

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FISICA GLEB WATAGHIN

"TUNELAMENTO EM HETEROESTRUTURAS DE SEMICONDUTORES"

Peter Alexander Bleinroth Schulz

Orientador: Prof. Cylon E.T. Gonçalves da Silva

Co-orientador: Prof. Carlos Tejedor

*Este exemplar corresponde
à redação final de Tese
definitiva pelo aluno, aprovada
pela Comissão Julgadora
Cylon E.T. Gonçalves da Silva
Campinas, 30.3.70*

Tese apresentada ao Instituto de
Física Gleb Wataghin da
Universidade Estadual de Campinas
para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Campinas

janeiro 1990

CLASSIF.
AUTOR
V. EX.
TOMBO BCI	105137
IF	

I. FÍSICA - UNICAMP	
n.º	TD
n.º	SCH 942
CE	CA
n.º Tombo	TD 788 m
301119	

M
CM 000 105137
OK Dina 03/06/98

A Marcia e aos meus pais,

Lilo e Waldemar.

RESUMO

Nesse trabalho estudamos vários aspectos do fenômeno de tunelamento eletrônico em heteroestruturas de semicondutores. Discutimos e aplicamos diferentes métodos de cálculo de probabilidades de transmissão e correntes de tunelamento. Ênfase especial é dada ao problema de tunelamento ressonante através de poços quânticos de semicondutores. Efeitos de desordem e campo magnético sobre a corrente de tunelamento também são analisados.

ABSTRACT

In this work we study many aspects of electronic tunneling through semiconductor heterostructures. We discuss and apply different methods to calculate transmission probabilities and tunneling currents. Special attention is paid to the resonant tunneling through quantum wells problem. Disorder effects and the influence of magnetic fields on tunneling currents are also analyzed.

INDICE

1. Introdução	1
2. Correntes de tunelamento de um diodo de poço quântico	8
2.1 Heterojunções de GaAs/(Ga,Al)As	8
2.2 Tunelamento na aproximação da massa efetiva	11
2.3 Tunelamento ressonante em diodos de poço quântico	15
3. Diodos de barreira única com dois degraus	21
4. Tunelamento ressonante através de níveis de Landau em poços quânticos na presença de alargamento por espalhamento inelástico	28
4.1 Introdução	28
4.2 Modelo de cálculo para magnetotunelamento ressonante	29
4.3 Efeitos de espalhamento inelástico	35
4.4 Características de corrente - voltagem	38
4.5 Características de corrente - campo magnético	48
5. Tunelamento eletrônico na presença de um campo magnético perpendicular à corrente	53
5.1 Introdução	53
5.2 Estados estacionários na presença de um campo magnético	54

Tunelamento eletrônico em heteroestruturas de semicondutores

1. Introdução

Tunelamento de partículas através de uma barreira de potencial é um conceito central da mecânica quântica e sua observação experimental é uma manifestação do caráter ondulatório da matéria. Desde os primórdios da mecânica quântica, modelos de tunelamento vem sendo aplicados a fenômenos envolvendo diferentes tipos de partículas em uma extensa série de sistemas que requerem descrições microscópicas¹. No presente trabalho nos limitaremos a estudar o tunelamento de elétrons em sistemas, onde as barreiras são formadas por heteroestruturas de semicondutores.

O protótipo de um sistema assim é, no entanto, uma "heterojunção" metal-vácuo. Em 1928, Fowler e Nordheim² explicaram, com um modelo de tunelamento através de uma barreira unidimensional, as principais características da emissão de elétrons de metais frios por meio da aplicação de um campo elétrico externo intenso.

A partir dos anos 50, o problema de como conceber e fabricar dispositivos baseados em tunelamento tem recebido um interesse crescente. A resposta a esse problema está na criação de junções entre materiais de propriedades eletrônicas diferentes. Um exemplo importante é o diodo de efeito túnel, ou diodo Esaki³, que se trata de uma homojunção p-n, degenerada dos dois lados. Essa forte dopagem é necessária para reduzir a espessura da

camada de depleção (que atua como barreira) e fornecer uma fonte e um dreno de carga (posicionando o nível de Fermi dentro da banda de condução e dentro da banda de valência, no lado n e p da junção, respectivamente). A figura 1.1 ilustra as propriedades desse diodo sob a aplicação de um campo elétrico.

Barreiras também podem ser formadas por meio de heterojunções. As junções metal-isolante-metal (M-I-M)⁴ figuram como primeiro exemplo importante dessa classe de dispositivos de tunelamento. As barreiras que se formam nas interfaces M-I (figura 1.2) são determinadas, a grosso modo⁵, pela diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica do material isolante. Na figura 1.2 vemos claramente uma fonte e um dreno de carga e uma barreira; através da qual esperamos uma corrente de tunelamento, a partir do momento em que a aplicação de um campo elétrico sobre a barreira desalinhe os níveis de Fermi da fonte e do dreno.

As características de corrente-voltagem (I-V) de dispositivos como o da figura 1.2 não apresentam estruturas interessantes como no caso do diodo Esaki. Buscava-se, no entanto, a realização de um triodo de elétrons quentes⁶ em sistemas M-I-M-I-M. Além disso, havia, no final dos anos sessenta, uma pista muito mais instigante: "Um novo tipo de efeito de quantização espacial poderia ocorrer em junções M-I-M-I-M, quando a camada metálica central se tornasse atômicamente fina...efeitos similares ocorreriam se essa camada 'metálica' central fosse um

semicondutor ou semimetal. Esses efeitos...nunca foram observados."⁷

Essas idéias retomaram um impulso definitivo a partir da proposta de Esaki e Tsu⁸ de fazer uma modulação artificial da estrutura eletrônica, superredes, em sequências de heterojunções de semicondutores, em vez de heterojunções metal-isolante. Esses sistemas; para os quais a dimensão característica para o aparecimento de efeitos de quantização espacial não é mais da ordem de angstroms como em metais, mas de até dezenas de nanômetros; passaram a ser factíveis com o aperfeiçoamento de técnicas de crescimento epitaxial de semicondutores III-V⁹, em particular as ligas de GaAlAs.

As primeiras observações de efeitos de quantização espacial nessa nova classe de heteroestruturas artificiais foram medidas de correntes de tunelamento ressonante numa estrutura simétrica de GaAlAs (barreira) - GaAs (poço) - GaAlAs (barreira)¹⁰. Dispositivos de tunelamento ressonante passaram a ser estudados nos últimos dez ou quinze anos com um interesse crescente; motivado não só pelas possibilidades de aplicação tecnológica, como também por questões fundamentais ao fenômeno de tunelamento em si, muitas das quais continuam em aberto.

No que segue, resumiremos as principais características das ligas $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Uma vez feito isso, descreveremos um protótipo de dispositivo de tunelamento com barreiras de GaAlAs crescidas epitaxialmente. Esse será o nosso ponto de partida para

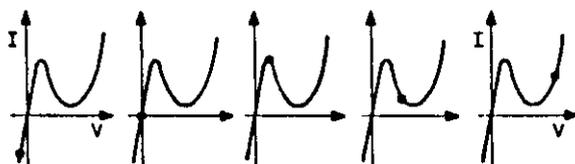
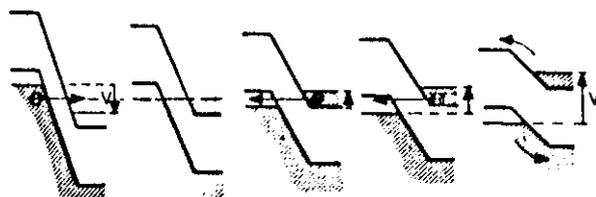
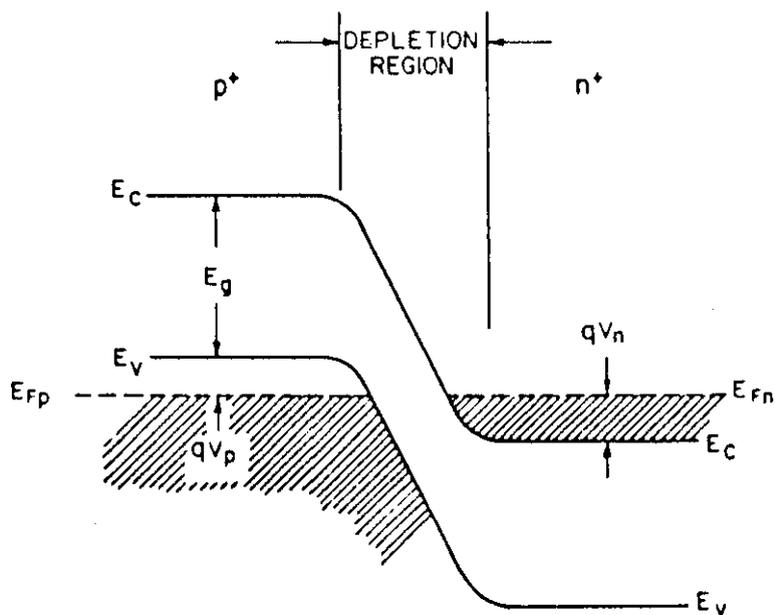


Fig. 1.1. O diagrama de bandas de um diodo túnel está esquematizado na painel superior da figura. O painel inferior ilustra o comportamento desse dispositivo sob a aplicação de diferentes voltagens externas com os valores de corrente associados na característica corrente-voltagem.

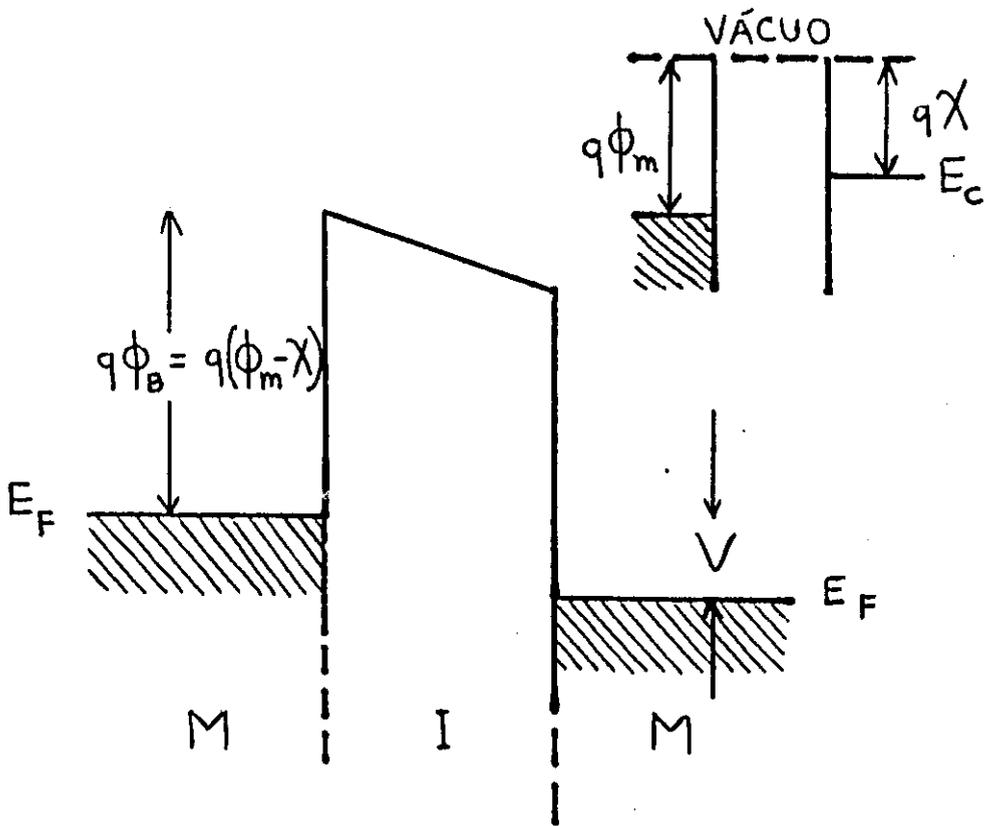


Fig. 1.2. Esquema das bandas de energia em uma junção metal-isolante-metal, não levando em conta efeitos de cargas espaciais. A altura da barreira está determinada pela diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica do material isolante. Essas quantidades estão definidas no diagrama inserido na figura, onde metal e isolante estão separados (ver ref. 5).

introduzir um modelo, na aproximação de massa efetiva, de tunelamento ressonante para calcular características de corrente-voltagem nesses dispositivos. Nos outros capítulos discutiremos aplicações desse modelo, o uso de abordagens alternativas, tunelamento em presença de campos magnéticos e a própria limitação do conceito de tunelamento ressonante como um processo puramente elástico para interpretar os processos de tunelamento em sistemas reais.

