Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

# Propriedades Eletrônicas de pontos Quânticos de $InAs_{1-x}P_x$ sobre GaAs

Carlos César Bof Bufon

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências: Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Gilberto Medeiros Ribeiro

Departamento de Física e Ciência dos Materiais
São Carlos – 2003

USP/IFSC/SBI
8-2-001498
IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Bufon, Carlos César Bof'

"Propriedades Eletrônicas de Pontos Quânticos de $InAs_{1-x}P_x$ sobre GaAs " / Carlos César Bof' Bufon – São Carlos, 2003

Dissertação (Mestrado) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2003 - Páginas: 89
Área: Física Aplicada
Orientador: Prof. Dr. Gilberto Medeiros Ribeiro

1. Pontos Quânticos; 2. GaAs; 3. Propriedades Eletrônicas.

I. Título

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400,
13566-590 São Carlos, SP

Fone/Fax 16 273 9777
www.if.sc.usp.br
wladerez@if.sc.usp.br

**MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE CARLOS CESAR BOF BUFON, APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 19/02/2003.**

# COMISSÃO JULGADORA:

---

**Dr. Gilberto Medeiros Ribeiro (Orientador) – LNLS**

---

**Prof. Dr. Alain André Quivy – IF/USP**

---

**Prof. Dr. Iouri Poussep – IFSC/USP**

# Agradecimentos

O programa de mestrado pode ser dividido em dois anos: no primeiro ano foram cumpridos os créditos necessários para obtenção do grau mestre e esta etapa foi desenvolvida no Instituto de Física de São Carlos (IFSC) – USP; no segundo ano o projeto da dissertação foi executado no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron em Campinas, sob orientação do Dr. Gilberto Medeiros-Ribeiro. Desta forma agradeço ao IFSC pela chance de desenvolver este trabalho em um laboratório com o LNLS (chance propiciada em virtude do credenciamento do Gilberto como meu orientador). Agradeço também ao LNLS pela oportunidade de desenvolver o projeto de mestrado no Grupo de Microscopia de Força Atômica e de Tunelamento.

Mesmo indiretamente, meus irmãos, Vinícius e Tiago, e minha mãe, Bete, tiveram grande participação em mais uma etapa da minha formação como Físico. A eles o meus sinceros agradecimentos. Sou extremamente grato ao meu sogro Davi e minha sogra Marli, por terem me acolhido no início deste processo. Também tenho uma divida eterna com minha esposa Diná, que incondicionalmente compartilhou comigo os momentos de ansiedade, incerteza e esperança.

No IFSC agradeço ao Prof. Yuri Pusep e ao Prof. Euclydes Marega pelo apoio acadêmico no primeiro ano do mestrado que estive em São Carlos. Agradeço ao amigo Guidoval, vulgo Rodrigo, pelos bons momentos de conversa fiada. Aos colegas de sala Serginho, Marcão, Solemar e Luiz, e aos técnicos Carlão e Aroldo pelo companheirismo. Agradeço também a Wladerez, secretária da pós, por sua impressionante paciência.

No LNLS agradeço ao meu orientador Gilberto por me dar um excelente projeto de mestrado e pelo apoio durante todo o processo. Ao Evaldo pelas proveitosas discussões e por me ajudar a dar o próximo passo. Ao Vinícius, figurinha rara, pelo apoio técnico e pela alegria intrínseca. Ao Angelo Gobbi e a Maria Helena pela amizade e suporte no preparo das minhas amostras.

Ao Prof. Fernado Iikawa, do grupo de propriedades óticas do IFGW da Unicamp, por ter cedido gentilmente o magneto para que boa parte das medidas deste trabalho fossem feitas. Ao Prof. Álvaro Neves da Universidade Federal de Viçosa pela amizade e por ter sempre incentivado.

Sobretudo, agradeço a Deus pelo sustento e fidelidade.

**Este projeto teve o apoio da FAPESP**

# Resumo

O crescimento de pontos quânticos a partir do descasamento dos parâmetros de rede tem sido alvo de intensos estudos nos últimos dez anos. Conhecer as propriedades eletrônicas destes materiais é chave para a engenharia de sistemas quânticos.

O objetivo deste trabalho é estudar as propriedades eletrônicas de pontos quânticos (QD) de $InAs_{1-X}P_X$ enterrados em GaAs, através de Espectroscopia de Capacitância (CV). A Espectroscopia CV é uma técnica que permite determinar os estados eletrônicos e a distribuição de cargas do sistema.

As amostras de $InAs_{1-x}P_x$ foram crescidas por MOCVD (*Low-Pressure Metalorganic Chemical Vapor Deposition*) sobre um substrato de GaAs:Cr (001). A estrutura das amostras é do tipo MIS (Metal-Isolante-Semicondutor) com um contato traseiro do tipo n. As medidas de capacitância foram feitas a 4,2 K para diferentes valores de freqüência e campo magnético.

A partir da dispersão dos estados confinados com o campo magnético aplicado perpendicular ao plano dos pontos quânticos, pode-se determinar, $\omega_0$, a freqüência natural do sistema. A partir de $\omega_0$, determinou-se $l_0$, o comprimento característico da função de onda. A concordância entre os valores de $l_0$ com as dimensões laterais dos pontos quânticos obtidos por microscopia eletrônica de transmissão (TEM) é boa. Finalmente, através das medidas de espectroscopia CV pode-se separar os efeitos de confinamento lateral e vertical, permitindo um melhor entendimento dos espectros de fotoluminescência (PL), assim como os detalhes da forma dos QD obtidos por TEM.

# Abstract

The growth of quantum dots in the Stranski-Krastranov mode has been subject of intense investigation in the last decade. Knowing the electronics properties of these materials is key for performing quantum systems engineering.

The objective of this work is to study the quantum dots (QD) electronic properties of the $InAs_{1-x}P_x$ embedded in GaAs. The study was done by capacitance spectroscopy (CV), which is an experimental tool that allows the evaluation of the electronic states and the charge distribution of a given quantum device.

The samples of $InAs_{1-x}P_x$ were grown by Low-Pressure Metalorganic Chemical Vapor Deposition on GaAs:Cr (001) substrates. They consist of metal-insulator-semiconductor structures with an n-type back contact. The measurements were performed at 4.2 K for different values of frequencies and magnetic field.

From the confined states dispersion as a function of the applied magnetic field, perpendicular to the QD plane, the system natural frequency, $\omega_0$, was determined. From the $\omega_0$, we could determine the wave function characteristic length, $l_0$. The concordance between the $l_0$ values and the lateral sizes obtained by Transmission Electronic Microscopy (TEM) is good. Finally, by CV spectroscopy we could separate the lateral and vertical confinement effects, leading to a more complete understanding of the Photoluminescence (PL) spectra, as well as the details of the QD shape obtained by TEM.

# Conteúdo

**1. INTRODUÇÃO ..... 1**

**2. FORMAÇÃO DE PONTOS QUÂNTICOS ..... 7**

**3. ESPECTROSCOPIA DE CAPACITÂNCIA ..... 12**

3.1. INTRODUÇÃO ..... 12

3.2. CAPACITÂNCIA GEOMÉTRICA ..... 13

3.3. REGIÃO DE DEPLEÇÃO E BARREIRA SCHOTTKY ..... 16

3.4. RELAÇÃO DE ALAVANCA ..... 19

3.5. TUNELAMENTO ATRAVÉS DE UMA BARREIRA TRIANGULAR ..... 21

3.6. RESPOSTA EM FREQÜÊNCIA ..... 22

3.7. CAPACITÂNCIA E A DENSIDADE DE ESTADOS (DOS) ..... 28

3.8. NÍVEIS ELETRÔNICOS EM PONTOS QUÂNTICOS ..... 28

3.9. ENERGIA DE BLOQUEIO COULOMBIANO ..... 31

**4. ASPECTOS EXPERIMENTAIS ..... 33**

4.1. ESTRUTURA DAS AMOSTRAS ..... 33

4.2. CARACTERÍSTICAS DOS DISPOSITIVOS. ..... 34

4.3. FORNO PARA DIFUSÃO ..... 35

4.4. SISTEMA DE MEDIDAS ..... 38

**5. RESULTADOS E DISCUSSÃO ..... 40**

5.1. MEDIDAS DE FOTOLUMINESCÊNCIA ..... 40

5.2. MEDIDAS I-V ..... 44

5.3. MEDIDAS DE CAPACITÂNCIA ..... 45

*5.3.1. Medidas C-V em SAQDs ..... 47*

*5.3.2. Medidas C-V em função da Freqüência. ..... 52*

*5.3.3. Medidas C-V em função do Campo Magnético ..... 62*

*5.3.3.1. Determinação do confinamento lateral e vertical ..... 62*

*5.3.3.2. Estado Fundamental para Buracos ..... 76*

*5.3.3.3. Dispersão dos Estados Eletrônicos ..... 78*

**6. CONCLUSÕES ..... 85**

**7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS ..... 87**

# Lista de Figuras

FIGURA 1 – DENSIDADE DE ESTADOS EM FUNÇÃO DA ENERGIA, PARA UM SISTEMA EM DIFERENTES DIMENSÕES. ..... 2

FIGURA 2 – ALINHAMENTO ENTRE AS BANDAS DE VALÊNCIA E CONDUÇÃO PARA PONTOS QUÂNTICOS DE INAS E INP. ..... 3

FIGURA 3 – FATOR G PARA ELÉTRONS EM SEMICONDUTORES III-V COMO FUNÇÃO DO PARÂMETRO DE REDE.. ..... 4

FIGURA 4 - ESTRUTURA DAS AMOSTRAS UTILIZADAS NESTE TRABALHO. ..... 5

FIGURA 5 - FABRICAÇÃO DE PONTOS QUÂNTICOS ATRAVÉS DE PROCESSO LITOGRÁFICO E *ETCHING* QUÍMICO.. ..... 7

FIGURA 6 – DIAGRAMA DE FASE NO EQUILÍBRIO EM FUNÇÃO DE $H$ E $\varepsilon$ ..... 9

FIGURA 7 - IMAGENS POR AFM DO CRESCIMENTO DE SAQDS DE INAS POR MBE ..... 10

FIGURA 8 - GRÁFICO MOSTRANDO O NÚMERO DE MONOCAMADAS DE $In_xGa_{1-x}As$, CRESCIDAS POR MBE. ..... 11

FIGURA 9 - DENSIDADE DE ILHAS EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE MONOCAMADAS. ..... 11

FIGURA 10 – CONDIÇÃO PARA TRANSFERÊNCIA DE CARGA ENTRE O SUBSTRATO E OS PONTOS QUÂNTICOS. ..... 13

FIGURA 11 – ESTRUTURA MIS. ..... 14

FIGURA 12 - DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE CARGAS, $\rho$, EVOLUÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO, $E$, E PERFIL DO POTENCIAL APLICADO, V. ..... 17

FIGURA 13 – DIAGRAMA DE BANDAS DAS AMOSTRAS. ..... 19

FIGURA 14 - BARREIRA DE TUNELAMENTO TRIANGULAR. ..... 21

FIGURA 15 –A) DIAGRAMA DE BANDAS PARA AS ESTRUTURAS ESTUDADAS, B) CIRCUITO EQUIVALENTE PARA BAIXAS FREQÜÊNCIAS E C) CIRCUITO EQUIVALENTE PARA ALTAS FREQÜÊNCIAS. ..... 24

FIGURA 16 – À ESQUERDA, A ESTRUTURA DO DISPOSITIVO. À DIREITA O DIAGRAMA DE BANDAS DA ESTRUTURA. ..... 34

FIGURA 17 - TIPOS DE ALINHAMENTO ENTRE A BANDA DE CONDUÇÃO (BC) E A BANDA DE VALÊNCIA (BV). ..... 34

FIGURA 18 - A) AMOSTRA DO TIPO N MONTADA SOBRE O SUPORTE. B) DETALHE DO CONTATO SCHOTTKY COM O FIO DE OURO PRESO UTILIZANDO EPÓXI CONDUTORA A BASE DE PRATA. ..... 35

FIGURA 19 - DESENHO ILUSTRANDO OS PRINCIPAIS ELEMENTOS DO FORNO CONSTRUÍDO. 36

FIGURA 20 - SISTEMA DE CONTROLE DE TEMPERATURA UTILIZADO NO FORNO. ..... 37

FIGURA 21 - CURVA DA TEMPERATURA EM FUNÇÃO DO TEMPO, OBTIDA NO FORNO PARA DIFUSÃO DOS CONTATOS ÔHMICOS ..... 37

FIGURA 22 - MONTAGEM EXPERIMENTAL UTILIZADA PARA A ESPECTROSCOPIA DE CAPACITÂNCIA EM BAIXAS FREQÜÊNCIAS (ATÉ 15KHZ) ..... 39

FIGURA 23 -MONTAGEM EXPERIMENTAL UTILIZADA PARA A ESPECTROSCOPIA DE CAPACITÂNCIA EM ALTAS FREQÜÊNCIAS (ACIMA DE 15KHZ). ..... 39

FIGURA 24 - CIRCUITO UTILIZADO PARA SOMAR O SINAL AC DE A)BAIXA FREQÜÊNCIA E B)ALTA FREQÜÊNCIA, À TENSÃO DC VARIÁVEL. ..... 39

FIGURA 25 - ESPECTROS DE PL FEITOS A 77K. ESPECTROS OBTIDOS NAS AMOSTRAS COM SAQDS DE INAS, INASP E INP ..... 41

FIGURA 26 - ESPECTROS DE PL FEITOS A 77K NA AMOSTRA 268.. ..... 42

FIGURA 27 – POSIÇÃO DOS PICOS DE PL EM FUNÇÃO DA TAXA DE CRESCIMENTO E COM DEPENDÊNCIA COM O FLUXO DE $PH_3$ UTILIZADO DURANTE O CRESCIMENTO POR MOCVD.. ..... 43

FIGURA 28 - CURVA J-V, À 292K, COM AJUSTE EXPONENCIAL PARA A AMOSTRA 274 ..... 44

FIGURA 29 – EFEITOS QUÂNTICOS NOS PONTOS QUÂNTICOS. ..... 46

FIGURA 30 – EFEITO ELETROSTÁTICO DEVIDO À INTERAÇÃO ENTRE ELÉTRONS DENTRO DE UM DETERMINADO ESTADO ..... 46

FIGURA 31 - CURVA C-V PARA AS AMOSTRAS 273 E 274, COM SAQDS DE INAS ENTERRADOS EM GAAS E ESTRUTURA TIPO N. ..... 47

FIGURA 32 - CURVA C-V PARA AS AMOSTRAS 270 E 271, COM SAQDS DE INASP ENTERRADOS EM GAAS E ESTRUTURA TIPO N ..... 48

FIGURA 33 – À ESQUERDA, TEMOS A CURVA C-V PARA A AMOSTRA 268, COM SAQDS DE INP ENTERRADOS EM GAAS E ESTRUTURA TIPO N. ..... 48

FIGURA 34 – DEPENDÊNCIA DA CAPACITÂNCIA E DA CONDUTÂNCIA COM A FREQÜÊNCIA PARA A AMOSTRA 274.. ..... 53

FIGURA 35 - DEPENDÊNCIA DA CAPACITÂNCIA E DA CONDUTÂNCIA COM A FREQÜÊNCIA PARA A AMOSTRA 273. ..... 53

FIGURA 36 - DEPENDÊNCIA DA CAPACITÂNCIA COM A FREQÜÊNCIA PARA AS AMOSTRAS 270 E 271 ..... 54

FIGURA 37 - DEPENDÊNCIA DA CAPACITÂNCIA COM A FREQÜÊNCIA PARA A AMOSTRA DE InP 268 ..... 54

FIGURA 38 – CAPACITÂNCIA COMO FUNÇÃO DA FREQÜÊNCIA E COM DEPENDÊNCIA DO POTENCIAL QUÍMICO PARA AS AMOSTRAS 273 E 274 ..... 55

FIGURA 39 - CAPACITÂNCIA COMO FUNÇÃO DA FREQÜÊNCIA E COM DEPENDÊNCIA DO POTENCIAL QUÍMICO PARA AS AMOSTRAS 270 E 271 ..... 56

FIGURA 40 - CAPACITÂNCIA COMO FUNÇÃO DA FREQÜÊNCIA E COM DEPENDÊNCIA DO POTENCIAL QUÍMICO, PARA A AMOSTRA 268 ..... 56

FIGURA 41 – BARREIRA DE TUNELAMENTO. ..... 58

FIGURA 42 – FREQÜÊNCIA DE PICO EM FUNÇÃO DO PRODUTO DA LARGURA DA BARREIRA DE TUNELAMENTO PELA RAIZ QUADRADA DA ALTURA DA BARREIRA DE TUNELAMENTO, PARA AS AMOSTRAS 273 E 274 ..... 59

FIGURA 43 - FREQÜÊNCIA DE PICO EM FUNÇÃO DO PRODUTO DA LARGURA DA BARREIRA DE TUNELAMENTO PELA RAIZ QUADRADA DA ALTURA DA BARREIRA DE TUNELAMENTO, PARA AS AMOSTRAS 270 E 271 ..... 60

FIGURA 44 - FREQÜÊNCIA DE PICO EM FUNÇÃO DO PRODUTO DA LARGURA DA BARREIRA DE TUNELAMENTO PELA RAIZ QUADRADA DA ALTURA DA BARREIRA DE TUNELAMENTO, PARA A AMOSTRA 268. ..... 60

FIGURA 45 – VALORES DE MASSA EFETIVA OBTIDO PARA CADA AMOSTRA.. ..... 62

FIGURA 46 – DENSIDADE DE ESTADOS (DOS) COMO FUNÇÃO DO POTENCIAL QUÍMICO E COM DEPENDÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO, PARA AS AMOSTRAS 273 274. ..... 63

FIGURA 47 - DENSIDADE DE ESTADOS (DOS) COMO FUNÇÃO DO POTENCIAL QUÍMICO E COM DEPENDÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO, PARA AS AMOSTRAS 270 E 271. ..... 63

FIGURA 48 - DENSIDADE DE ESTADOS (DOS) COMO FUNÇÃO DO POTENCIAL QUÍMICO E COM DEPENDÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO, PARA A AMOSTRA 268. ..... 64

FIGURA 49 – DISPERSÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL COM O CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRAS 273 E 274 ..... 67

FIGURA 50 - DISPERSÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL COM O CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRAS 270 E 271 ..... 68

FIGURA 51 - DISPERSÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL COM O CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRA 268.. ..... 68

FIGURA 52 – LARGURA DE LINHA À MEIA ALTURA EM FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRAS 273 E 274 ..... 69

FIGURA 53 - LARGURA DE LINHA À MEIA ALTURA EM FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRAS 270 E 271 ..... 69

FIGURA 54 - - LARGURA DE LINHA À MEIA ALTURA EM FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO PARA A AMOSTRA 268. ..... 70

FIGURA 55 – IMAGENS DE TEM, NO MODO SEÇÃO TRANSVERSA, DE AMOSTRAS COM PONTOS QUÂNTICOS DE INAS CRESCIDOS SOB AS MESMAS CONDIÇÕES QUE AS UTILIZADAS NESTE TRABALHO.. ..... 72

FIGURA 56 – IMAGENS DE TEM, NO MODO SEÇÃO TRANSVERSA, DE AMOSTRAS COM PONTOS QUÂNTICOS DE INASP CRESCIDOS SOB AS MESMAS CONDIÇÕES QUE AS UTILIZADAS NESTE TRABALHO ..... 72

FIGURA 57 – IMAGENS DE TEM, NO MODO SEÇÃO TRANSVERSA, DE AMOSTRAS COM PONTOS QUÂNTICOS DE INP CRESCIDOS SOB AS MESMAS CONDIÇÕES QUE AS UTILIZADAS NESTE TRABALHO ..... 72

FIGURA 58 – RELAÇÃO ENTRE OS VALORES DE $l_0$ COM O RAIO DO PONTOS QUÂNTICO OBTIDO POR TEM EM AMOSTRAS DE MESMA ESPÉCIE QUÍMICA E CRESCIDAS EM CONDIÇÕES SEMELHANTES ..... 72

FIGURA 59 – AJUSTE DAS CURVAS DE DOS A 0T, OBTIDAS PARA AS AMOSTRAS 273 E 274, COM DUAS GAUSSIANAS. ..... 73

FIGURA 60 – AJUSTE DAS CURVAS DE DOS À 0T, OBTIDAS PARA AS AMOSTRAS 270 E 271, COM DUAS GAUSSIANAS ..... 74

FIGURA 61 - DENSIDADE DE ESTADO(DOS), COMO FUNÇÃO DO POTENCIAL QUÍMICO, À CAMPO MAGNÉTICO ZERO, PARA A AMOSTRA 268 ..... 74

FIGURA 62 – POSIÇÃO DOS NÍVEIS DE BURACOS PESADOS E DE ELÉTRONS NO DIAGRAMA DE BANDAS. ..... 77

FIGURA 63 – BANDA DE VALÊNCIA PARA O INP TENSIONADO. OS BURACOS ESTÃO CONFINADOS NA INTERFACE GAAS/INP. A SETA INDICA A POSIÇÃO DO NÍVEL DE BURACO. ..... 78

FIGURA 64 – RELAÇÃO DE DISPERSÃO DOS ESTADOS ELETRÔNICOS COMO FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRAS 273 E 274 ..... 79

FIGURA 65 - RELAÇÃO DE DISPERSÃO DOS ESTADOS ELETRÔNICOS COMO FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO PARA AS AMOSTRAS 270 E 271 ..... 79

FIGURA 66 - RELAÇÃO DE DISPERSÃO DOS ESTADOS ELETRÔNICOS COMO FUNÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO PARA A AMOSTRA 268.. ..... 80

FIGURA 67 – DENSIDADE DE ESTADOS (DOS) COMO FUNÇÃO DO POTENCIAL QUÍMICO, COM DEPENDÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO, PARA A AMOSTRA 274. ..... 80

FIGURA 68 - DENSIDADE DE ESTADOS (DOS) COMO FUNÇÃO DO POTENCIAL QUÍMICO, COM DEPENDÊNCIA DO CAMPO MAGNÉTICO, PARA A AMOSTRA 268. ..... 81

FIGURA 69 – RESUMO DOS RESULTADOS OBTIDOS ATRAVÉS DAS MEDIDAS DE CAPACITÂNCIA EM PONTOS QUÂNTICOS DE INAS, INASP E INP ..... 82

# Lista de Tabelas

TABELA 1 - PRINCIPAIS PARÂMETROS UTILIZADOS NO CRESCIMENTO DOS SAQDS DE INAS, INASP E INP. ..... 33

TABELA 2 – ENERGIA DOS PICOS DE PL, $E_{PL}$, E LARGURA DE LINHA PARA AS AMOSTRAS DE INAS(273 E 274), INASP(270 E 271) E INP(268). ..... 42

TABELA 3 – VALORES DE $\phi_B$ ATRAVÉS DAS CURVAS I-V. ..... 44

TABELA 4 – FREQÜÊNCIAS MÁXIMA E MÍNIMA UTILIZADAS NA MEDIDAS DAS AMOSTRAS DE INAS, INASP E INP. ..... 45

TABELA 5 – VALORES MEDIDOS DAS ÁREAS DO CONTATO SCHOTTKY DOS DISPOSITIVOS. $N_D$ E $\phi_B$ FORAM CALCULADOS PELOS AJUSTE DA REGIÃO LINEAR DA CURVA C-V ATRAVÉS DA EQUAÇÃO 19. OUTRO VALOR DE $\phi_B$ FOI OBTIDO PELA CURVA I-V A 292K. ..... 50

TABELA 6 – VALORES DE MASSA EFETIVA, OBTIDAS PELO AJUSTE DAS CURVAS DAS FIGURAS 38, 39 E 40, PARA AS AMOSTRAS DE INAS(273 E 274), INASP(270 E 271) E INP(268). ..... 61

TABELA 7 – POSIÇÃO DOS PICOS DE DOS E LARGURA DE LINHA À MEIA ALTURA PARA AS AMOSTRAS DE INAS (273 E 274), INASP (270 E 271) E INP(268). ..... 65

TABELA 8 – COMPARAÇÃO DOS DADOS DE $\rho_{SAQDs}$ OBTIDOS PARA AS AMOSTRAS DE INAS (273 E 274), INASP (270 E 271) E INP (268), ATRAVÉS DA INTEGRAÇÃO DA ÁREA ABAIXO DA CURVA DE DOS, COM OS VALORES MEDIDOS POR TEM ..... 66

TABELA 9 – VALORES DE $\omega_0$, $l_0$ E $E_{CB}$ OBTIDOS PARA AS AMOSTRAS EM ESTUDO E DIÂMETRO DOS PONTOS QUÂNTICOS OBTIDOS POR TEM. ..... 71

TABELA 10 – POSIÇÕES DOS PICOS DAS DUAS GAUSSIANAS AJUSTADAS SOBRE AS CURVAS DE DOS.. ..... 75

TABELA 11 – VALORES DE ENERGIA ENCONTRADOS PARA O CONFINAMENTO NA DIREÇÃO DE CRESCIMENTO E ALTURA DOS PONTOS QUÂNTICOS OBTIDAS POR TEM ..... 76

# Equações mais Utilizadas

**Equação 1**

Descasamento dos parâmetros de rede ($\varepsilon_{//}$) do InAs/GaAs:

$$\varepsilon_{//} = 2\left(\frac{a_{InAs} - a_{GaAs}}{a_{InAs} + a_{GaAs}}\right) = 0{,}07$$

$a_{InAs}$ e $a_{GaAs}$ são os parâmetros de rede do InAs e do GaAs.

**Equação 2**

Capacitância e um capacitor de placas paralelas:

$$C_{geo} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_m A}{d}$$

$\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $A$ a área da placa do capacitor e $d$ a separação entre a placas.

**Equação 3**

Largura da região de depleção para um metal colocado em contato com um semicondutor dopado:

$$W' = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r}{qN}\left(\Delta V - \frac{kT}{e}\right)}$$

onde $\varepsilon_r = \varepsilon_0 \varepsilon_m$, $N$ é a concentração de dopantes na região de depleção, $q$ a carga do elétron/buraco e $\Delta V$ o ganho de energia potencial por elétron/buraco transportado através do percurso $W'$.

**Equação 4**

Largura da região de depleção para uma estrutura tipo MIS:

$$W = 2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r \Delta V}{eN_D}}$$

onde $t_T$.é a largura total da região não dopada, $e$ é a carga do elétron, $\Delta V = \phi_B + V - \frac{kT}{e}$, $\phi_B$ é a altura da barreira Schottky e $N_D$ a concentração de doadores.

**Equação 5**

Capacitância de uma estrutura tipo MIS como função do potencial $V$ :

$$C \equiv \frac{|\partial Q|}{\partial V} = \frac{\varepsilon_r A}{2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r \Delta V}{eN_D}}}$$

$\varepsilon_r = \varepsilon_0 \varepsilon_m$, $\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $A$ a área do contato Schottky, $t_T$.é a largura total da região não dopada (isolante), $e$ é a carga do elétron e $\Delta V = \phi_B + V - \frac{kT}{e}$, $\phi_B$ é a altura da barreira Schottky e $N_D$ a concentração de doadores.

**Equação 6**

Altura da barreira Schottky:

$$\phi_B = \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{A^{**}T^2}{J_S}\right)$$

$J = J_S e^{\frac{eV}{nkT}}$ é densidade de corrente através de uma junção metal-semicondutor no regime de emissão termiônica (altas temperaturas e baixas dopagens), $J_S$ é a densidade de saturação e $n$ o fator de idealidade e $A^{**}$ é a constante efetiva de Richardson (120[$AK^2cm^{-2}$] a 300K).

**Equação 7**

Relação de alavanca:

$$e\mu_{QD} = \frac{t_{tunn}}{t_{tot}} e(V - \phi_B)$$

$t_{tunn}(V) = t_B + t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$, é a largura da região de tunelameto do elétron, $t_{tot}(V) = 2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$, é a largura efetiva total da região não dopada, $t_B$ é a largura da barreira de tunelamento, $\varepsilon_r = \varepsilon_0 \varepsilon_m$, $\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $A$ a área do contato Schottky, $t_T$ é a largura total da região não dopada (isolante), $e$ é a carga do elétron, $\phi_B$ é a altura da barreira Schottky e $N_D$ a concentração de doadores

**Equação 8**

Coeficiente de tunelamento através de uma barreira triangular (aproximação WKB):

$$P_{tunn} \cong \exp\left[-\frac{2}{3}\left(t_{tunn}(V)\right)\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}\left(E_t(V)\right)}\right]$$

$\hbar$ é a constante de Planck, m* a massa efetiva, $E_t$ é a energia referente a altura da barreira de tunelamento, $t_{tunn}(V) = t_B + t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$, $\varepsilon_r = \varepsilon_0 \varepsilon_m$, $\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $A$ a área do contato Schottky, $t_T$.é a largura total da região não dopada (isolante), $e$ é a carga do elétron, $\phi_B$ é a altura da barreira Schottky e $N_D$ a concentração de doadores.

**Equação 9**

Capacitância equivalente:

$$C_{eq}(\omega) = \frac{C_{high} C_{low}\left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_p^2}\right)}{C_{high} + C_{low}\left(\frac{\omega^2}{\omega_p^2}\right)}$$

$C_{high}$ é a capacitância do circuito em alta freqüência , $C_{low}$ é a capacitância do circuito em baixa freqüência e $\omega_p$ é a freqüência de pico do sistema.

