termos do polinômio de Hermite, $H_N(x)$:

$$\Phi_{N}(x) = \left(2^{N}N!R\sqrt{\pi}\right)^{-1/2}(i)^{N}\exp\left(-\frac{x_{o}y}{2R^{2}}\right)H_{N}\left(\frac{x}{R}\right). \qquad (8.2.9)$$

Através do uso das relações abaixo:

$$\hat{k}_{+} \Psi_{N}(x,y) = \frac{\sqrt{2}}{R} (N+1)^{1/2} \Psi_{N+1}(x,y),$$
 (8.2.10)

$$\hat{k}_{-}\Psi_{N}(x,y) = \frac{\sqrt{2}}{R} N^{1/2}\Psi_{N-1}(x,y),$$
 (8.2.11)

$$\begin{aligned} \left[\hat{k}_{x}^{2} + \hat{k}_{y}^{2} \right] \Psi_{N}(x, y) &= \frac{1}{2} \left[\hat{k}_{-} \left[\hat{k}_{+} \Psi_{N}(x, y) \right] + \hat{k}_{+} \left[\hat{k}_{-} \Psi_{N}(x, y) \right] \right] \\ &= \frac{(2N+1)}{R^{2}} \Psi_{N}(x, y), \qquad (8.2.12) \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{N}(x) H_{M}(x) e^{-x^{2}} dx = 2^{N} N! \sqrt{\pi} \delta_{NM}, \qquad (8.2.13)$$

ou

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{N}(x) \Phi_{M}(x) dx = (i)^{2N} \delta_{NM}, \qquad (8.2.14)$$

as equações (8.2.5) e (8.2.6) adquirem a seguinte forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \frac{P^{2}}{Eg} + \mathcal{S}_{N}^{\dagger} - U_{N}^{\dagger} & \frac{i\sqrt{2(N+1)}}{Eg(\lambda_{o} + \overline{E} - V(z))} \\ \frac{i\sqrt{2(N+1)}}{Eg(\lambda_{o} + \overline{E} - V(z))} & \frac{P^{2}}{Eg} + \mathcal{S}_{N+1}^{\dagger} - U_{N+1}^{\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{A}_{1}^{N}(z) \\ \mathcal{A}_{4}^{N+1}(z) \end{bmatrix} = 0, \qquad (8.2.15)$$

onde

$$S_{N}^{\dagger} = \left\{ E_{U}(B)^{2} - \lambda_{o}^{2} - Eg \hbar \omega_{c} \left[N + 1/4 \right] \right\} \frac{1}{Eg}, \qquad (8.2.16)$$

$$S_{N+1}^{\downarrow} = \left\{ E_{L}(B)^{2} - \lambda_{o}^{2} - Eg \hbar \omega_{c} \left(N + 7/4 \right) \right\} \frac{1}{Eg}, \qquad (8.2.17)$$

$$U_{N}^{\dagger} = \left\{ 2E_{U}V(z) - V(z)^{2} + \frac{P^{2}(d^{2}V/dz^{2})}{2(\lambda_{o} + E_{U} - V(z))^{2}} + \frac{3P^{2}(dV/dz)^{2}}{4(\lambda_{o} + E_{U} - V(z))} \right\} \frac{1}{E_{g}} (8.2.18)$$

$$U_{N+1}^{\downarrow} = \left\{ 2E_{L}V(z) - V(z)^{2} + \frac{P^{2}(d^{2}V/dz^{2})}{2(\lambda_{o} + E_{L} - V(z))^{2}} + \frac{3P^{2}(dV/dz)^{2}}{4(\lambda_{o} + E_{L} - V(z))} \right\} \frac{1}{Eg} \cdot (8.2.19)$$

A auto-energia E, por analogia ao caso de campo magnético nulo, é escrita por E_U no bloco superior e por E_L no bloco inferior da diagonal. Com o objetivo de simplicar os cálculos, fora da diagonal, E é substituído por $\overline{E} = (E_U + E_L)/2$, já que é a mistura dos dois blocos.

Os dados utilizados para encontrarmos a dependência da energia com o campo magnético, em cada subbanda com "separação dos spins", foram os mesmos empregados na obtenção de $E \ge k_{\ell\ell}$, dado na fig.(6.4).