Esta tese apresenta resultados que deram suporte parcial ou total aos seguintes trabalhos já publicados ou em processo de publicação:

- Simple model for resonant tunneling beyond the effective-mass approximation, P.A.Schulz and C.E.T.Gonçalves da Silva, Phys.Rev.B35, 8126 (1987)
- Resonant tunneling beyond the effective-mass approximation, P.A.Schulz and C.E.T.Gonçalves da Silva, em: Current Topics on Semiconductor Physics (World Scientific, Singapore, 1988), p.79
- Two-step barrier diodes, P.A.Schulz and C.E.T.Gonçalves da Silva, Appl.Phys.Lett. 52, 960 (1988)
- Disorder effects on resonant tunneling in double-barrier quantum wells, P.A.Schulz and C.E.T.Gonçalves da Silva, Phys.Rev.B38, 10718 (1988)
- Quantum oscillations and negative differential resistance in nonresonant magnetotunneling, P.A.Schulz and C.Tejedor,

Phys.Rev.B39, 11187 (1989)

- Resonant tunneling through Landau levels in quantum wells in the presence of inelastic scattering broadening, P.A.Schulz and C.Tejedor, Phys.Rev.B41, 3053 (1990)
- Coherent and sequential resonant magnetotunneling through double barrier structures, G.Platero, P.A.Schulz and C.Tejedor, Surf.Sci. (aceito para publicação)
- Quantum transmission channels for magnetotunneling in semiconductor microstructures, G.Platero, P.A.Schulz, L.Brey, and C.Tejedor, Surf.Sci. (aceito para publicação)

2. Correntes de tunelamento de um diodo de poço quântico

2.1 Heterojunções de GaAs/GaAlAs

Os semicondutores mais utilizados até hoje, na fabricação de heteroestruturas por crescimento epitaxial são as ligas de GaAlAs. A variação no valor da energia de gap, acompanhada por um quase perfeito casamento de parâmetros de rede entre essas ligas com diferentes concentrações de alumínio, figura 2.1; abre um amplo leque de possibilidades para o crescimento de dispositivos de boa qualidade baseados em heteroestruturas de GaAs e GaAlAs¹¹. Os métodos de crescimento mais utilizados, a epitaxia por feixe molecular (MBE)⁹ e deposição de vapores químicos de gases organo-metálicos (MOCVD)¹², permitem formar interfaces abruptas da ordem de monocamadas atômicas.

Algumas características da estrutura da banda de condução de GaAlAs estão resumidas na figura 2.2. O GaAs é um semicondutor de gap direto, enquanto que AlAs é de gap indireto. A transição se faz a uma concentração de alumínio de aproximadamente 40%, sendo que o topo da banda de valência está sempre no ponto Γ ¹³. O alinhamento das bandas numa heterojunção entre semicondutores está ligado às propriedades eletrônicas de interface, de modo que é praticamente tão abrupto quanto a variação na composição do material crescido epitaxialmente para fabricar a junção. Uma análise "ab initio" desse alinhamento ainda é uma questão em

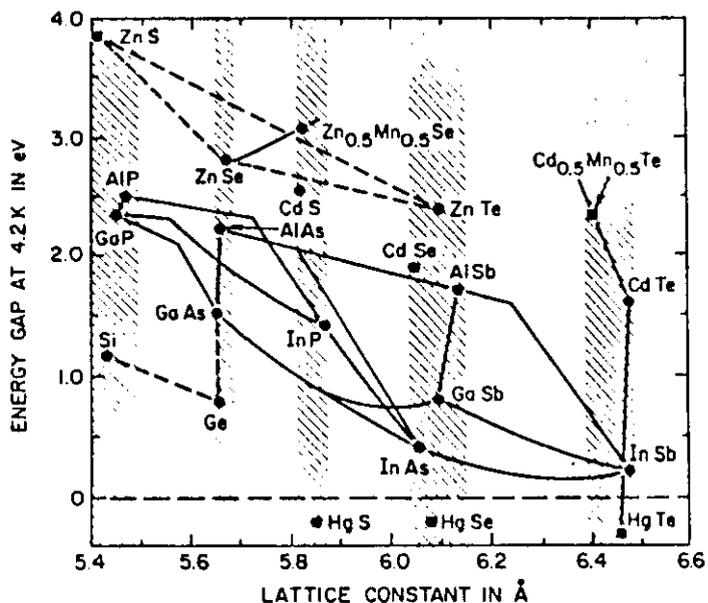


Fig. 2.1. Relação entre os parâmetros de rede e energias de gap para diversos materiais semicondutores. As linhas indicam essa relação para as ligas intermediárias entre dois semicondutores diferentes

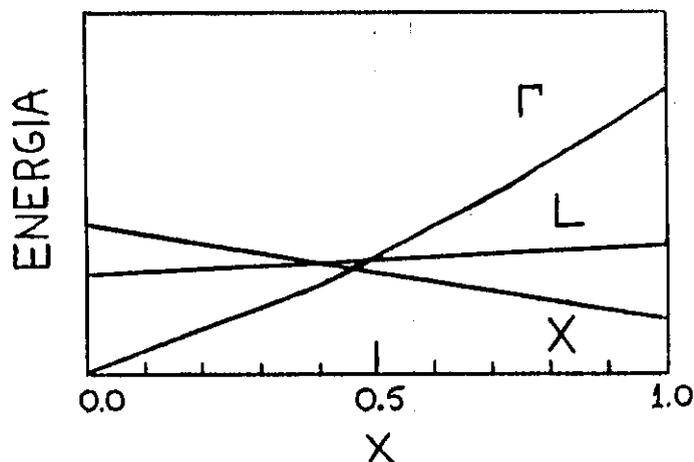


Fig. 2.2. Posição relativa entre os mínimos da banda de condução de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, em função da concentração x de Al. O topo da banda de valência desse material está no ponto Γ para qualquer valor de concentração de Al.

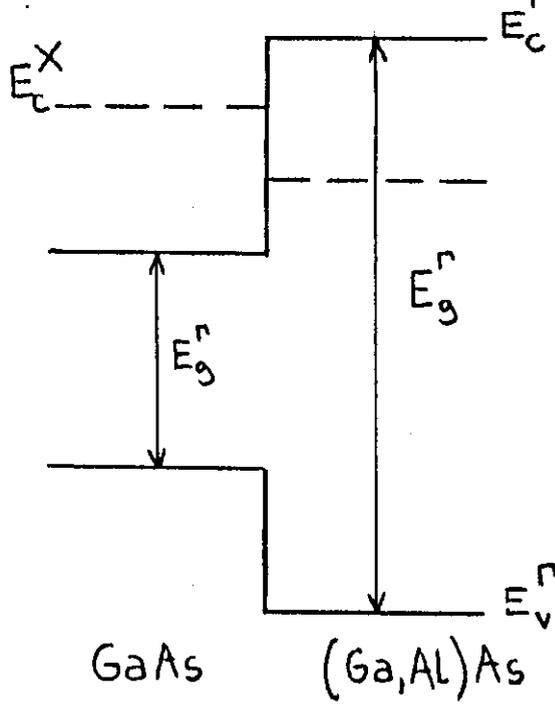


Fig. 2.3. Alinhamento das bandas de valência e condução em uma heterojunção GaAs/(Ga,Al)As. As linhas tracejadas indicam esquematicamente o alinhamento das bandas de condução quando a concentração de Al é tal que (Ga,Al)As passa a ser um semiconductor de gap indireto.

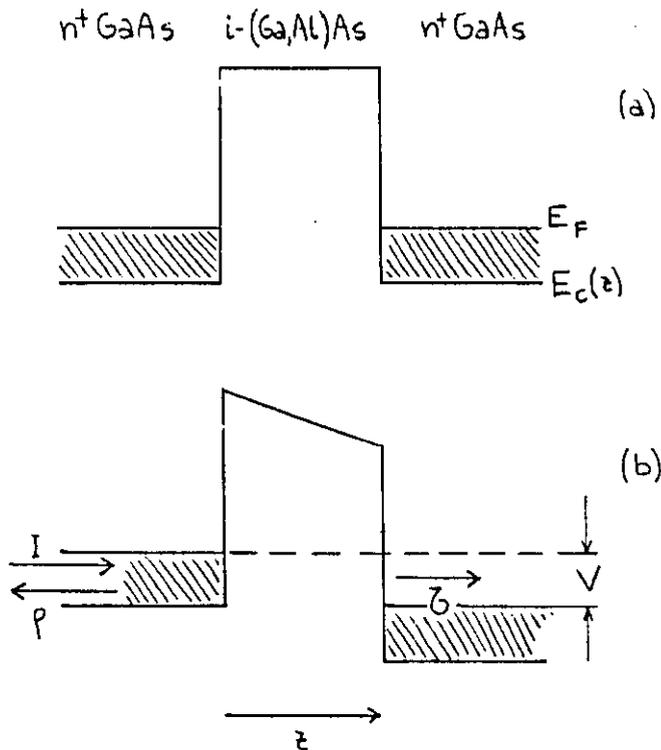


Fig. 2.4. Diagrama de bandas de condução de uma heteroestrutura n-GaAs / i-(Ga,Al)As / n-GaAs em equilíbrio termodinâmico (a) e com uma voltagem V , aplicada sobre a barreira (b).

aberto, mas o problema pode ser introduzido didaticamente com o modelo onde o alinhamento das bandas de condução seria determinado pela diferença entre as afinidades eletrônicas dos semicondutores em questão¹⁴. O alinhamento das bandas numa heterojunção GaAs/GaAlAs está esquematizada na figura 2.3, sendo que o valor aceito experimentalmente para a descontinuidade entre as bandas de valência é de aproximadamente 40% da diferença total entre os gaps diretos dos dois materiais em questão. A descontinuidade entre as bandas de condução cresce com a concentração de Al na barreira até a transição de gap direto para indireto no GaAlAs, quando essa descontinuidade passa a diminuir, além de mudar a simetria do fundo da banda de condução¹⁴. De um modo geral estaremos interessados em situações onde a concentração de alumínio na barreira está abaixo do ponto onde ocorre essa mudança de simetria. Para essa região de concentrações de Al, a descontinuidade entre os fundos das bandas de condução numa heterojunção GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs e as respectivas massas efetivas são dadas por: $\Delta E_c(x) = 740x$ (meV) e $m^*(x) = (0.067 + 0.085x)m_0$ ¹³.

2.2 Tunelamento na aproximação da massa efetiva

Um dispositivo de tunelamento com uma estrutura fonte-barreira-dreno similar às junções M-I-M é obtido com o crescimento epitaxial sucessivo de três camadas semicondutoras: n⁺GaAs, 1-GaAlAs e n⁺GaAs, figura 2.4. Os contatos de GaAs são

degenerados para $n \geq 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ¹⁵. O potencial devido às heterojunções, que é superposto ao potencial cristalino periódico é de caráter unidimensional, não havendo quebra de simetria translacional nas direções paralelas às interfaces. Isso é uma primeira aproximação, evidentemente, pois quebras de simetria ocorrem devido a presença de defeitos nas interfaces, por exemplo. Definiremos a direção de crescimento epitaxial, ao longo da qual se manifesta a variação unidimensional do potencial devido à presença de heteroestruturas, como sendo a direção z.

Essa descrição do problema sugere as seguintes simplificações adicionais para construir o hamiltoniano do sistema ¹⁶:

i) cada camada semicondutora do sistema é tratada na aproximação da massa efetiva.

ii) a equação de Schroedinger é separável nas coordenadas paralela e perpendicular ao plano da junção.

iii) A energia total, $E = E_z + E_{\parallel}$, e o momento paralelo às interfaces, k_{\parallel} , são conservados.

Nesse limite, o problema não trivial se reduz a resolver uma equação unidimensional da forma

$$[-\hbar^2/2(d/dz(1/m(z))d/dz + V(z) - E] \psi_E(z) = 0, \quad (2.1)$$

onde $V(z)$ é o potencial introduzido pelas descontinuidades das bandas de condução. O termo de energia cinética é reescrito dessa forma para restaurar o caráter hermitiano de um problema onde a

massa efetiva varia ao longo da direção z ¹⁷. Nessa equação ψ_E é a função envelope da função de onda monoelétrica real do sistema, que está sujeita em cada interface z_1 às seguintes condições de contorno que garantem a conservação de corrente¹⁸:

$$\psi_E(z_1^-) = \psi_E(z_1^+) e, \quad (2.2a)$$

$$1/m(z_1^-)d\psi_E/dz|_{z^-} = 1/m(z_1^+)d\psi_E/dz|_{z^+}. \quad (2.2b)$$

Nosso interesse é calcular a corrente de tunelamento através de uma barreira de potencial de largura finita e forma arbitrária. É fácil mostrar que a corrente por unidade de área, j , para uma estrutura em equilíbrio termodinâmico como a da figura 2.4a, pode ser escrita como

$$j = (e/4\pi^3\hbar) \int dk_z dk_{\parallel} f(E) T(E_z) \partial E / \partial k_z, \quad (2.3)$$

onde $f(E)$ é a distribuição de Fermi-Dirac e $T(E_z)$ é a probabilidade de tunelamento, definida como a razão entre a corrente incidente e a transmitida através da barreira. Se o equilíbrio termodinâmico é rompido com a aplicação de uma voltagem V na barreira, a expressão para a densidade de corrente passa a ser¹⁶

$$j = (e/4\pi^3\hbar) \int dE_z dk_{\parallel} [f(E) - f(E+eV)] T(E_z), \quad (2.4)$$

onde a origem de energia é o fundo da banda de condução do contato que funciona como dreno (contato da esquerda no caso da figura 2.4b).