**Equação 10**

Densidade de Estados:

$$D_Q(\mu_{QD}) = \frac{C_{tunn}}{Ae^2}\left(\frac{C_{low}}{C_{high}} - 1\right)\left[1 + C_{low}\left(\frac{1}{C_{tunn}} - \frac{1}{C_{high}}\right)\right]^{-1}$$

$C_{tunn} = \varepsilon_r A / t_{tunn}$, $t_{tunn}(V) = t_B + t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$, $\varepsilon_r = \varepsilon_0 \varepsilon_m$, $\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $A$ a área do contato Schottky, $t_T$.é a largura total da região não dopada (isolante), $e$ é a carga do elétron, $\phi_B$ é a altura da barreira Schottky, $N_D$ a concentração de doadores, $C_{high}$ é a capacitância do circuito em alta freqüência e $C_{low}$ é a capacitância do circuito em baixa freqüência .

**Equação 11**

Energia de confinamento lateral ( $x, y$ ):

$$E_{n,m}(\omega_c) = (n+1)\hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} - m\frac{\omega_c}{2}$$

$n = 2n_r + |m|$, $n_r$ é o número quântico radial, $n = 0, 1, ...$ e $m = -n, -n+2, ..., n-2, n$ são os números quânticos principal e azimutal, respectivamente, $\omega_0$ é a freqüência natural do sistema, $\omega_c = eB/m^*$, B é o campo magnético, m* a massa efetiva e $e$ é a carga do elétron.

**Equação 12**

Energia do estado fundamental para caso do potencial parabólico:

$$E_{0,0} = \hbar\omega_0 \cong \left(\frac{\hbar}{l_0 m^*}\right)^2$$

onde $l_0$ é o comprimento característico da função de onda e $m^*$ a massa efetiva do portador de carga e $\hbar$ é a constante de Planck.

**Equação 134**

Função de onda do elétron no estado fundamental do ponto quântico:

$$R_{0,0} = e^{-\left(\frac{r^2}{2b^2}\right)}$$

$b = \left(\frac{\hbar}{m^*}\right)\frac{1}{\sqrt{\omega_C^2 + \omega_0^2}}$, $m^*$ a massa efetiva do portador de carga, $\hbar$ é a constante de Planck, $\omega_0$ é a freqüência natural do sistema, $\omega_c = eB/m^*$, B é o campo magnético e $e$ é a carga do elétron,

**Equação 146**

Energia total de confinamento em um ponto quântico:

$$E_T(\omega_c) = E_z + (2n_r + |m| + 1)\hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} - m\hbar\frac{\omega_c}{2}$$

$E_z$ é a energia de confinamento da direção z, $n = 2n_r + |m|$, $n_r$ é o número quântico radial, $n = 0, 1, ...$ e $m = -n, -n+2, ..., n-2, n$ são os números quânticos principal e azimutal, respectivamente, $\omega_0$ é a freqüência natural do sistema, $\omega_c = eB/m^*$, B é o campo magnético, m* a massa efetiva e $e$ é a carga do elétron.

**Equação 158**

- Energia de Bloqueio Coulombiano:

$$E_{CB,i} = \frac{e^2}{2C_{QD}} n_i (n_i - 1)$$

$C_{QD} = 2\pi\varepsilon_r R$ é a auto-capacitância do ponto quântico, $R$ é o raio do ponto quântico, $n_i$ é o número de elétrons no nível $i$ e $e$ é a carga do elétron.

- Energia Bloqueio Coulombiano ($E_{CB}$) como função de $\hbar\omega_0$:

$$E_{CB} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_r}\sqrt{\frac{m^*\omega_0}{\hbar}}$$

$\hbar$ é a constante de Planck, m* a massa efetiva, $\varepsilon_r = \varepsilon_0\varepsilon_m$, $\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $e$ é a carga do elétron e $\omega_0$ é a freqüência natural do sistema

**Equação 63**

Relação de dispersão dos estados com o campo magnético incluindo a interação coulombiana:

$$E_T(\omega_c) = \underbrace{E_z}_{\substack{Conf.\\ em\ z}} + \underbrace{(2n_r + |m| + 1)\hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} - m\hbar\frac{\omega_c}{2}}_{Fock-Darwin} + \underbrace{\frac{e^2}{2C_{QD}} n_i (n_i - 1)}_{Coulomb\ Blockade}$$

$E_z$ é a energia de confinamento da direção z, $n = 2n_r + |m|$, $n_r$ é o número quântico radial, $n = 0, 1, \ldots$ e $m = -n, -n+2, \ldots, n-2, n$ são os números quânticos principal e azimutal, respectivamente, $\omega_0$ é a freqüência natural do sistema, $\omega_c = eB/m^*$, B é o campo magnético, m* a massa efetiva, $e$ é a carga do elétron e $C_{QD} = 2\pi\varepsilon_r R$ é a auto-capacitância do ponto quântico, $R$ é o raio do ponto quântico, $n_i$ é o número de elétrons no nível $i$.

# 1. Introdução

A observação dos efeitos de quantização está condicionada ao tamanho da estrutura[1]. Para uma estrutura com largura $L$, os efeitos quânticos seguem a relação $f(L) \propto 1/L^2$.

A Figura 1 mostra como a redução do tamanho do sistema é refletida diretamente na dependência da densidade de estados (DOS) com a energia.

A densidade de estados para um sistema 3D ($D_{3D}$), onde não há confinamento, tem uma dependência com a raiz quadrada da energia, ou seja:

$$D_{3D} = \frac{1}{\pi^2}\sqrt{2m^{*3}\,E}$$ **Equação 16**

onde m* é a massa efetiva e $E$ a energia. A Figura 1a mostra esta dependência.

Já para um sistema 2D, onde há confinamento ao longo de uma direção, como por exemplo os poços quânticos, temos platôs bem definidos, conforme mostra o segundo quadro da Figura 1b. A dependência da densidade de estados com a energia, para um sistema 2D, é dada pela relação:

$$D_{2D} = \sum_{\xi_i \le E} \frac{m^*}{\pi^2}$$ **Equação 17**

onde $\xi_i$ são níveis discretos de energia.

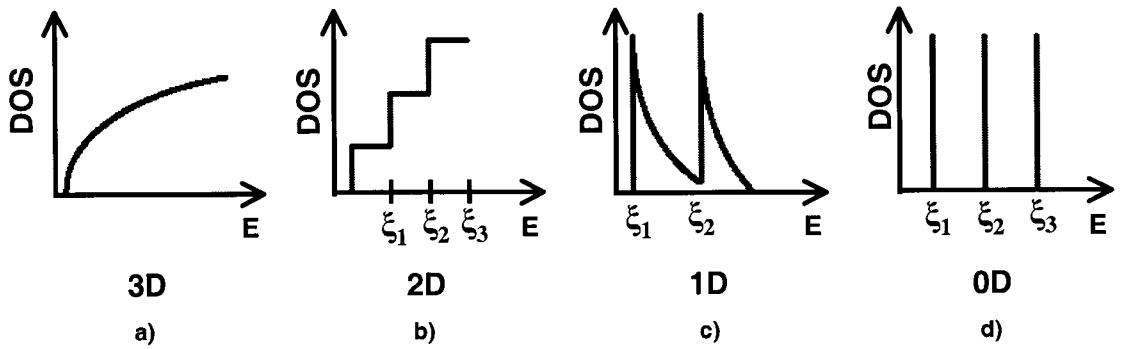



**Figura 1 – Densidade de estados em função da energia, para um sistema em diferentes dimensões: Em a) temos a 3D, para um material *bulk;* em b) a 2D, para um poço quântico; em c) a 1D, para fios quânticos; e em d) a 0D, para pontos quânticos.**

Para um sistema 1D, onde há confinamento ao longo de duas direções (fios quanticos), a dependência da densidade de estados com a energia é dada por:

$$D_{1D} = \sum_{\xi_i \leq E} \frac{gL}{\pi^2} \sqrt{\frac{m^*}{2(E-\xi_i)}} \qquad \textbf{Equação 18}$$

onde g é a degenerescência do sistema e L o comprimento do fio. A Figura 1c, apresenta esta dependência. Finalmente, temos na Figura 1d a dependência da densidade de estados com a energia para um sistema 0D, onde há confinamento quântico ao longo da três direções (pontos quânticos). A relação com a energia é dada por:

$$D_{0D} \propto \sum_{\xi_i} \delta(E-\xi_i) \qquad \textbf{Equação 19}$$

onde $\delta$ é a função de Dirac. Assim, os estados eletrônicos nos pontos quânticos, que se comportam com um sistema 0D, possuem valores de energia bem definidos, assim como os átomos[2]. A posição em energia para cada estado irá depender basicamente do tamanho destas estruturas e do material no qual ela é formada. Assim, de acordo com o tamanho e a composição, a distância entre níveis de energia vizinhos pode chegar à ordem de meV[3].

Quando modificamos a composição dos pontos quânticos, alteramos o gap do material (por exemplo: a 0K, de 0,45eV – InAs para 1,42eV - InP) e conseqüentemente as posições dos níveis de confinamento para elétrons e para buracos. Com esta alteração, modificamos a energia de recombinação dos pontos quânticos. Esta é uma propriedade importante no desenvolvimento de dispositivos opto-eletrônicos. Com isto, o estudo da alteração da composição dos pontos quânticos de InAs até InP, à medida que se modifica a concentração de fósforo e arsênico mostra-se relevante uma vez que variamos a energia de gap.

Outra motivação que deve ser ressaltada se refere ao alinhamento entre as bandas de condução e de valência entre os dois materiais. O InAs possui um alinhamento do tipo I entre as bandas, enquanto que o InP possui um alinhamento do tipo II. A Figura 3 ilustra a diferença entre os tipos de alinhamento entre as bandas de valência e de condução.

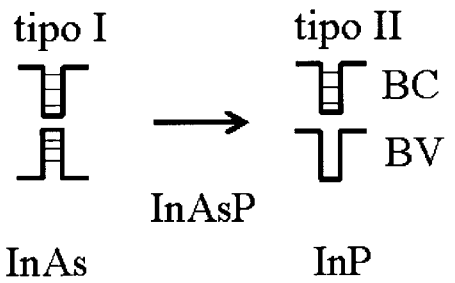



**Figura 3 – Alinhamento entre as bandas de valência e condução para pontos quânticos de InAs e InP. Os alinhamentos podem ser do tipo I ou do tipo II.**

Devido ao alinhamento entre as bandas, nos pontos quânticos de InAs temos a localização tanto de elétrons como de buracos. Já nos pontos quânticos de InP, somente os elétrons estão localizados, uma vez que os buracos encontram-se na interface GaAs/InP. Com isto, os tempos de recombinação do par elétron-buraco para os pontos quânticos de InAs e InP são diferentes. O tempo de recombinação nos pontos quânticos

de InAs, $\tau_{InAs}$, é menor que o tempo de recombinação nos de InP, $\tau_{InP}$. Este fato representa a possibilidade no desenvolvimento de novos dispositivos de memória.

Outro aspecto há ser explorada no estudo de pontos quânticos de $InAs_{1-X}P_X$ é a engenharia de fator g. No desenvolvimento de dispositivos para aplicação em comunicação quântica, é desejável que o fator g seja próximo de zero[4]. A Figura 4 apresenta um gráfico com a dependência do fator g com o parâmetro de rede para diversos materiais.

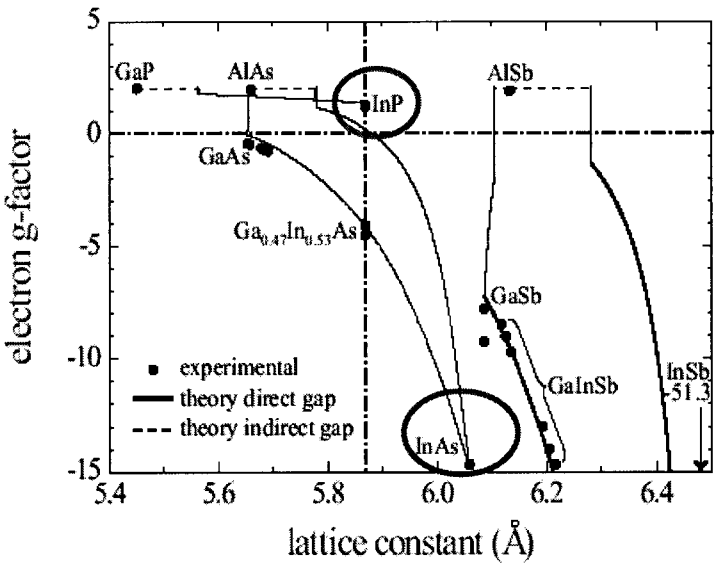



**Figura 4 – Fator g para elétrons em semicondutores III-V como função do parâmetro de rede[4]. Os círculos vermelhos indicam a posição no gráfico para o InAs e InP.**

Segundo o gráfico da Figura 4, os elétrons no InP possuem fator g positivo, enquanto que elétrons no InAs possuem fator g negativo. Como o InAsP é uma liga intermediaria ao InAs e InP, é possível que esta possua valores de fator g próximo a zero. Com isto, as ligas de InAsP são bons candidatos para o desenvolvimento dos dispositivos que preservam o entrelaçamento de spin para aplicações em comunicação quântica.

Como a estequiometria das ilhas de InAsP não é conhecida, por causa da dificuldade do controle da incorporação do elemento V, este trabalho irá ajudar, qualitativamente, no entendimento da estequiometria como função dos parâmetros de crescimento.

Diante disto, o objetivo deste trabalho é entender as propriedades eletrônicas de pontos quânticos auto-organizados (*Self-Assembled Quantum Dots* – SAQDs), formados de $InAs_{1-X}P_X$, com $0<X<1$, e enterrados em GaAs. Para tal, foi utilizada a caracterização por espectroscopia de capacitância em uma série de amostras crescidas por MOCVD. A estrutura das amostras utilizadas neste trabalho é apresentada na Figura 5.

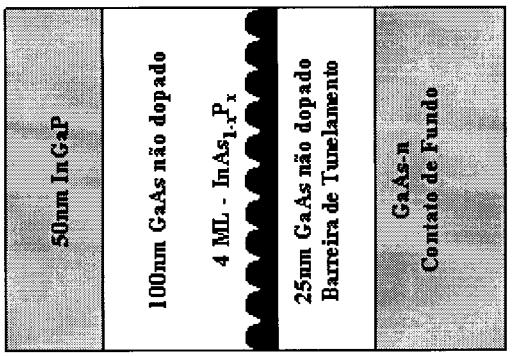



**Figura 5 - Estrutura das amostras utilizadas neste trabalho. Elas possuem SAQDs de InAs, InAsP e InP enterrados em GaAs, e foram crescidas por MOCVD.**

Os dispositivos foram processados por fotolitografia e para a preparação dos contatos ôhmicos foi necessária a construção de um forno para difusão das ligas.

Como técnica complementar, foram utilizadas medidas de fotoluminescência no intuito de entender as propriedades ópticas dos pontos quânticos. Medidas de microscopia de transmissão forneceram as dimensões e a densidade superficial de pontos quânticos em amostras crescidas sob as mesmas condições das utilizadas neste trabalho.

Assim, passamos a uma breve discussão a respeito da formação dos pontos quânticos e na seqüência, ao estudo da espectroscopia de capacitância aplicada à análise

das propriedades eletrônicas dos pontos quânticos. Após esta parte, seguimos pela descrição dos aspectos experimentais do trabalho e finalmente, a apresentação e discussão dos resultados obtidos.

# 2. Formação de Pontos Quânticos

Desde a década de 80, esforços têm sido feitos na direção de se produzir estruturas que se comportem como pontos quânticos, isto é, estruturas que possam confinar cargas tridimensionalmente[5].

Os primeiros pontos quânticos foram desenvolvidos através de litografia por feixe de elétrons e *etching* químico, em estruturas contendo um gás 2D de elétrons[6]. Ao final do processo de fabricação, os elétrons antes confinados no plano 2D ficam restritos a pilares com dimensões da ordem de 50-100nm. Mesmo com tamanhos tão pequenos, tais estruturas possibilitam ainda pequeno confinamento lateral. A Figura 6 traz o processo de fabricação dos pontos quânticos através da litografia por feixe de elétrons e *etching* químico[7].

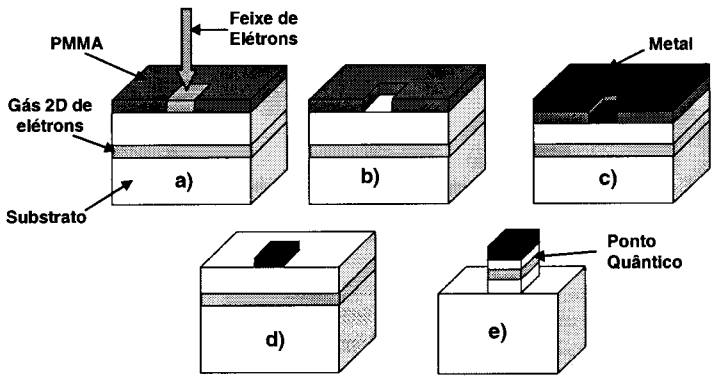



**Figura 6 - Fabricação de pontos quânticos através de processo litográfico e *etching* químico. Em (a), o PMMA(resina eletro-sensível) é espalhado sobre a amostra e o padrão é desenhado pelo feixe de elétrons. O PMMA é removido da região onde o feixe incide (b). Uma camada de metal é depositada sobre a estrutura (c). O excesso de metal é removido, e por *etching* químico o semicondutor na região sem o metal é atacado (d), levando à formação do ponto quântico(e).**

Como este processo envolve altas energias e ataques químicos, problemas como o surgimento de estados de superfície e defeitos profundos são possíveis[8].

Outro método utilizado é o crescimento auto-organizado de pontos quânticos. Aqui, os pontos quânticos são formados por ilhas que surgem durante o crescimento epitaxial.

A equação abaixo, descreve a energia livre por átomo, para ilhas piramidais e incluindo a interação ilha-ilha[9]:

$$E_{is} = gCe^2 - \Phi_{AA} + E_C\left(-\frac{2}{x_L^2}\ln e^{1/2}x_L + \frac{\alpha}{x_L} + \frac{\beta(n_2)}{x_L^{3/2}}\right) \qquad \textbf{Equação 20}$$

onde $gCe^2$ é a densidade de energia devido ao descasamento dos parâmetros de rede, $\Phi_{AA}$ é a energia de ligação e $x_L = L/L_0$, com $L_0$ sendo o comprimento característico dependente do material. A Equação 20 determina a energia livre do sistema mais a das ilhas 3D, onde seu mínimo indica a situação de equilíbrio do sistema. Os possíveis modos de crescimento heteroepitaxial, dependerão da quantidade de material depositado, $H$, e da diferença relativa entre os parâmetros de rede, $\varepsilon$, dos materiais envolvidos, e obtidos através dos mínimos de energia da Equação 20. A Figura 7 mostra o diagrama de fase no equilíbrio em função da quantidade de material depositado e do descasamento dos parâmetros de rede. No diagrama, as fases são separadas pelas seguintes linhas: $H_{C1}(\varepsilon)$, que é a separação entre as fases FM e R1, FM e SK1; $H_{C2}(\varepsilon)$, separação entre as fases SK1 e R2; $H_{C3}(\varepsilon)$, separação entre as fases SK2 e SK1; $H_{C4}(\varepsilon)$, separação entre as fases VW e SK2, VW e R3.

Se H< $H_{C1}(\varepsilon)$, teremos o crescimento no modo FM (Frank van der Merve), onde o crescimento se dá camada por camada.

Na fase R1, para valores de H acima de $H_{C1}(\varepsilon)$ e com $0<\varepsilon<\varepsilon_1$, o mínimo de energia na Equação 20 faz com que após o crescimento de uma camada 2D (*wetting layer*), o excesso de material depositado contribua para a formação de ilhas Ri (*ripening*). Como a energia livre reduz com o aumento da largura ($x_L$), então esta fase tende a utilizar todo o material depositado disponível em ilhas com o maior tamanho possível.

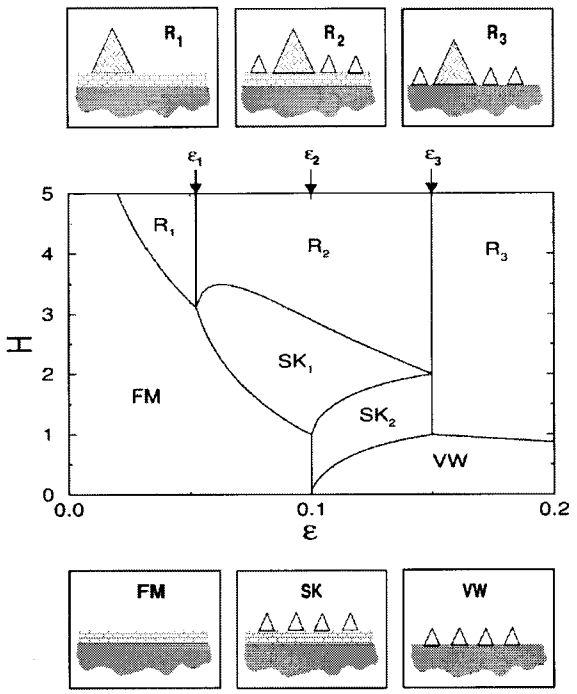



**Figura 7 – Diagrama de fase no equilíbrio em função de $H$ e $\varepsilon$. Os quadros acima e abaixo do diagrama de fase ilustram a morfologia da superfície para cada um dos seis modos de crescimento. Os triângulos vazios representam as ilhas crescidas estáveis e finitas, enquanto que os preenchidas as ilhas crescidas com restrição(*ripened*)[10].**

Na fase SK1, para valores de H acima $H_{C1}(\varepsilon)$ e com $\varepsilon_1 < \varepsilon < \varepsilon_2$, o mínimo da energia livre se refere a um sistema formado por uma camada 2D e na seqüência pela nucleação de ilhas com tamanhos otimos ($R_0$), ou seja, têm-se como condição de equilíbrio um conjunto de ilhas de um mesmo tamanho. Da mesma forma, para valores de H acima de $H_{C4}(\varepsilon)$ e para $\varepsilon_2 < \varepsilon < \varepsilon_3$, observa-se o crescimento no modo SK na fase SK2.

Já na fase R2, o mínimo de energia favorece a formação de um sistema composto de uma camada 2D, de ilhas $R_0$ e ilhas Ri. Porém, na fase R3 o sistema minimiza a energia de modo que se obtém a formação direta de ilhas $R_0$ e ilhas Ri sem a presença da camada 2D.

Para a fase VW (Volmer-Weber), onde $\varepsilon > \varepsilon_2$ e $H < H_{C4}(\varepsilon)$, a minimização da energia favorece a formação direta de ilhas finitas sem a presença da camada 2D.

O descasamento dos parâmetros de rede ($\varepsilon_{//}$) do InAs/GaAs é dado por:

$$\varepsilon_{//} = 2\left(\frac{a_{InAs} - a_{GaAs}}{a_{InAs} + a_{GaAs}}\right) = 0{,}07 \qquad \textbf{Equação 21}$$

onde $a_{InAs}$ e $a_{GaAs}$ são os parâmetros de rede do InAs e do GaAs, respectivamente. Para o sistema InP/GaAs o descasamento é de aproximadamente 3,8%. No caso do InAs sobre GaAs e do InP sobre GaAs, o crescimento se dá no modo SK na fase SK1 para espessuras acima de ~1,7 ML e 2,3 ML, respectivamente, segundo o diagrama da Figura 7, uma vez que os valores de $\varepsilon_{//}$ são tais que $\varepsilon_1 < \varepsilon_{//} < \varepsilon_2$.

Como já visto, a transição 2D-3D dependente da espessura (número de monocamadas). Na Figura 9 temos a imagem de uma superfície coberta por InAs com as espessuras variando de 1,6 a 1,8 monocamadas. Os pontos em cinza são as ilhas crescidas à medida que se aumenta o número de monocamadas.

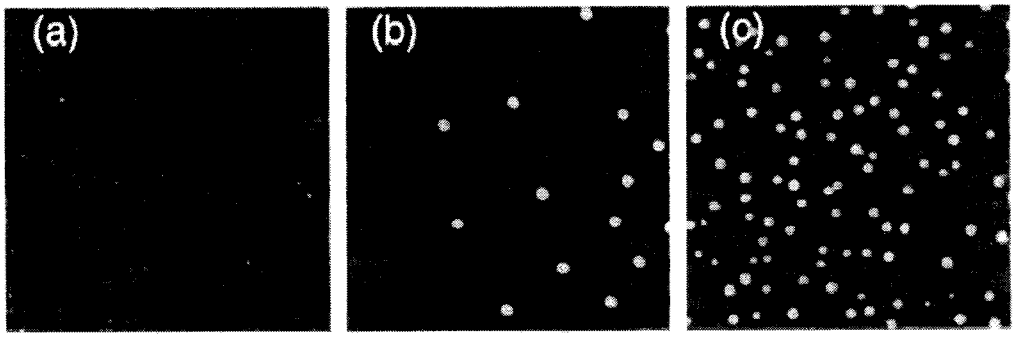



**Figura 9 - Imagens por AFM do crescimento de SAQDs de InAs por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*). a)1,6ML, b)1,7ML e c)1,8ML. As imagens possuem dimensões de 1μm X 1μm [11,12].**

A Figura 10 mostra o gráfico que determina o número de monocamadas da liga de $In_xGa_{1-x}As$ necessárias para a transição 2D-3D, como função da composição da liga, X, para estruturas crescidas por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*).

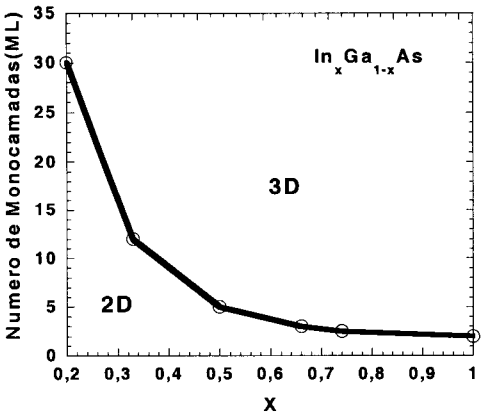



**Figura 10 - Gráfico mostrando o número de monocamadas de $In_xGa_{1-x}As$, crescidas por MBE, para a transição 2D-3D como função da composição X[13].**

A densidade de ilhas crescidas e sua distribuição de tamanhos estão relacionadas com a quantidade de material depositado. A Figura 12 apresenta o gráfico da densidade de ilhas como função do número de camadas crescidas por MBE. A figura indica o aumento da densidade de ilhas com a quantidade de material[12].

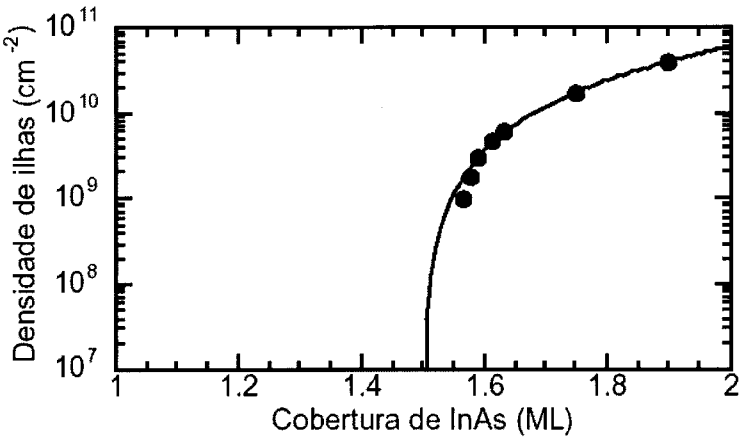



**Figura 12 - Densidade de ilhas em função do número de monocamadas crescidas.[12]**

# 3. Espectroscopia de Capacitância

Neste capítulo são desenvolvidos os aspectos teóricos da Espectroscopia de Capacitância que será utilizada no estudo das propriedades eletrônicas dos pontos quânticos de $InAs_{1-X}P_X$ enterrados em GaAs. Desta forma, este estudo fornecerá as ferramentas necessárias para a avaliação dos efeitos quânticos e eletrostáticos associados aos pontos quânticos.

## 3.1. Introdução

A espectroscopia de capacitância (C-V) é uma poderosa técnica que têm sido utilizada há vários anos[14,15] para determinar os estados eletrônicos de elétrons e buracos[16], a densidade de dopantes e sua distribuição espacial em semicondutores[17], e os efeitos da interação elétron-elétron em pontos quânticos[18].

A técnica de espectroscopia de capacitância é baseada na medida da capacitância do sistema, $C = {dQ}/{dV}$, como função do potencial $V$ aplicado. Neste sistema, os pontos quânticos são crescidos sobre um substrato, onde seu potencial químico, $\mu_S$, está em equilíbrio termodinâmico com o potencial de Fermi: $E_F = e\mu_S$. A transferência de elétrons do substrato para os pontos quânticos ocorre, em princípio, quando os respectivos potenciais químicos forem iguais, ou seja, $E_F = e\mu_S = e\mu_{QD}$ ( onde $\mu_{QD}$ é o potencial químico do ponto quântico e $e$ a carga do elétron) e quando houver a condição

de ressonância, onde a energia referente a $\mu_S$ passa a ser igual a energia de um nível eletrônico do ponto quântico. A Figura 14 ilustra a condição de transferência de carga.