As funções bases escolhidas são as funções de onda correspondentes às três subbandas, soluções do Hamiltoniano acima para campo magnético nulo e $k_{//}=0$, que foram encontradas no capítulo VI. Deste modo, o Hamiltoniano será uma matriz 6x6. Lembrando-se que, em $k_{//}=0$, as funções $\mathcal{A}_1(z)$ e $\mathcal{A}_4(z)$ de cada subbanda são idênticas. A auto-energia utilizada é sempre a energia do campo B anterior. Com este modelo simplificado podemos obter o espectro dos níveis de Landau para as subbandas separadas eletricamente, que será utilizado para explicar resultados experimentais.

8.3. Espectro dos Niveis de Landau para as Subbandas com "Separação dos Spins".

Há vários mecanismos diferentes que conduzem ao afastamento das subbandas eletrônicas em camada de inversão interfacial. Em materiais de gap estreito, a assimetria do potencial é o mecanismo que domina a quebra de degenerescência de spin, pois é o responsável pelo campo elétrico interno, dado por $\left(\frac{\partial V(z)}{\partial z}\right)$. Chamaremos este afastamento de afastamento elétrico. Na presença de campo magnético, B_{\perp} , a separação dos níveis de spin, em cada nível de Landau, contém esta contribuição adicional que, significantemente, altera o espaçamento de energia.

Na fig.8.1 está ilustrada a dependência da energia com o campo magnético, obtida pelo nosso modelo. Esta figura será utilizada para explicar medidas experimentais realizadas por Wollrab, Sizmann e Koch [21] em magneto-condutividade oscilatória, veja fig.8.2.a. No trabalho da referência [21] considerou-se apenas uma subbanda ocupada e explicou-se as observações experimentais através da junção e do cruzamento de pontos dos níveis de Landau. A fig.8.2.b, que mostra a energia da subbanda $E^{\pm}(k_{//})$ como função de B_{\parallel} , foi construída para explicar os dados de magneto-transporte, ilustrado na fig.8.2.a, usando o modelo proposto por Bychkov e Rashba [22], incluindo a não parabolicidade da subbanda. Note na fig.8.2 que, em altos campos magnéticos, quando a contribuição da energia magnética, para o afastamento da subbanda, domina a contribuição elétrica, pode-se encontrar o convencional ordenamento dos níveis $(0^+, 0^-, 1^+, 1^-, 2^+, ...)$. Em baixos campos magnéticos, quando o afastamento elétrico domina, o nível 1⁺ encontra-se abaixo do 0⁻, com pouca resolução. A contribuição elétrica, em um campo magnético, leva a coincidência de pares de níveis de Landau. Portanto, nos pontos de junção na fig.8.2.b, os picos estão superpostos e com o aumento de B_{+} , ultrapassa-se este cruzamento e os picos podem ser observados.



Figura 8.1. Energias dos níveis de Landau versus campo magnético, B_⊥, calculada em nosso trabalho. As setas indicam transições de níveis variando o campo magnético, e mantendo N_{inv} fixo. Perceba o cruzamento e junção dos níveis.

Apesar da densidade, utilizada em nosso modelo, ser diferente da utilizada na ref.[21], nosso modelo também apresenta pontos de junção e cruzamento dos níveis de energia, o que nos leva à conclusão que a explicação dada na ref.[21] seja a possivelmente correta. Variando-se, na fig.8.1, o campo B_{\perp} , para um N_{inv} fixo, existem vários pontos onde nota-se apenas um pico (junção dos níveis), e em seguida, dois picos

são observados (após o cruzamento). A existência dos vários pontos de cruzamento e junção se deve à existência de mais modelo, não permitindo subbandas ocupadas em nosso uma ordenação dos níveis, como no caso da ref.[21], para uma parabólica. Isto é uma deficiência do modelo de subbanda Bychkov e Rashba, pois apenas uma subbanda ocupada é considerada.