A integração sobre o momento paralelo resulta em uma expressão que é comumente utilizada nos cálculos que aparecem na literatura^{18,19}:

$$j = (em^*kT/2\pi^2\hbar^3) \int_0^\infty dE_z T(E_z, V) \ln[(1 + e^{A/kT}) / (1 + e^{B/kT})], \quad (2.5)$$

onde $A = (E_F - E_z)$ e $B = (E_F - E_z - eV)$.

As probabilidades de transmissão são obtidas com a solução da equação de Schroedinger. Infelizmente as soluções analíticas só existem para alguns tipos de perfil de potencial. Procedemos portanto com um método numérico, onde transformamos a equação de Schroedinger em uma equação de diferenças finitas, que pode ser resolvida, por exemplo, com o método de matriz de transferência²⁰. Esse método permite introduzir qualquer perfil de potencial pela discretização do mesmo em degraus infinitesimais. Finalmente obtemos as probabilidades de transmissão com o acoplamento dessa solução da equação de Schroedinger, na região de uma barreira arbitrária, com ondas planas à esquerda, $e^{ikz} + \rho e^{-ikz}$, e à direita, τe^{ikz} ; segundo a convenção da figura 2.4²¹:

$$T(E_z) = \tau^* \tau [(E_z + V)/E]^{1/2}, \quad (2.6)$$

$$\tau^* \tau + \rho^* \rho = 1.$$

2.3 Tunelamento ressonante em diodos de poço quântico

O método apresentado acima é, como dissemos, aplicável a sistemas com barreiras de formas arbitrárias. Um caso interessante é o de duas barreiras de potencial retangulares, separadas por um poço quântico, como mostra a figura 2.5. Esse é o exemplo mais simples onde ocorre tunelamento ressonante. Essa estrutura pode ser simulada por um dispositivo real crescido epitaxialmente, substituindo a camada central de GaAlAs na figura 2.4 por duas camadas do mesmo material separadas por uma camada de GaAs. Esse dispositivo foi inicialmente estudado por Esaki, Chang e Tsu¹⁰ e é conhecido na literatura por diodo de poço quântico com barreira dupla. Para o perfil de potencial da figura 2.5a, a probabilidade de transmissão total pode ser calculada analiticamente²² e colocada na seguinte forma geral²³:

$$T_T = C_1 / [C_2 T_e T_d + C_3 T_e / T_d + C_4 T_d / T_e + C_5 / (T_e T_d)] , \quad (2.7)$$

onde T_e e T_d são as probabilidades de transmissão da barreira esquerda e direita, respectivamente, que são exponencialmente evanescentes. Os fatores C_i (que contém fatores de fase determinados pela geometria da estrutura) tem uma dependência em energia muito mais fraca, portanto serão tratados, em primeira aproximação, como constantes. Para poder fazer uma análise qualitativa das propriedades de tunelamento desse tipo de

estrutura, manipularemos a expressão acima para o limite de barreiras espessas ($T_e, T_d \ll 1$). Essa aproximação não implica, no entanto, na perda de generalidade das conclusões. Nesse limite, a probabilidade de transmissão total é dominada pelo último termo no denominador da eq. 2.7

$$T_T \approx T_e T_d \ll 1 . \quad (2.8)$$

Nesse caso a presença do poço na estrutura apenas modifica a fase da função de onda do elétron que tunela. Quantitativamente temos uma probabilidade de transmissão característica de uma barreira simples com a espessura igual à soma das duas separadas pelo poço quântico da figura 2.5.

Para certos valores de energia, no entanto, C_B se anula²³, cancelando o termo dominante no denominador e produzindo uma ressonância:

$$T_T^{res} \approx C_1 / (C_3 T_e / T_d + C_4 T_d / T_e) . \quad (2.9)$$

Vemos que a probabilidade de transmissão em ressonância pode ser ordens de grandeza maior do que a fora de ressonância. Para o caso de uma estrutura perfeitamente simétrica $T_T^{res} = 1$, podendo, no entanto, chegar a ser ordens de grandeza menor, quando quebramos essa simetria (curvando o perfil de potencial com a aplicação de um campo elétrico, por exemplo).

A condição de ressonância, $C_B=0$, é satisfeita quando a energia do elétron que tunela é igual à energia de um estado quase ligado do poço quântico. Dito de outra forma: a condição $C_B=0$ corresponde às condições de contorno para um estado ligado no poço. A expressão completa para a probabilidade total de transmissão de uma estrutura com barreira dupla pode ser expandida em torno de uma energia de ressonância, revelando um comportamento lorentziano para $T(E)$ ²⁴:

$$T(E) = (\Gamma^2/4) [(E-E_0)^2 + \Gamma^2/4]^{-1}, \quad (2.10)$$

onde $\Gamma/2$ é a meia largura do pico de ressonância e está ligado ao tempo de vida do estado quase ligado E_0 : $\tau = 2\hbar/\Gamma$ ²⁵.

Esse comportamento ressonante se revela na característica de corrente-voltagem de um diodo de poço quântico com barreira dupla. Podemos injetar elétrons de um dos contatos fortemente dopados para o poço quântico, mediante a aplicação de uma voltagem sobre o dispositivo (figura 2.5a). Para uma faixa de valores de voltagem, existem elétrons disponíveis para tunelar ressonantemente através do estado quase ligado do poço (figura 2.5b), fazendo com que a corrente de tunelamento aumente consideravelmente devido ao aumento da probabilidade de transmissão em ressonância. Para valores de voltagem em que o estado quase ligado cai abaixo do fundo da banda de condução do emissor, a condição de ressonância é quebrada, não sendo mais

possível tunelar através desse estado conservando a energia total e o momento paralelo ao mesmo tempo, provocando uma súbita queda na corrente de tunelamento (figura 2.5c). Essa é a origem da resistência diferencial negativa nesses dispositivos.

Para avaliar numericamente a densidade de corrente de tunelamento através de um diodo de poço quântico, levamos em conta inicialmente a aproximação de queda linear da diferença de potencial apenas na região de barreira dupla, desprezando efeitos de curvatura de bandas devido a camadas de acumulação e depleção nos contatos, além dos efeitos da carga dentro do poço na condição de ressonância. A figura 2.6 mostra a característica j - V de um diodo de poço quântico com barreiras simétricas, calculada com o modelo descrito aqui. A estrutura do dispositivo corresponde a duas barreiras de 50Å de GaAlAs limitando um poço de GaAs de 50Å, com contatos de n^+ GaAs. (a descontinuidade entre as bandas é de 0.25 eV). A figura 2.6 ilustra o efeito da temperatura e do nível de Fermi sobre a característica densidade de corrente-voltagem de um dispositivo. Queremos ressaltar que a dopagem real dos contatos pode diferir bastante da dopagem nominal, o que altera muito o pico da corrente ressonante. Esse é um parâmetro que tem que ser levado em conta nas comparações de resultados experimentais com previsões teóricas. Muito mais complexa seria a análise dos efeitos de curvatura de bandas²⁶ e do acúmulo de carga dentro do poço em regime de tunelamento²⁷. É possível, no entanto, desenhar

diodos de poço quântico onde esses efeitos são desprezíveis, de modo que o nosso cálculo é uma boa aproximação²⁸. Nessas condições obtem-se previsões corretas para a corrente de pico^{29,30}, mas correntes de vale muito baixas em relação aos resultados experimentais. Esse "excesso" de corrente de vale é atribuído a processos de espalhamento inelástico que competem com o tunelamento ressonante puramente elástico³¹. A estrutura que aparece em torno de 0.4 V na figura 2.6 é devida a um estado virtual fora do poço, que corresponde ao chamado tunelamento de Fowler-Nordheim³² através de uma barreira triangular (o que ocorre em relação à segunda barreira de um diodo de poço quântico para altas voltagens aplicadas).

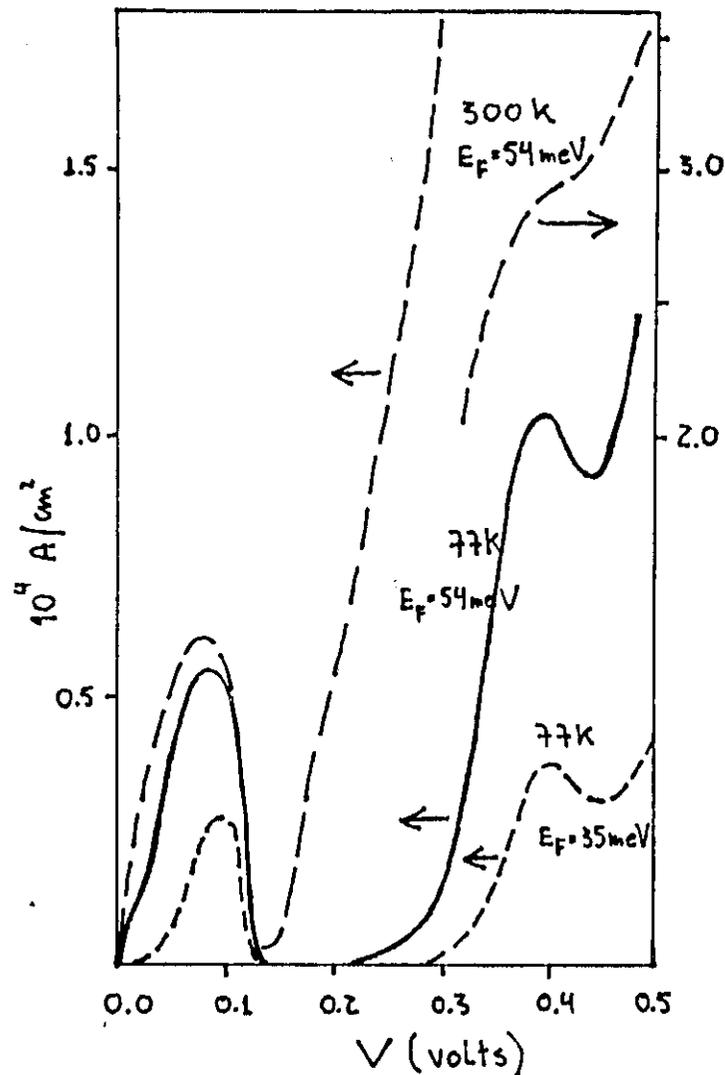
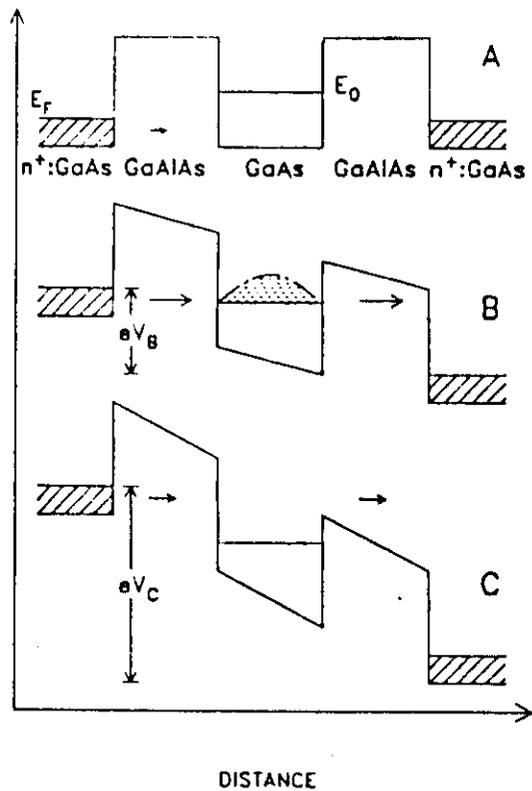


Fig. 2.5. Diagrama de bandas de condução de um diodo de poço quântico com barreira dupla. Em (a) o dispositivo está em equilíbrio. Para certos valores de voltagem aplicada elétrons incidentes da esquerda podem tunelar ressonantemente através do estado quase ligado no poço (b). Quando, devido à voltagem aplicada, o estado quase ligado do poço cruza o fundo da banda de condução do contato emissor (c), a condição de tunelamento ressonante não pode mais ser satisfeita.

Fig. 2.6. Características de densidade de corrente - voltagem para um diodo de poço quântico (parâmetros do dispositivo estão no texto) em função da temperatura e dopagem dos contatos emissor e coletor.