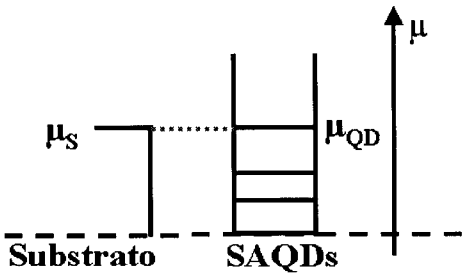



**Figura 14 – Condição para transferência de carga entre o substrato e os pontos quânticos.**

A mudança no potencial $V$ aplicado leva à mudança do número de elétrons transferidos do substrato para os pontos quânticos[19]. Pelo fato dos níveis de energia dos pontos quânticos serem discretos, a adição de elétrons ocorre somente em valores discretos de $V$. Com isto, os valores discretos de $V$ estarão relacionados com as auto-energias do sistema.

## 3.2. Capacitância Geométrica

A capacitância medida com a técnica C-V, $C_M$, pode ser considerada como a soma de uma capacitância geométrica associada ao substrato, $C_{geo}$, com uma capacitância relacionada à densidade de estados, $C_{DOS}$, supondo então, que temos dois capacitores em paralelo[37,38]. Como a $C_{geo}$ está associada aos aspectos geométricos da estrutura, podemos representá-la, a princípio, como um capacitor de placas paralelas, fazendo:

$$C_{geo} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_m A}{d} \qquad \textbf{Equação 22}$$

onde, $\varepsilon_m$ é a constante dielétrica do material, $\varepsilon_0$ é a permissividade do vácuo, $A$ a área da placa do capacitor e $d$ a separação entre a placas.

Para um metal colocado em contato com um semicondutor dopado, temos ao resolver a equação de Poisson que a largura da região de depleção $W'$ é dada por:

$$W' = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r}{qN}\left(\Delta V - \frac{kT}{e}\right)} \qquad \textbf{Equação 23}$$

onde $\varepsilon_r = \varepsilon_0 \varepsilon_m$, $N$ é a concentração de dopantes na região de depleção, $q$ a carga do elétron/buraco e $\Delta V$ o ganho de energia potencial por elétron/buraco transportado através do percurso $W'$[20,21].

Porém, para uma camada não dopada entre o contato metálico e o substrato dopado (estrutura estudada neste trabalho) será necessário fazer uma correção nas Equações 7 e 8. O que fazemos é reduzir a estrutura de multicamadas das amostras (como mostra a Figura 5), a uma estrutura tipo MIS (metal-isolante-semicondutor), onde a parte isolante se refere a camada de 1750Å. Esta camada é formada por: de 250Å de GaAs não dopado; 4 monocamadas de $InAs_{1-X}P_X$; 1000Å de GaAs não dopado e 500Å de InGaP não dopado. A Figura 15 ilustra a estrutura MIS. Na figura $t_T$ é a largura total da região não dopada e $W$ a largura da região de depleção.

**Figura 15 – Estrutura MIS.**

A partir da Figura 15, consideramos que $C_{geo}$ seja o resultado da associação em série de um capacitor com uma separação entre as "placas" igual a $W'(V) = W(V) - t_T$

(que é dependente do potencial aplicado), $C_W$, e um capacitor com separação entre as "placas" igual a $t_T$, $C_T$ (que se refere à região formada pelo material semicondutor não dopado). Logo podemos escrever que:

$$C_{geo}(W') = \frac{C_{W'} \cdot C_T}{C_{W'} + C_T} = \left(\frac{\varepsilon_r A}{t_T}\right)\left(\frac{1}{1 + W'/t_T}\right) \qquad \textbf{Equação 24}$$

onde $W'$ pode ser obtido, a princípio, pela Equação 23. Podemos expandir $C_{geo}(W')$ em uma série de potências, uma vez que tomamos o limite de $T = 0$ (onde $kT/e$ é nulo) e os valores de $N$ [1] tais que para qualquer $\Delta V$, temos $|W'| < |t_T|$ (exigência para convergência da série). Assim, a Equação 24 assume a seguinte forma:

$$C_{geo}(W') = \frac{\varepsilon_r A}{W' + t_T} = \frac{\varepsilon_r A}{t_T} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{W'}{t_T}\right)^n = \frac{\varepsilon_r A}{t_T}\left(1 - \frac{W'}{t_T} + \frac{W'^2}{t_T^2} + \cdots\right) \qquad \textbf{Equação 25}$$

Desprezando os termos de ordem maior e igual a 2 passamos à forma:

$$C_{geo}(W) = \frac{\varepsilon_r A}{t_T}\left(1 - \frac{W'}{t_T}\right) \qquad \textbf{Equação 26}$$

Avaliando a Equação 26, temos que, se a separação $W'$ for nula (quando $N \longrightarrow \infty$), $C_{geo}$ se reduz à capacitância na região não dopada. Assim, voltamos à situação de um capacitor de placas paralelas como apresentada na Equação 22.

---

[1] Para o GaAs:Si a concentração nominal de doadores é de aproximadamente $5 \times 10^{17}\, cm^{-3}$.

## 3.3. Região de Depleção e Barreira Schottky

Para encontrar a dependência da largura da região ausente de cargas livres, $W$, com o potencial $V$ aplicado ao contato metálico (contato Schottky), devemos resolver a equação de Poisson para as condições de contorno da estrutura proposta (Figura 15).

Da equação de Poisson temos:

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\varepsilon_r}$$ **Equação 27**

onde $\rho$ é a densidade de cargas na região $W$. Como o campo elétrico é aplicado na direção z e consideramos como uma aproximação que não há portadores de cargas livres na zona de depleção (aproximação de depleção) após a junção metal-semicondutor ter entrado em equilíbrio termodinâmico (potencial químico do metal igual ao potencial químico do semicondutor), a densidade de cargas nesta região, será fornecida por $\rho = qN$ .

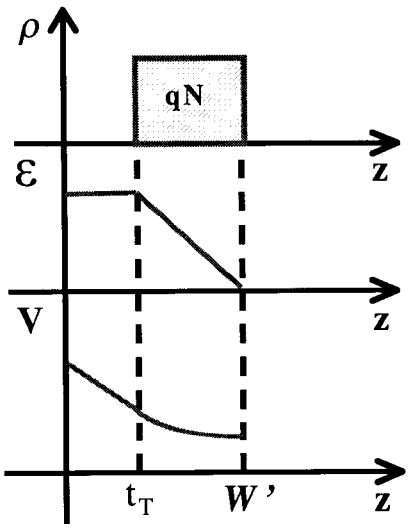
Temos a seguir a equação de Poisson na forma unidimensional:

$$\frac{d^2V}{dz^2} = -\frac{qN}{\varepsilon_r}$$ **Equação 28**

onde $q$ é o módulo da carga e $N$ a densidade de doadores/aceitadores constante (independente de z)[22].

Assumindo a condição de contorno, conforme a Figura 16, obtemos integrando a Equação 28, que:

$$\frac{dV}{dz} = \frac{qN}{\varepsilon_r}(W - t_T - z)$$ **Equação 29**




$$\mathcal{E}(z = t_T) = \mathcal{E}(z = 0)$$
$$\mathcal{E}(z = W') = 0$$
$$\mathcal{E}(z < 0) = 0$$

**Figura 16 - Distribuição espacial de cargas (ρ), evolução do campo elétrico (ℰ) e perfil do potencial aplicado (V). W'- $t_T$ é o intervalo referente a região de depleção.**

Integrando mais uma vez com relação à z e aplicando novamente as condições de contorno segundo a Figura 16, obtemos:

$$\Delta V = \frac{qN}{\varepsilon_r}\left(W^2 - t_T W - \frac{W^2}{2}\right) \qquad \textbf{Equação 30}$$

Manipulando a Equação 30 chegamos à equação do segundo grau:

$$W^2 - 2t_T W - \frac{2\varepsilon_r \Delta V}{qN} = 0 \qquad \textbf{Equação 31}$$

Resolvendo a Equação 31 encontramos a largura da região de depleção em função do potencial quando os portadores de carga são elétrons ($q = e$ e $N = N_D$):

$$W = 2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r \Delta V}{eN_D}} \qquad \textbf{Equação 32}$$

onde $e$ é a carga do elétron e $\Delta V = \phi_B + V - \frac{kT}{e}$, com $\phi_B$ sendo a altura da barreira Schottky e $N_D$ a concentração de doadores. Verificamos que se a largura da região não dopada, $t_T$, for nula, voltamos à Equação 23.

Com o resultado obtido na Equação 32 encontramos que a carga na região dopada, que possui em módulo o mesmo valor da carga depletada, é dada por:

$$Q = eNAW' = eNA(W - t_T) = eNAt_T + eNA\sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r \Delta V}{eN}}$$ **Equação 33**

A capacitância diferencial é definida como:

$$C \equiv \frac{|\partial Q|}{\partial V}$$ **Equação 34**

Assim, podemos obter a relação da capacitância da estrutura como função da variação do potencial aplicado $V$ :

$$C \equiv \frac{|\partial Q|}{\partial V} = \frac{\varepsilon_r A}{2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r \Delta V}{eN_D}}}$$ **Equação 35**

Através do ajuste das curvas C-V com a Equação 35, é possível obter o valor da concentração de doadores, $N_D$, e a altura da barreira Schottky, $\phi_B$.

Também podemos obter o valor da altura da barreira Schottky através das curvas I-V dos dispositivos. Como o diâmetro do capacitor (contato Schottky) é conhecido (300μm), podemos traçar a curva da densidade de corrente como função do potencial aplicado (J-V). A densidade de corrente através de uma junção metal-semicondutor, no regime de emissão termiônica (altas temperaturas e baixas dopagens), é dada pela relação[21]:

$$J = J_S e^{\frac{eV}{nkT}}$$ **Equação 36**

onde $J_S$ é a densidade de saturação e $n$ o fator de idealidade. Quando o semicondutor possui alta dopagem e está a baixas temperaturas, o trasporte de cargas se dá através de tunelamento[21].

Já o valor da altura da barreira Schottky é dado pela relação:

$$\phi_B = \frac{kT}{e}\ln\left(\frac{A^{**}T^2}{J_S}\right) \qquad \textbf{Equação 37}$$

onde $A^{**}$ é conhecida como constante efetiva de Richardson, cujo valor à temperatura ambiente é 120[$AK^2cm^{-2}$][21].

## 3.4. Relação de alavanca

Para que possamos avaliar as propriedades eletrônicas dos pontos quânticos, é necessário determinar como o potencial aplicado varia dentro da estrutura, e mais especificamente, como o potencial varia na região onde se encontram os pontos quânticos. De acordo com a estrutura das amostras, os pontos quânticos, juntamente com a *wetting layer*, estão localizados logo após a barreira de tunelamento, $t_B$=250Å, conforme o diagrama de bandas da estrutura mostrada na Figura 17. No diagrama de bandas, $t_B$ representa a largura da camada de 250Å de GaAs não dopado, $t_{InGaP}$ a distância entre o contato traseiro e a camada de InGaP não dopado, e $t_T$, a largura total da região não dopada.

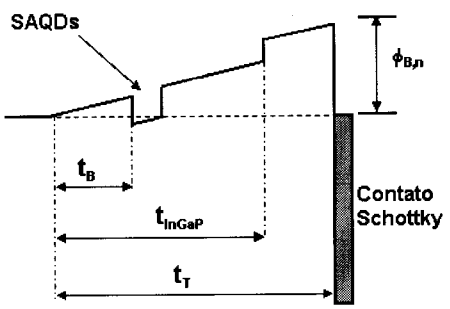



**Figura 17 – Diagrama de bandas das amostras.**

Porém, a largura da região de tunelamento irá variar com o potencial $V$ aplicado ao contato Schottky. Ou seja, a barreira de tunelamento, terá uma largura



IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

efetiva, $t_{tunn} = t_B + W' = t_B + W - t_T$. Com o valor de $W$ obtido pela Equação 32 determinamos que :

$$t_{tunn}(V) = t_B + t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$$ **Equação 38**

O que foi feito para a barreira de tunelamento é também adotado para a largura total da estrutura, $t_T$. Assim, a espessura total efetiva, $t_{tot}$, é igual a:

$$t_{tot}(V) = 2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$$ **Equação 39**

$V_{tunn} = \mu_{QD}$ é o potencial sobre a região onde se encontram os pontos quânticos, e que estão a uma distância igual a $t_{tunn}$ do contato traseiro. $V_{tot}$ é o potencial aplicado sobre toda a extensão $t_{tot}$, e que é determinado pela relação $V_{tot} = V - \phi_B$, onde $V$ é o potencial aplicado entre o contato Schottky e o contato traseiro e $\phi_B$ a altura da barreira Schottky. A partir da relação do campo elétrico, $\varepsilon = -dV/dz$, obtemos que:

$$\int_0^{V_{tunn}} dV = -\varepsilon \int_0^{t_{tunn}} dz \rightarrow V_{tunn} = -\varepsilon\, t_{tunn}$$ **Equação 40**

$$\int_0^{V_{tot}} dV = -\varepsilon \int_0^{t_{tot}} dz \rightarrow V_{tot} = -\varepsilon\, t_{tot}$$ **Equação 41**

Dividindo a Equação 40 pela Equação 41 obtemos a relação de alavanca:

$$V_{tunn} = \frac{t_{tunn}(V)}{t_{tot}(V)}(V_{tot}) = \frac{t_{tunn}(V)}{t_{tot}(V)}(V - \phi_B)$$ **Equação 42**

Na Equação 42, $t_{tunn}(V)$ e $t_{tot}(V)$ são determinados pelas Equações 25 e 26. Em termos do potencial químico dos pontos quânticos ($\mu_{QD}$) temos que:

$$e\mu_{QD} = \frac{t_{tunn}}{t_{tot}} e(V - \phi_B)$$ **Equação 43**

## 3.5. Tunelamento através de uma barreira triangular

Como observado no diagrama de bandas da estrutura apresentado na Figura 13, supõe-se que a barreira de tunelamento, de largura $t_{tunn}$, possa ser aproximada a uma barreira triangular[23]. Para este caso, o coeficiente de tunelamento através da barreira pode ser obtido pela aproximação WKB[21]:

$$P_{tunn}^2 \cong \exp\left[2\int_{z_1}^{z_2} |k(z)| dz\right] \qquad \textbf{Equação 44}$$

Na Equação 44, $|k(z)|$ é o valor absoluto do vetor de onda do elétron, $P_{tunn}$ é o coeficiente de tunelamento e $P_{tunn}^2$ a probabilidade de tunelamento.

O vetor de onda para o elétron na barreira triangular é dado por:

$$k(z) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E_B)} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E_t - E(z))} \qquad \textbf{Equação 45}$$

onde $E_t$ é a energia referente a altura da barreira de tunelamento e $E(z) = e\varepsilon(t_{tunn} - z)$ é a energia do do elétron, com $\varepsilon$ sendo o campo elétrico constante. A Figura 14 mostra o esquema da barreira de tunelamento triangular.

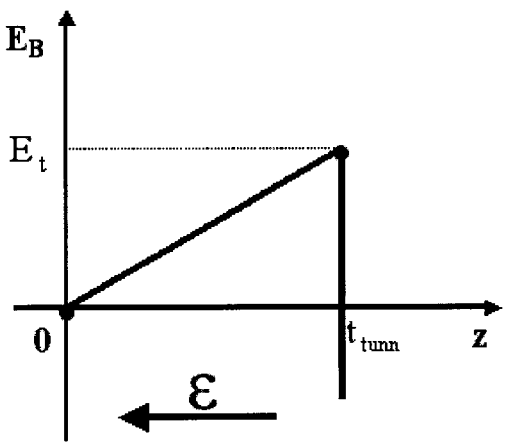



**Figura 14 - Barreira de tunelamento triangular.**

Inserindo a Equação 45 na Equação 44 e integrando no intervalo de $z = 0$ a $z = t_{tunn}$ obtemos:

$$P_{tunn}^2 \cong \exp\left[\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}}\left(\frac{1}{q\mathcal{E}}\right)(E_t - E(z))^{\frac{3}{2}}\right]_0^{t_{tunn}}$$ **Equação 46**

De acordo com as condições de contorno do problema, apresentadas na Figura 14 temos:

a) $z = t_{tunn}(V) \quad \rightarrow \quad E(t_{tunn}) = e\mathcal{E}(t_{tunn} - t_{tunn}) = 0$ e $E_B = E_t$,

b) $z = 0 \quad \rightarrow \quad E(0) = e\mathcal{E}\,(t_{tunn}(V)) = E_t$ e $E_B = 0$

Assim, temos que o coeficiente de tunelamento é dado por:

$$P_{tunn} \cong \exp\left[-\frac{2}{3}(t_{tunn}(V))\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E_t(V))}\right]$$ **Equação 47**

onde $t_{tunn}$ é dado pela Equação 44. Assim, com a Equação 47 podemos obter a probabilidade de tunelamento do portador de carga através da barreira triangular. Avaliando a equação, confirmamos que se o valor da altura da barreira, $E_t$, tender ao infinito, a probabilidade de tunelamento tenderá a zero.

## 3.6. Resposta em freqüência

A resposta em freqüência das estruturas com os pontos quânticos e o evento de tunelamento através da barreira, $t_{tunn}$, estão relacionados intimamente. De acordo com a Equação 47, o coeficiente de transmissão está relacionado exponencialmente com a altura da barreira de tunelamento. Assim espera-se que quanto menor a altura da barreira, mais alta poderá ser a taxa de transferência de elétrons por tempo.

Consideramos o potencial aplicado ao contato Schottky como sendo composto de uma componente contínua e outra alternada ($V = V_{CC} + V_{pico}\cos(\omega t)$). Desta forma, variando $V_{CC}$, varremos todos os estados abaixo do fundo da banda de condução do material da barreira de tunelamento. A componente alternada do sinal aplicado faz com que o quase nível de Fermi varie em torno de $V_{CC}$, carregando os estados disponíveis de acordo com as características da estrutura.

A freqüência de pico do sistema, $\omega_p$, é aquela onde metade dos elétrons tunelam para dentro dos pontos quânticos através da barreira, quando consideramos um do ciclo do sinal alternado. A freqüência de pico é definida por[24]:

**Equação 48**

$$\omega_p = \frac{1}{C_{tunn} R_{tunn}}$$

Em altas freqüências ($\omega >> \omega_p$) não há tunelamento dentro de um ciclo do sinal ac e os níveis eletrônicos abaixo do quase nível de Fermi permanecem ocupados durante este ciclo. Por isso o tunelamento ocorre exclusivamente devido a componente dc do sinal aplicado.[24]

A Figura 15 mostra em a), o diagrama de bandas das estruturas estudadas, em b) o circuito equivalente para baixas freqüências (quando há tunelamento) e na seqüência, em c), o circuito equivalente para altas freqüências (onde o tunelamento não se dá dentro de um ciclo do sinal ac, e apenas ocorre devido à mudança em $V_{CC}$).

Em freqüências próximas a zero, o circuito equivalente é reduzido a um capacitor ,$C_{low}$, em série com o resistor $R_{tunn}$. Isto porque a reatância capacitiva, $X_{tunn} = 1/\omega C_{tunn}$, irá crescer de forma que $R_{tunn} << X_{tunn}$. Já em altas freqüências o circuito equivalente se reduz à associação em série do capacitor, $C_{low}$, que representa a capacitância em baixa freqüência, com o capacitor $C_{tunn}$.

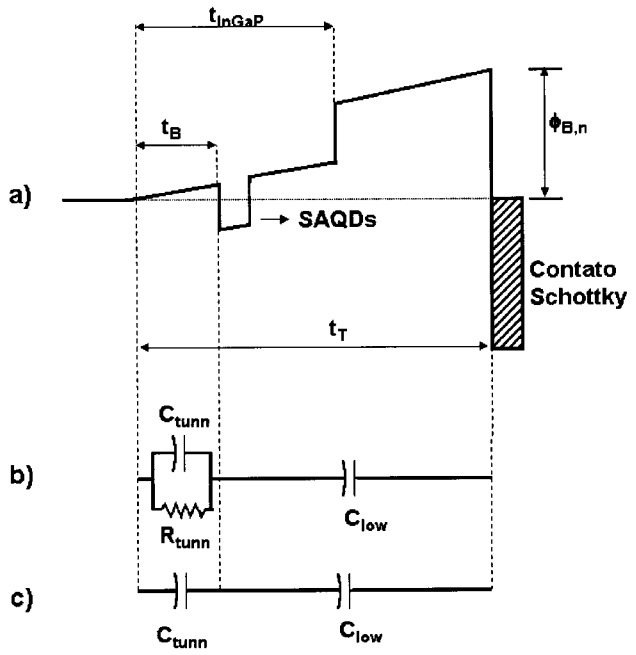



**Figura 15 –a) Diagrama de bandas para as estruturas estudadas, b) circuito equivalente para baixas freqüências e c) circuito equivalente para altas freqüências.**

Considerando que $V_{tunn}$ seja o potencial sobre a região de tunelamento, e que seja obtido através da relação de alavanca, logo podemos obter que:

$$I_{tunn} = \frac{V_{tunn}}{R_{tunn}} = \omega_p C_{tunn} V_{tunn} = \frac{\omega_p Q_{QD}}{2}$$ **Equação 49**

onde $I_{tunn}$ é a corrente de tunelamento e $Q_{QD}$ a carga armazenada nos pontos quânticos. A corrente de tunelamento $I_{tunn}$ é a quantidade de carga que atravessa a

barreira em um determinado período. $I_{tunn}$ é a taxa de transferência de metade dos portadores armazenados nos pontos quânticos. Como o coeficiente de transmissão do elétron está diretamente relacionado com a taxa de transferência de carga, então $I_{tunn} \propto P_{tunn}$. Com isto, concluímos que o coeficiente de transmissão de um portador de carga através da barreira de tunelamento, obtido por meio da aproximação WKB para um poço triangular, é proporcional à freqüência do sinal ac:

$$\omega_p \propto P_{tunn} = \exp\left[-\frac{2}{3}(t_{tunn}(V))\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E_t(V))}\right] \qquad \textbf{Equação 50}$$

Com a Equação 50 podemos relacionar a freqüência de pico com a altura da barreira de tunelamento. Esta análise será muito útil para avaliarmos a massa efetiva dos portadores de carga através da barreira de tunelamento nas estruturas em estudo.

Partimos neste instante para a determinação da capacitância equivalente $C_{eq}$, apresentada no circuito b) da Figura 15, como função da freqüência, $\omega$, do sinal alternado aplicado. Em termos das impedâncias associadas a este circuito temos que:

$$Z_{BF} = -jX_{low} + \frac{-jR_{tunn}X_{tunn}}{R_{tunn} - jX_{tunn}} \qquad \textbf{Equação 51}$$

onde $Z_{BF}$ é a impedância do circuito em baixa freqüência, $X_{tunn}$ a reatância associada à capacitância da região de tunelamento e $X_{low}$ a associada à capacitância $C_{low}$, com $X_{low} = 1/\omega C_{low}$. Manipulando a Equação 51 obtemos:

$$Z_{BF} = \frac{R_{tunn}X_{tunn}^2 - j(R_{tunn}^2 X_{low} + R_{tunn}^2 X_{tunn} + X_{low}X_{tunn}^2)}{R_{tunn}^2 + X_{tunn}^2} \qquad \textbf{Equação 52}$$

Da expressão complexa da Equação 52 obtemos as partes real e imaginária, que são, respectivamente:

$$\frac{1}{\omega C_{eq}(\omega)} = \mathrm{Im}(Z_{BF}) = \frac{R_{tunn}^2 X_{low} + R_{tunn}^2 X_{tunn} + X_{low} X_{tunn}^2}{R_{tunn}^2 + X_{tunn}^2}$$ **Equação 53**

$$\frac{1}{G_{eq}(\omega)} = \mathrm{Re}(Z_{BF}) = \frac{R_{tunn} X_{tunn}^2}{R_{tunn}^2 + X_{tunn}^2}$$ **Equação 54**

Simplificando a Equação 53 temos que:

$$\frac{1}{\omega C_{eq}(\omega)} = X_{low} + \frac{X_{tunn}}{1 + \frac{X_{tunn}^2}{R_{tunn}^2}} = X_{low} + \frac{X_{tunn}}{1 + \frac{1}{\omega^2 R_{tunn}^2 C_{tunn}^2}}$$ **Equação 55**

Uma vez que $X_{tunn} = 1/\omega C_{tunn}$ e $\omega_p = 1/C_{tunn} R_{tunn}$, podemos reescrever a Equação 55 como:

$$\frac{1}{\omega C_{eq}(\omega)} = X_{low} + \frac{X_{tunn}}{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$ **Equação 56**

Do circuito c) na Figura 15 extraímos que:

$$X_{high} = X_{low} + X_{tunn} \Rightarrow X_{tunn} = X_{high} - X_{low}$$ **Equação 57**

onde $X_{high}$ é a reatância capacitiva relativa à capacitância equivalente em alta freqüência, $X_{high} = 1/\omega C_{high}$, resultado da associação em séria do capacitor $C_{low}$ ao $C_{tunn}$.

Inserindo a Equação 57 na Equação 56 teremos:

$$\frac{1}{\omega C_{eq}(\omega)} = X_{low} + \frac{X_{high} - X_{low}}{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$ **Equação 58**

Substituindo os valores das reatâncias pelos respectivos valores de capacitância, temos:

$$\frac{1}{\omega C_{eq}(\omega)} = \frac{1}{\omega C_{low}} + \left( \frac{1}{\omega C_{high}} - \frac{1}{\omega C_{low}} \right) \left( \frac{1}{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \right)$$ **Equação 59**

Reorganizando os termos, obtemos:

$$C_{eq}(\omega) = \frac{C_{high} C_{low} \left( 1 + \frac{\omega^2}{\omega_p^2} \right)}{C_{high} + C_{low} \left( \frac{\omega^2}{\omega_p^2} \right)}$$ **Equação 60**

Já da parte real, conforme a Equação 54, temos [24]:

$$\frac{G_{eq}(\omega)}{\omega} = 2\sqrt{C_{high} C_{low}} \frac{(C_{low} - C_{high}) \left( \frac{\omega}{\omega_p} \right)}{C_{high} + C_{low} \left( \frac{\omega}{\omega_p} \right)^2}$$ **Equação 61**

Assim, de acordo com as Equações 45 e 46, concluímos que se aumentarmos a freqüência, teremos uma redução no valor da capacitância.

## 3.7. Capacitância e a Densidade de Estados (DOS)

Uma vez que o sistema se encontra no equilíbrio termodinâmico, $E_F = \mu_R = \mu_{QD}$, e se a temperatura for $T = 0$, podemos relacionar a densidade de estados $D(\mu) = dn/d\mu$, onde $n$ é a densidade de partículas e $\mu$ o potencial químico, com a densidade de estados para os portadores de carga nos pontos quânticos $D_Q(\mu)$:

$$D(\mu) = D(E_F) = D_Q(E_F) = D_Q(\mu_{QD})$$ **Equação 62**

Assim, a relação entre a capacitância e a densidade de estados para o sistema com pontos quânticos, será dada por[37]:

$$C_{DOS} = \frac{dQ}{dV} = q\frac{dn}{d\mu}\frac{d\mu}{dV} = q\frac{dn}{d\mu}\frac{t_{tunn}}{t_{tot}} \propto D_Q(\mu_{QD})$$ **Equação 63**

A Equação 63 mostra uma relação utilizada para uma análise qualitativa da densidade de estados do sistema com pontos quânticos.

Quantitativamente, a densidade de estados é dada por[24]:

$$D_Q(\mu_{QD}) = \frac{C_{tunn}}{Ae^2}\left(\frac{C_{low}}{C_{high}} - 1\right)\left[1 + C_{low}\left(\frac{1}{C_{tunn}} - \frac{1}{C_{high}}\right)\right]^{-1}$$ **Equação 64**

onde $C_{tunn} = \varepsilon_r A / t_{tunn}$, com $A$ sendo a área do dispositivo e $t_{tunn}$ o valor fornecido pela Equação 38.