Figura 8.2. a. Magneto-condutividade versus densidade de portadores na camada de inversão, N_{inv}, para campos magnéticos fixos.

b. Energias dos níveis de Landau versus campo magnético, B_⊥, para N_{inv} fixo. Note que, os níveis cruzados correspondem aos pontos do níveis Landau sem resolução na parte a.

característica outra interessante do Uma nosso modelo, está ilustrada na fig.8.3. Note que, o nível de Landau 2 da subbanda O cruza a subbanda 1 em exatamente a metade do ponto onde o nivel 1 cruza esta mesma subbanda, apesar da com o campo magnético não ser dependência da energia linear. Wieck e outros [23] observaram este mesmo efeito em subbandas de heterejunções de GaAs/Ga(Al)As.





 Movimento de um Gás de Elétrons Bi-Dimensional em um Campo Magnético.

Quando um campo magnético, \vec{B} , é aplicado perpendicularmente a um gás de elétrons quase bi-dimensional (2D), os elétrons do gás passam a se mover em órbitas circulares, paralelas à superfície e centradas em (x_0, y_0) , com frequência ciclotrônica ω_c e raio R. O tipo de órbita e as grandezas clássicas citadas podem ser obtidas da equação de movimento deste sistema. Vamos supor que o gás de elétrons se encontre no plano x-y e o campo magnético no eixo-z, $\vec{B} = B\hat{z}$. O sistema de unidade adotado é o CGS.

Como conseqüência da quantização orbital, surgem níveis de energia permitidos aos elétrons [16]. Para determinar esses níveis, usaremos o seguinte operador Hamiltoniano:

$$H = \frac{\vec{p}^{\prime 2}}{2m_o}, \qquad (I.1)$$

onde m_o é a massa do elétron e

$$\vec{\mathbf{p}}' = \left(\vec{\mathbf{p}} - \frac{\mathbf{e}}{\mathbf{c}}\vec{\mathbf{A}}\right). \tag{1.2}$$

O potencial vetor \vec{A} (ou gauge de Landau) é convenientemente escolhido como:

$$A_y = x B,$$
 $A_x = A_z = 0.$ (1.3)

Portanto, operador Hamiltoniano (I.1) torna-se:

$$H = \frac{1}{2m_o} \left[p_x^2 + \left(p_y - \frac{eB}{c} x \right)^2 \right], \qquad (I.4)$$

satisfazendo a seguinte equação de Schrödinger:

$$H\Psi(x,y) = E\Psi(x,y). \tag{1.5}$$

Da eq.(I.4) podemos observar que o elétron ainda é livre na direção y, pois a componente y do momento é conservada. Note além disso que, H comuta com p_y e, portanto, a função de onda pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{x},\mathbf{y}) = e^{i(\mathbf{p}_{\mathbf{y}}/\hbar)\mathbf{y}} \Phi(\mathbf{x}). \qquad (I.6)$$

Substituindo a eq.(I.6) em (I.5), obtemos a equação abaixo para a função $\Phi(x)$:

$$\ddot{\Phi}(\mathbf{x}) + \frac{2\mathbf{m}_{o}}{\hbar^{2}} \left[E - \frac{\mathbf{m}_{o}}{2} \omega_{c}^{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{o}) \right] \Phi(\mathbf{x}) = 0, \qquad (1.7)$$

onde

متر والارتجاب المتراج والمترومين

$$\omega_{\rm c} = \frac{|{\bf e}|B}{m_{\rm o}c}, \qquad (1.8)$$

$$x_{o} = \frac{p_{y}}{m_{o}\omega_{c}} = \frac{\hbar k_{y}}{m_{o}\omega_{c}}.$$
 (1.9)

A eq.(I.7) é formalmente idêntica à equação de Schrödinger para um oscilador harmônico unidimensional (ou linear), oscilando com freqüência ω_c em torno do ponto $x = x_0$. Portanto, como no oscilador, a auto-energia E é quantizada em níveis e dada por:

$$E_N = (N + 1/2) \hbar \omega_c, \qquad N = 0, 1, 2...$$
 (1.10)

Os níveis de energia N são conhecidos como níveis de Landau e encontram-se afastados em intervalos de energia de $\hbar\omega_c$.