3. Diodos de barreira única com dois degraus

O interesse em diodos de poços quânticos de barreira dupla (DBQW) cresceu consideravelmente nos últimos anos, concomitantemente com o aumento no número de sugestões de dispositivos baseados no efeito de tunelamento ressonante. Um exemplo sugestivo é a proposta de um transistor de efeito de campo de tunelamento ressonante³³. Osciladores de poços quânticos, com frequências de até 108 GHz já foram anunciados³⁴, sendo que um limite teórico de 1 THz foi sugerido³⁵. Sollner e colaboradores³⁶ demonstraram que a operação de um diodo de poço quântico na presença de um campo alternado (ac) pode resultar em uma resistência diferencial negativa em campo contínuo (dc) para pequenos valores de bias dc aplicado ao dispositivo. Liu e Coon³⁷ deram uma explicação física bastante simples para esse tipo de resultado, baseados na teoria de tunelamento ressonante.

Como já vimos na introdução, para um diodo de poço quântico - com um estado ressonante metaestável E_0 - a condição de tunelamento ressonante é obtida, quando a diferença de potencial aplicada ao dispositivo abaixa o estado E_0 até o nível de Fermi do contato emissor. Uma queda drástica da corrente de tunelamento ocorre quando E_0 cai abaixo do fundo da banda de condução do contato emissor, ocasionando a resistência diferencial negativa. Para um poço quântico perfeitamente simétrico a mesma característica corrente - voltagem é esperada, independentemente

do sentido do campo elétrico aplicado. No caso de poços quânticos com barreiras de espessuras diferentes, a condição de ressonância é obtida para diferentes valores de voltagem aplicada, dependendo do sentido do campo. Ainda assim, qualitativamente a característica corrente - voltagem apresenta o mesmo aspecto²³.

Sob o efeito de um campo elétrico alternado, dentro da aproximação adiabática do efeito de variação de voltagem com o tempo, o mesmo fenômeno ocorre, se a amplitude de voltagem ac é grande o suficiente para fazer com que E_0 cruze a faixa compreendida entre o nível de Fermi e o fundo da banda de condução no emissor. Essa faixa de voltagem para tunelamento ressonante é cruzada duas vezes durante um meio ciclo do campo ac com amplitude suficiente (figura 3 da ref. 37). O mesmo ocorre durante o outro meio ciclo e a corrente média total é nula. Por outro lado, se aplicarmos simultaneamente um campo dc, a quebra de simetria resultante é tal que, a superposição da faixa de voltagem para tunelamento ressonante com a curva de campo alternado é diferente para os dois semi ciclos e uma corrente média diferente de zero é esperada.

Nesse capítulo apresentamos um dispositivo que quebra o comportamento simétrico sob bias dc, apresentado pelos diodos de poço quântico com barreira dupla. O diodo de barreira única com dois degraus, como mostra a figura 3.1, pode ser crescido, por exemplo, com mudanças bruscas na concentração de Al, durante o crescimento epitaxial de $Al_{1-x}Ga_xAs$ sobre um substrato de n^+ -

GaAs. Uma segunda camada de GaAs fortemente dopada crescida sobre a barreira funcionaria como o segundo contato. Essa estrutura não apresenta nenhum estado ligado sem bias aplicado (fig. 3.1a). Tal estado pode aparecer no poço triangular formado na barreira, através da aplicação de um bias direto (fig. 3.1b). Sob bias reverso (fig. 3.1c) não aparece tal estrutura e, conseqüentemente, nenhum efeito de tunelamento ressonante com a resistência diferencial negativa associada é esperado nessa condição.

Nós calculamos probabilidades de transmissão e características de corrente-voltagem para esse dispositivo, resolvendo numericamente a equação de Schroedinger dentro da aproximação de massa efetiva. Os resultados apresentados aqui são para sistemas de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs com x = 0.2 no primeiro degrau da barreira e x = 0.4 no segundo. A espessura de cada degrau é de 100 Å. As descontinuidades dos fundos das bandas de condução, relativas aos contatos de GaAs são de 0.15 eV e 0.3 eV, respectivamente. As massas efetivas são $m^* = 0.067 m_0$ (GaAs), $m^* = 0.0836 m_0$ (primeiro degrau), e $m^* = 0.1002 m_0$ (segundo degrau da barreira)³⁸.

Na figura 3.2 mostramos as probabilidades de transmissão como função da energia do elétron incidente, para diferentes valores de voltagem (direta) aplicada ao dispositivo. Notamos que, quando não há voltagem aplicada (fig. 3.2a), não existem ressonâncias na probabilidade de transmissão. Vemos apenas as oscilações bem

conhecidas para energias acima de cada degrau da barreira. Ao aplicarmos uma voltagem direta, um poço triangular começa a formar-se, com a inclinação do primeiro degrau. Existe um limiar de voltagem para ligar um estado nesse poço, que depende dos parâmetros do dispositivo. Se o dispositivo discutido aqui está sob um bias direto de 150 mV (fig. 3.2b), observamos esse limiar para a formação de um estado ligado, através de um pico na probabilidade de transmissão para elétrons com energia incidente de aproximadamente 130 meV. Aumentando a voltagem direta aplicada para 300 mV, observamos um estado ressonante em $E_0 = 76$ meV (fig. 3.2c).

Na figura 3.3 mostramos a característica de corrente-voltagem para esse diodo de barreira única para $T = 15$ K e $E_F = 54$ meV (o que corresponde a uma dopagem de $n^+ = 10^{18}$ cm⁻³ nos contatos), usando a expressão para densidade de corrente dada na eq. 2.5. Observamos um primeiro pico a 440 mV, devido ao estado quase ligado no poço. Esse valor é consistente com o resultado da figura 3.2c, onde o estado quase ligado para um bias direto de 300 mV ainda está acima do nível de Fermi do emissor escolhido para o presente cálculo da característica de corrente-voltagem. Sob bias reverso, a densidade de corrente não apresenta nenhuma estrutura, na escala da figura, até -1V.

Baseando-nos na figura 3.1, o limite inferior de voltagem aplicada, para o qual um estado quase ligado aparece abaixo do nível de Fermi do emissor, é dado por $V_- = (L_1 + L_2)(V_1 - E_F)/L_1$.

Para valores de bias aplicado maiores que $V_+ = (L_1 + L_2)(V_2/L_1)$, qualquer estado quase ligado no poço cai abaixo do mínimo da banda de condução do contato emissor. Para o caso da figura 3.3, temos $V_- = 200$ mV e $V_+ = 800$ mV. As estruturas observadas acima de 500 mV são devidas a oscilações quânticas da probabilidade de transmissão de estados virtuais estendidos.

Os resultados mostrados aqui indicam que o dispositivo de barreira única proposto tem uma aplicação potencial como oscilador quântico, semelhante à demonstrada para diodos de poço quântico com barreira dupla. Naturalmente teríamos ainda que levar em conta análises do comportamento do dispositivo proposto aqui sob a aplicação de uma voltagem alternada, lembrando sempre que a hipótese de aproximação adiabática é válida apenas para frequências que sejam baixas, quando comparadas com o inverso do tempo de tunelamento da estrutura. A principal diferença em relação a um diodo de poço quântico com barreira dupla é que o presente dispositivo pode operar como retificador ac na ausência de um campo dc auxiliar, além de ser, em princípio de fabricação mais simples do que a dos diodos de poço quântico de barreira dupla. Para fazer comparações de performance entre dois dispositivos de tunelamento diferentes, como a frase anterior sugere, o problema da resposta dinâmica dos diodos torna-se crucial. Estudos teóricos nesse sentido começam a aparecer na literatura³⁰, levando em conta sempre a aproximação adiabática.

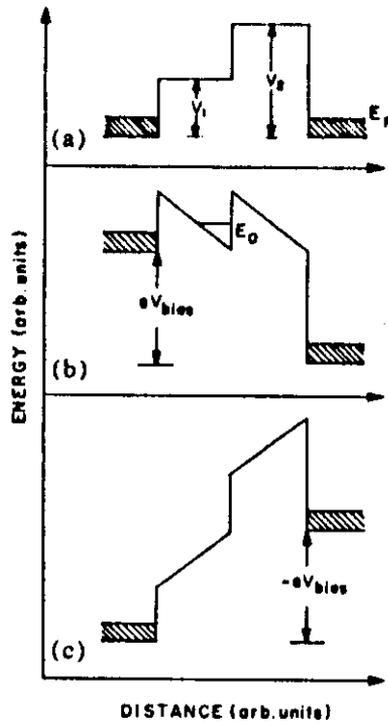


Fig. 3.1. Diagrama do fundo da banda de condução de um estrutura de barreira com dois degraus (a) sem voltagem aplicada, (b) sob voltagem direta (com um estado quase ligado no poço formado), e (c) sob voltagem reversa.

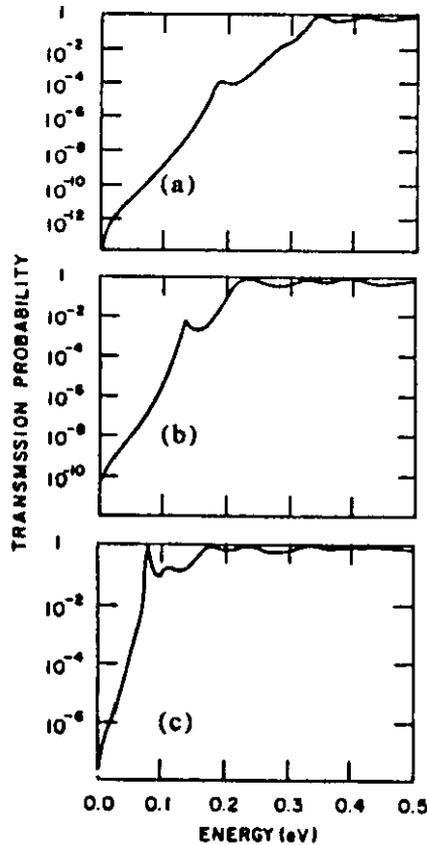


Fig. 3.2 Probabilidades de transmissão em função da energia do elétron incidente para a estrutura de barreira com dois degraus (a) sem voltagem aplicada, (b) com voltagem direta $V = 150\text{mV}$, e (c) com voltagem direta $V = 300\text{mV}$. (parâmetros do dispositivo no texto)

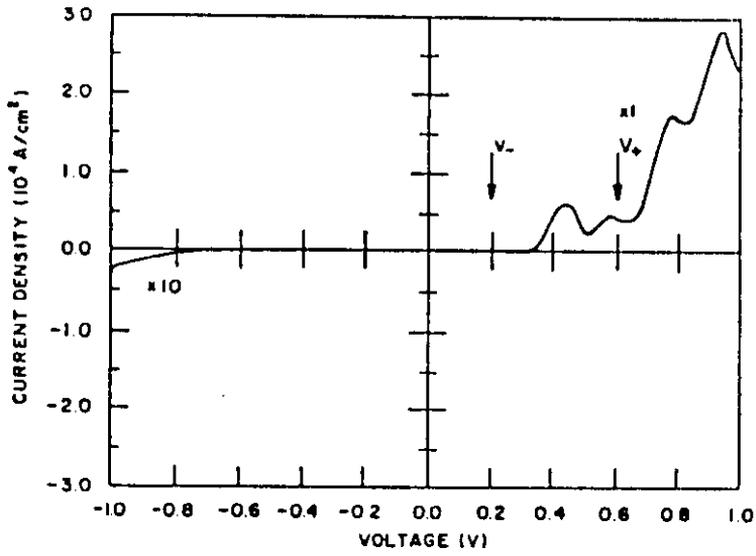


Fig. 3.3. Característica de densidade de corrente - voltagem a $T=15K$ e $E_F = 54meV$ para a mesma estrutura da figura 3.1. Os valores de V_- e V_+ especificam a região na qual se espera a condição de tunelamento ressonante.

4. Tunelamento ressonante através de níveis de Landau

em poços quânticos

na presença de alargamento por espalhamento inelástico

4.1 Introdução

Até agora apresentamos resultados, cujas análises negligenciavam desvios de heteroestruturas ideais na concepção dos modelos utilizados. Esses desvios - rugosidades nas interfaces, fonons, desordem de liga ou estrutural - foram apenas mencionados como prováveis causas de discrepâncias entre dados experimentais e previsões teóricas. A importância dessas imperfeições nas estruturas reais não pode, no entanto, ser subestimada, posto que esses mencionados desvios são fontes de espalhamentos (elástico e inelástico), que podem alterar o próprio regime de tunelamento, de um regime completamente coerente²³, para um intermediário, chamado sequencial⁴⁰, até a um regime completamente incoerente³¹. O comportamento geral do fenômeno de tunelamento ressonante na presença de espalhamento inelástico é discutido em dois trabalhos importantes de Buttiker³¹ e de Stone e Lee⁴¹. Essa discussão é fenomenológica, no sentido de que os vários mecanismos de espalhamento não são levados em conta explicitamente. Um certo progresso tem sido feito em relação aos fonons, incluídos de forma explícita em alguns tratamentos teóricos recentes⁴².

Nesse cenário, magnetotunelamento ressonante tornou-se uma

ferramenta importante, que já proveu informações experimentais sobre efeitos de acúmulo de carga no poço em estado de ressonância⁴³, tunelamento ressonante assistido por fonons e violação da conservação de momento em tunelamento⁴⁴, e a caracterização de elétrons provenientes de sub bandas bidimensionais na camada de acumulação entre o emissor e o diodo de poço quântico⁴³.