## 3.8. Níveis eletrônicos em Pontos Quânticos

O estudo das propriedades eletrônicas dos pontos quânticos pode ser feito assumindo um confinamento parabólico no plano xy.[25,26]

O movimento de um elétron sujeito a um potencial parabólico, devido ao confinamento lateral, e com campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano deste confinamento é descrido pela seguinte Hamiltoniana [27,28]:

$$H = \frac{1}{2m^*}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2m^*}\left(\omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2\right)\left(x^2 + y^2\right) - \frac{1}{2}\omega_c\left(xp_y - yp_x\right)$$ **Equação 65**

onde $m^*$ é a massa efetiva, $x$ e $y$ as posições, $p_x$ e $p_y$ os momentos, $xp_y - yp_x$ é a projeção do momento angular sobre a direção do campo magnético, $\omega_0$ a freqüência natural do sistema ou, a freqüência de ressonância do potencial de confinamento, e $\omega_c = eB/m^*$ a freqüência ciclotrônica. Os autoestados desta Hamiltoniana e suas respectivas energias são determinados resolvendo a equação de Schröedinger em coordenadas cilíndricas ($\vec{r},\theta$), com $\left|\vec{r}\right| = \sqrt{x^2 + y^2}$. Esta solução é possível uma vez que a simetria circular do problema permite a separação das variáveis na equação de Schröedinger. A solução da equação de Schröedinger, envolvendo os polinômios de Laguerre, foi obtida por Fock e Darwin[27,28] em 1928 e 1930, respectivamente. A função de onda do elétron pode ser escrita como:

$$\Phi_{nm}\left(\vec{r},\theta\right) = \phi_m(\theta) R_{nm}\left(\vec{r}\right)$$ **Equação 66**

Na Equação 66, $n = 0, 1, \ldots$ e $m = -n, -n+2, \ldots, n-2, n$ são os números quânticos principal e azimutal, respectivamente. Desta forma, a energia para o confinamento lateral ($x$, $y$), obtidas com os números quânticos ($n, m$) são[29]:

$$E_{n,m}(\omega_c) = (n+1)\hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} - m\frac{\omega_c}{2}$$ **Equação 67**

Onde $n = 2n_r + |m|$, e $n_r$ é o número quântico radial. Para o estado fundamental, onde valores de $n_r$ e $m$ são nulos($E_{0,0}$), e para campo magnético igual a zero, temos a energia do estado fundamental para caso do potencial parabólico[30,31]:

$$E_{0,0} = \hbar\omega_0 \cong \left(\frac{\hbar}{l_0 m^*}\right)^2$$ **Equação 68**

onde $l_0$ é o comprimento característico da função de onda e $m^*$ a massa efetiva do portador de carga. A função de onda do elétron no estado fundamental do ponto quântico é dada por:

$$R_{0,0} = e^{-\left(\frac{r^2}{2b^2}\right)}$$ **Equação 69**

onde $b = \left(\frac{\hbar}{m^*}\right)\frac{1}{\sqrt{\omega_C^2 + \omega_0^2}}$ e $r$ é a coordenada radial.[27] Tanto $b$ quanto $r$ possuem unidades de comprimento. Assim, a Equação 68 pode nos fornecer o comprimento característico da função de onda do ponto quântico a partir do momento que obtemos a freqüência natural do sistema $\omega_0$.

A energia total de confinamento para um elétron no ponto quântico será dada por:

$$E_T(\omega_c) = E_z + E_{n,m}(\omega_c)$$ **Equação 70**

Com $E_z$ sendo a energia de confinamento da direção $z$. Logo :

$$E_T(\omega_c) = E_z + (2n_r + |m| + 1)\hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} - m\hbar\frac{\omega_c}{2}$$ **Equação 71**

## 3.9. Energia de Bloqueio Coulombiano

No item 3.8 trabalhamos com o caso de um elétron confinado lateralmente, na presença de um campo magnético perpendicular ao plano de confinamento. Por fim levamos em conta a energia de confinamento na direção $z$. Porém, nada foi falado da interação coulombiana existente quando outros elétrons são colocados nos níveis eletrônicos à medida que o potencial químico do ponto quântico, $\mu_{QD}$, é elevado. Em espectroscopia de capacitância, $\mu_{QD}$ é alterado à medida que o potencial externo aplicado ao contato Schottky varia.

Devemos levar em consideração o efeito da interação coulombiana entre os elétrons à medida que se preenchem estes níveis eletrônicos. Ou seja, deveremos incluir na Hamiltoniana da Equação 65 um termo referente à interação Coulombiana.

A energia de interação entre dois elétrons em um mesmo nível é dada por[32]:

$$E_{CB} = \frac{e^2}{2C_{QD}} \qquad \textbf{Equação 72}$$

onde $C_{QD} = 2\pi\varepsilon_r R$ é a auto-capacitância do ponto quântico e $R$ o raio do ponto quântico. Assim, para inserir um outro elétron no mesmo nível será necessário aumentar o potencial químico $\mu_{QD}$ em um valor discreto e igual a $E_{CB}$. Este efeito é conhecido como Bloqueio Coulombiano (*Coulomb Blockade*). A energia de Bloqueio Coulombiano depende do número de elétrons segundo a relação[33]:

$$E_{CB,i} = \frac{e^2}{2C_{QD}} n_i (n_i - 1) \qquad \textbf{Equação 73}$$

onde $n_i$ é o número de elétrons no nível $i$. Analisando a Equação 72, concluímos que quanto maior o confinamento lateral, maior será a interação

coulombiana e conseqüentemente a energia de Bloqueio Coulombiano. Isto pode ser visto quando rescrevemos a energia Bloqueio Coulombiano ($E_{CB}$) como função de $\hbar\omega_0$:

$$E_{CB} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_r}\sqrt{\frac{m^*\omega_0}{\hbar}}.$$

Da mesma forma que a Hamiltoniana da Equação 65 deve levar em consideração o efeito de Bloqueio Coulombiano , assim também será com a Equação 71, que passará a ter a mais um termo relativo aos efeitos eletrostáticos. Com isto:

$$E_T(\omega_c) = E_z + E_{n,m}(\omega_c) + E_{CB,i}$$ **Equação 74**

# 4. Aspectos Experimentais

## 4.1. Estrutura das Amostras

As amostras estudadas contêm SAQDs de InAs, InAsP e InP enterrados em GaAs. A Tabela 1 destaca os principais parâmetros utilizados no crescimento destes pontos quânticos.

| SAQDs | Amostra | Fluxo de Índio (sccm) | Fluxo de Arsina (sccm) | Fluxo de Fosfina (sccm) | Tempo (s) | Taxa de Crescimento (ML/s) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| InAs | 273 | 100 | 0,8 | - | 16 | 0,2 |
| | 274 | 50 | 0,8 | - | 34 | 0,1 |
| InAsP | 270 | 200 | 0,8 | 5 | 10 | 0,4 |
| | 271 | 100 | 0,8 | 10 | 20 | 0,2 |
| InP | 268 | 100 | - | 10 | 20 | 0,2 |

**Tabela 1 - Principais parâmetros utilizados no crescimento dos SAQDs de InAs, InAsP e InP.**

A estrutura básica para as medidas C-V, bem como o diagrama de bandas das amostras podem ser vistos na Figura 16.

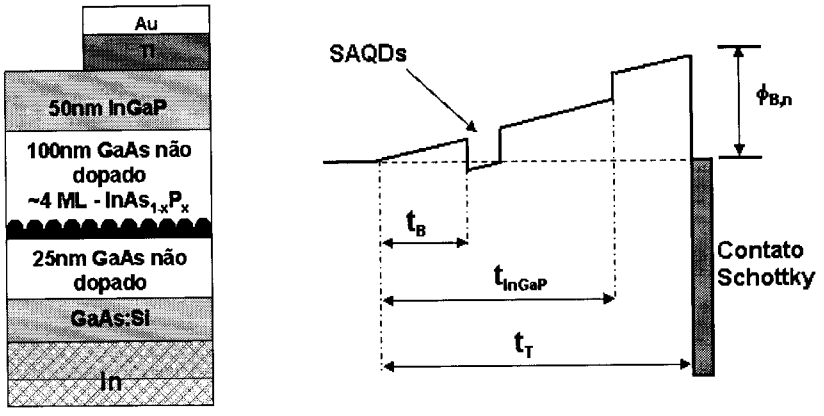



**Figura 16 – À esquerda, a estrutura do dispositivo. À direita o diagrama de bandas da estrutura.**

As bandas de condução (BC) e de valência (BV) podem possuir alinhamento do tipo I ou do tipo II. A Figura 17 explica a diferença entre os dois tipos. Medidas de PL têm sugerido um alinhamento entre a BV e BC como sendo do tipo II para as amostras com pontos quânticos de InP[34].

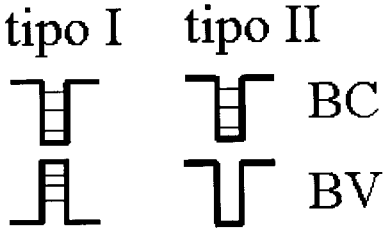



**Figura 17 - Tipos de alinhamento entre a banda de condução (BC) e a banda de valência (BV).**

## 4.2. Características dos Dispositivos.

Os dispositivos com a estrutura básica para a espectroscopia de capacitância foram processados por fotolitografia. A estrutura do dispositivo consiste de um contato Schottky de Titânio com 300μm de diâmetro e 800Å de espessura, depositado por *Sputtering* sobre a superfície, e um contato ôhmico de Índio, difundido a 380°C durante 60" sobre o substrato de GaAs:Si. Sobre o contato de Titânio foi depositada uma camada de ouro com 2000Å de espessura com o objetivo de facilitar a conexão dos

contatos elétricos. A Figura 16 mostra a estrutura básica dos dispositivos fabricados para a caracterização por espectroscopia de capacitância.

As amostras foram montadas sobre suportes específicos para dispositivos eletrônicos. Para a ligação elétrica entre os pinos do suporte e os contatos Schottky utilizou-se fios de ouro com 50μm de diâmetro. Para o contato fio-pino utilizou-se cola prata e para o contato fio-contato Schottky, epóxi condutora a base de prata. Os detalhes desta montagem podem ser vistos nas Figura 18.

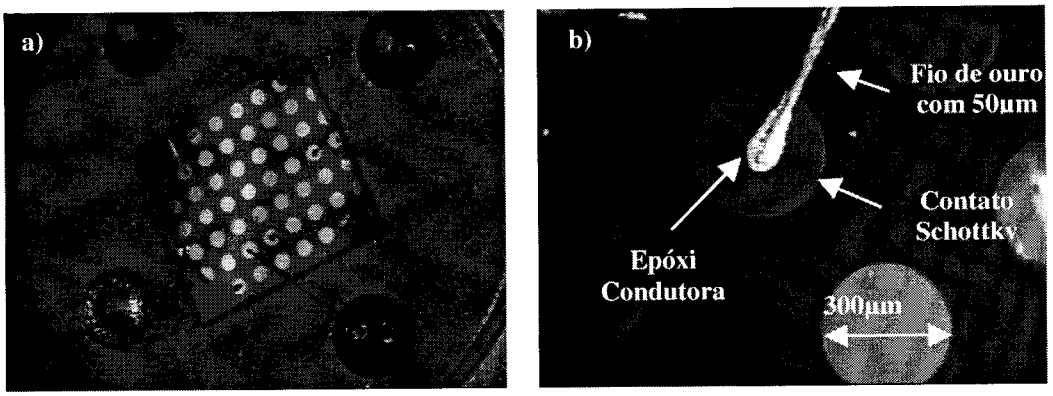



**Figura 18 - a) Amostra do tipo n montada sobre o suporte. A amostra foi colada sobre o suporte com cola prata. b) Detalhe do contato Schottky com o fio de ouro preso utilizando epóxi condutora a base de prata.**

Para as medidas de magneto-capacitância, as amostra foram remontadas sobre um suporte não metálico.

## 4.3. Forno para difusão

Para que a etapa de fabricação dos dispositivos se tornasse possível, foi necessário construir um forno para a difusão dos contatos ôhmicos. O desenho da Figura 19 permite a visualização deste equipamento (a figura é apenas ilustrativa). Este forno foi construído com a intenção de se obter uma região para aquecimento das amostras sem a presença de $O_2$, limpa (livre de partículas e gordura) e com uma rampa de subida da temperatura a mais acentuada possível. Para atender as primeiras exigências (limpeza

e ausência de $O_2$), optou-se pelo uso de um tubo de quartzo, onde um fluxo contínuo de $N_2$ é mantido.

Para obter uma rampa de subida de temperatura com elevada inclinação, duas lâmpadas de 1000W foram instaladas de modo a aquecer a amostra por radiação. Inserindo a amostra em uma cápsula de grafite, obtêm-se um gradiente de temperatura pequeno ao longo da mesma e permite um controle da temperatura na amostra com boa precisão (<1°C). O resfriamento do sistema é obtido aumentando o fluxo de $N_2$ dentro do tubo de quartzo e fazendo circular água por uma serpentina instalada na parte externa à carcaça do forno. Para aumentar a eficiência do forno, ou seja, para fazer com que o máximo da potência irradiada pelas lâmpadas esteja concentrado sobre a cápsula de grafite, uma placa de aço inox especular, com um filme de aproximadamente 1200Å de ouro, foi instalada nas paredes internas da carcaça do formo, de modo a refletir os comprimentos de onda na região do infravermelho.

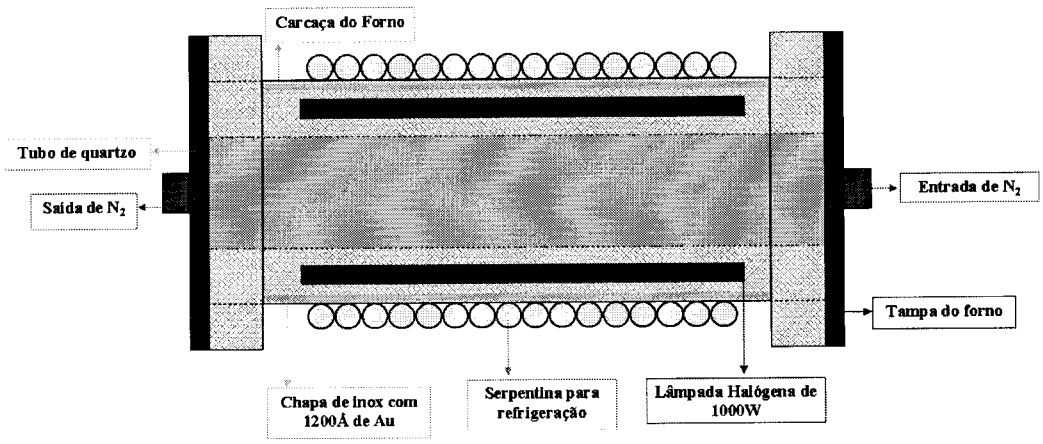



**Figura 19 - Desenho ilustrando os principais elementos do forno construído.**

O controle da temperatura é feito variando a potência emitida pelas lâmpadas. Para isto, um controlador de temperatura foi ligado a um controlador de potência. A medida de temperatura é feita diretamente por um termopar conectado à cápsula de

grafite. O tempo de difusão é programado e controlado por um temporizador. O diagrama esquemático da Figura 20 ilustra o sistema de controle.

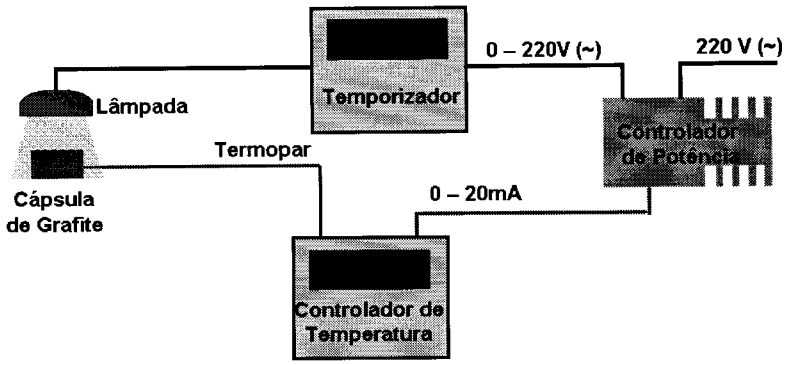



**Figura 20 - Sistema de controle de temperatura utilizado no forno.**

O controlador de temperatura trabalha com um algoritmo PID (proporcional-integral-derivativo). Seus parâmetros foram ajustados de modo que a curva de temperatura em função do tempo assumisse a forma exibida na Figura 21. Observando o gráfico da Figura 21, vemos que o forno atinge a temperatura de 450°C em aproximadamente 25". Este valor é considerado bom pois os tempos utilizados para a difusão dos contatos ôhmicos variam de 1'30" a 3'.

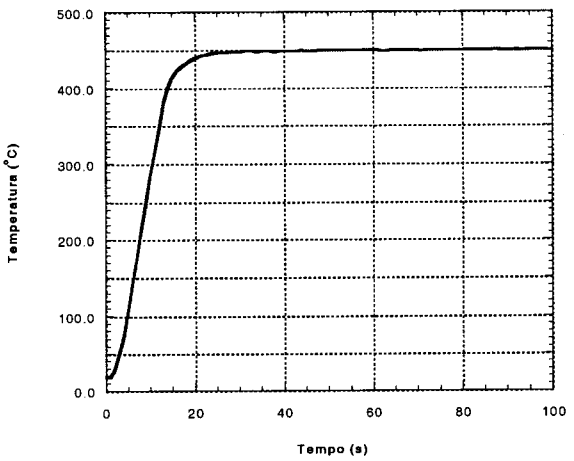



**Figura 21 - Curva da Temperatura em função do tempo, obtida no forno para difusão dos contatos ôhmicos. O *setpoint* da temperatura ajustado foi 450°C.**

## 4.4. Sistema de Medidas

A montagem experimental para as medidas de capacitância em *ensembles* de ilhas e a baixas freqüências (até 50kHz) está apresentada na Figura 22, e para as medidas em altas freqüências (acima de 50kHz) na Figura 23. Note que nas medidas em baixa freqüência o amplificador *lock-in* mede a corrente capacitiva ($I_C$) e a corrente resistiva ($I_G$) através da amostra (aqui o amplificador de corrente responde bem até 50kHz). Já nas medidas em alta freqüência, o amplificador *lock-in* irá medir a tensão capacitiva ($RI_C$) e a tensão resistiva ($RI_G$) sobre o resistor $R$ (uma vez que o amplificador de corrente não responde bem em freqüências superiores a 50kHz). O resistor $R$ é utilizado para casar a impedância do circuito com a da entrada do *lock-in* de RF.

O sinal ac de baixa freqüência é somado ao sinal dc por meio do circuito esquematizado na Figura 24a, enquanto que para sinais de alta freqüência utilizou-se o circuito da Figura 24b. Variando a tensão dc podemos mudar o nível de Fermi através do *gap* do material, varrendo os níveis quantizados dos SAQDs. A tensão ac oscila em torno da tensão dc, proporcionando a transferência de cargas quando houver a igualdade entre o potencial químico dos pontos quânticos com o do substrato, e quando o sistema estiver em ressonância. Para que seja possível resolver os estados dos SAQDs, a amplitude do sinal ac, convertida em energia, deverá ser menor que a separação entre os estados.

As amostras foram medidas a 12K e 4,2K, variando a freqüência e o campo magnético.

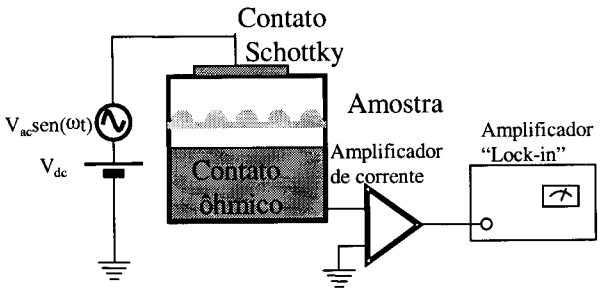



**Figura 22 - Montagem experimental utilizada para a espectroscopia de capacitância em baixas freqüências (até 15kHz).**

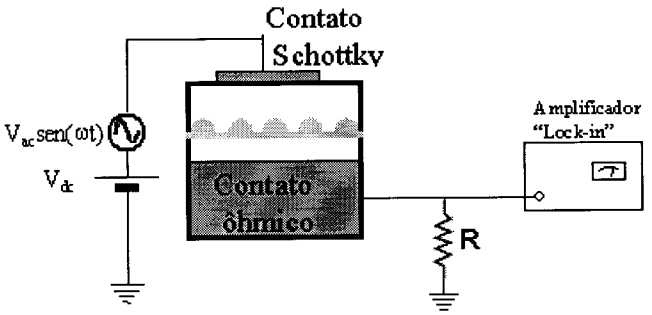



**Figura 23 -Montagem experimental utilizada para a espectroscopia de capacitância em altas freqüências (acima de 15kHz). O valor de R é 50Ω.**

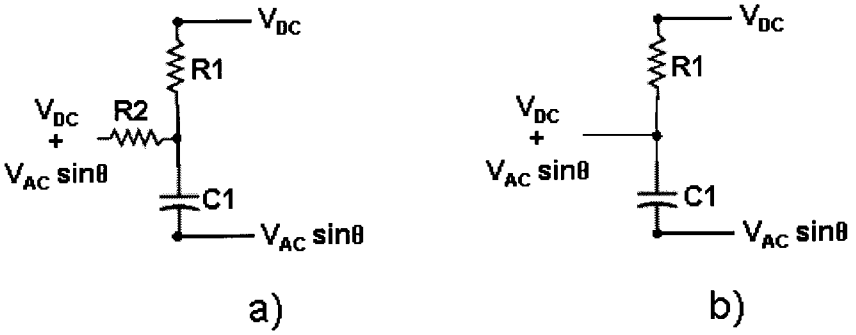



**Figura 24 - Circuito utilizado para somar o sinal ac de a)baixa freqüência e b)alta freqüência, à tensão dc variável.**

# 5. Resultados e Discussão

Neste capítulo, inicialmente serão apresentados os resultados de fotoluminescência (PL) e das medidas I-V. para todas as amostras. As medidas de PL fornecem simultaneamente o confinamento lateral e em z, e as medidas I-V fornece o valor de $\phi_B$, fundamental na determinação dos níveis de energia (ver Equação 43). A determinação do nível de dopagem do contato traseiro, utilizada na avaliação precisa da relação de alavanca, poderá ser obtida através da tensão reserva elevada aplicada ao dispositivo que depopula os estados dos pontos quânticos. Por fim, serão apresentados e discutidos os resultados das medidas de capacitância e sua dependência com a freqüência e com o campo magnético. No decorrer da discussão os resultados de C-V serão comparados com as medidas de TEM e PL.

## 5.1. Medidas de Fotoluminescência

Estas medidas foram feitas a 77K (nitrogênio líquido), utilizando como fonte de excitação um laser de Ar+ com comprimento de onda de 5145Å. O sinal de PL emitido foi coletado por um detector de Ge. A Figura 25 mostra as curvas de fotoluminescência (PL) nas amostras com SAQDs de InAs, InAsP e InP. A Tabela 2 resume os dados obtidos através das medidas de PL.

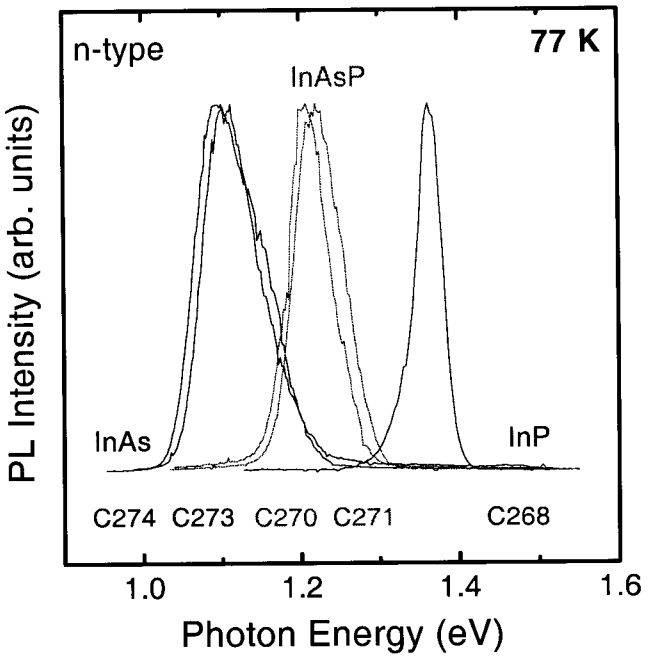



**Figura 25 - Espectros de PL feitos a 77K. Espectros obtidos nas amostras com SAQDs de InAs, InAsP e InP.**

Como a energia de PL para os SAQDs da amostra 273 é maior que as obtidas para os SAQDs da amostras 274, é possível que o confinamento dos estados na 273 é menor que na 274. Isto é um indicativo da tendência dos pontos quânticos de InAs formados na amostra 273 possuírem um diâmetro menor que os da amostra 274. Esta afirmação terá condição de ser avaliada com mais detalhe através das medidas de capacitância. Observamos ainda um pequeno deslocamento da cauda direita da linha de PL no sentido das mais altas energias, indicando que os estados excitados estão começando a ser populados.

O espectro de PL obtido para a amostra 268, com dependência da potência do *laser* aplicado sobre a amostra, pode ser visto na Figura 26. O pico utilizado para a amostra de InP na Figura 25 foi o obtido a mais baixa potência do *laser* aplicado.

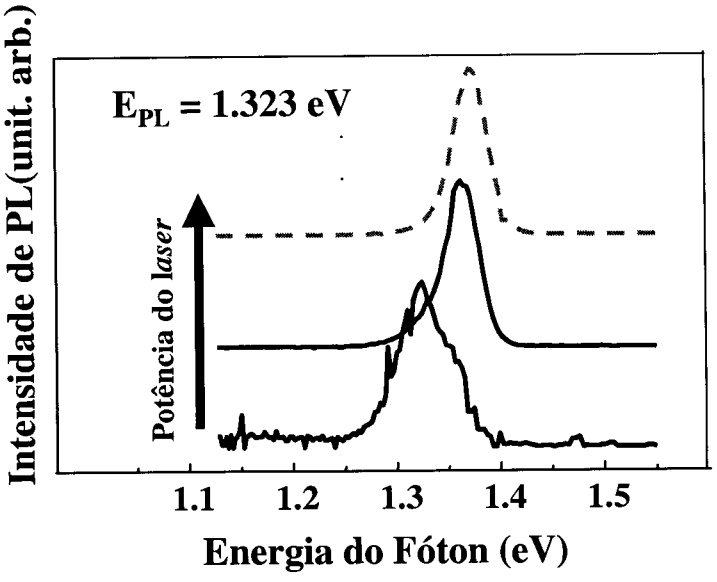



**Figura 26 - Espectros de PL feitos a 77K na amostra 268. A seta indica a sentido de aumento da potência do *laser* aplicado sobre a amostra.**

Na figura acima, a seta indica o sentido de crescimento da potência aplicada pelo *laser* sobre a amostra. Segundo a referência, o deslocamento da posição do pico no sentido das mais altas energias indica que o alinhamento entre a banda de valência e a banda de condução para os SAQDs de InP é do tipo II[35].

| | 273(InAs) | 274(InAs) | 270(InAsP) | 271(InAsP) | 268(InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $E_{PL}$(eV) | 1,195 | 1,095 | 1,207 | 1,217 | 1,323 |
| $\Delta L_{PL}$ (meV) | 73,1 | 73,6 | 66,5 | 54,5 | 62,6 |

**Tabela 2 – Energia dos picos de PL, $E_{PL}$, e largura de linha para as amostras de InAs (273 e 274), InAsP (270 e 271) e InP (268).**

A Figura 27 apresenta um gráfico das posições dos picos de PL em função da taxa de crescimento e com dependência do fluxo de $PH_3$ utilizado durante o crescimento por MOCVD[34]. As amostras utilizadas neste trabalho se encontram entre as analisadas no gráfico (as caixas em cinza marcam quais são elas).

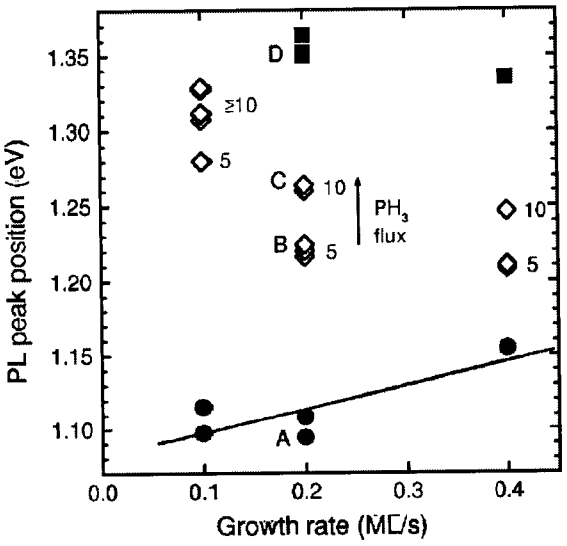



**Figura 27 – Posição dos picos de PL em função da taxa de crescimento e com dependência com o fluxo de $PH_3$ utilizado durante o crescimento por MOCVD. Os círculos representam as amostras de InAs, os losangos as amostras de InAsP e os quadrados as amostras de InP. A seta indica o sentido do aumento do fluxo de $PH_3$[34].**

Segundo a figura acima, com o aumento do fluxo de $PH_3$ à taxa de 0,2ML/s, observamos o deslocamento dos picos de PL para valores de mais alta energia. Porém, com o aumento da incorporação de fósforo pelos pontos quânticos de InAs, é esperado que devido à redução do descasamento do parâmetro de rede (de 7% - InAs para 3,8% - InP), os pontos quânticos sejam maiores. Para uma composição fixa, pontos quânticos maiores implicam em um deslocamento dos picos de PL no sentido dos valores de mais baixa energia. Em contrapartida também temos que em um material *bulk* o aumento da incorporação de fósforo implica no aumento da energia de gap (à 0K de 0,42 eV – InAs para 1,42 eV - InP) fazendo com que o pico de PL tenda a deslocar-se no sentido dos valores de mais alta energia. A partir dos dados de PL é impossível separar os efeitos de tamanho (lateral e vertical) e composição. Por isto ela poderá ser mais bem discutida através da espectroscopia de capacitância, quando separarmos os efeitos de confinamento lateral e em z. Isto porque as informações de PL fornecem apenas a transição entre o nível de elétrons, $E_0$, e o nível de buracos, $H_0$.