O gás de elétrons quase bi-dimensional pode ser produzido em MISFET's, em heteroestruturas, ou ainda, em superredes. Vamos nos deter apenas em gás de elétrons 2D formado em MISFET's. A relação E(k) de uma gás de elétrons quase 2D é caracterizada pela equação:

$$E(k) = E_j + E(k_x, k_y), \qquad j = 0, 1, 2, ..., \quad (I.11)$$

onde $E(k_x,k_y)$ é a energia cinética dos elétrons do gás quase 2D, com movimento no plano x-y e vetor de onda (k_x,k_y) . A energia discreta E_j , onde j representa as subbandas de energia, é originada do confinamento do gás de elétrons dentro de um estreito poço de potencial. Em MISFET's, o gás de elétrons quase 2D é formado na interface semicondutor-isolante, ou seja, na camada de inversão.

Em um campo magnético igual a zero, a densidade de estados bi-dimensional (número de estados com energia entre E e E+dE por unidade de área) da mais baixa subbanda é uma constante, dada por:

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}_s \frac{\mathbf{m}}{2\pi\hbar^2}, \qquad (I.12)$$

onde g_s representa a degenerescência do spin. A degenerescência (número de elétrons com a mesma energia por unidade de área) de cada nível de Landau é igual a [25]:

$$D = g \hbar \omega_c = g_s \left(\frac{eB}{hc}\right) , \qquad (I.13a)$$

ou ainda,

$$D = g_s \frac{1}{2\pi R^2}$$
, (I.13b)

onde R é o raio da órbita ciclotrônica de um elétron, no mais baixo nível de Landau, dado por:

$$R^2 = \frac{\hbar c}{eB} . \qquad (I.14)$$

Note que, quanto maior for o campo magnético menores serão os raios das órbitas, o que significa mais elétrons por unidade de área sem que exista superposição das órbitas.

Na ausência de espalhamento por impurezas ou por defeitos na rede, a densidade de estados, para campo magnético diferente de zero, é representada por uma função delta em cada energia correspondente a um nível de Landau, $E=E_N$.

> SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

2. Efeito Hall Quantizado Inteiro.

O efeito Hall quantizado é um fenômeno inerente da mecânica quântica, observado apenas em gás de elétrons 2D, em altos campos magnéticos e baixas temperaturas. Dependendo do número " ν " de níveis de Landau ocupados, existem dois tipos de efeito Hall quantizado: o inteiro e o fracional. O efeito Hall quantizado inteiro é observado quando um número inteiro ν de estados de Landau estão preenchidos, e o fracional quando o nível de Landau mais baixo está parcialmente ocupado, ou seja, ν é um número fracional. A ocupação ν dos níveis de Landau é definida como:

$$\nu = \frac{N_{i nv}}{D}, \qquad (1.15)$$

onde N_{inv} é o número de carga por unidade de área, na camada de inversão. Nosso interesse, a partir deste ponto, será apenas no efeito Hall quantizado inteiro, que foi descoberto experimentalmente por K. von Klitzing, em 1980 [24], quando realizava estudos do efeito Hall clássico, em MOSFET's de silício.

O aparato para observação do efeito Hall está ilustrado na fig.I.1, e consiste de um fino plano representando o gás de elétrons quase 2D da camada de inversão, com um campo magnético aplicado perpendicularmente, um campo elétrico paralelo ao plano devido a voltagem aplicada entre a fonte (F) e o dreno (D) (terminais de um MISFET), responsável pela corrente I, e ainda dispositivos para medidas de corrente e de voltagem (paralela e perpendicular a corrente I).



Figura I.1. Aparato para medidas do efeito Hall quantizado.

O campo elétrico, em combinação com o campo magnético, impele os elétrons a moverêm-se em órbitas ciclotrônicas (não mais em órbitas circulares), com os mesmos parâmetros da seção anterior, em uma direção perpendicular a ambos os campos, ou seja, de (A) para (G) (veja fig.I.1), criando uma diferença de voltagem nestes pontos, conhecida como voltagem Hall, $U_{\rm H}$, que cresce linearmente com o aumento do campo magnético. Este é o efeito Hall clássico, observado em temperaturas relativamente altas.

A resistência Hall, R_{H} , é definida por:

$$R_{H} = \frac{U_{H}}{I}, \qquad (I.16)$$

onde U_H clássico é [25]:

$$U_{H} = \frac{BI}{e c N_{i nv}}.$$
 (I.17)

O efeito Hall quantizado só é observado, quando um gás de elétrons 2D é submetido a altos campos magnéticos e resfriado à baixíssimas temperaturas, de tal modo que $\hbar\omega_{\rm c}>> {\rm kT}$.