O objetivo do trabalho apresentado nesse capítulo é duplo. O primeiro é discutir idealmente o tunelamento ressonante através de um poço quântico na presença de um campo magnético perpendicular às interfaces do dispositivo. O modelo discutido aqui já havia sido proposto e explorado anteriormente por outros autores⁴⁵. O segundo objetivo relaciona-se com o fato de que tal modelo, ainda que capaz de interpretar os resultados experimentais disponíveis, apresenta fortes discrepâncias com os dados experimentais disponíveis. Tendo isso em mente, procuramos demonstrar a importância do papel desempenhado por processos de espalhamento inelástico, quando comparamos características corrente-voltagem calculadas com as obtidas experimentalmente.

4.2 Modelo para magnetotunelamento ressonante

Neste capítulo nos concentraremos no efeito do campo magnético paralelo à corrente. A situação de campo magnético perpendicular à corrente será analisada, para alguns casos particulares, no capítulo 5. O procedimento geral para calcular a corrente através

de um conjunto de níveis de Landau em um poço quântico tem, como é usual, duas etapas: o cálculo da probabilidade de transmissão eletrônica através da heteroestrutura e uma integração apropriada de tais probabilidades de transmissão para obter a densidade de corrente.

Na aproximação da massa efetiva, podemos separar a função de onda eletrônica numa componente paralela às interfaces da heteroestrutura de barreira dupla, que é uma onda plana, e uma componente na direção do crescimento (definida aqui como sendo a direção z) da heteroestrutura. Na aproximação de interfaces perfeitas (isto é, sem mistura das diferentes componentes, paralela e perpendicular, da função de onda total), o problema se reduz à solução de uma equação de Schroedinger unidimensional na direção de crescimento, onde as descontinuidades de banda e de massas efetivas são levadas em conta.

O protótipo da estrutura de barreira dupla estudada nesse capítulo é o de uma configuração $n^+ \text{GaAs}(\text{emissor}) / i\text{-GaAlAs}(\text{barreira}) / i\text{-GaAs}(\text{poço}) / i\text{-GaAlAs}(\text{barreira}) / n^+ \text{GaAs}(\text{coletor})$. Consideraremos que apenas os elétrons com funções de onda derivadas do vale Γ da banda de condução contribuem para a corrente de tunelamento. As massas efetivas desses elétrons são, portanto: $m^* = 0.067m_0$ (GaAs) e $m^* = 0.101m_0$ para GaAlAs, considerando uma concentração de 40% de Al nas barreiras. Para tal composição da liga ternária, a altura da barreira é de $V_b = 0.3 \text{ eV}$ ³⁸.

Quando o campo magnético na direção de crescimento é ligado, não ocorre uma mistura das componentes paralela e perpendicular da função de onda total, mas as ondas planas na direção paralela se convertem em soluções do tipo de oscilador harmônico e a relação de dispersão de elétrons livres colapsa em um conjunto de níveis de Landau⁴⁶. A figura 4. 1 mostra esquematicamente a estrutura eletrônica em espaço real dessa situação. A equação de Schroedinger a ser resolvida numericamente é a mesma que no caso sem campo magnético, mas com um potencial unidimensional efetivo diferente para cada nível de Landau⁴⁵:

$$V_n^{eff}(z) = V_0(z) + \hbar(n+1/2)[\omega_c(z) - \omega_0], \quad (4.1)$$

onde $n=0,1,2,\dots$ são os índices dos níveis de Landau, $\omega_c(z)$ é a frequência de ciclotron, que depende da massa efetiva e ω_0 é a frequência de ciclotron para GaAs. O termo $V_0(z)$ é o perfil de potencial, ao longo da direção z na ausência de campo magnético. A forma local do potencial implica na conservação dos índices dos níveis de Landau, n , através da estrutura de barreira dupla. A expressão para a densidade de corrente é obtida a partir da eq.2.4 para $T=0K$, levando em conta a quantização magnética na integração dos momentos paralelos:

$$j = -\left(\frac{e}{\pi \hbar l} \frac{2}{m}\right) \sum_{n=0}^N \int_{(n+1/2)\hbar\omega_0}^{E_f} dE T_n(E, V) \Theta(E - E_f + V), \quad (4.2)$$

onde $\theta(x)$ é a função degrau, E_f o nível de Fermi no emissor, $l_m = (\hbar/eB)^{1/2}$, o comprimento magnético; n é somado sobre todos os níveis de Landau abaixo de E_f e $T_n(E,V)$ é a probabilidade de transmissão obtida através da solução da equação de Schroedinger para uma energia E com uma dependência em relação ao índice de nível de Landau dado pela equação (4.1). A voltagem aplicada, V , cai linearmente através da estrutura, segundo o presente modelo. Esse modelo foi proposto inicialmente por Gonçalves da Silva e Mendez⁴⁵ para interpretar resultados experimentais de magnetotunelamento ressonante e será utilizado aqui como ponto de partida para analisar os efeitos de espalhamento inelástico sobre magnetotunelamento.

Uma abordagem simples dentro da aproximação de massa efetiva descreve qualitativamente as principais características de dispositivos de tunelamento ressonante na ausência de campo magnético. Por principais características entendemos (vide capítulo 2) a presença de um limiar de voltagem para a corrente, de uma corrente de pico, resistência diferencial negativa e uma razão pico-vale⁴⁷. Para uma descrição detalhada, no entanto, o modelo precisa ir muito além para levar em conta um perfil de potencial realista (inclusão de efeitos de carga espacial) e efeitos de estrutura de banda. No momento não existe uma teoria que aborda consistentemente todos esses aspectos.

Antes de tentar incluir tais sofisticacões, podemos nos deter

sobre a questão dos tempos característicos do problema. Se o tempo de tunelamento é comparável ou mesmo mais longo que os tempos característicos de mecanismos de espalhamento presentes no sistema físico real, esses últimos devem ser levados em conta em um modelo. Segundo Buttiker³¹, espera-se que o espalhamento inelástico de elétrons em tunelamento modifique o regime de tunelamento de coerente, onde a memória de fase é preservada, a um regime sequencial, onde o espalhamento inelástico é um mecanismo de perda dessa memória de fase. A presença de tais mecanismos de espalhamento alarga o pico de probabilidade de transmissão na ressonância em conexão com o alargamento da densidade de estados no poço. Com isso em mente, espera-se também um alargamento, com uma redução da razão pico-vale, na característica corrente-voltagem de um dispositivo de tunelamento ressonante, predita por uma abordagem simples de aproximação de massa efetiva descrita acima.

Na presença de um campo magnético longitudinal, as características de corrente-voltagem de um poço quântico de barreira dupla mostram as "assinaturas" dos níveis de Landau desse poço quântico. O alargamento da densidade de estados pode, no entanto, transformar essa visão qualitativa dada por um cálculo de massa efetiva, baseado na conservação do momento paralelo e energia total.

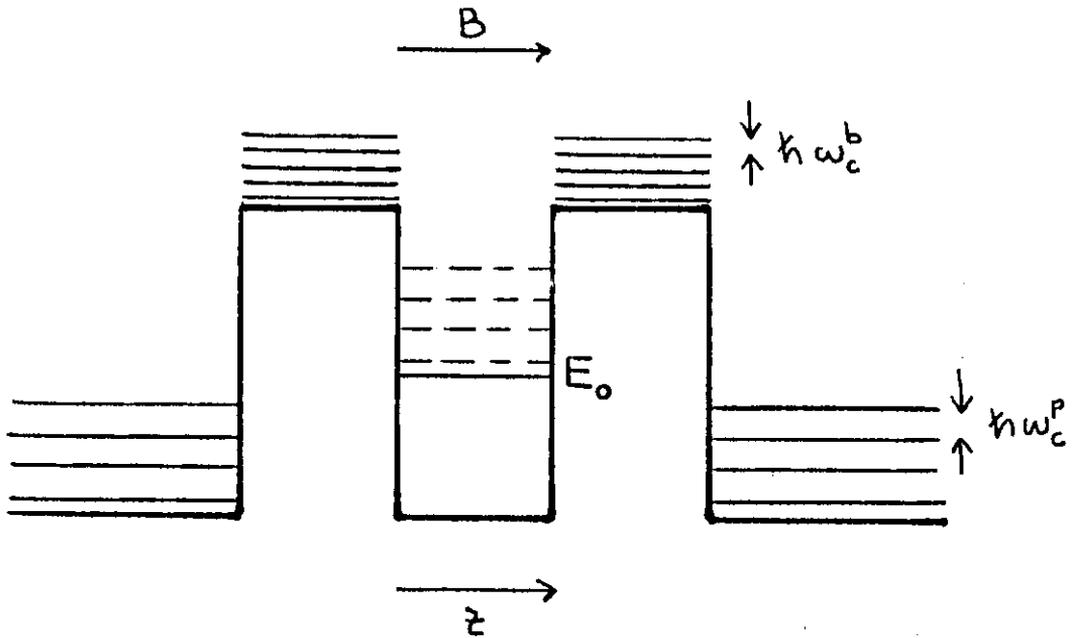


Fig. 4.1. Estrutura eletrônica esquemática de um diodo de poço quântico na presença de um campo magnético B perpendicular às interfaces da heteroestrutura. A separação dos níveis de Landau é menor nas barreiras, dado que a massa efetiva nessas regiões é maior que nos contatos e no poço. Os níveis de Landau no poço tem como origem o estado eletrônico quase ligado E_0 e estão indicados de modo diferente que nas outras regiões devido ao fato de que, na presença de um campo magnético nessa configuração, existe uma quantização em todas as direções dentro do poço.

4.3 Efeitos de espalhamento inelástico

Espalhamento inelástico e os efeitos de alargamento consequentes sobre a transmissão ressonante são introduzidos de uma maneira "ad hoc", baseada nos modelos de Stone e Lee⁴¹ e de Buttiker³¹. A função de onda na estrutura de barreira dupla, calculada por meio da solução de uma equação de diferenças finitas, é casada à esquerda e à direita da estrutura com ondas planas. Esse casamento é feito de maneira a definir uma onda plana incidente da esquerda, com amplitude unitária; uma onda transmitida à direita, com o módulo quadrado da amplitude dado por T ; e uma onda refletida à esquerda, com o módulo quadrado da amplitude R . A unitariedade de espalhamento,

$$R + T = 1 \quad (4.3)$$

é automaticamente garantida pelo procedimento de cálculo. Espalhamento inelástico nas barreiras e poço pode ser modelado pela adição de uma parte imaginária, Γ_1 , na energia apenas nessa região, enquanto que as mesmas ondas planas são mantidas à esquerda e à direita. Com isso a probabilidade de transmissão perto da ressonância é alargada e amortecida. Essa probabilidade de transmissão, como função de energia, é equivalente a que se obtém usando as expressões derivadas nas referências 31 e 41 para tunelamento ressonante coerente (ou elástico, definido por uma meia largura de decaimento elástico Γ_e) modificado por

espalhamento inelástico, quando tomamos Γ_1 como a meia largura de decaimento inelástico. O amortecimento e alargamento das assim calculadas probabilidades de transmissão e reflexão tem, como consequência, a quebra da unitariedade de espalhamento:

$$T_e + R_e < 1, \quad (4.4)$$

onde o subíndice e define a contribuição elástica. Isto sugere, seguindo a referência 41, um caminho para estimar a contribuição inelástica, com a imposição da unitariedade do espalhamento total:

$$T_e + R_e + T_i + R_i = 1, \quad (4.5)$$

onde o subíndice i define a contribuição inelástica. É importante lembrar que um cálculo independente de T_i não é possível, de modo que recorreremos novamente ao modelo citado^{31,41}, para estimar a contribuição inelástica a ser somada à probabilidade de transmissão total:

$$T_i = (\Gamma_1 / \Gamma_e) T_e. \quad (4.6)$$

O valor de Γ_e é obtido numericamente do caso puramente elástico, enquanto que Γ_1 é um parâmetro livre. A validade dessa hipótese, derivada para o caso de poços quânticos de barreira dupla simétricos, para valores de voltagem aplicada diferentes de

zero foi testada numericamente por meio da seguinte condição necessária:

$$T_{\text{tot}} = T_e (1 + \Gamma_i / \Gamma_e) < 1, \quad (4.7)$$

que se mantem em todos os casos estudados.

No que segue discutiremos a influência de espalhamento inelástico, no escopo do modelo apresentado, sobre magnetotunelamento ressonante em estruturas de barreira dupla. O presente modelo de abordagem difere de trabalhos anteriores⁴³, pelo fato de que efeitos inelásticos são incluídos no processo de tunelamento em si, em vez de tratar o alargamento através de um procedimento "a posteriori" de suavização para a característica de corrente-voltagem. Contribuições de espalhamento inelástico podem, de acordo com a nossa abordagem, alterar drasticamente os resultados obtidos por um cálculo puramente elástico. A meia largura de decaimento inelástico é um parâmetro cuja importância está diretamente relacionada à geometria da estrutura crescida. Quando as barreiras são suficientemente estreitas, o decaimento elástico pode ser grande o suficiente para que a vida média do estado quase ligado no poço seja muito curto, de modo que o espalhamento inelástico não ocorra de maneira apreciável. Além disso, tal alargamento elástico, ligado à espessura das barreiras, pode afetar as características de corrente voltagem de uma maneira qualitativamente similar ao efeito de espalhamento

inelástico em dispositivos com barreiras espessas.