## 5.2. Medidas I-V

A Tabela 3 mostra os valores de $\phi_B$, obtidos pelas curvas I-V das amostras, medidas a 292K. O valor de $\phi_B$, para a amostra 274, foi calculado através da curva I-V da Figura 28. A mesma análise feita para a amostra 274 foi repetida para as demais amostras. Como conhecemos a área do contato Schottky, logo podemos determinar a densidade de corrente, $J$, através do contato. Fazendo o ajuste da curva J-V mostrada na Figura 28 com a Equação 36, $J = J_S e^{\frac{eV}{nkT}}$, obtemos os valores de $J_S \cong 2{,}02x10^{-9}\,\mathrm{Acm}^{-2}$ e $e/_{nkT} = 34{,}6\ \mathrm{V}^{-1}$. Assim, através da Equação 37, $\phi_B = \frac{kT}{e}\ln\left(\frac{A^{**}T^2}{J_S}\right)$, calculamos o valor de $\phi_B$. Vemos que os valores de $\phi_B$ encontrados à temperatura de 292K independe da amostra, porém não serão utilizados pois as medidas de capacitância foram feitas a 4,2K.

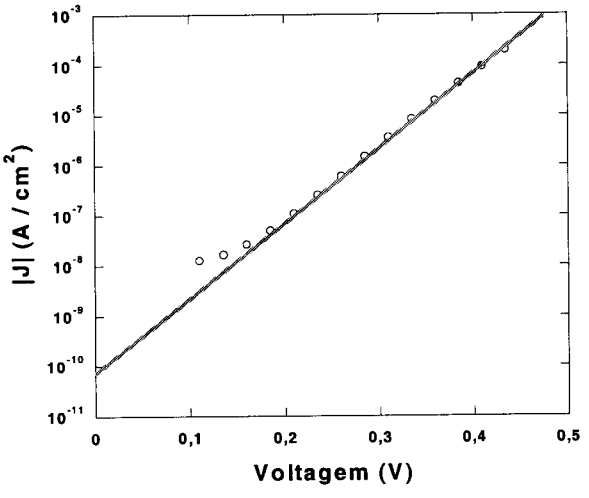



**Figura 28 - Curva J-V, à 292K, com ajuste exponencial para a amostra 274**

| Amostra | Área do Contato Schottky | Valor de $\phi_B$ através de I-V |
|---|---|---|
| 274 | $7{,}7\times10^{-4}cm^2$ | $0{,}90\,eV$ |
| 273 | $6{,}7\times10^{-4}cm^2$ | $0{,}91eV$ |
| 270 | $6{,}8\times10^{-4}cm^2$ | $0{,}92eV$ |
| 271 | $5{,}6\times10^{-4}cm^2$ | $0{,}92eV$ |
| 268 | $6{,}6\times10^{-4}cm^2$ | $0{,}91eV$ |

**Tabela 3 – Valores de $\phi_B$ através das curvas I-V.**

## 5.3. Medidas de Capacitância

As medidas de capacitância foram feitas a temperatura de 4,2K. Os valores das freqüências, máxima e mínima, utilizadas para cada amostra estão na Tabela 4. A amplitude do sinal alternado (ac) foi de 14mV rms para todas as amostras. O valor da amplitude do sinal ac utilizado possibilita uma variação no potencial químico, $e\mu_{QD}$, de aproximadamente 2meV, de acordo com a relação de alavanca da Equação 43. Este valor é menor que a largura de linha, referente à distribuição de tamanhos, e por isto razoável. O campo magnético aplicado na direção de crescimento [001] variou de 0 a 15 Tesla.

| Amostra | 273(InAs) | 274(InAs) | 270(InAsP) | 271(InAsP) | 268(InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $f_{min}$(kHz) | 2,0 | 2,0 | 1,0 | 2,0 | 15,0 |
| $f_{max}$(MHz) | 2,0 | 5,0 | 5,0 | 2,0 | 2,0 |

**Tabela 4 – Freqüências máxima e mínima utilizadas nas medidas de capacitância das amostras com SAQDs de InAs, InAsP e InP.**

Com as medidas da capacitância do sistema em função da freqüência e do campo magnéticos será possível determinar os efeitos do confinamento lateral e em z. Do confinamento lateral podemos obter o valor de $\hbar\omega_0$ e assim determinar o comprimento característico da função de onda, $l_0$. A Figura 29 apresenta a ilustração de ambos os confinamentos.

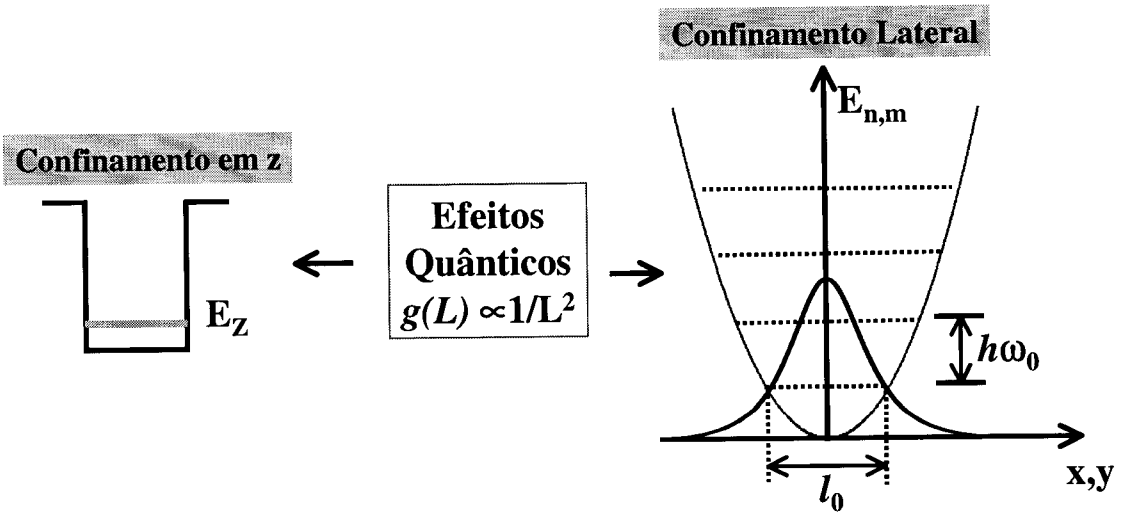



**Figura 29 – Efeitos quânticos nos pontos quânticos. À esquerda, temos a representação da energia devido ao confinamento na direção de crescimento, z, e à direita a energia devido ao confinamento lateral. $\hbar\omega_0$ e o comprimento característico da função de onda, $l_0$, são obtidos através da relação de dispersão dos estados com o campo magnético e da relação de confinamento quântico, respectivamente.**

A partir do valor de $\hbar\omega_0$ é possível determinar o valor da energia de Bloqueio Coulombiando. A energia de Bloqueio Coulombiano, como já citado, é o valor referente à energia de interação eletrostática entre elétrons adicionados seqüencialmente. A Figura 30 ilustra este efeito.

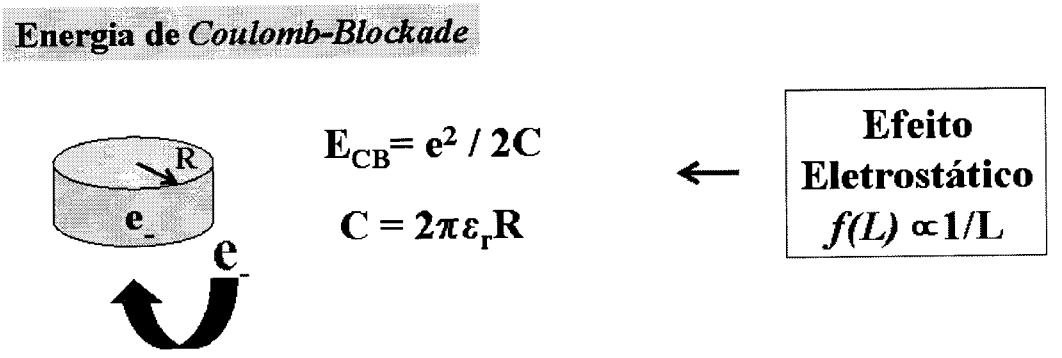



**Figura 30 – Efeito Eletrostático devido à interação entre elétrons dentro de um determinado estado. Este efeito é representado pela energia de Bloqueio Coulombiano, que é a energia necessária para adicionar mais um elétron em um estado. $C = 2\pi\varepsilon_r R$ é a auto-capacitância de um disco de raio R.**

### 5.3.1. Medidas C-V em SAQDs

As curvas das medidas de capacitância (C-V) nas amostras 273 e 274 podem ser vistas na Figura 31. Para as amostras 270 e 271, as curvas são vistas na Figura 32 e para a 268 na Figura 33. A linha pontilhada na horizontal se refere ao valor da capacitância esperada para a *wetting layer*, calculada assumindo que o sistema possa ser modelado como um capacitor de placas paralelas. Os valores utilizados no cálculo para a separação entre as supostas placas do capacitor são indicados na estrutura de bandas à direita da Figura 33. Como os elétrons estão confinados lateralmente no pontos quanticos, é possível diferenciar através de magneto CV o comportamento da *wetting layer* do estado fundamental.

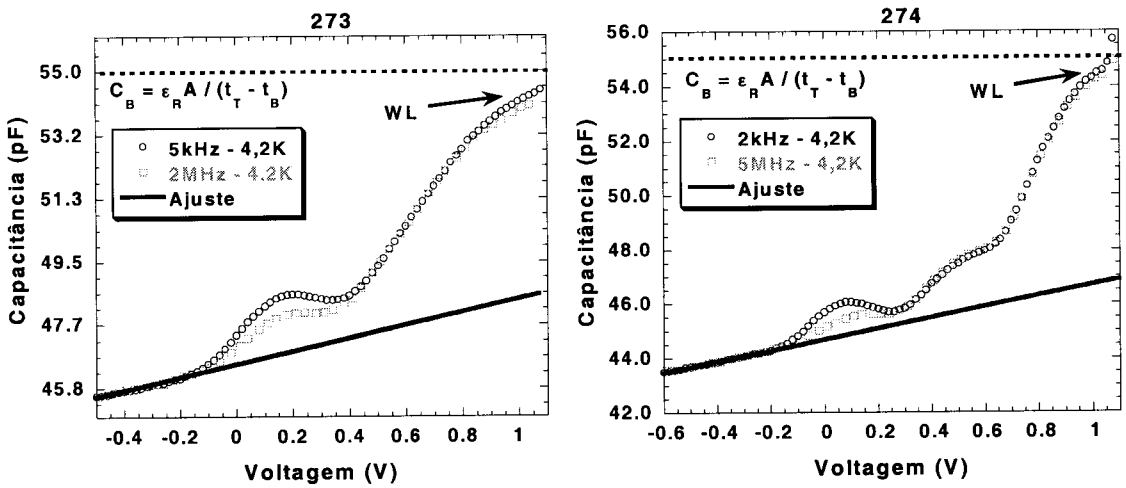



**Figura 31 - Curva C-V para as amostras 273 e 274, com SAQDs de InAs enterrados em GaAs e estrutura tipo n. As medidas foram feitas a 4,2K. $C_B$ é o valor previsto para a capacitância conforme o diagrama de bandas da Figura 33. Os símbolos representam os dados experimentais. A linha contínua representa o ajuste feito com a Equação 35 sobre a região linear da curva.**

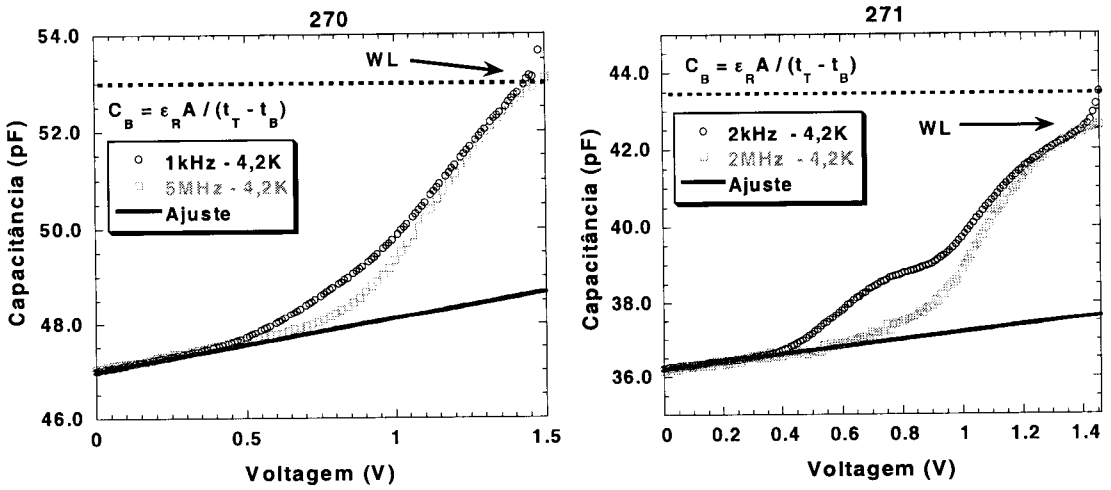



**Figura 32 - Curva C-V para as amostras 270 e 271, com SAQDs de InAsP enterrados em GaAs e estrutura tipo n. As medidas foram feitas a 4,2K. $C_B$ é o valor previsto para a capacitância conforme o diagrama de bandas da Figura 33. Os símbolos representam os dados experimentais. A linha contínua representa o ajuste feito com a Equação 35 sobre a região linear da curva.**

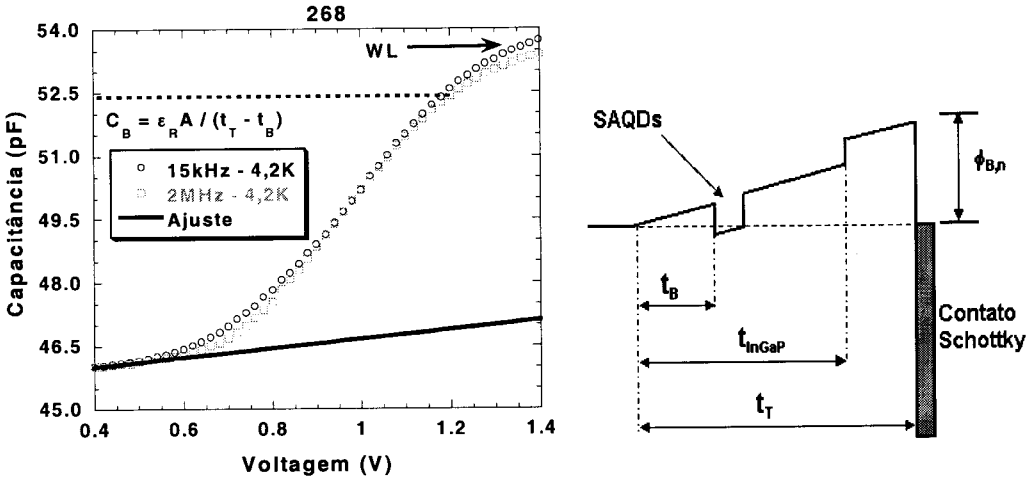



**Figura 33 – À esquerda, temos a curva C-V para a amostra 268, com SAQDs de InP enterrados em GaAs e estrutura tipo n. As medidas foram feitas a 4,2K. $C_B$ é o valor previsto para a capacitância conforme o diagrama de bandas ao lado. Os símbolos representam os dados experimentais. A linha contínua representa o ajuste feito com a Equação 35 sobre a região linear da curva. À direita, temos o diagrama de bandas das estruturas tipo n.**

Em todas as curvas, vemos que para baixas tensões aplicadas, a capacitância está relacionada à região do substrato dopado conforme a Equação 35:

$$C = \frac{\varepsilon_r A}{2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_r \Delta V}{eN_D}}}$$

Já em tensões mais elevadas, vemos que a capacitância tende ao valor calculado para a *wetting layer*. Nas curvas C-V para a amostra 274, vemos um primeiro pico em torno de 0,08V indicando o carregamento do estado fundamental dos SAQDs de InAs pelos elétrons. Em 0,51V e 1,00V, temos o início do carregamento do primeiro estado excitado e da *wetting layer*, respectivamente. Note ainda que há uma redução do valor de pico da capacitância, com o aumento da freqüência de 2kHz para 5MHz. Esta redução da amplitude da capacitância, referente ao estado fundamental, está associada com a probabilidade de tunelamento do portador de carga através da barreira, $t_B$, de acordo com a Equação 47:

$$P_{tunn}^2 \cong \exp\left[-\frac{4}{3}(t_{tunn}(V))\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E_t(V))}\right].$$

A redução da capacitância com o aumento da tensão (capacitância diferencial negativa), vista no intervalo de 0,08V a 0,2V, é resultado da natureza 0D do sistema conforme a Equação 63:

$$C_{DOS} = \frac{dQ}{dV} = q\frac{dn}{d\mu}\frac{d\mu}{dV} = q\frac{dn}{d\mu}\frac{t_{tunn}}{t_{tot}} \propto D_Q(\mu_{QD}).$$

Na curva C-V para a amostra 273, vemos que em torno do valor de potencial aplicado de 0,15V, temos o carregamento do estado fundamental. Para a amostra 273, a *wetting layer* é carregada antes do primeiro estado excitado. Outro ponto a ser notado é

o fato de que o pico referente ao estado fundamental deslocou para os valores de mais altas energias, quando comparamos com os dados obtidos para a amostra 274. Este resultado indica, ainda de forma preliminar, uma mudança no tamanho médio dos pontos quânticos das amostras 273 e 274. Esta modificação nos tamanhos dos pontos quânticos surge pelos diferentes parâmetros de crescimento, conforme a Tabela 1. A região de capacitância linear apresentada nos gráficos se refere à camada semicondutora dopada segundo a estrutura das amostras (GaAs:Si), como foi citado acima. Podemos determinar através desta região, a concentração de portadores , $N_D$, e a altura da barreira Schottky, $\phi_B$, utilizando a Equação 35:

$$C = \frac{\varepsilon_r A}{2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_r \Delta V}{eN_D}}}$$

Nas Figuras 31, 32 e 33, a linha contínua representa o ajuste feito com a Equação 35. Os valores de $N_D$ e $\phi_B$, são obtidos pelo ajuste da região linear das curvas de capacitância e podem ser vistos na Tabela 5.

| **Amostra** | **Área do Contato Schottky** | **Valor de $\phi_B$ através de I-V 292K** | $N_D$ **por CV** | $\phi_B$ **por CV 4,2K** |
|---|---|---|---|---|
| 274 | $7{,}7\times10^{-4}\,cm^2$ | $0{,}90\,eV$ | $6\times10^{17}\,cm^{-3}$ | $1{,}05eV$ |
| 273 | $6{,}7\times10^{-4}\,cm^2$ | $0{,}91\,eV$ | $6\times10^{17}\,cm^{-3}$ | $1{,}07eV$ |
| 270 | $6{,}8\times10^{-4}\,cm^2$ | $0{,}92eV$ | $1{,}0\times10^{18}\,cm^{-3}$ | $1{,}40eV$ |
| 271 | $5{,}6\times10^{-4}\,cm^2$ | $0{,}92eV$ | $9{,}7\times10^{17}\,cm^{-3}$ | $1{,}41eV$ |
| 268 | $6{,}6\times10^{-4}\,cm^2$ | $0{,}91\,eV$ | $9{,}9\times10^{17}\,cm^{-3}$ | $1{,}45eV$ |

**Tabela 5 – Valores medidos das áreas do contato Schottky dos dispositivos. $N_D$ e $\phi_B$ foram calculados pelos ajuste da região linear da curva C-V através da Equação 35. Outro valor de $\phi_B$ foi obtido pela curva I-V a 292K.**

Avaliando os valores obtidos para $N_D$ e $\phi_B$ através das diferentes formas, vemos que as concentrações de doadores de cargas da região dopada possuem a mesma ordem de grandeza. A diferença entre os valores de $\phi_B$ se dá pelo fato das medidas I-V terem sido feitas a 292K, enquanto que as C-V a 4,2 K. No entanto, medidas I-V a 4,2 K não foram possíveis para este limite de temperatura, devido à não adequação da Equação 36:

$$J = J_S e^{\frac{eV}{nkT}}$$

Para a amostra 270 podemos observar que não há um pico definido referente ao carregamento do estado fundamental, uma vez que este está muito próximo dos estados da *wetting layer*. O sinal do evento de carregamento é evidenciado quando a freqüência é elevada e observamos uma redução na capacitância no intervalo de 0,46V a 1,20V. A *wetting layer* pode ser vista próximo a 1,45V. Já para a amostra 271, o carregamento dos SAQDs pode ser verificado pelo pico apresentado em torno de 0,75V. O *plateau* referente ao preenchimento da *wetting layer* é visto em torno de 1,36V. Vale notar que o sinal de capacitância referente ao estado fundamental para a amostra 271 desaparece completamente em altas freqüências. Uma evidência disto é o fato do pico de capacitância em altas freqüências assumir valores iguais ao da extensão do ajuste, representado pela linha contínua nos gráficos de C-V.

Assim como observado para a amostra 270, não há um pico definido que corresponda ao carregamento do estado fundamental para a amostra de InP (268). O carregamento é evidenciado quando a freqüência é elevada e uma redução na

capacitância, no intervalo de 0,53V a 0,85V, é apresentada. O *plateau* característico da *wetting layer* é visto em torno de 1,25V.

O potencial químico sobre os pontos quânticos em função da tensão V aplicada ao contato Schottky pode ser obtido com os valores de $\phi_B$ apresentados nas Tabela 5, em conjunto com a relação de alavanca, $e\mu_{QD} = \frac{t_{tunn}}{t_{tot}} e(V - \phi_B)$, onde:

$$t_{tunn}(V) = t_B + t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}$$

e

$$t_{tot}(V) = 2t_T - \sqrt{t_T^2 + \frac{2\varepsilon_r}{eN_D}(V + \phi_B)}.$$

Os valores de $t_B$ e $t_T$ são 250Å e 1750Å, respectivamente, e suas posições podem ser vistas no diagrama de bandas à direita da Figura 33 no início deste item.

### 5.3.2. Medidas C-V em função da Freqüência.

Passemos a analisar a dependência da capacitância com a freqüência. A Figura 34 e a Figura 35 mostram as curvas de capacitância e condutância, para as amostras 273 e 274, em função do potencial químico, tomado com relação ao fundo da banda de condução, para alguns valores de freqüência.

Nas curvas de capacitância, vemos em baixa freqüência o carregamento do estado fundamental dos SAQDs e no gráfico referente à amostra 274, também o carregamento do primeiro estado excitado. Podemos ainda notar o aumento da condutância e o decréscimo da capacitância com o aumento da freqüência.



IFSC-USP

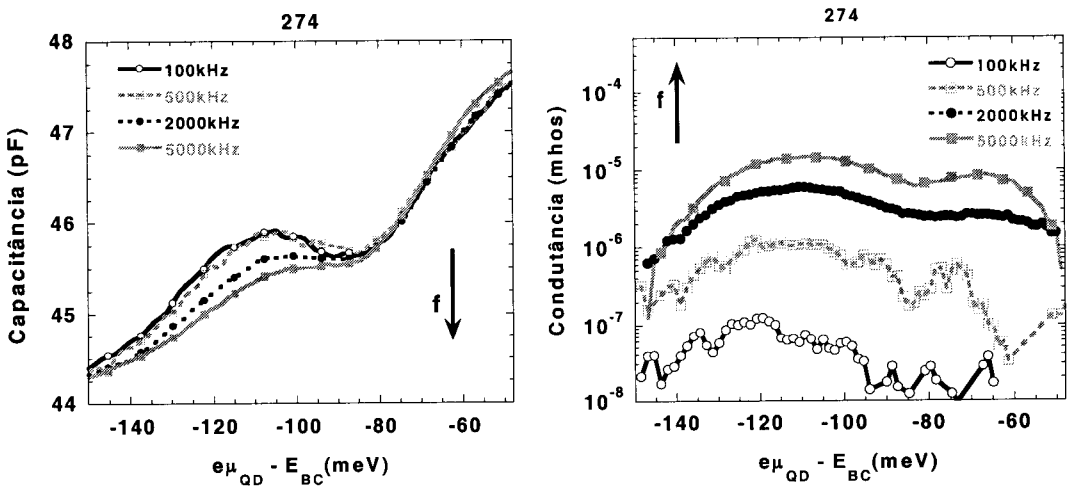



**Figura 34 – Dependência da Capacitância e da Condutância com a freqüência para a amostra 274. A seta indica o sentido de aumento da freqüência. A escala de energia toma como referencial o fundo da banda de condução, BC, do GaAs.**

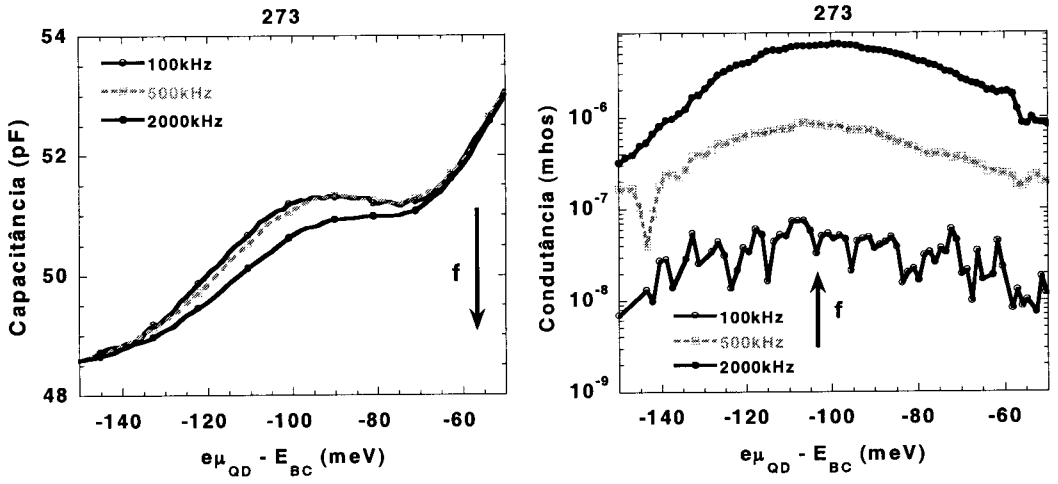



**Figura 35 - Dependência da Capacitância e da Condutância com a freqüência para a amostra 273. A seta indica o sentido de aumento da freqüência. A escala de energia toma como referencial o fundo da banda de condução, BC, do GaAs.**

Na Figura 36 e na Figura 37 temos a dependência da capacitância com freqüência paras as amostras de InAsP, 270 e 271, e para a de InP, 268.

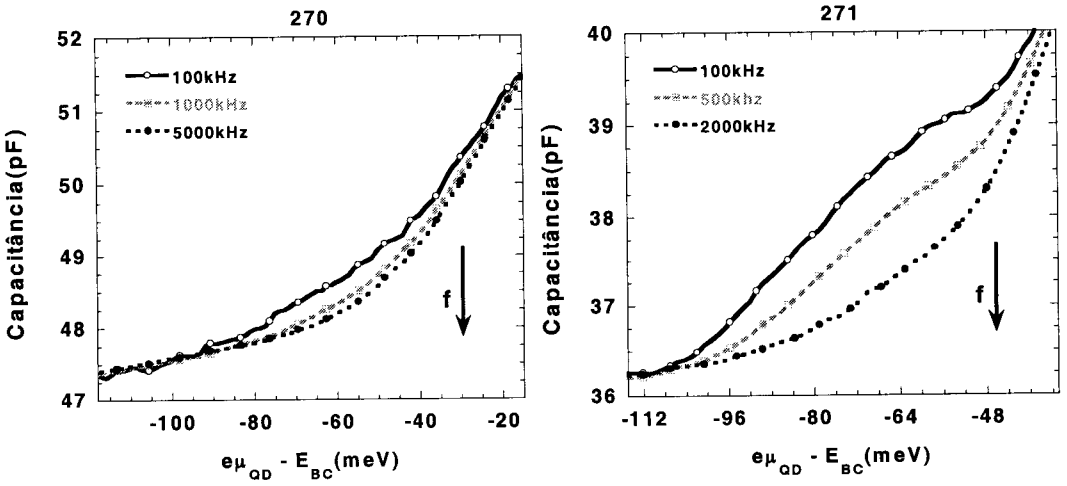



**Figura 36 - Dependência da Capacitância com a freqüência para as amostras 270 e 271. A seta indica o sentido de aumento da freqüência. A escala de energia toma como referencial o fundo da banda de condução, BC, do GaAs.**

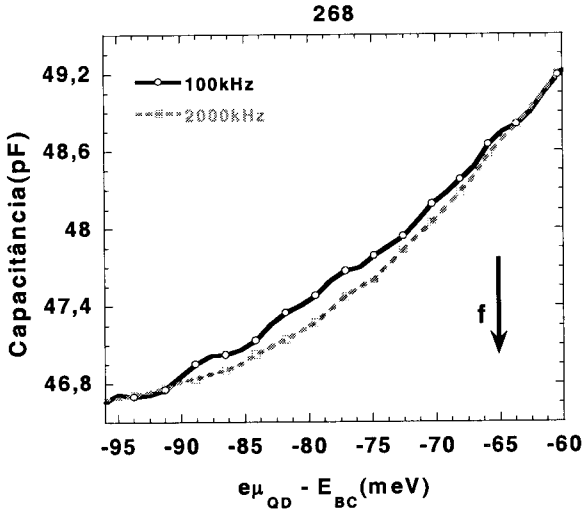



**Figura 37 - Dependência da Capacitância com a freqüência para a amostra 268. A seta indica o sentido de aumento da freqüência. A escala de energia toma como referencial o fundo da banda de condução, BC, do GaAs.**

A Figura 38 mostra o gráfico da capacitância em função da freqüência para as amostras 273 (à esquerda) e 274 (à direita). As linhas continuas e pontilhadas representam o ajuste feito com a Equação 60:

$$C_{eq}(\omega)=\frac{C_{high}C_{low}\left(1+\frac{\omega^2}{\omega_p^2}\right)}{C_{high}+C_{low}\left(\frac{\omega^2}{\omega_p^2}\right)}.$$

Com esta equação obtemos a freqüência de pico, $\omega_p$, para cada valor de potencial químico. Na freqüência de pico, metade dos elétrons tunelam através da barreira, $E_{tunn}(V)$, em um ciclo do sinal ac. A Figura 39 e a Figura 40 mostram os gráficos capacitância em função da freqüência para as amostras 270, 271 e 268.