Substituindo N_{inv} na eq.(I.17) por νD , conforme a eq.(I.15), com D dado pela eq.(I.13a), encontramos a expressão de R_{μ} para o efeito Hall quântico,

$$R_{H} = \frac{h}{\nu e^{2}}, \qquad \nu = 1, 2, 3...$$
 (1.18)

onde N_{inv} e B devem ser ajustados, de modo que ν seja sempre um inteiro, para que o efeito Hall inteiro possa ser obtido. A degenerescência do spin não foi considerada.

A mais notável diferença entre o efeito Hall quantizado inteiro e o clássico é que a resistência Hall, em vez de crescer linearmente com o campo magnético, exibe uma série de patamares, isto é, existem intervalos em que R_H não varia com o campo magnético. Nestes mesmos intervalos, a amostra não apresenta resistência elétrica, ou seja, a queda de tensão paralela à corrente desaparece completamente e a corrente flui na amostra sem dissipar qualquer energia. É interessante notar que o valor assumido por R_H, em cada patamar, é igual à constante de Planck dividida por um inteiro multiplicado pelo quadrado da carga do elétron. Cada patamar é caracterizado por um inteiro diferente. Na fig.I.2 está ilustrado um diagrama esquemático da resistência Hall, R_H ou ρ_{xy} .

A fim de explicar o efeito Hall quantizado inteiro, daremos um enfoque semi-clássico para evitar complicações matemáticas. Para atingir este objetivo, inicialmente salientaremos a importância que as impurezas possuem na resistência elétrica ordinária dos semicondutores e metais.

a a second a second second



Figura I.2. O efeito Hall quantizado inteiro, caracterizado por patamares na resistência Hall, coincidindo com o desaparecimento da resistência elétrica normal de uma amostra.

A maior parte da energia dissipada, que caracteriza resistência, ocorre quando elétrons são espalhados por uma colisões com impurezas ou defeitos na rede cristalina. Paradoxialmente, a presença de impurezas é a responsável pelo desaparecimento da resistência elétrica e dos patamares na resistência Hall. Na presença de espalhamento, ocorre uma quebra de níveis cada nivel degenerescência dos de Landau; sofre um alargamento e passa a formar uma "banda de energia" de largura finita, composta de vários níveis (veja fig.1.4). Dentro da aproximação auto-consistente de Born [17], o alargamento do espectro discreto de energia está mostrado na fig.I.3a. Osvários estados quânticos de uma dada banda de energia podem ser divididos em dois tipos: estados localizados e estados estendidos (fig.I.3b).



Figura I.3. a. Modelo para a densidade de estados, na aproximação auto-consistente de Born.

b. Ilustra os estados localizados e estendidos de uma banda de energia.

Os estados localizados encontram-se próximos ao fundo e ao topo de cada banda de energia. Os estados próximos ao fundo (topo) são ocupados por elétrons que se localizam em regiões ao redor de ions negativos (positivos) de impurezas. Elétrons, nestes estados, dificilmente deixam estas regiões e, por este motivo, não podem contribuir para a corrente. Já os estados estendidos ocupam a região central de cada banda e podem se movimentar sobre uma larga região do espaço е. são responsáveis pelo fluxo de corrente portanto, os na amostra.

Em baixas temperaturas, todos os estados de energia estão preenchidos até a energia de Fermi, E_F. Devido ao fato da degenerescência de estados, em cada nível de Landau, aumentar com o aumento do campo magnético, veja eq.(I.13a), o número de estados acessíveis crescem em cada banda de energia quando B aumenta. Portanto, a cada acréscimo do campo magnético, a energia de Fermi pode encontrar-se em um das subbandas de estados localizados ou em uma subbanda de estados estendidos, conforme ilustrado na fig.I.4.





Figura I.4. Níveis de energia permitidos aos elétrons, quando submetidos a um campo magnético perpendicular ao plano de confinamento destes elétrons. a. Em um cristal ideal.

> b. e c. Em um cristal real, que sempre possui impurezas, onde cada nivel de Landau é alargado em uma banda de energia. A energia de Fermi está indicada para dois valores crescentes do campo magnético.