4.4 Características de corrente-voltagem

Nessa secção mostramos as características j - V para poços quânticos de barreira dupla simétricos na presença de um campo magnético longitudinal. Os únicos parâmetros variados são a meia largura de decaimento inelástico, largura de barreira (variação do decaimento elástico) e densidade de portadores nos contatos.

Na ausência de um campo magnético, a corrente de tunelamento ressonante aumenta monotonicamente, começando num limiar de voltagem - quando um estado quase ligado do poço se alinha com o nível de Fermi do emissor - até à voltagem de corte - quando esse estado quase ligado cruza o fundo da banda de condução do emissor. Para voltagens aplicadas maiores, a conservação de momento paralelo e energia total não é mais satisfeita simultaneamente. Numa integração numérica da corrente, o pico dessa característica corrente-voltagem de forma triangular é suavizado e deslocado para valores de voltagem aplicada menores que a de corte (capítulo 2). Essa é uma característica geral de elétrons tunelando de um emissor tridimensional, através de um poço quântico com natureza bidimensional⁴⁷. Quando o campo magnético é ligado, o gás de elétrons livres nos contatos é quantizado e a densidade de estados constante no interior do poço é convertida numa escada de níveis de Landau, que tem no nível eletrônico quase ligado sua origem de energia³². Essas alterações

introduzidas na densidade de estados se refletem em mudanças na corrente de tunelamento. Num quadro idealizado, onde tomamos os níveis de Landau como sendo funções delta, esperamos saltos abruptos na corrente, toda vez que um nível de Landau do poço cruza com níveis de Landau de mesmo índice do emissor. Com o aumento do campo magnético, a degenerescência de cada nível de Landau aumenta, reduzindo o número de níveis de Landau ocupados no emissor. Consequentemente, o número de saltos na corrente diminui, ao mesmo tempo que a altura dos mesmos aumenta (maior número de elétrons disponíveis para tunelar a um dado valor de voltagem aplicada). Por outro lado, ao diminuirmos o campo magnético, o número de saltos na corrente aumenta com a diminuição da altura de cada um deles; de modo que para campos magnéticos pequenos, a característica corrente-voltagem de magnetotunelamento ressonante se aproxima assintoticamente ao caso de campo magnético nulo.

Esse comportamento pode ser observado na figura 4.2, para o caso puramente coerente ($\Gamma_1=0$). Aqui as barreiras tem uma espessura de 50 Å (correspondendo a $\Gamma_0 \cong 0.1$ meV). Alguns desses resultados se assemelham aos da ref. 45, onde, no entanto, as densidades de corrente são muito menores, dado que as barreiras consideradas nessa referência, são muito mais espessas.

Na figura 4.2 vemos que a característica j-V modifica-se continuamente com o aumento do campo magnético. A B=2T temos um total de 16 saltos devidos à sucessiva entrada em ressonância de

um número igual de níveis de Landau, onde a forma geral da característica j - V para campo magnético nulo ainda é dominante. No caso seguinte, para $B=5T$, as mesmas estruturas estão melhor resolvidas com a separação maior entre os níveis de Landau. Para $B=10T$ as estruturas fortemente pronunciadas, devidas a três níveis de Landau (os únicos que ainda entram em ressonância para esse valor de B), exibem uma forma completamente distinta do caso com $B=0T$. Além disso, podemos observar a evolução dessas estruturas na corrente de tunelamento ressonante ao aumentarmos mais ainda o campo magnético, até o limite quântico extremo de apenas um único nível de Landau ($B=25T$) entrando em ressonância.

Por outro lado, resultados experimentais disponíveis não apresentam essas estruturas diretamente nas medidas de corrente. Não se observa nenhuma região de resistência diferencial negativa adicional e, de fato, não aparecem mudanças significativas na característica j - V até valores bem altos de campo magnético ($B=15T$); em desacordo com a predição teórica. Na verdade, estruturas devidas a quantização magnética são vistas apenas na condutância⁴⁵ (figura 4.3).

O efeito de introduzir um alargamento que pode ser atribuído a espalhamento inelástico é mostrado na figura 4.4. Aqui comparamos as características j - V a $B=10T$ e $B=15T$ para o mesmo dispositivo da figura 4.2. Resultados para vários valores de Γ_1 são mostrados e as densidades de corrente são calculadas para

probabilidades totais de transmissão ($T_{tot} = T_0 + T_1$). A introdução do mecanismo de alargamento inelástico altera drasticamente o cálculo no limite coerente em dois pontos: i), as regiões de resistência diferencial negativa adicionais desaparecem progressivamente com o alargamento e ii), a forma da característica j - V modifica-se progressivamente no sentido de recuperar o limite de campo magnético nulo. Para $\Gamma_1 = 4\text{meV}$, estruturas devidas a níveis de Landau, calculadas para $B = 5\text{T}$, são vistas apenas na condutância. A interpretação física é bastante simples: o mecanismo de alargamento introduzido amortece e alarga o pico na transmissão. O mesmo ocorre com a estrutura idealizada de funções delta para a densidade de estados no poço. Para Γ_1 suficientemente grande, a densidade de estados no poço assemelha-se muito mais a um fundo constante, com o que temos uma densidade de estados similar a de um poço quântico sem campo magnético. Apesar disso, devemos notar que mudanças notáveis ocorrem na forma da densidade de corrente, mesmo quando a separação $\hbar\omega_c$ entre os níveis de Landau é uma ordem de grandeza maior que Γ_1 . Isso pode ser verificado na figura 4.4 para o caso de $B = 15\text{T}$. Aqui $\hbar\omega_c = 25\text{meV}$ e, para $\Gamma_1 = 2\text{meV}$, a resistência diferencial negativa relativa ao primeiro nível de Landau ressonante sofre uma sensível redução, enquanto que o segundo pico de corrente é ressaltado apreciavelmente.

Como já foi mencionado, as características j - V apresentadas aqui, correspondem a probabilidades totais de transmissão, que

são calculadas através das equações (4.6) e (4.7). Dessa maneira a corrente devido apenas a T_e na presença de espalhamento inelástico escala com a densidade de corrente total. Na "parte elástica da corrente", a razão pico/vale diminui devido à redução das correntes de pico, enquanto que as correntes de vale continuam essencialmente as mesmas que para $\Gamma_1=0$. Por outro lado, as correntes de pico nos cálculos de corrente total (soma das contribuições elástica e inelástica) apresentadas na figura 4.4 são de mesma ordem de grandeza daquelas obtidas para o caso puramente elástico; enquanto que as correntes de vale aumentam, em relação aos cálculos puramente elásticos, levando também a uma diminuição da razão pico/vale. Devemos chamar a atenção para essa diferença dos dois resultados. O comportamento da parte elástica da corrente foi analisado independente por Gupta e Ridley⁴⁸, que a consideraram como sendo a corrente total, admitindo que o espalhamento inelástico leva a uma dissipação da corrente. O modelo de Stone e Lee se baseia na manutenção da unitariedade de espalhamento. O resultado para a corrente total apresentado por nós é obtido a partir de uma aproximação feita sobre um resultado obtido exatamente, T_e como função de Γ_1 , que leva a um comportamento da característica corrente-voltagem qualitativamente de acordo com os últimos resultados experimentais²⁰; a corrente de pico é razoavelmente bem descrita por um cálculo puramente elástico, enquanto que a corrente de vale experimental é muito maior que a obtida pelo mesmo cálculo.

Devemos lembrar que o aumento na corrente de pico, na presença de espalhamento inelástico, é devido à aproximação de Γ_e constante em função da voltagem aplicada. Na verdade Γ_e aumenta com o aumento da voltagem, levando a uma diminuição na transmissão total. Essa variação é, no entanto, pelo menos uma ordem de grandeza menor do que a que ocorre com a corrente de vale, de modo que a aproximação de Γ_e constante não invalida os resultados obtidos aqui.

Um efeito de alargamento similar ao obtido com a inclusão de espalhamento inelástico pode ser obtido com a simples diminuição da espessura das barreiras (aumento de Γ_e). Esse efeito pode ser visto na figura 4.5, onde tomamos o poço quântico das figuras 4.2 e 4.4, mas com barreiras mais estreitas. Podemos ver aqui que as estruturas relacionadas com os níveis de Landau, que aparecem nas características j-V a B=10T para o dispositivo com barreiras de 50Å, desaparecem quase que completamente, quando as barreiras são reduzidas a uma espessura de 20Å. Nesse caso extremo, a meia largura elástica é de 7meV, indicando que, tomando os mesmos valores de Γ_i discutidos acima, a contribuição inelástica à corrente é menos importante; não apenas quantitativamente, mas principalmente para explicar qualitativamente a forma das características j-V correspondentes. Esses resultados nos indicam que estudos sistemáticos, com amostras de poços quânticos com larguras de barreiras diferentes, para tentar diferenciar entre contribuições coerente e sequencial para a corrente de

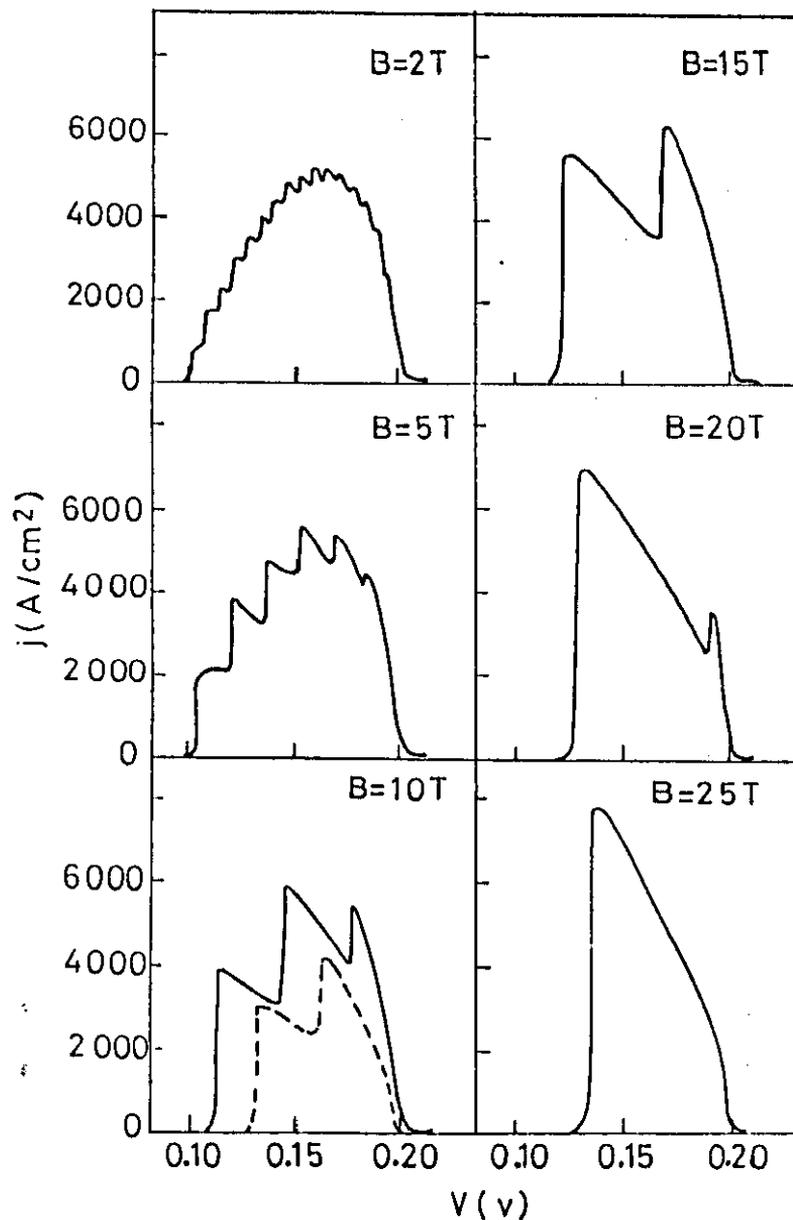


Fig. 4.2. Densidades de corrente de magnetotunelamento ressonante em função da voltagem aplicada para um poço quântico de barreira dupla com diferentes campos magnéticos aplicados na direção da corrente (parâmetros do dispositivo no texto). Esses resultados numéricos são para o caso coerente, ou seja, sem alargamento inelástico ($\Gamma_{\perp} = 0$). A dopagem dos contatos emissor e coletor é de $n^{\pm} = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ em todos os casos, com exceção para a curva tracejada, calculada para $n^{\pm} = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