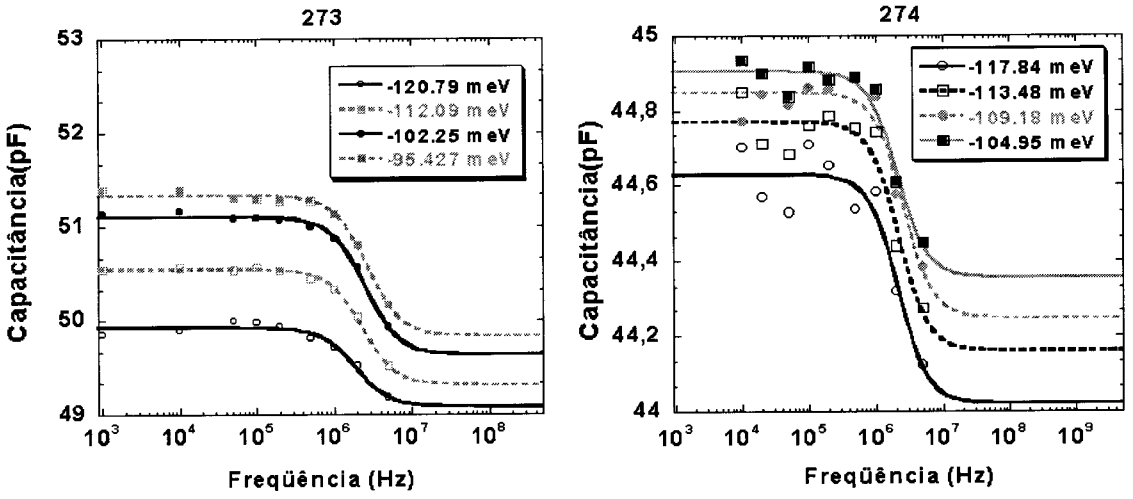



**Figura 38 – Capacitância como função da freqüência e com dependência do potencial químico. À esquerda temos o gráfico para a amostra 273 e à direita para a 274. Os símbolos correspondem as dados experimentais enquanto que as linhas representam o ajuste feito utilizando a Equação 60.**

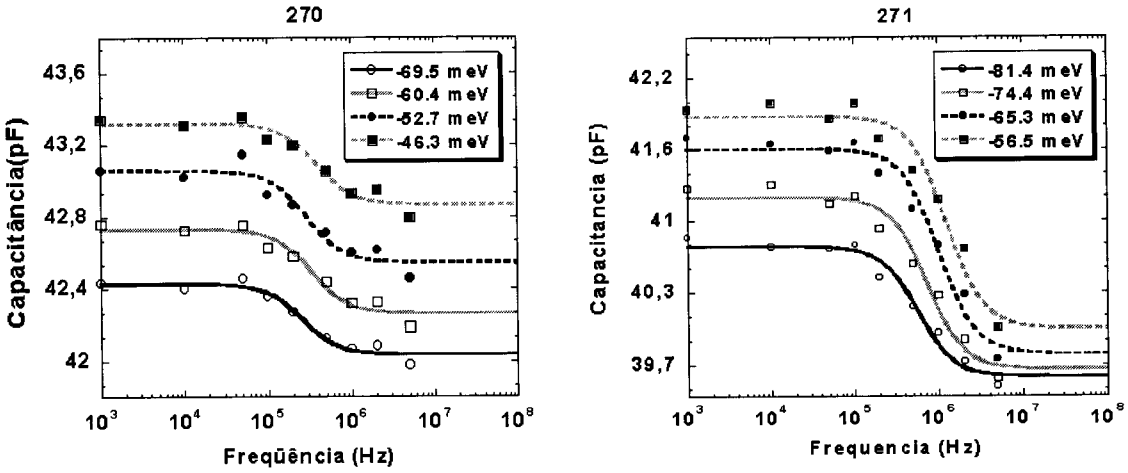



**Figura 39 - Capacitância como função da freqüência e com dependência do potencial químico. À esquerda temos o gráfico para a amostra 270 e à direita para a 271. Os símbolos correspondem aos dados experimentais enquanto que as linhas representam o ajuste feito utilizando a Equação 60.**

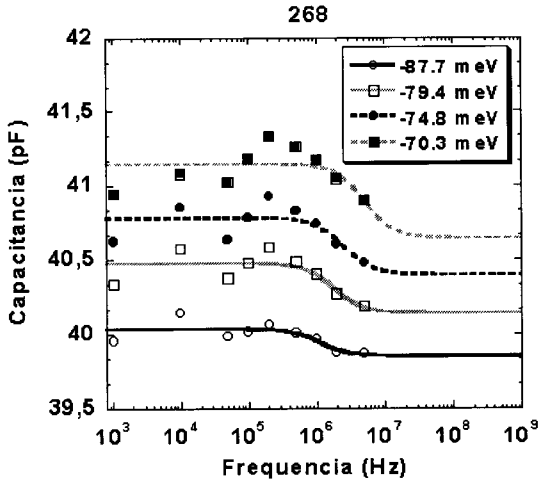



**Figura 40 - Capacitância como função da freqüência e com dependência do potencial químico, para a amostra 268. Os símbolos correspondem aos dados experimentais enquanto que as linhas representam o ajuste feito utilizando a Equação 60.**

Com os valores para a freqüência máxima de 2MHz e 5MHz foi possível determinar os valores de $\omega_p$ para cada potencial químico. A freqüência máxima é limitada pela área do contato Schottky (que determina a impedância do dispositivo), conforme a montagem apresentada na Figura 23. Nesta montagem, temos a amostra, com uma impedância $X_C$, em série com um resistor de carga R, onde a queda de tensão

é medida. Quanto menor a área do dispositivo menor será sua impedância $X_C$ ($X_C = A/\varepsilon_0 d\omega$, com $A$ sendo a área do contato Schottky) e com isto haverá um aumento na queda de tensão sobre R. Para valores de $\omega$ acima da freqüência máxima utilizada nas medidas CV, a impedância $X_C$ é tal que a maior parte da queda de tensão no circuito se dá em cima do resistor de carga R, alterando a fase do sinal e introduzindo erros nas medidas de capacitância e condutância.

É possível observar claramente o efeito da resposta dos estados com a freqüência na Figura 34, onde mesmo na freqüência máxima (5MHz), ainda verificamos o evento de carregamento do estado fundamental. O ideal é que em freqüências elevadas, o sinal referente ao carregamento do estado fundamental desapareça por completo. Quando isto ocorre, podemos resolver completamente os estados ligados. Para aumentar a faixa de freqüência utilizada no experimento é necessário reduzir a área do contato Schottky e/ou desenvolver um circuito para amplificação do sinal nas medidas. Porém esta é uma nova etapa a ser desenvolvida e que não será tratada neste trabalho. O que vale ressaltar é que os valores das freqüências máximas escolhidas são suficientes para o estudo proposto neste trabalho.

As mesmas curvas e ajustes feitos nos gráficos da Figura 38 foram repetidos para outros valores de potencial químico, de modo a ser possível construir os gráficos da Figura 42. Nesta figura, temos a dependência da freqüência de pico, $\omega_p$, com a raiz da altura da barreira, $E_t$, multiplicada pela largura da barreira de tunelamento, $t_{tunn}$, para cada valor de potencial químico, para as amostras 273 e 274. Esta dependência foi

escolhida para que seja possível ajustar a curva utilizando a Equação 50, obtida pela aproximação WKB para uma barreira triangular:

$$\omega_p \propto \exp\left[-\frac{2}{3}(t_{tunn})\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E_t)}\right]$$

Conforme a Figura 41, a altura da barreira de tunelamento é dada pela relação $e\mu_{QD} - E_{BC} = E_t$, uma vez que, tanto a altura da barreira de tunelamento quanto o valor potencial químico no equilíbrio termodinâmico (quando um nível é preenchido), se referem à mesma largura da barreira de tunelamento. Para cada valor da altura da barreira de tunelamento existe uma freqüência de pico, $\omega_p$, associada. Assim, se a freqüência do sinal ac for maior que o valor de $\omega_p$, associado a um determinado nível, não será possível a transferência de carga para tal estado. Desta forma, para cada estado que desejamos carregar, existirá uma freqüência de corte, onde valores acima dela não possibilitarão a transferência de carga. Logo, escolhendo a freqüência máxima do sinal ac aplicado, é possível sintonizar os estados confinados que serão carregados e consequentemente avaliados pela espectroscopia de capacitância. Para este trabalho, as freqüências máximas foram escolhidas de modo que seja possível carregar apenas o estado fundamental dos pontos quânticos.

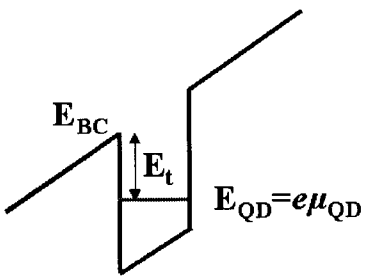



**Figura 41 – Barreira de tunelamento. $E_{BC}$ é a energia na banda de condução, $E_t$ é altura da barreira de tunelamento e $E_{QD}$ é a energia do ponto quântico. Aqui, $e\mu_{QD} - E_{BC} = E_t$.**

Com o ajuste feito através da Equação 50 nos gráficos da Figura 42 obtemos a massa efetiva dos portadores de carga através do material que compõe a barreira de tunelamento. No caso das estruturas em estudo, a barreira de tunelamento é formada por GaAs. A massa efetiva obtida para a amostra 273 foi de $(0{,}013 \pm 0{,}002)m_0$, enquanto que para a amostra 274, $(0{,}020 \pm 0{,}002)m_0$. As barras de erro apresentadas nos gráficos foram obtidas a partir do ajuste das curvas com a Equação 50. Os gráficos para as amostras de InAsP, 270 e 271, e para a amostra de InP, 268, podem ser vistos na Figura 43 e na Figura 44.

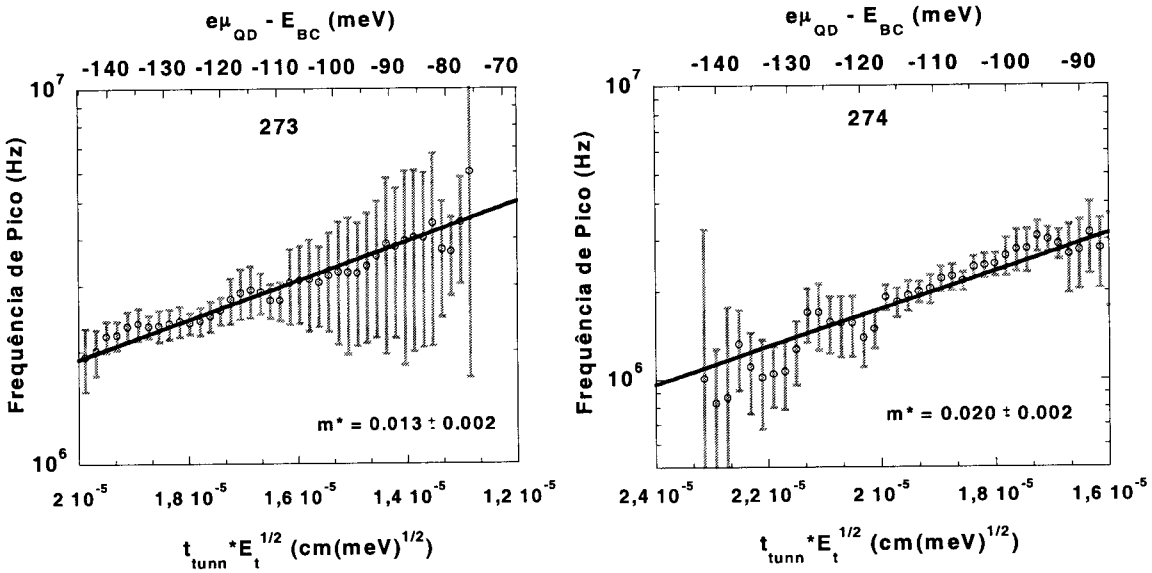



**Figura 42 – Freqüência de pico em função do produto da largura da barreira de tunelamento pela raiz quadrada da altura da barreira de tunelamento, para as amostras 273 (à esquerda) e 274 (à direita). Os símbolos representam os dados experimentais enquanto que as linhas o ajuste feito segundo a Equação 50. As barras verticais representam o erro no valor da freqüência de pico.**

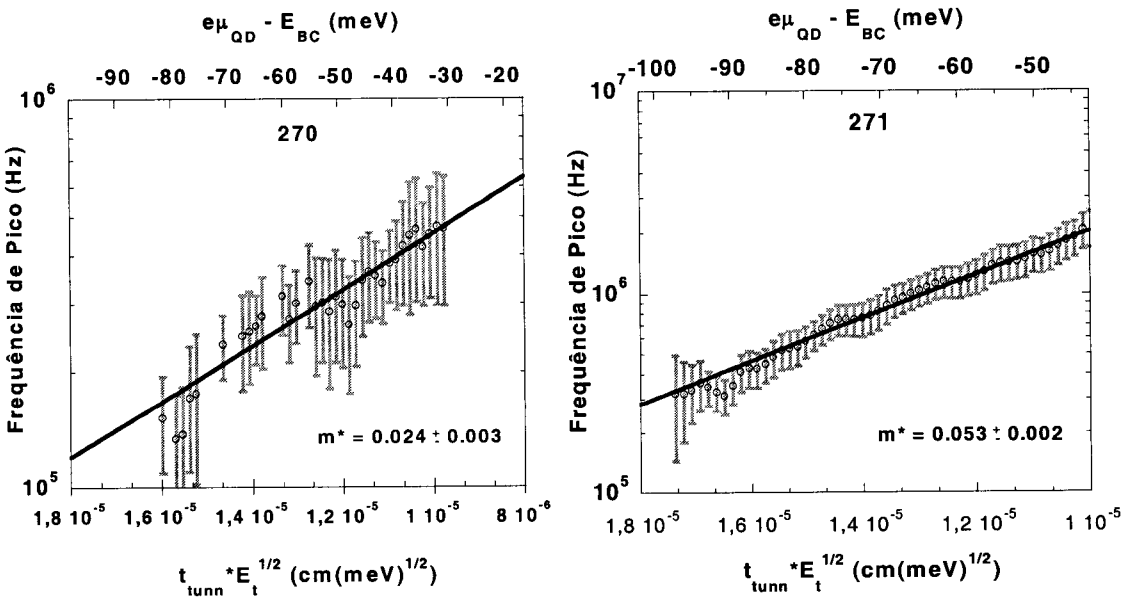



**Figura 43 - Freqüência de pico em função do produto da largura da barreira de tunelamento pela raiz quadrada da altura da barreira de tunelamento, para as amostras 270 (à esquerda) e 271(à direita). Os símbolos representam os dados experimentais enquanto que as linhas o ajuste feito segundo a Equação 50. As barras verticais representam o erro no valor da freqüência de pico.**

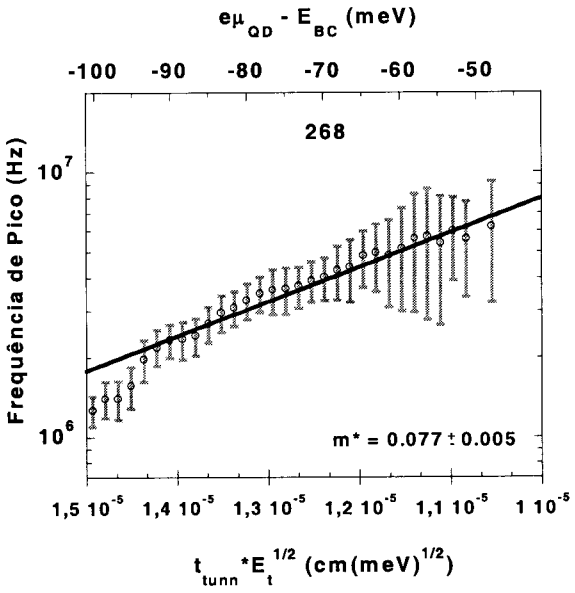



**Figura 44 - Freqüência de pico em função do produto da largura da barreira de tunelamento pela raiz quadrada da altura da barreira de tunelamento, para a amostra 268. Os símbolos representam os dados experimentais enquanto que as linhas o ajuste feito segundo a Equação 50. As barras verticais representam o erro no valor da freqüência de pico.**

A Tabela 6 apresenta os valores de massa efetiva para todas as amostras.

| | 273 (InAs) | 274 (InAs) | 270 (InAsP) | 271 (InAsP) | 268 (InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $m^*/m_0$ | $0{,}013 \pm 0{,}002$ | $0{,}020 \pm 0{,}002$ | $0{,}024 \pm 0{,}003$ | $0{,}053 \pm 0{,}002$ | $0{,}077 \pm 0{,}005$ |

**Tabela 6 – Valores de massa efetiva, obtidas pelo ajuste das curvas das Figuras 38, 39 e 40, para as amostras de InAs(273 e274), InAsP(270 e 271) e InP(268).**

Observamos que os valores de massa efetiva, encontrados através dos ajustes das curvas acima através da Equação 50, possuem a mesma ordem de grandeza dos valores utilizados para o GaAs ($0{,}067m_0$), InAs ($0{,}028\ m_0$) e InP ($0{,}077\ m_0$).

Pela aproximação WKB, o elétron atravessa uma barreira triangular e segue sua trajetória, mas em nosso experimento o elétron oscila entre o contato de fundo e ponto quântico, passando pela barreira constantemente. Com isto, é possível que o modelo WKB não seja adequado para tratar este problema.

O valor esperado para m* é o referente ao de um elétrons através da barreira de GaAs, conforme o formalismo desenvolvido pela aproximação WKB. Assim, o valor de m*, independente dos pontos quânticos crescidos após a barreira de tunelamento, é o valor da m* do GaAs. Mas, isto não é observado quando construímos o gráfico da Figura 45, onde observamos claramente a dependência na massa efetiva com a composição do ponto quântico.

Porém, esta questão deverá ser estudada com mais afinco em outro momento, uma vez que sua análise se afasta do foco principal deste trabalho.

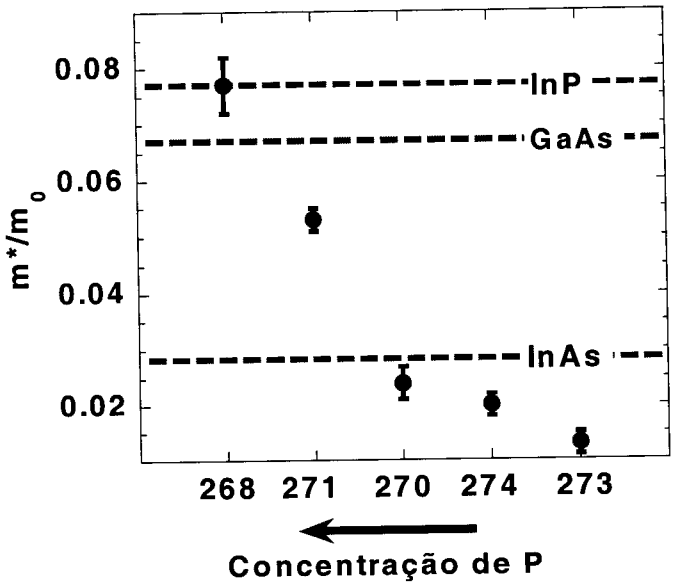



**Figura 45 – Valores de massa efetiva obtido para cada amostra. A linha pontilhada apresenta os valores de massa efetiva para o InAs *bulk*, InP *bulk* e GaAs *bulk*. A seta indica o sentido do aumento da concentração de fósforo na ilhas.**

### 5.3.3. Medidas C-V em função do Campo Magnético

#### 5.3.3.1. Determinação do confinamento lateral e vertical

De posse das medidas de capacitância em alta e baixa freqüência, podemos calcular a densidade de estados através da Equação 64:

$$D_Q(\mu_{QD}) = \frac{C_B}{Ae^2}\left(\frac{C_{CL}}{C_{CH}} - 1\right)\left[1 + C_{CL}\left(\frac{1}{C_B} - \frac{1}{C_{CH}}\right)\right]^{-1}$$

As Figuras 46, 47 e 48 mostram os gráficos da densidade de estados dos SAQDs como função do potencial químico e com dependência do campo magnético para as amostras de InAs (273 e 274), InAsP (270 e 271) e InP (268). Com os valores escolhidos para as freqüências mais altas, foi possível selecionar e analisar apenas os estado fundamental nos SAQDs. Por isto, as figuras estão mantendo o foco no estado fundamental. As curvas foram ajustadas de início por uma Gaussiana, de modo a se obter a largura de linha à meia altura e as posições dos picos onde a DOS é máxima. A

Tabela 7, após os gráficos, apresenta os valores da posição em energia do pico de DOS e a largura de linha à meia altura, obtidos a partir do ajuste das curvas.

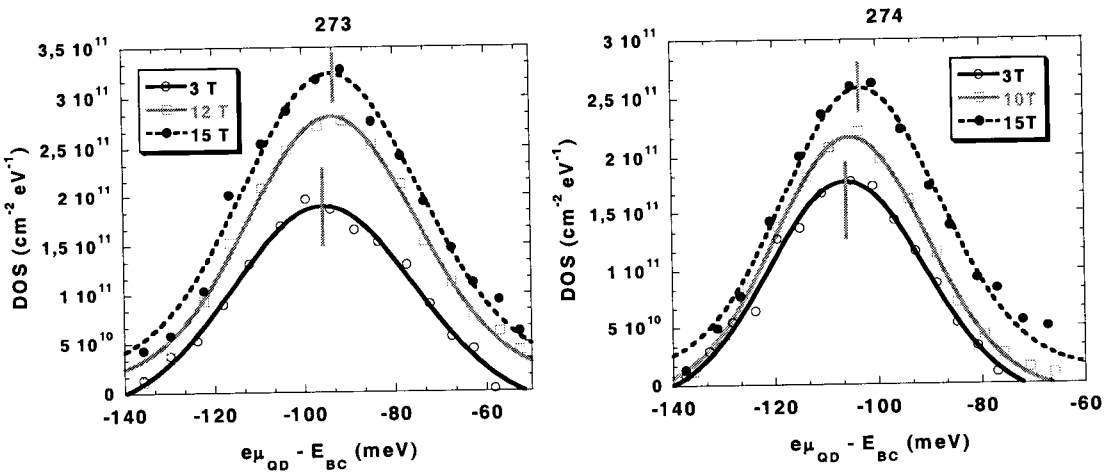



**Figura 46 – Densidade de Estados (DOS) como função do potencial químico e com dependência do campo magnético, para as amostras 273 274. O campo magnético é aplicado paralelamente à direção de crescimento [100]. Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste com uma Gaussiana. As barras verticais representam as posições em energia onde a DOS é máxima.**

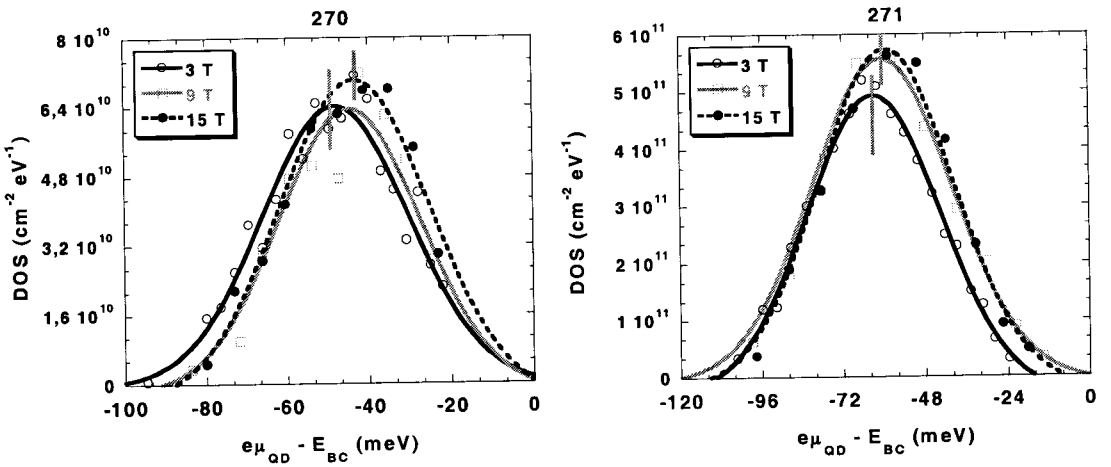



**Figura 47 - Densidade de Estados (DOS) como função do potencial químico e com dependência do campo magnético, para as amostras 270 e 271. O campo magnético é aplicado paralelamente à direção de crescimento [100]. Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste com uma Gaussiana. As barras verticais representam as posições em energia onde a DOS é máxima.**

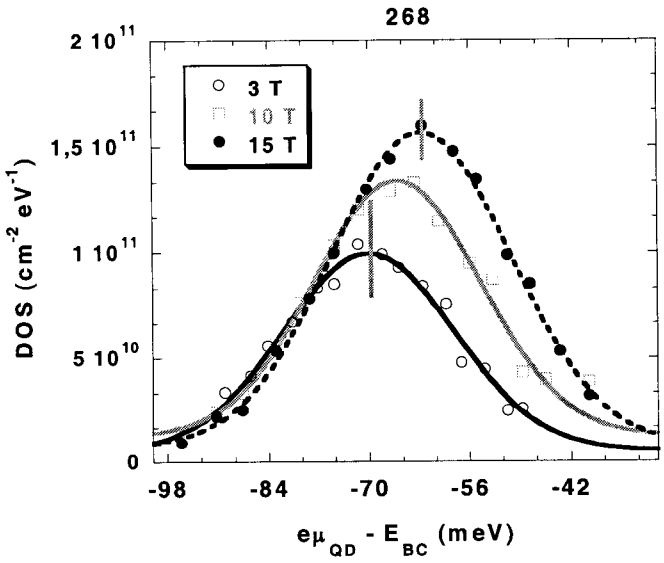



**Figura 48 - Densidade de Estados (DOS) como função do potencial químico e com dependência do campo magnético, para a amostra 268. O campo magnético é aplicado paralelamente à direção de crescimento [100]. Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas o ajuste com uma Gaussiana. As barras verticais representam as posições em energia onde a DOS é máxima.**

Observando os gráficos das Figuras 46, 47 e 48 podemos, a partir do deslocamento dos picos, visualizar o *shift* diamagnético do estado fundamental para elétrons com:

$$E(\omega_C) = \hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_C}{2}\right)^2 + \omega_0^2}\ , \text{ onde } \omega_C = \frac{eB}{m^*}$$

As larguras de linha à meia altura estão relacionadas com a distribuição de tamanhos dos SAQDs. Isto porque tamanhos ligeiramente diferentes implicam em níveis de confinamento distintos. Além disto, a largura dos picos nos fornece informações sobre as interações eletrostáticas dentro e entre os SAQDs[38,36].

| | Posição dos Picos de DOS (meV) | | | Largura de linha (meV) | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Amostra** | **B = 3T** | **B = 10T** | **B = 15T** | **B = 3T** | **B = 10T** | **B = 15T** |
| **273** | **-95,4 ± 0,2** | **-94,9 ± 0,2** | **-93,8 ± 0,2** | **45,5 ± 0,7** | **43,2 ± 0,4** | **46,3 ± 0,6** |
| **274** | **-105,8 ± 0,3** | **-105,1 ± 0,2** | **-103,9 ± 0,2** | **35,3 ± 0,7** | **33,9 ± 0,3** | **34,6 ± 0,5** |
| **268** | **-70,1 ± 0,1** | **-66,1 ± 0,2** | **-62,7 ± 0,2** | **27 ± 2** | **23,7 ± 0,8** | **29,3 ± 0,5** |
| **Amostra** | **B = 3T** | **B= 9 T** | **B=15T** | **B = 3T** | **B= 9 T** | **B=15T** |
| **270** | **-48,2 ± 0,4** | **-44,8 ± 0,6** | **-43,5 ± 0,6** | **42 ± 2** | **40 ± 3** | **42 ± 4** |
| **271** | **-63,0 ± 0,1** | **-60,7 ± 0,2** | **-59,4 ± 0,1** | **45 ± 1** | **47,1 ± 0,7** | **45,6 ± 0,8** |

**Tabela 7 – Posição dos Picos de DOS e largura de linha à meia altura para as amostras de InAs (273 e274), InAsP (270 e271) e InP(268).**

A densidade de pontos quânticos, $\rho_{SAQDs}$, pode ser avaliada por meio da área abaixo da curva de DOS. O valor de $\rho_{SAQDs}$ é dado pela integração:

$$\rho_{SAQDs} = \frac{1}{2}\int_{E_A}^{E_B} DOS(E)dE \qquad \textbf{Equação 75}$$

onde o fator $1/2$ leva em consideração a degenerescência de *spin* e $E_B - E_A$ é o intervalo de integração, assumindo cobrir toda a faixa do estado fundamental. Os pontos $E_A$ e $E_B$ são obtidos nas posições onde a densidade de estados é nula. A densidade de pontos quânticos obtida paras as amostras pode ser vista na Tabela 8. Os valores encontrados para $\rho_{SAQDs}$ estão bem próximos dos obtidos através das medidas de TEM, em amostras crescidas em condições semelhantes[34]. Os valores encontrados são comparados com os medidos por TEM na mesma tabela, e representam um limite inferior para a densidade de pontos quânticos. Uma maior concordância seria possível

se as freqüências máximas utilizadas fossem maiores(suficiente para suprimir a resposta do estado s).

| | 273(InAs) | 274(InAs) | 270(InAsP) | 271(InAsP) | 268(InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $\rho_{SAQDs}$ **por DOS** | $1{,}0\times10^{10}\,cm^{-2}$ | $0{,}8\times10^{10}\,cm^{-2}$ | $0{,}5\times10^{10}\,cm^{-2}$ | $3{,}5\times10^{10}\,cm^{-2}$ | $0{,}5\times10^{10}\,cm^{-2}$ |
| | **InAs** | | **InAsP** | | **InP** |
| $\rho_{SAQDs}$ **por TEM**[34] | $2{,}1\times10^{10}\,cm^{-2}$ | | $3{,}9\times10^{10}\,cm^{-2}$ e $4{,}2\times10^{10}\,cm^{-2}$ | | $3{,}0\times10^{10}\,cm^{-2}$ |

**Tabela 8 – Comparação dos dados de $\rho_{SAQDs}$ obtidos para as amostras de InAs (273 e274), InAsP (270 e 271) e InP (268), através da integração da área abaixo da curva de DOS, com os valores medidos por TEM e vistos na referência 34.**

Como no estado s são possíveis dois elétrons, esperaríamos que devido à interação eletrostática (Bloqueio Coulombiano) obtivéssemos dois picos no estado fundamental, conforme observado em outros trabalhos com SAQDs de InAs[37,38]. Deveremos ter um pico referente ao carregamento dos SAQDs por um elétron, estado s($1e^-$), e na seqüência um segundo pico, quando outro elétron é adicionado ao estado fundamental, estado s($2e^-$). Este segundo pico, devido à repulsão coulombiana, está deslocado no sentido das mais altas energias com relação ao primeiro[39]. Isto não é observado nas amostras deste trabalho pois a variação de tamanhos dos pontos quânticos é tal que o pico referente ao estado s($1e^-$) se sobrepõe ao referente ao estado s($2e^-$). Assim, a soma dos dois não permite a observação da separação devido à interação eletrostática.