Com a finalidade de explicar o comportamento da resistência Hall, mostrada na fig.I.2, vamos manter a voltagem Hall constante e observar a variação da corrente I com o campo magnético. Se a energia de Fermi encontra-se inicialmente em uma das subbandas contendo estados localizados, não existirá fluxo de corrente com o aumento do campo magnético, até que a subbanda com estados estendidos seja atingida. Se não existe fluxo de corrente I durante estes estados, a resistência Hall permanesce constante com o acréscimo do campo magnético, exibindo os patamares visto na fig.I.2.

Quando a energia de Fermi atinge a subbanda com estados estendidos, inicia-se o fluxo de corrente I, que irá diminuindo com o aumento do campo magnético; pois este aumento causa um decréscimo da energia de Fermi, deixando estados estentidos vazios acima de E_F , conforme ilustrado na fig.I.4. Isto acontecerá até que outra subbanda de estados localizados seja atingida. Portanto, com a voltagem Hall mantida constante, um decréscimo de corrente representa um aumento na resistência Hall, que são os aumentos entre dois patamares, observados em R_{μ} .

Por este modelo é fácil entender porque a razão entre os valores da resistência Hall, em qualquer dois patamares, é igual a uma razão de números inteiros. O motivo é que, para uma dada voltagem Hall, a corrente é diretamente proporcional ao número de subbandas de estados estendidos ocupados, e em cada patamar existe um número inteiro diferente destas subbandas preenchidas.

O fluxo de corrente através da amostra sem sofrer resistência, ou seja, sem dissipar qualquer tipo de energia, será explicado pelo princípio de conservação de energia. Para que uma amostra apresente resistência à passagem de corrente, seus elétrons precisam fazer transições de estados de maiores energias para estados desocupados de menores energias, dissipando o excesso de energia sob a forma de calor ou energia vibracional.

Também precisamos deixar claro que, é impossível definir uma única energia de Fermi para o plano inteiro de elétrons de condução; a E_r varia ligeiramente de um ponto para outro deste plano.

Se a energia de Fermi encontra-se em uma subbanda de estados estendidos, pode ocorrer de um elétron entrar па amostra em uma região onde a energia de Fermi local seja maior do que a E_r local da região de saída na amostra. Portanto, ao longo da amostra, o elétron pode cair em um dos estados desocupados de menor energia, existente entre as duas energias de Fermi locais, dissipando parte de sua energia durante esta transição, fazendo com que a amostra apresente uma resistência ao fluxo de corrente elétrica. No entanto, se o nível de Fermi está dentro de uma subbanda correspondente a estados localizados, a amostra não apresenta resistência à passagem de corrente. O motivo é que, para elétrons nestas subbandas, localizados em uma pequena região do espaço, é impossível fazer transições em estados localizados desocupados de menor energia, por se encontrarem muito distantes no espaço. Se a energia de Fermi decrescer até que todos os niveis abaixo dela sejam localizados, não existirá mais fluxo de corrente, e a amostra irá se comportar como um perfeito isolante e não mais como um condutor.

Através das componentes da resistividade ρ_{xx} e ρ_{xy} , podemos obter as componentes da condutividade longitudinal e transversal (ou Hall), σ_{xx} e σ_{xy} , que são dadas pelas seguintes equações [25]:

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^{2} + \rho_{xy}^{2}}$$
 e $\sigma_{xy} = -\frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^{2} + \rho_{xy}^{2}}$ (I.19)

Por estas expressões, podemos notar que nas regiões dos

patamares, onde $\rho_{xx}=0$, temos uma condutividade longitudinal também nula, $\sigma_{xx}=0$, e uma condutividade Hall igual a:

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{\rho_{xy}} = -\frac{\nu e^2}{h}.$$
 (1.20)

Em consequência, é fácil observar que $\sigma_{\rm xy}$ também apresentará os patamares vistos em $\rho_{\rm xy}$.