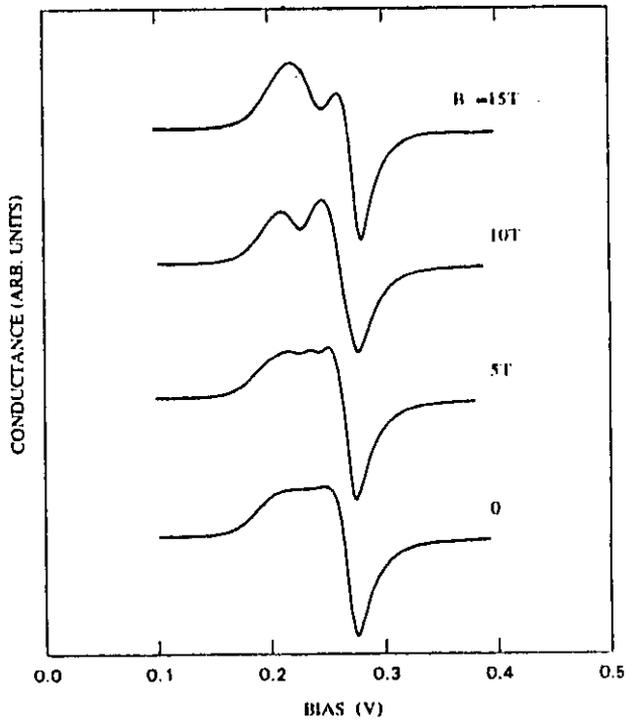
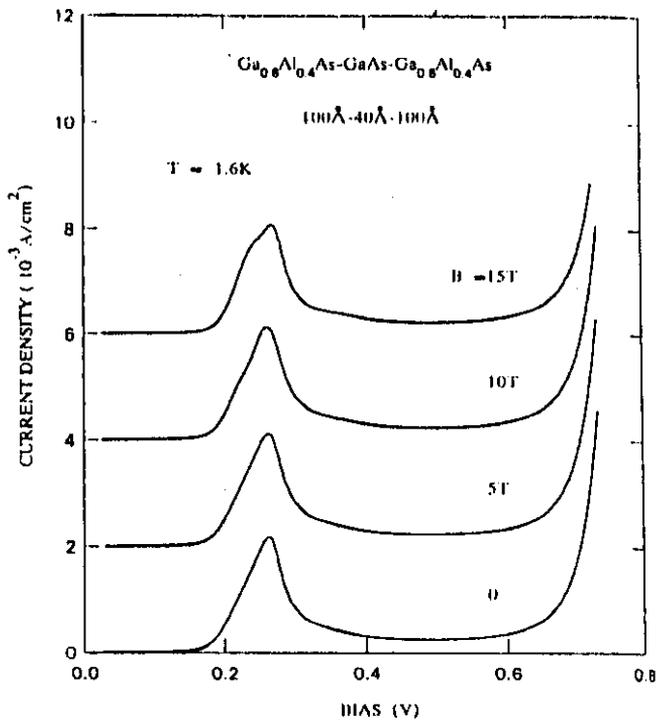


Fig. 4.3. Dados experimentais de magnetotunelamento contidos na ref.45 para um diodo de poço quântico com a mesma estrutura do da figura 4.2, exceto a largura das barreiras, que aqui tem 100Å de em vez de 50Å.

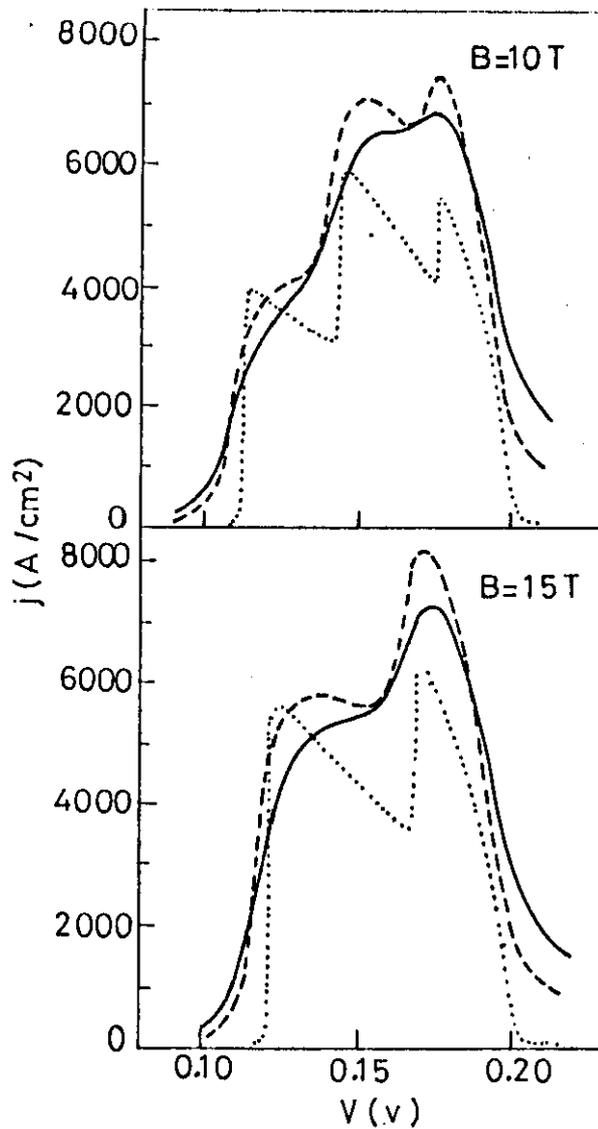


Fig. 4.4. Características de densidade de corrente - voltagem para a mesma estrutura da figura 4.2 com diferentes valores para o alargamento inelástico (Γ_1). As curvas pontilhadas são para $\Gamma_1 = 0.0$ (tunelamento coerente), as curvas tracejadas para $\Gamma_1 = 2\text{meV}$ e as contínuas para $\Gamma_1 = 4\text{meV}$.

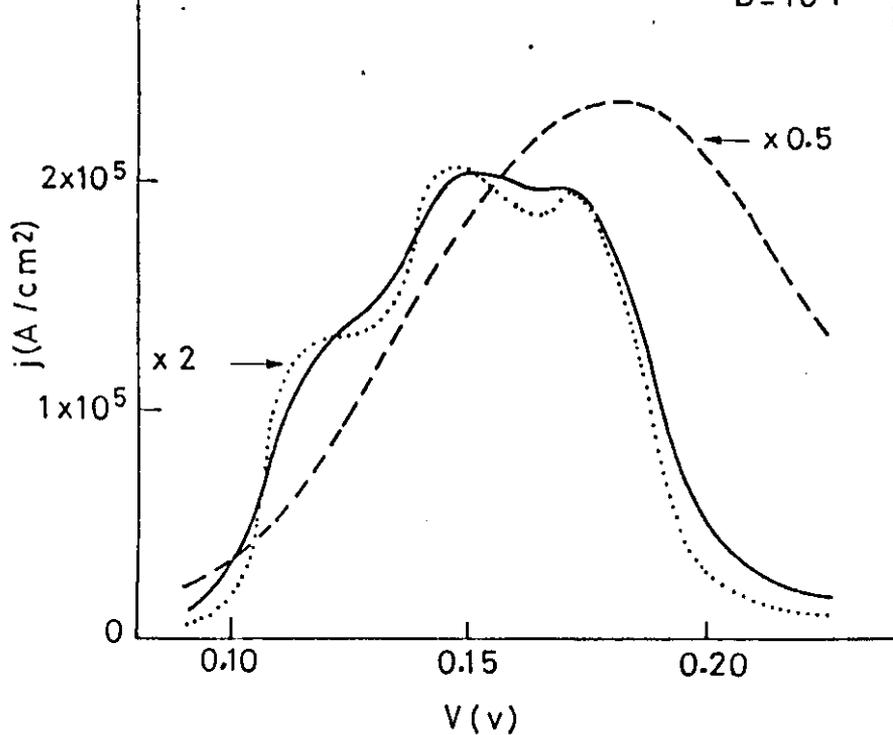


Fig. 4.5. Características de densidade de corrente - voltagem no limite coerente para a mesma estrutura da figura 4.2 com barreiras de larguras diferentes. A curva pontilhada corresponde a uma largura de barreira de 30Å, a curva contínua a uma barreira de 25Å e a tracejada a uma de 20Å.

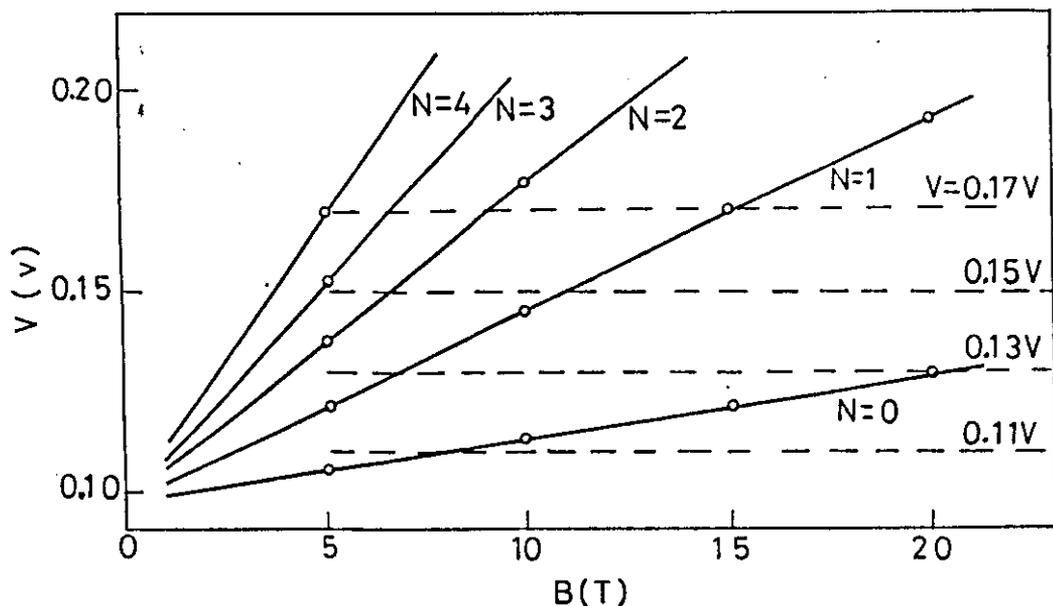


Fig. 4.6 Gráfico de feixes derivado da figura 4.2. Os círculos indicam a posição dos saltos nas densidades de corrente que aparecem na figura 4.2. As linhas cheias mostram a evolução contínua desses saltos como função da voltagem e campo magnético aplicados. O cruzamento dessas linhas com as retas horizontais indicam as posições das quedas abruptas na densidades de corrente em função do campo magnético aplicado a diferentes valores fixos de voltagem mostradas na figura 4.7a.

tunelamento, devem ser tomados com cuidado, devido a essa competição entre meias larguras elástica e inelástica da transmissão. Em tal estudo, as eventuais resistências diferenciais negativas subsidiárias devidas aos níveis de Landau, detectadas em dispositivos com barreiras espessas, devem ser suavizadas progressivamente em dispositivos com barreiras mais finas, mas com todos os outros parâmetros estritamente idênticos (com o objetivo de garantir, tanto quanto possível, o mesmo alargamento inelástico de um dispositivo para outro).

4.5 Características de densidade de corrente-campo magnético

Nessa secção discutiremos as oscilações quânticas em correntes de tunelamento ressonante como função do campo magnético a bias fixo. Características de corrente-campo magnético tem sido apresentadas na literatura para diferentes tipos de heteroestruturas e diferentes orientações de campo magnético. Essas correntes de tunelamento exibem, geralmente, oscilações periódicas em $1/B$. No caso de heteroestruturas de barreiras duplas, essas oscilações já foram estudadas como instrumento de análise da estrutura de sub bandas nas camadas de acumulação, formadas na interface do contato emissor, e do acúmulo de carga no interior do poço quântico, durante o tunelamento ressonante⁴⁹.

A condição de ressonância para cada nível de Landau, como função de bias e campo magnético aplicados, aparece resumida no "gráfico de feixes" da figura 4.6. Os círculos vazios mapeiam o

limiar para os saltos de corrente (relacionados com a entrada em ressonância dos níveis de Landau), que aparecem nas características j-V da figura 4.2. O valor de campo magnético, para o qual um dado nível de Landau de índice n entra em ressonância com a energia de Fermi no emissor, é dado pela seguinte relação:

$$(E_f - E_w(V)) = (n + 1/2) \hbar e B / m^* , \quad (4.8)$$

onde $E_w(V)$ é o nível de energia do estado quase ligado no poço, em função da voltagem aplicada. De fato, as linhas contínuas da figura 4.6 são obtidas da eq.(4.8), usando a massa efetiva do GaAs, $E_f = 54 \text{ meV}$ (correspondendo a uma dopagem de contato de $n^+ = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) e $E_w(V) = E_0 - eV/2$, onde $E_0 = 101 \text{ meV}$ é o nível de energia do estado quase ligado a zero bias.