A Figura 49 mostra a dependência da posição do pico da DOS, obtida experimentalmente, com o campo magnético e ajustada com uma gaussiana. Estes gráficos se referem às amostras 273 e 274 de InAs. Esta curva foi ajustada através da

relação de dispersão de Fock-Darwin[27,28] (Equação 71) para o estado fundamental (n = 0 e m = 0), ou seja:

$$E_T(\omega_c) = E_z + E_0(B) = E_z + \hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} \qquad \textbf{Equação 76}$$

onde $E_z$ é a energia de confinamento na direção $z$, $\omega_0$ a freqüência natural do sistema e $\omega_c = eB/m^*$ a freqüência ciclotrônica. O valor utilizado para a massa efetiva do elétron, m*, foi 0,067 pois variações de m* não afetam de maneira significativa os deslocamentos observados[40].

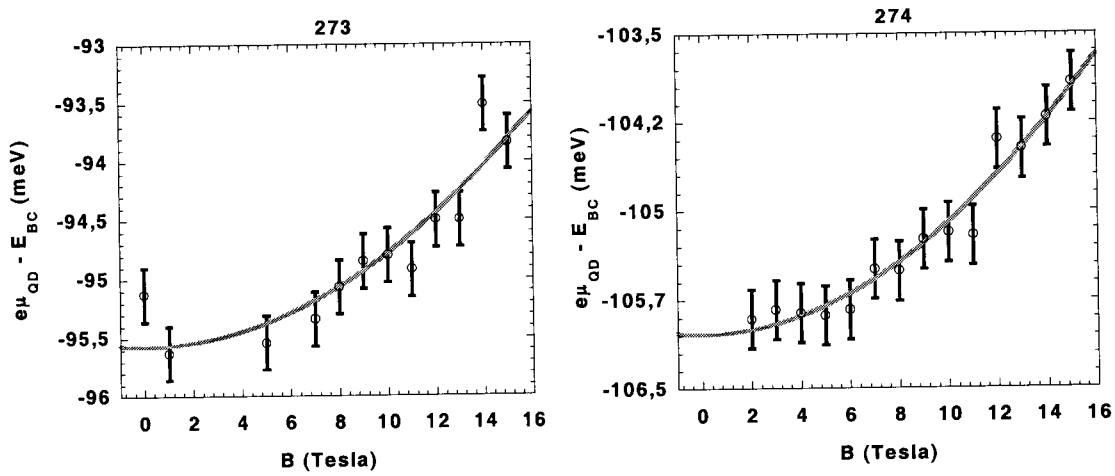



**Figura 49 – Dispersão do estado fundamental com o campo magnético para as amostras 273 e 274. Os símbolos representam os dados experimentais obtidos através do ajuste com uma Gaussiana. A linha representa o ajuste feito a partir da relação de Fock-Darwin[27,28] para o estado fundamental. As barras verticais representam o erro nos valores obtidos para as posições de picos nos gráficos de DOS. A freqüência natural do sistema, encontrada através do ajuste, é de $(47 \pm 6)$meV/$\hbar$ e $(39 \pm 3)$meV/$\hbar$ para as amostras 273 e 274, respectivamente.**

As Figuras 50 e 51 mostram a dependência da posição do pico da DOS, obtida experimentalmente, com o campo magnético para as amostras de InAsP e InP. Estas curvas também foram ajustadas com a relação de dispersão de Fock-Darwin[27,28].

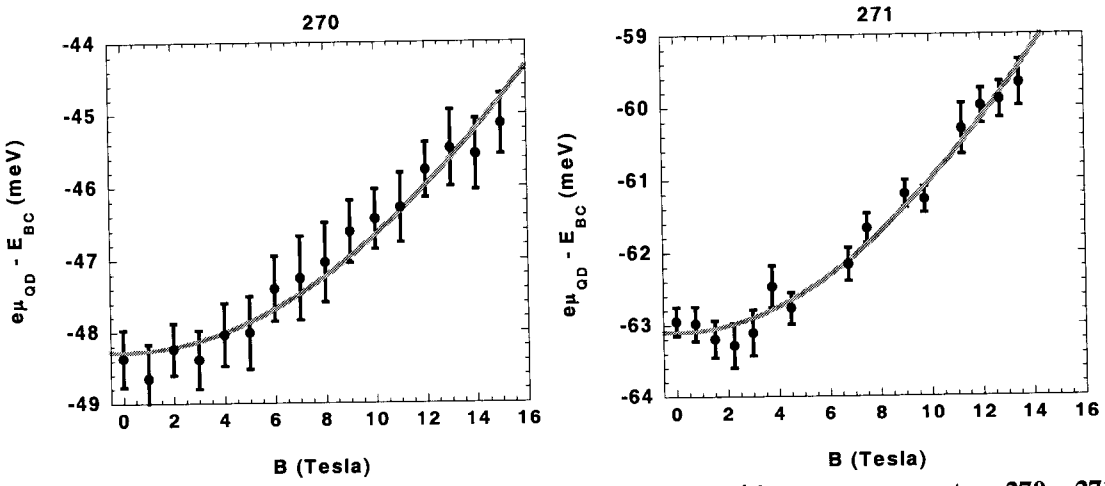



**Figura 50 - Dispersão do estado fundamental com o campo magnético para as amostras 270 e 271. Os símbolos representam os dados experimentais obtidos através do ajuste com uma Gaussiana. A linha representa o ajuste feito a partir da relação de Fock-Darwin[27,28] para o estado fundamental. As barras verticais representam o erro nos valores obtidos para as posições de picos nos gráficos de DOS. A freqüência natural do sistema, encontrada através do ajuste, é de $(29 \pm 1)$meV/$\hbar$ e $(20 \pm 1)$meV/$\hbar$ para as amostras 270 e 271, respectivamente.**

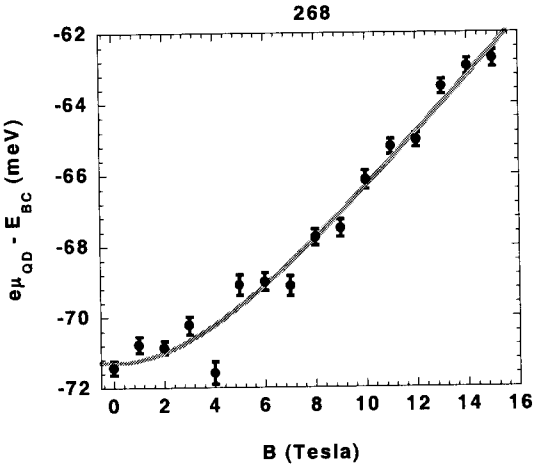



**Figura 51 - Dispersão do estado fundamental com o campo magnético para as amostra 268. Os símbolos representam os dados experimentais obtidos através do ajuste com uma Gaussiana. A linha representa o ajuste feito a partir da relação de Fock-Darwin[27,28] para o estado fundamental. As barras verticais representam o erro nos valores obtidos para as posições de picos nos gráficos de DOS. A freqüência natural do sistema, encontrada através do ajuste, é de $(5{,}0 \pm 0{,}6)$meV/$\hbar$.**

Porém, os dados das curvas se referem à contribuição dos estados s($1e^-$) e s($2e^-$) e não apenas ao estado fundamental. Desta forma, os valores obtidos para o confinamento em $z$ através do ajuste não estão inteiramente corretos. Isto porque o estado s($1e^-$), onde o ajuste deveria ser feito, está deslocado para um valor de energia mais baixo, com relação ao valor de pico obtido experimentalmente. Já os resultados

encontrados para a freqüência natural, $\omega_0$, podem ser considerados válidos, pois como a largura de linha varia pouco com o campo magnético, tanto o estado s(1e$^-$) como o estado s(2e$^-$) e a soma de ambos terão a mesma dependência com o campo. Isto faz com que a separação entre os picos seja constante (desprezando o desdobramento de spin-Efeito Zeeman). Assim, independente da curva escolhida para o ajuste com a relação de Fock-Darwin (se é a curva de dispersão do estado s(1e$^-$), do estado s(2e$^-$) ou da soma de ambos, com o campo magnético) obtemos o mesmo valor de $\hbar\omega_0$. E verificamos ainda que a pequena mudança da largura de linha com o campo mantém a variação em $\hbar\omega_0$ dentro do seu erro. As Figuras 52, 53 e 54 mostram os gráficos da largura de linha à meia altura, $\Delta E_L$, em função do campo magnético para as amostras medidas.

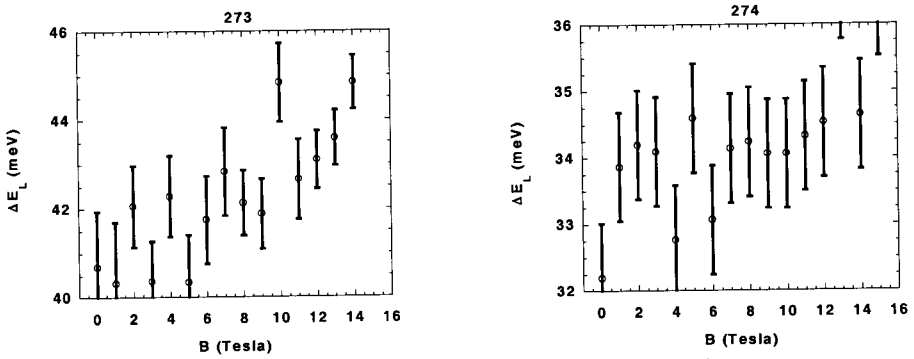



**Figura 52 – Largura de linha à meia altura em função do campo magnético para as amostras 273 e 274. Os símbolos representam os dados experimentais e as barras verticais o erro obtido no ajuste do gráfico de DOS.**

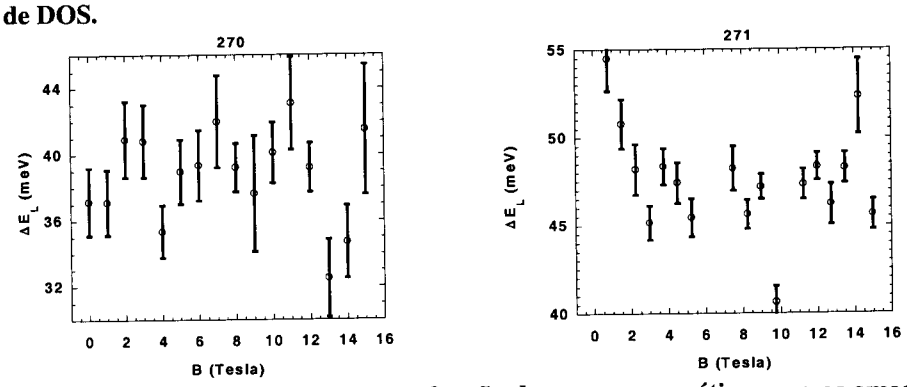



**Figura 53 - Largura de linha à meia altura em função do campo magnético para as amostras 270 e 271. Os símbolos representam os dados experimentais e as barras verticais o erro obtido no ajuste do gráfico de DOS.**

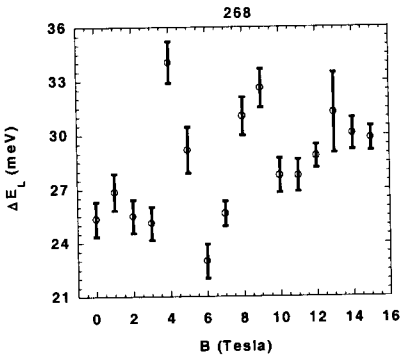



**Figura 54 - - Largura de linha à meia altura em função do campo magnético para a amostra 268. Os símbolos representam os dados experimentais e as barras verticais o erro obtido no ajuste do gráfico de DOS.**

Através do ajuste feito nas curvas das Figuras 49, 50 e 51 pela Equação 76, obtemos os valores da freqüência natural do sistema. Com os valores de $\omega_0$ obtidos pelo ajuste das curvas podemos calcular, através da relação do confinamento quântico para o caso de um potencial parabólico, o comprimento associado à função de onda, $l_0$:

$$\hbar\omega_0 = \left(\frac{\hbar^2}{l_0^2}\right)\frac{1}{m^*}.$$

Como encontramos o valor do comprimento característico da função de onda dos pontos quânticos, podemos obter a energia de Bloqueio Coulombiano através da Equação 72:

$$E_{CB} = \frac{e^2}{2C_{QD}}, \text{ onde } C_{QD} = 2\pi\varepsilon\varepsilon_0 l_0$$

A Tabela 9 apresenta os valores de $\omega_0$, $l_0$ e $E_{CB}$ para as amostras em estudo. As imagens de TEM para amostras de InAs, InAsP e InP crescidas em condições semelhantes, podem ser vistas nas Figuras 55, 56 e 57.

| | 273(InAs) | 274(InAs) | 270(InAsP) | 271(InAsP) | 268(InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $\omega_0$ (meV/$\hbar$) | $47 \pm 6$ | $39 \pm 3$ | $29 \pm 1$ | $20 \pm 1$ | $5{,}0 \pm 0{,}6$ |
| $E_{CB}$ (meV) | $22 \pm 1$ | $20 \pm 1$ | $17{,}6 \pm 0{,}5$ | $14{,}6 \pm 0{,}5$ | $7{,}3 \pm 0{,}5$ |
| $2 \times l_0$ (Å) | $108 \pm 3$ | $110 \pm 2$ | $126 \pm 1$ | $150 \pm 2$ | $300 \pm 8$ |
| | InAs por TEM[34] | | InAsP por TEM[34] | | InP por TEM[34] |
| **Diâmetro** (Å) | $130 \pm 20$ | | $150 \pm 30$ e $200 \pm 50$ | | $320 \pm 60$ |

**Tabela 9 – Valores de $\omega_0$, $l_0$ e $E_{CB}$ obtidos para as amostras em estudo e diâmetro dos pontos quânticos obtidos por TEM para amostras de mesma espécie química e crescidas em condições semelhantes.**

Os valores para $\omega_0$ estão próximos dos encontrados na literatura para pontos quânticos de InAs ($\omega_0$=47 meV/$\hbar$)[18]. Analisando a primeira linha da tabela, observamos a redução de $\hbar\omega_0$ com o aumento da concentração de fósforo. Isto indica que os pontos quânticos de $InAs_{1-x}P_x$ aumentam de tamanho com a concentração de fósforo. Com isto, temos os pontos quânticos de InP bem maiores que os que InAs e os de InAsP com tamanhos intermediários. Com o aumento do tamanho também observamos a redução da interação eletrostática através da energia de Bloqueio Coulombiano. Podemos observar também, que com o aumento da taxa de crescimento temos a tendência de incorporar mais arsênico do que fósforo. Uma vez que $L \propto \varepsilon_{//}^{-2}$[9], onde $\varepsilon_{//}$ é o descasamento entre os parâmetros de rede (para o caso de InAs sobre GaAs, $\varepsilon_{//}$= 7%, enquanto que para o InP sobre GaAs, $\varepsilon_{//}$= 3,8%), com o aumento da incorporação de arsênico teremos pontos quânticos menores. O gráfico da Figura 58 relaciona o comprimento característico da função de onda $l_0$ com o raio do pontos quântico obtidos por TEM em amostras de mesma espécie química e crescidas em condições semelhantes. Os valores obtidos por TEM podem ser conferidos na referência 34.

**Figura 55 – Imagens de TEM, no modo seção transversa, de amostras com pontos quânticos de InAs crescidos sob as mesmas condições que as utilizadas neste trabalho. Os SAQDs possuem 130Å ± 20Å de diâmetro. A densidade de pontos quânticos é de $(2{,}1 \pm 0{,}5) \times 10^{10} cm^{-2}$ [34].**

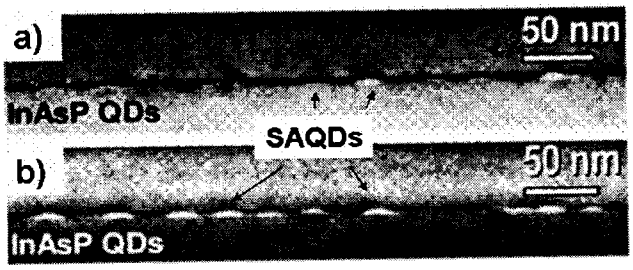



**Figura 56 – Imagens de TEM, no modo seção transversa, de amostras com pontos quânticos de InAsP crescidos sob as mesmas condições que as utilizadas neste trabalho. Em a) o InAsP foi crescido com fluxo de $PH_3$ de 5sccm e em b) a 10sccm. Os SAQDs possuem em a) (150 ± 30)Å de diâmetro e em b) (200 ± 50)Å. A densidade de pontos quânticos é em a) $(3{,}9 \pm 0{,}3) \times 10^{10} cm^{-2}$ e em b) $(4{,}2 \pm 0{,}3) \times 10^{10} cm^{-2}$ [34]**

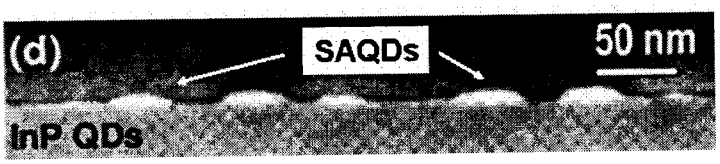



**Figura 57 – Imagens de TEM, no modo seção transversa, de amostras com pontos quânticos de InP crescidos sob as mesmas condições que as utilizadas neste trabalho. A amostra foi crescida a fluxo de $PH_3$ de 10sccm. Os SAQDs possuem (320 ± 60Å) de diâmetro. A densidade de pontos quânticos é de $(3{,}0 \pm 0{,}3) \times 10^{10} cm^{-2}$ [34]**

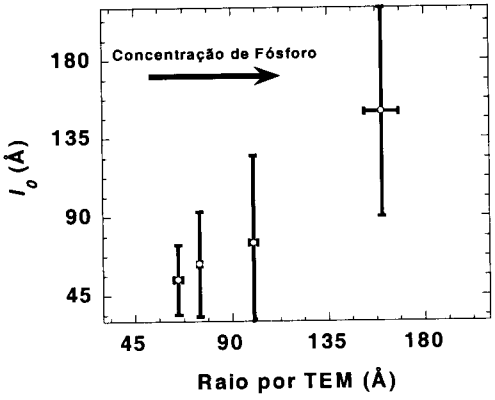



**Figura 58 – Relação entre os valores de $l_0$ com o raio do pontos quântico obtido por TEM[34] em amostras de mesma espécie química e crescidas em condições semelhantes. A seta indica o sentido de aumento da concentração de fósforo dos pontos quânticos.**

Para calcular a dispersão dos níveis, $E_z$ e a energia do estado fundamental quando este está carregado com um elétron ($E_{s(1e^-)}$), as curvas de DOS foram ajustadas com duas gaussianas de mesma largura de linha e cuja separação entre os picos é igual a energia de Bloqueio Coulombiano ($E_{CB}$):

$$DOS = A\left\{\exp\left[-\left(\frac{E - E_{s(1e^-)}}{\Delta L_{\uparrow\downarrow}}\right)^2\right] + \exp\left[-\left(\frac{E - \left(E_{s(1e^-)} + E_{CB}\right)}{\Delta L_{\uparrow\downarrow}}\right)^2\right]\right\}$$

As Figuras 59, 60 e 61 mostram o ajuste feito sobre as curvas de DOS a campo magnético zero. Para a amostra 274, é possível visualizar os dois estados na curva de capacitância a baixa freqüência. No entanto como a capacitância no estado fundamental em alta freqüência não foi baixa o suficiente, o ajuste apresentado na curva de DOS, não foi muito bom.

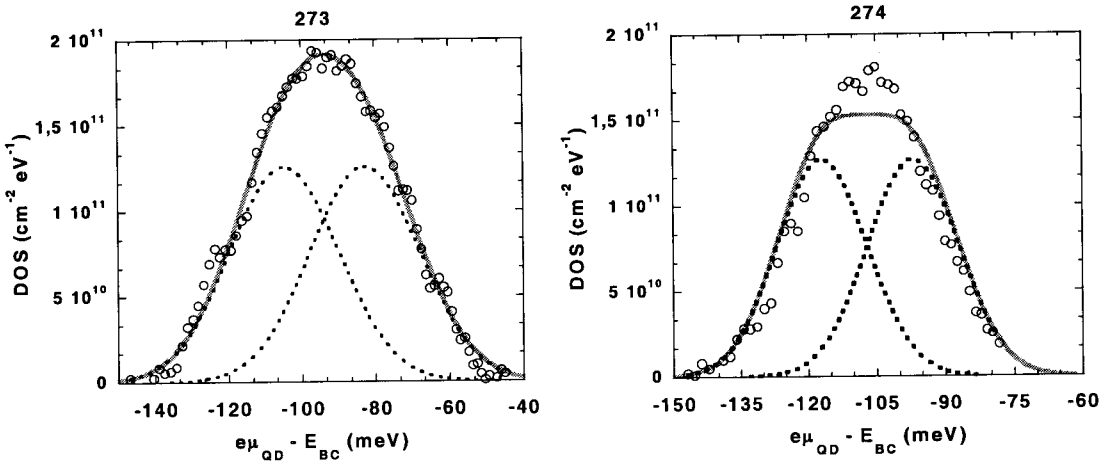



**Figura 59 – Ajuste das curvas de DOS a 0T, obtidas para as amostras 273 e 274, com duas gaussianas. A linha contínua representa a soma das duas gaussianas ajustadas, enquanto que as linhas pontilhadas as duas gaussianas isoladas. Os símbolos representam os resultados experimentais. Cada gaussiana possui largura de linha à meia altura igual a (34 ± 2) meV para a 273 e (23 ± 2) meV para a 274. Estas gaussianas possuem o pico de DOS em (-104,8 ± 0,6) meV e (–82,8 ± 0,6) meV para a 273 e (-117,1 ± 0,5) meV e (–97,1 ± 0,5) meV para a 274.**

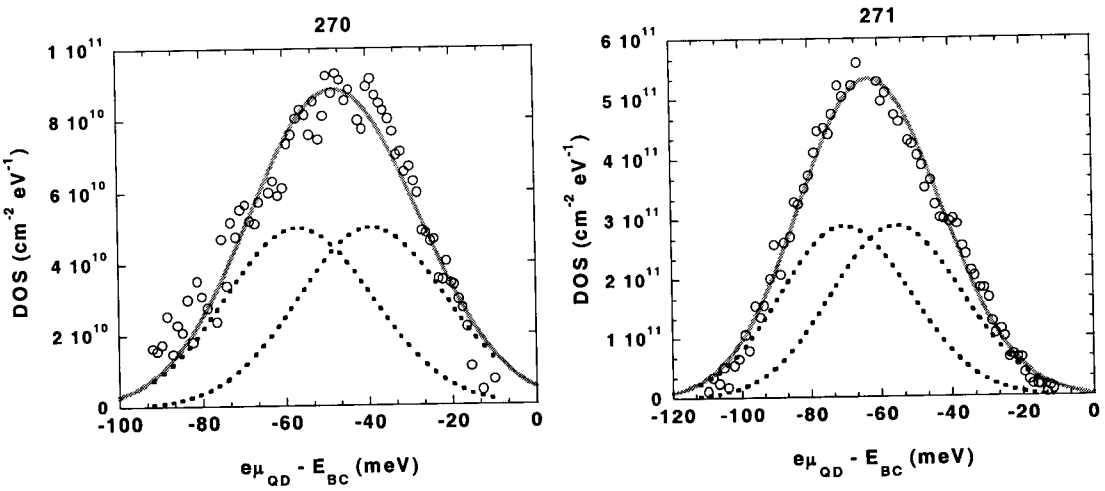



**Figura 60 – Ajuste das curvas de DOS à 0T, obtidas para as amostras 270 e 271, com duas gaussianas. A linha contínua representa a soma das duas gaussianas ajustadas, enquanto que as linhas pontilhadas as duas gaussianas isoladas. Os símbolos representam os resultados experimentais. Cada gaussiana possui largura de linha à meia altura igual a (44 ± 1) meV e (43,1 ± 0,3) meV, para as amostras 270 e271, respectivamente. Estas gaussianas possuem o pico de DOS em (-56,1 ± 0,4) meV e (–38,5 ± 0,4) meV para a amostras 270. A amostra 271 possui seus picos em (-70,2 ± 0,2) meV e (-55,6 ± 0,2) meV.**

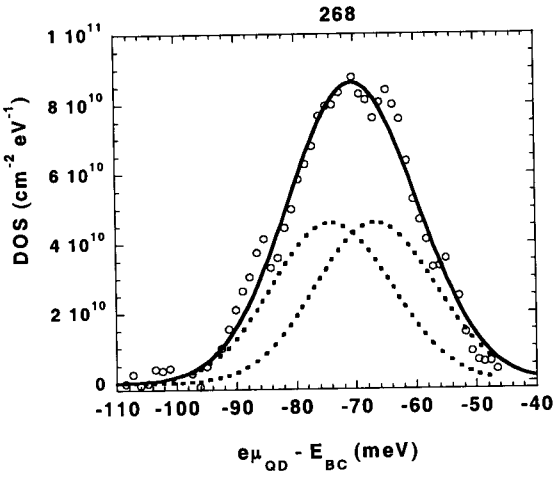



**Figura 61 - Densidade de estado(DOS), como função do potencial químico, à campo magnético zero, para a amostra 268. A linha contínua representa a soma das duas gaussianas ajustadas, enquanto que as linhas pontilhadas as duas gaussianas isoladas. Os símbolos representam os resultados experimentais. A largura de linha à meia altura obtido foi (23,0 ± 0,5) meV.**

Do ajuste feito nos gráficos das figuras acima, obtemos que a curva de DOS é resultado da soma de uma Gaussiana G1, referente ao evento de carregamento do estado fundamental por um elétron, com uma Gaussiana G2, afastada de G1 por um valor igual a $E_{CB}$ após o acréscimo do segundo elétron no estado fundamental. As posições dos picos da Gaussiana G1 e da Gaussiana G2, bem com as respectivas larguras de linha,

$\Delta E_{L\uparrow\downarrow}$, podem ser vistas na Tabela 10. Verificamos nesta tabela que $\Delta E_{L\uparrow\downarrow} > E_{CB}$ para todas as amostras, daí a dificuldade de separar os picos.

| | 273(InAs) | 274(InAs) | 270(InAsP) | 271(InAsP) | 268(InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $E_{G1} = E_z + E_{s(1e^-)}$ (meV) | -104,8 ± 0,6 | -117,1 ± 0,5 | -56,1 ± 0,4 | -70,2 ± 0,2 | -74,1 ± 0,2 |
| $E_{G2} = E_z + E_{s(2e^-)}$ (meV) | -82,8 ± 0,6 | -97,1 ± 0,5 | -38,5 ± 0,4 | -55,6 ± 0,2 | -66,8 ± 0,2 |
| $E_{PL}$(eV) | 1,195 | 1,095 | 1,207 | 1,217 | 1,323 |
| $\Delta E_{L\uparrow\downarrow}$ (meV) | 34 ± 2 | 23 ± 2 | 44 ± 1 | 43,1 ± 0,3 | 23,0 ± 0,5 |
| $E_{CB}$ (meV) | 22 ± 1 | 20 ± 1 | 17,6 ± 0,5 | 14,6 ± 0,5 | 7,3 ± 0,5 |

**Tabela 10 – Posições dos picos das duas Gaussianas ajustadas sobre as curvas de DOS. São apresentados os valores de $E_{G1}$, $E_{G2}$ e da largura de linha $\Delta E_{L\uparrow\downarrow}$, referentes aos estados s(1e⁻) e s(2e⁻). A ultima linha apresenta novamente os resultados das medidas de PL.**

Até o momento obtemos para os pontos quânticos de InAs as posições em energia dos estados s(1e⁻) e s(2e⁻), o valor de $\hbar\omega_0$, o comprimento característico da função de onda e a energia de Bloqueio Coulombiano. Com este conjunto de resultados, é possível obter o valor da energia referente ao confinamento na direção $z$. Novamente, através da relação de dispersão de Fock-Darwin[27,28](Equação 71) para o estado fundamental, temos que:

$$E_{0,0}(B) = E_{s(1e^-)}(B) = E_z + \hbar\omega$$

Com esta relação obtemos a energia de confinamento na direção $z$, $E_z$. A Tabela 11 apresenta os valores para $E_z$ e os valores da altura dos pontos quânticos obtidos por TEM em amostras crescidas sob as mesmas condições que as amostras utilizadas neste trabalho.

| | 273 (InAs) | 274 (InAs) | 270 (InAsP) | 271 (InAsP) | 268 (InP) |
|---|---|---|---|---|---|
| $E_z$ (meV) | -152 ± 6 | -156 ± 3 | -85 ± 1 | -90 ± 1 | -79,1 ± 0,8 |
| **Altura por TEM[34] (Å)** | 36 ± 6 | | 28 ± 6 | 26 ± 5 | 40 ± 10 |

**Tabela 11 – Valores de energia encontrados para o confinamento na direção de crescimento z, $E_z$, e a altura dos pontos quânticos obtidas por TEM em amostras crescidas sob as mesmas condições que as utilizadas neste trabalho.**

Analisando a Tabela 11, vemos que não é possível avaliar a relação entre a concentração de fósforo e a altura dos pontos quânticos de InAsP através das medidas de TEM devido a barra de erro. Porém, através da espectroscopia de capacitância é possível verificar que amostras de InAsP com maior concentração de fósforo possuem uma maior altura. Além disto, cruzando as informações da Tabela 11 com as da Tabela 10, notamos que devido a pequena diferença entre os valores da energia de confinamento em z para as amostras de InAsP, a energia do estado fundamental de elétrons irá depender basicamente da energia de confinamento lateral. As energias obtidas por PL indicariam uma variação de tamanho quase imperceptível, mas pelo fato de por CV separarmos os efeitos de confinamento em z e lateral, percebemos que a forma das ilhas é diferente.