As funções de onda envelope em termos de $A_1(\vec{r})$ e $A_4(\vec{r})$ são:

$$A_{2}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{P}{(\lambda_{o} + E - V(z))} \hat{k}_{-} A_{1}(\vec{r})$$
(II.1)

$$A_{3}(\vec{r}) = \frac{P}{(\lambda_{o} + E - V(z))} \left\{ -\frac{1}{2} \hat{k}_{+} A_{1}(\vec{r}) + \hat{k}_{z} A_{z}(\vec{r}) \right\}$$
(II.2)

$$A_{5}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{P}{(\lambda_{o} + E - V(z))} \hat{k}_{+} A_{4}(\vec{r})$$
(II.3)

$$A_{6}(\vec{r}) = -\frac{P}{(\lambda_{o} + E - V(z))} \left\{ \hat{k}_{z} A_{1}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \hat{k}_{-} A_{4}(\vec{r}) \right\}$$
(II.4)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Kirk, W.P., Kobiela, P.S., Schiebel, R.A. & Reed, M.A., J. Vac.
 Sci. Technol. A 4, 2132 (1986).
- [2] Marques, G.E. & Sham, J.L., Surface Sci. <u>113</u>, 131 (1982).
- [3] Marques,G.E., Tese de Doutorado (não publicada).Universidade da California, San Diego (1982).
- [4] Long, Donald & Schmit, Joseph L., Infrared Delectors, Semiconductors and Semimetals. Willardson, R.K., ed.
 & Beer, Albert C., ed. New York, Academic Press Inc., Vol.5, Cap.5, p.175 (1972).
- [5] Tinkham, Michael, Group Theory and Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Co., Cap.5 (1964).
- [6] Martin, Thomas L. & Leonard, William F., Electrons and Cristals. Brooks/Cole Publishing Co., Belmont, Cap.6 (1970).
- [7] Luttinger, J.M. & Kohn, W., Phys. Rev. <u>97</u>, 869 (1955).
- [8] Sham, L.J. & Nakayama, M., Surface Sci. <u>73</u>, 272 (1978).
- [9] Kane, E.O., Physics of III-V Compounds, Semiconductors and Semimetals. Willardson, R.K., ed. & Beer, Albert C., ed. New York, Academic Press Inc., Vol.1, Cap.3, p.75 (1966).
- [10] Dresselhaus, G., Phys. Rev. <u>100</u>, 580 (1955).
- [11] Messiah, A., Quantum Mechanics, North-Holland Publishing Co., Amsterdam (1966).
- [12] Löwdin, P., J. Chem. Phys. <u>19</u>, 1396 (1951).
- [13] Stern, Frank & Das Sarma, Sankar, Phys. Rev. B <u>30</u>, 840 (1984).
- [14] Stern, Frank & Howard, W.E., Phys. Rev. <u>163</u>, 816 (1967).
- [15] Gummich, Ute & Sham, L.J., Phys. Rev. B 26, 5611 (1982).
- [16] Landau, L.D. & Lifchitz, E.M., Mécanique Quantique (Théorie non Relativiste), Éditions Mir, Moscou, (1966).
- [17] Ando, T. & Uemura, Y., J. Phys. Soc. Jpn. <u>36</u>, 959 (1974).
- [18] Mahan, Gerald D., Many-Particle Physics, Plenum Press, New

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA York, (1981).

- [19] Ashcroft, Neil W. & Mermin, N. David, Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, U.S.A., Cap.2, pg.44 (1976).
- [20] Ohkawa, J.F. & Uemura, Y., J. Phys. Soc. Jpn. <u>37</u>, 1325 (1974)
- [21] Sizmann, R., Chu, J., Wollrab, R., Koch, F., Ziegler, J. & Maier, H., 19th Int. Conf. on Phys. of Semiconductors (ICPS). Zawadzki, W., ed., Warsaw, Vol.1, p.471 (1988).
- [22] Bychkov, Y.A. & Rashba, E.I., J. Phys. C 17, 6039 (1984).
- [23] Wieck, A.D., Maan, J.C., Merckt, U., Kotthaus, J.P., Ploog, K.
 & Weimann, G., Phys. Rev. B <u>35</u>, 4145 (1987).
- [24] von Klitzing, K., Dorda, G. & Pepper, M., Phys. Rev. Lett. <u>45</u>, 494 (1980).
- [25] von Klitzing, K., Rew. of Modern Phys. <u>58</u>, 519 (1986).