#### 5.3.3.2. Estado Fundamental para Buracos

Através da estrutura de bandas na Figura 62, vemos que é possível obter o nível de confinamento dos buracos, se conhecermos os níveis de confinamento para elétrons, e soubermos a energia necessária para uma transição do nível de buracos para o nível de elétrons.

Como podemos obter a energia necessária para a formação de um par elétron-buraco, através das curvas de PL, e também temos acesso ao *gap* do material onde os SAQDs estão enterrados(GaAs), logo:

$$E_{GAP} = E_0 + E_{PL} + H_0 - E_{ex}$$ **Equação 77**

onde $E_{GAP}$ é o *gap* do GaAs, $E_0$ e $H_0$ a posição do estado fundamental nos níveis de elétrons e buracos[II] respectivamente, $E_{PL}$ a energia necessária para a formação de um par elétron-buraco entre os níveis dos SAQDs, e $E_{ex}$ é a energia excitônica, que aqui aproximamos ela por $E_{ex} = 0$[III]. Aqui, usaremos $E_0 = E_{s(1e^-)}$.

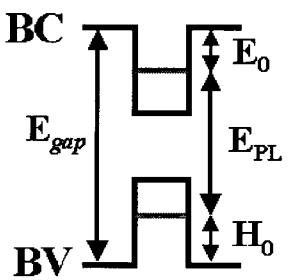



**Figura 62 – Posição dos níveis de buracos e de elétrons no diagrama de bandas.**

Utilizando os resultados obtidos para as amostras, inferimos que o estado fundamental para buracos está a aproximadamente 300meV do topo da banda de valência do GaAs para as amostras de InAs e 240meV para as de InAsP. Para a amostra de InP, estima-se que a posição do estado fundamental para buracos está à aproximadamente 120meV do topo da banda de condução do GaAs. Das medidas de PL obtemos que o alinhamento do InP é do tipo II. Assim, teremos os buracos confinados na interface GaAs/InP, no lado do GaAs. Devido ao descasamento entre os parâmetros de

[II] Devido ao confinamento em z os níveis de buracos pesados e buracos leves se separam , fazendo com que o primeiro esteja mais confinado que o segundo. Com isto, as transições observadas nas linhas de PL se referem àquelas ocorridas entre o estado fundamental de elétrons e o estado fundamental de buracos pesados.

rede do GaAs e do InP, o sistema GaAs/InP está tensionado. Esta tensão pode mudar a energia de *gap* do GaAs na vizinhança dos pontos quânticos[41,42]. A Figura 63 mostra a estrutura da banda de condução BC, para o InP tensionado.

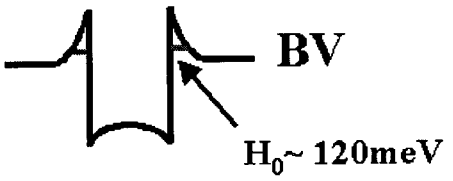



**Figura 63 – Banda de valência para o InP tensionado. Os buracos estão confinados na interface GaAs/InP. A seta indica a posição do nível de buraco.**

### 5.3.3.3. Dispersão dos Estados Eletrônicos

Através da relação de dispersão de Fock-Darwin[27,28](Equação 71), incluindo a contribuição da energia de Bloqueio Coulombiano e o confinamento na direção de crescimento z, podemos construir o diagrama de dispersão dos estados eletrônicos com o campo magnético. Isto se faz possível uma vez que temos determinado o confinamento em $z$, a freqüência natural do sistema, $\omega_0$, e a energia de interação eletrostática (Bloqueio Coulombiano). Os gráficos das Figuras 64, 65 e 66 apresentam a relação de dispersão dos estados eletrônicos dos SAQDs com o campo magnético, segundo a relação de dispersão:

$$E_T(\omega_c) = \underbrace{E_z}_{\substack{Conf.\\ em\ z}} + \underbrace{(2n_r + |m| + 1)\hbar\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2 + \omega_0^2} - m\hbar\frac{\omega_c}{2}}_{Fock-Darwin} + \underbrace{\frac{e^2}{2C_{QD}} n_i(n_i - 1)}_{Coulomb\ Blockade}$$

**Equação 78**

onde $n_r$ é o número quântico radial, m o número quântico azimutal e $n_i$ o número de elétrons em um determinado estado i. $C_{QD}$ é a auto-capacitância de um disco

[III] Não há, no melhor do nosso conhecimento, uma medida experimental de $E_{ex}$, e para os propósitos deste trabalho, a aproximação $E_{ex} = 0$ é boa.

metálico, cujo raio é igual ao comprimento característico da função de onda $l_0$, conforme ilustra a Figura 30. A região em cinza representa a faixa de energia que compreendendo os estados acessíveis. Esta faixa é determinada através do valor da freqüência máxima utilizada.

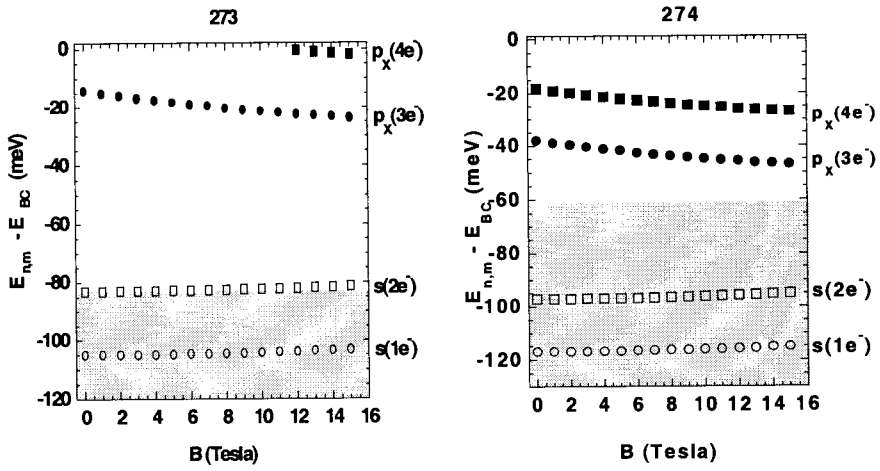



**Figura 64 – Relação de dispersão dos estados eletrônicos como função do campo magnético para as amostras 273 e 274. Ambos os gráficos incluem os efeitos de Bloqueio Coulombiano e o confinamento na direção de crescimento $z$. Os valores de energia foram obtidos em relação ao fundo da banda de condução, BC. A região em cinza é a faixa de energia acessível com a freqüência máxima utilizada para cada amostra.**

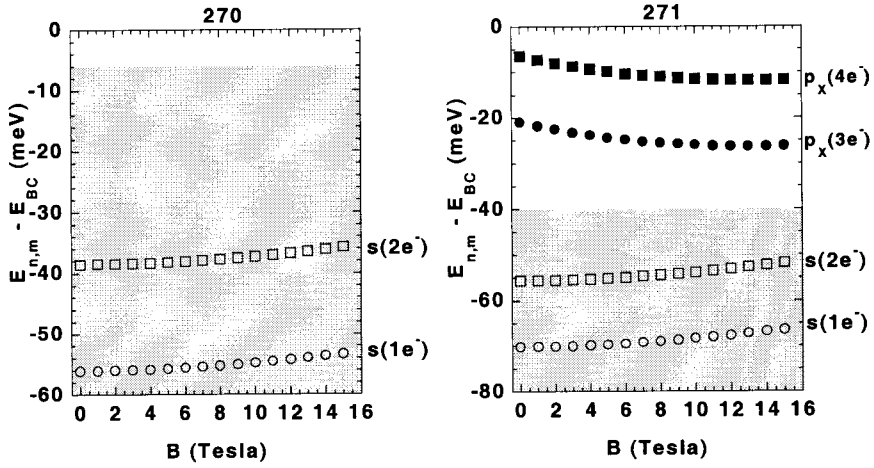



**Figura 65 - Relação de dispersão dos estados eletrônicos como função do campo magnético para as amostras 270 e 271. Ambos os gráficos incluem os efeitos de Bloqueio Coulombiano e o confinamento na direção de crescimento $z$. Os valores de energia foram obtidos em relação ao fundo da banda de condução, BC. A região em cinza é a faixa de energia acessível com a freqüência máxima utilizada para cada amostra.**

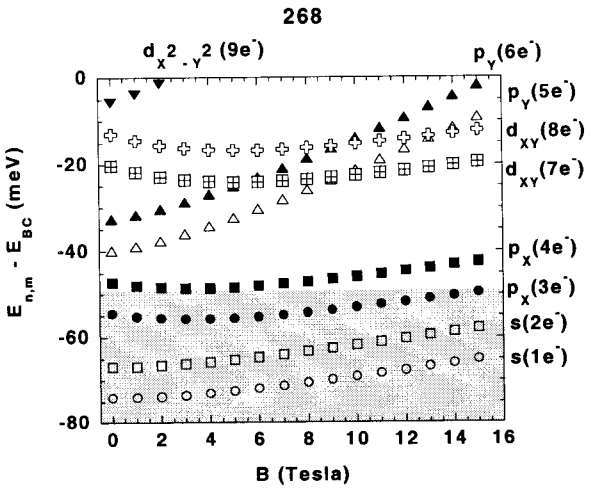



**Figura 66 - Relação de dispersão dos estados eletrônicos como função do campo magnético para a amostra 268. O gráfico inclui os efeitos de Bloqueio Coulombiano e o confinamento na direção de crescimento $z$. Os valores de energia foram obtidos em relação ao fundo da banda de condução, BC. A região em cinza é a faixa de energia acessível com a freqüência máxima utilizada para cada amostra.**

Em todas a amostras foram medidos o estado fundamental para elétrons (s1e⁻ e s2e⁻), exceto na amostra 268, onde há uma contribuição do estado $p_x(3e^-)$.

A Figura 67 indica para a amostra 274, em torno de –60meV, o início do carregamento do primeiro estado excitado. Somente a 15T visualizamos o início do evento de carregamento do estado $p_x(3e^-)$ no diagrama de dispersão.

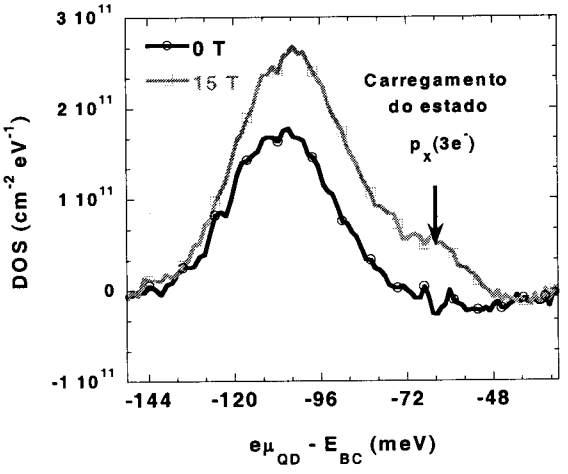



**Figura 67 – Densidade de estados (DOS) como função do potencial químico, com dependência do campo magnético, para a amostra 274. A seta indica a posição do início do carregamento do primeiro estado excitado.**

Para a amostra 271, elevando a freqüência à valores superiores ao utilizado nas medidas, é possível resolver o estado $p_x(4e^-)$. O gráfico da Figura 66 indica a possibilidade de resolver, em freqüências bem elevadas, até o estado $d_{x^2-y^2}(9e^-)$. Mesmo tendo uma energia de confinamento para o estado fundamental muito próxima dos valores obtidos para os pontos quânticos de InAsP, o número de estados ligados para as amostras de InP é notoriamente maior. Isto se deve principalmente ao tamanho dos SAQDs, pois, como os pontos quânticos de InP são maiores que os demais, temos que $\hbar\omega_0$ e a interação coulombiana serão menores que a observada nos SAQDs de InAs e InAsP. O correto para a amostra 268, seria o ajuste da curva de DOS com três Gaussianas ao invés de duas, uma vez que o estado $p_x(3e^-)$ está dentro da faixa de estados acessíveis. Porém, como para 4T<B<15T, o comportamento é semelhante (deslocamento dos níveis eletrônicos com o campo magnético), a aproximação feita é razoável. A Figura 68 mostra que para altos campos a largura de linha da DOS é maior, uma vez que a dispersão de tamanhos promove uma variação em $\hbar\omega_0$.

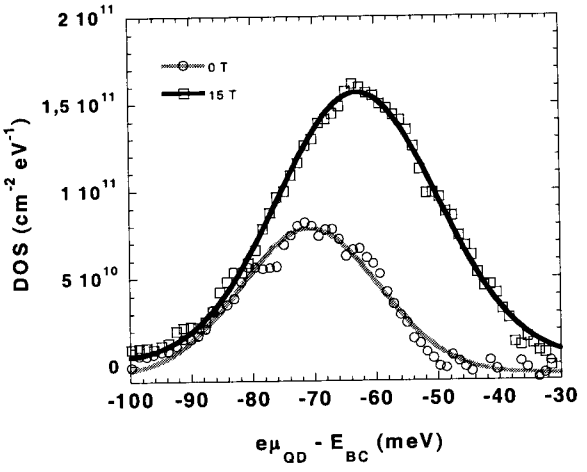



**Figura 68 - Densidade de estados (DOS) como função do potencial químico, com dependência do campo magnético, para a amostra 268.**

Os resultados obtidos no trabalho estão resumidos na Figura 69. Nesta figura, temos a dispersão dos estados eletrônicos com o campo magnético para as amostras com pontos quânticos de InAs (273), InAsP (270 e 271) e InP (268). No topo dos quadros é apresentada a taxa de crescimento utilizada em cada amostra. No fundo dos quadros os dados medidos são representados por uma escala em tons de cinza, onde as regiões mais claras são ordem de $10^{11}cm^{-2}eV^{-1}$, enquanto que as regiões mais escuras possuem densidade de estados nula. Os símbolos mostram a dispersão dos estados com o campo magnético, calculadas segundo a relação apresentada na Equação 78. As linhas brancas limitam a região de estados acessíveis de acordo com a freqüência máxima escolhida. A densidade de estados na faixa de energia acima do valor limitado pela linha branca não está acessível experimentalmente. A seta na parte inferior da figura representa o sentido do aumento da concentração de fósforo.

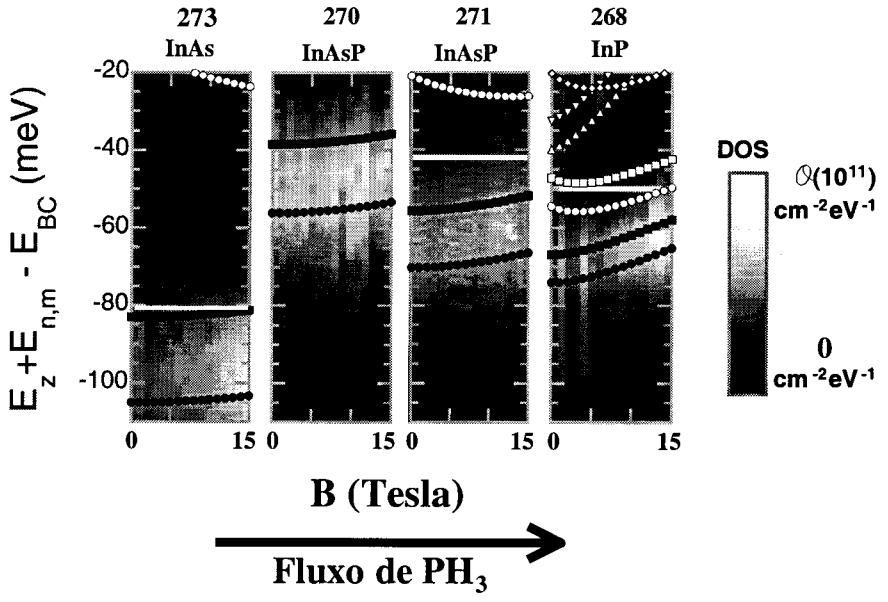



**Figura 69 – Resumo dos resultados obtidos através das medidas de capacitância em pontos quânticos de InAs, InAsP e InP. A taxa de crescimento dos pontos quânticos é apresentada no topo da figura. O fundo dos quadros, em escala de cinza, representam os dados medidos e os símbolos a dispersão dos estados com o campo magnético, calculado a partir da Equação 78. A linha branca marca a região acessível experimentalmente e a seta no fundo da figura indica o sentido de aumento da concentração de fósforo.**

Observamos nos gráficos da Figura 69 que a curvatura da dispersão dos estados com o campo magnético nos diz o quanto o sistema é sensível a este campo. Assim, os elétrons nos pontos quânticos de InP são mais sensíveis ao campo magnético do que os nos pontos quânticos de InAs. Isto se explica pelo fato de que um mesmo campo magnético o raio da orbita ciclotrônica é menor que o raio do ponto quântico de InP e maior que o raio do ponto quântico de InAs. Neste caso, elevando ainda mais o campo magnético, para o InP que tem maior tamanho, vale a aproximação:

$$E(B)=\hbar\sqrt{\left(\frac{eB}{2m^*}\right)^2+\omega_0^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{eB}{2m^*}>>\omega_0 \quad \Rightarrow \quad E(B)=\hbar\frac{e}{2m^*}\mathrm{B}$$

Ou seja, em campos magnéticos tais que a freqüência ciclotrônica é bem maior que a freqüência natural do sistema, a dispersão dos estados com o campo magnético será linear. Este efeito pode ser observado no gráfico da dispersão dos estados com o campo magnético para os pontos quântico de InP.

Através da separação entre os estados s($1e^-$) e s($2e^-$), vemos que a interação eletrostática reduz à medida que a concentração de fósforo aumenta. Isto mostra que o tamanho do ponto quântico aumenta com a concentração de fósforo. Esta observação está em concordância com a relação $L \propto \varepsilon_{//}^{-2}$, uma vez que o InP tem um descasamento menor (3,8%) que o InAs (7%), e assim seu tamanho é maior.

Observamos ainda que o aumento da taxa de crescimento de 0,2ML/s para 0,4ML/s dos pontos quânticos de InAsP favorece uma maior incorporação de arsênico, já que o tamanho deles reduz. Esta redução é vista através do aumento da interação eletrostática entre os estados s($1e^-$) e s($2e^-$). Também verificamos que tanto a redução da taxa de crescimento como o aumento da quantidade de fósforo no pontos quânticos

provocam um maior confinamento dos estados eletrônicos do sistema InAsP. Comparando os valores da energia do estado fundamental das amostras 270 e 271 verificamos que o aumento da concentração de fósforo resulta na modificação dos tamanhos dos pontos quânticos. Esta comparação é possível pelo fato de termos conseguido separar a contribuição do confinamento lateral e em z.

# 6. Conclusões

Através da espectroscopia de capacitância foi possível realizar o estudo das propriedades eletrônicas em amostras com SAQDs de InAs, InAsP e InP.

Com as medidas de capacitância em função da freqüência, a densidade de estados dos sistemas foi calculada.

Vimos que a modelagem do sistema através da teoria WKB ajuda a explicar a dependência da capacitância com a freqüência. Ajustando as curvas segundo as equações propostas pelo modelo, os valores da massa efetiva para o elétron através da barreira de tunelamento de GaAs foram determinados.

Ajustando as curvas de densidade de estados com a soma de duas Gaussianas, obteve-se a energia de confinamento para os estados s($1e^-$) e s($2e^-$). Além disto, integrando a área abaixo da curva de DOS, a densidade de pontos quânticos foi calculada. Esta densidade quando comparada à obtida por TEM se mostra em boa concordância.

Das medidas C-V com o campo magnético, obteve-se a energia de confinamento em $z$ e a freqüência natural do sistema $\hbar\omega_0$. Com a relação para o confinamento quântico encontrou-se o comprimento característico da função de onda $l_0$ e, na seqüência, a energia de Bloqueio Coulombiano. Através das medidas de TEM foi

possível comparar o raio dos pontos quânticos com o comprimento característico da função de onda.

Juntamente com os resultados de PL, a energia referente ao estado fundamental de elétrons foi utilizada no cálculo do valor aproximado da posição do estado fundamental de buracos. Levando em consideração a variação do *gap* do GaAs na vizinhança dos pontos quânticos, os resultados obtidos tornam-se razoáveis. Mesmo assim, uma análise mais exata deverá ser feita.

Como a estequiometria dos pontos quânticos de InAsP não é conhecida, devido à dificuldade do controle de absorção dos elemento V, este trabalho ajudou a entender qualitativamente a formação destes pontos quânticos, uma vez que é possível associar os parâmetros de crescimento aos resultados obtidos.

Finalmente, com os resultados levantados neste trabalho foram determinadas as relações de dispersão dos estados eletrônicos para pontos quânticos de composições distintas (InAs, InAsP e InP). A dispersão dos estados foi obtida pela relação de Fock-Darwin[27,28] e inclui os efeitos da interação coulombiana (Bloqueio Coulombiano) e do confinamento na direção de crescimento. Da determinação dos estados ligados temos previsto o que poderá ser visto em espectroscopia de capacitância quando variamos a freqüência do sinal alternado.

# 7. Referências Bibliográficas


1 BIMBERG D., GRUNDMANN M., LEDENTSOV N.N., *Quantum Dots Heteroestrutures*, Chichester, John Wiley & Sons, 1999.

2 KASTNER M.A.,Phys.Today, January **24**(1993).

3 HANSEN W., SMITH T.P., LEE K.Y., BRUM J.A., KNOEDLER C.M., HONG J.M. KERN D.P., Phys. Rev. Lett. **62**, 2168 (1989).

4 KOSAKA H., KISELEV A.A., BARON F.A., KIM K.W. and YABLONOVITCH E., Electron Lett. 37, 464 (2001).

5 JACAK L., HAWRYLAK P., WOJS A., *Quantum Dots*, New York, Springer, 1998.

6 REED M.A. et al, J. Vac. Sci. Technol. B **4 (1)**, 358 (1986).

7 REED M.A., Scientific American **268 (1)**, 118 (1993).

8 BO X.Z., ROKHINSON L.P., YIN H., TSUI D.C. and STURM, J.C., Appl. Phys. Letts **81,** 3263(2002).

9 SHCHUKIN V. A., LEDENSTOV N. N., KOPEV P. S., and BIMBERG D., Phys.Rev. Lett. 75, 2968 (1995).

10 DARUKA I., BARABÁSI A.L., Phys. Rev. Lett. **79,** 3708(1997).

11 PETROFF P.M., DENBARRS S.P., Superlattice and Microestrutures **15,** 15(1994).

12 LEONARD D., POND K. and PETROFF P.M., Phys. Rev B **50**, 11687(1994).

13 CESCHIN A.M., MASSIES J., J. Crys. Growth **114**, 693(1991).

14 KROEMER H., CHIEN W., HARRIS J. S., EDWALL D. D., Appl. Phys. Lett. **36**, 295 (1980).

15 KROEMER H., Rev. Mod. Phys, **73** (2001).

16 MEDEIROS-RIBEIRO G., LEONARD D., PETROFF P.M., Appl. Phys. Lett, **66**, 1767 (1995).

17 CHIQUITO A.J., PUSEP Y.A., MERGULHÃO S., GALZERANI J.C., MOSHEGOV N.T., MILLER D.L., J. Appl. Phys. **88**, 1987 (2000).

18 MEDEIROS-RIBEIRO G., PINHEIRO M.V.B., PIMENTEL V.L.,MAREGA E., Appl. Phys. Lett. **80**, 4229 (2002).

19 KUMAR A., LAUX S.E., STERN F., Phys. Rev. B **42**, 5166 (1990).

20 MEDEIROS-RIBEIRO G., *Tese de Doutorado*, Universidade de Minas Gerais, Belo Horizonte (1996).

21 SZE S. M., *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, 1981.

22 KROEMER H., Appl. Phys. Lett, **45**, 504 (1985).

23 LUYKEN R.J., LORKE A., GOVOROV A.O., KOTTHAUS J. P., MEDEIROS-RIBEIRO G. AND PETROFF P. M., Appl. Phys. Lett, **74**, 2486 (1999).

24 MEDEIROS-RIBEIRO G., GARCIA J.M., PETROFF P.M., Phys. Rev. B **56**, 3609 (1997).

25 PETROFF P.M., LORKE A. AND IMAMOGLU A., Physics Today, May **46**(2001).

26 WOJS A., HAWRYLAK P.,FAFARD S.,JACK L., Phys. Rev. B **54**, 5604 (1996).

27 FOCK V., Z. Phys. **47**, 446(1928).

28 DARWIN C.G., Proc. Cambridge Phylos. Soc., **27**, 86(1930).

29 MAKSYM P.A., CHAKRABORTY T., Phys. Rev. Lett. 65 108(1990).

30 WARBURTON R.J., DURR C.S.,KARRAI K. KOTTHAUS J.P.,MEDEIROS-RIBEIRO G., PETROFF P.M, Phys. Rev. Lett. **79** 5282(1997).

31 LORKE A., KOTTHAUS J.P., Phys. Rev. Lett. **64** 2559(1990).

32.MEIRAV U., KASTER M.A., WIND S.J., Phys. Rev. Lett. **65** 771(1990).

33 MILLER B.T., HANSEN W., MANUS S, LUYLEN R.J., LORKE A., KOTTHAUS J.P., MEDEIROS-RIBEIRO G., PETROFF P.M., PHYSICA B, **249**, 257(1998).

34 RIBEIRO E., MAKLTEZ R.L., CARVALHO W., UGARTE D., MEDEIROS-RIBEIRO G., Appl. Phys. Lett. **81**, 2953 (2002).

35 NAKAEMA M. K. K., IIKAWA F., BRASIL M. J. S. P., RIBEIRO E., MEDEIROS-RIBEIRO G., CARVALHO W., MAIALLE M. Z., DEGANI M. H., Appl. Phys. Lett, **81**, 2743 (2002).

36 MILLER B.T., HANSEN W., MANUS S, LUYLEN R.J., LORKE A., KOTTHAUS J.P., HUANT S., MEDEIROS-RIBEIRO G., PETROFF P.M., Phys. Rev. B **56**, 6764 (1997).

37 MEDEIROS-RIBEIRO G., LEONARD D., PETROFF P.M., Appl. Phys. Lett, **66**, 1767 (1995).

38 MEDEIROS-RIBEIRO G., PIKUS F.G., PETROFF P.M., EFROS A.L., Phys. Rev. B **55**, 1568 (1997).

39 BEENAKKER C.W.J., Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991).

40 DREXLER H., LEONARD D., HANSEN W., KOTTHAUS J.P., PETROFF P.M., Phys. Rev. Lett. **73**, 2252 (1994).

41 XU Z.,PETROFF P. M., J. Appl. Phys. **69**, 6564(1991).