Para um dado valor de bias aplicado, o número de níveis de Landau que podem ser acomodados abaixo do nível de Fermi, depende do campo magnético através da eq. (4.8). Ao aumentarmos o campo magnético, sucessivos níveis de Landau são puxados para energias acima da energia de Fermi no emissor, dando origem a quedas abruptas na característica j-B a bias fixo. Os valores de B, para os quais essas quedas ocorrem para o presente dispositivo, são dados pelos cruzamentos das linhas do gráfico de feixes com as linhas horizontais tracejadas da figura 4.6. O comportamento oscilatório da característica j-B é periódico em $1/B$, com um

período, B_f , dado por:

$$B_f = (m^*/eh)(E_f - E_w(V)) . \quad (4.9)$$

Essas oscilações no magnetotunelamento são mostradas na figura 4.7(a) para a mesma estrutura da figura 4.2, com $\Gamma_1=0$. A estrutura de dente de serra bem definida é característica de sistemas eletrônicos bidimensionais e o comportamento periódico em $1/B$ pode ser facilmente verificado. O nosso modelo não leva em conta efeitos de curvatura de bandas, de modo que oscilações devidas a eventuais sub bandas bidimensionais na camada de acumulação na interface com o emissor não podem ser calculadas. Por outro lado, podemos incluir o efeito de oscilações do nível de Fermi de volume, que também é periódico em $1/B$. Se levarmos em conta essas oscilações, os círculos do gráfico da figura 4.8 oscilariam em torno das linhas contínuas calculadas para uma energia de Fermi constante (a de $B=0$).

O efeito da inclusão dessa oscilação da energia de Fermi do volume pode ser apreciado na figura 4.7(b), onde um segundo conjunto de oscilações está superposto aquelas devidas aos níveis de Landau no poço. As setas na figura 4.7(b) indicam os máximos na variação da energia de Fermi do contato emissor com o campo magnético. No caso onde a voltagem aplicada é pequena, os dois conjuntos de oscilações são perfeitamente distinguíveis, mas para os casos de voltagens aplicadas mais altas, os dois períodos

de oscilação são similares, não permitindo uma distinção clara entre eles. Apesar disso, dois aspectos interessantes podem ser observados, onde a inclusão de variações na energia de Fermi em função do campo magnético muda qualitativamente as características j - V calculadas. Primeiro, no caso de 0.11V, observamos que perto de um máximo para a energia de Fermi em $B=13T$, o primeiro nível de Landau do poço volta a entrar em ressonância, provocando um forte pico na densidade de corrente. Segundo, no caso de $V=0.13V$, essa mesma variação na energia de Fermi desvia a estrutura perto de $B=20T$ na figura 4.7(a) para um valor de campo magnético apreciavelmente maior.

A forma das oscilações na figura 4.7 está em claro desacordo com resultados experimentais da literatura⁴⁹, onde essas oscilações não apresentam a estrutura de dente de serra tão bem definida. As figuras 4.8(a) e 4.8(b) mostram características j - B equivalentes às da figura 4.7, mas com a inclusão de uma meia largura inelástica diferente de zero, $\Gamma_1=2meV$, que altera completamente a forma das oscilações. Lembramos que características j - B em forma de dentes de serra foram observadas para elétrons tunelando para fora de um poço quântico formado na interface de um heterojunção simples⁵⁰. No caso de elétrons tridimensionais, tunelando através de um poço quântico, as características j - B encontradas na literatura⁴⁰ assemelham-se muito mais às mostradas na figura 4.8.

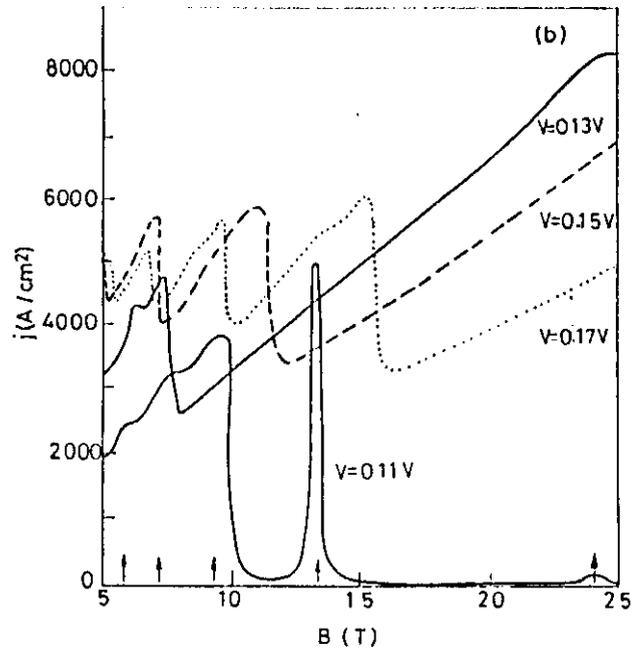
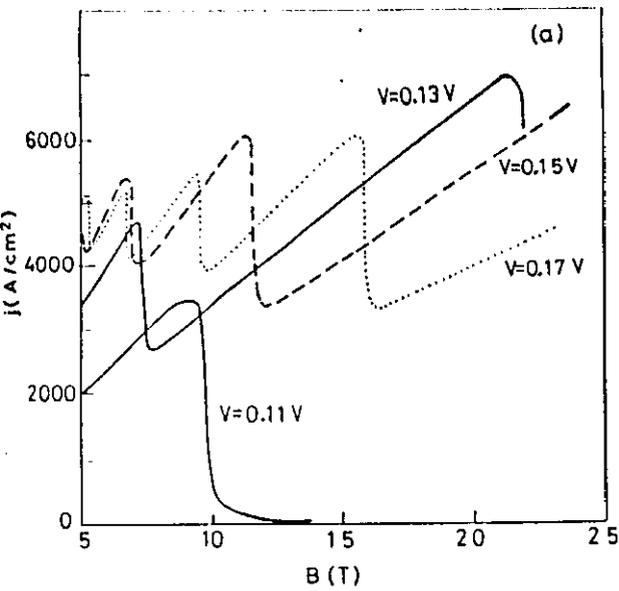


Fig 4.7. (a) Densidades de corrente em função do campo magnético aplicado, para diferentes valores fixos de voltagem aplicada. Os parâmetros do diodo de poço quântico são os mesmos da figura 4.2. Aqui a energia de Fermi dos contatos é tida como constante. (b) O mesmo que (a), incluindo oscilações da energia de Fermi dos contatos como função do campo magnético. Tanto (a) quanto (b) são para o limite de tunelamento coerente. As setas em (b) indicam os máximos nas oscilações do nível de Fermi com o campo magnético.

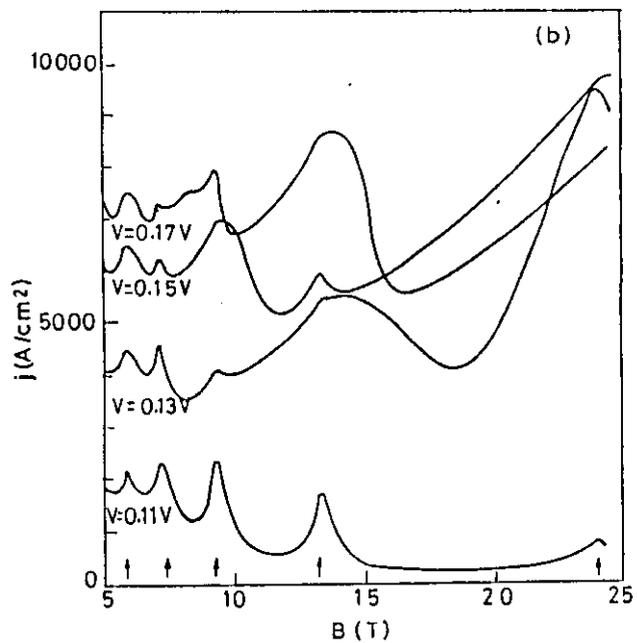
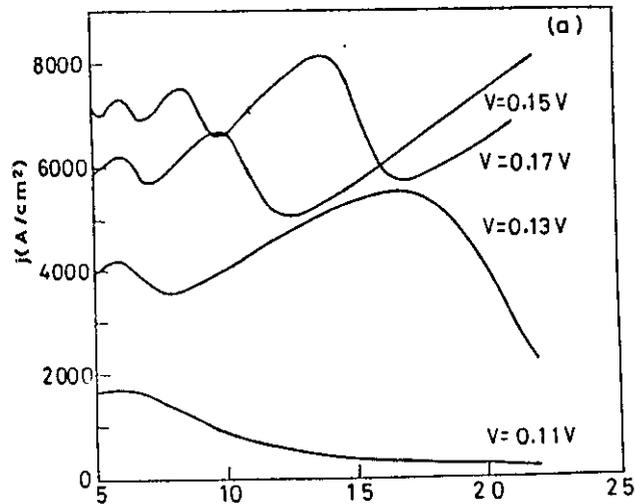


Fig. 4.8. Densidades de corrente em função do campo magnético aplicado para a mesma estrutura da figura 4.7 com a inclusão de um alargamento inelástico de $\Gamma_1 = 2\text{meV}$. (a): energia de Fermi constante, e (b): energia de Fermi como função do campo magnético.

5. Tunelamento eletrônico na presença de um campo magnético perpendicular à corrente

5.1 Introdução

A disponibilidade atual de campos magnéticos intensos e de heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade, tem permitido um apreciável avanço no estudo experimental de magnetotransporte em sistemas eletrônicos bidimensionais. Grande parte desse esforço é dirigido ao que se conhece por configuração geométrica do efeito Hall quântico, onde o campo magnético B é perpendicular às correntes eletrônicas. Um problema correlato, que vem despertando interesse, é o do efeito de um campo B transversal a uma corrente de tunelamento em um sistema de uma simples barreira⁵¹. Nessa configuração observa-se que a corrente i , para um dado valor de bias V , decresce monotonicamente com o aumento de B , sendo que as derivadas segundas, d^2i/dB^2 , apresentam oscilações quânticas⁵². A análise desses experimentos é feita geralmente por meio de uma abordagem semiclássica⁵³, ou por meio de argumentos qualitativos sobre o efeito do campo magnético sobre os estados eletrônicos.

Um estudo mais completo desses experimentos, baseado em cálculos mecânico-quânticos das correntes de tunelamento não é ainda de uso corrente. Uma abordagem nesse sentido foi iniciada por Brey et al⁵⁴. Uma extensão dessa abordagem para a interpretação de experimentos de tunelamento ressonante em poços

quânticos na presença de um campo magnético transversal⁵⁵ foi, recentemente, desenvolvida pelo mesmo grupo⁵⁶.

Nesse capítulo apresentaremos uma generalização do método de Hamiltoniano de transferência²² para estudar o tunelamento através de uma barreira única na presença de um campo B paralelo às interfaces. Com esse método estudaremos dois sistemas de barreira única diferentes, em um deles o emissor e o coletor são semicondutores semi infinitos⁵⁷ e, no outro, o coletor é substituído por uma superrede⁵⁸.

5.2 Estados estacionários na presença de um campo magnético

Antes de introduzir os elementos característicos de um problema de tunelamento, esboçaremos os efeitos de um campo magnético, aplicado ao longo de um dos eixos principais de um cristal, sobre a estrutura eletrônica desse mesmo cristal. O potencial cristalino periódico é definido por $U(\mathbf{r}) = U(x + a_x u_x + y + a_y u_y + z + a_z u_z)$ e o campo magnético é $B u_x$ com o calibre $A = (0, -Bz, 0)$. Assim, a equação de Schroedinger

$$\left[\frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

transforma-se em

$$\left[-\hbar^2 / 2m \left((ik_x + \partial/\partial x)^2 + (ik_z + \partial/\partial z)^2 + (ik_y + ieBz/\hbar + \partial/\partial y)^2 \right) + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (5.2)$$

onde tomamos a forma usual

$$\psi_k(r) = u_k e^{ikr} . \quad (5.3)$$

A equação (5.2) sugere, para recobrar a condição de Bloch generalizada⁵⁹, a seguinte transformação de calibre:

$$A \rightarrow A e^{-iyeBpa_z/h} , \quad (5.4)$$

onde p é um número inteiro. Com isso introduzimos uma nova periodicidade $\psi_{k+g_m} = \psi_k$, com $g_m = eBa_z u_y/h$, superposta sobre a periodicidade cristalina: $2\pi u_y/a_y$. Se a razão entre a nova periodicidade e a cristalina não é um número racional, o sistema apresenta uma incomensurabilidade e, conseqüentemente, propriedades muito interessantes⁵⁹. Por outro lado, recobramos uma periodicidade perfeita no caso em que essa razão é um número racional qualquer. Em muitos casos, no entanto, os parâmetros da rede cristalina são muito menores do que o comprimento magnético, $l_m = (\hbar/eB)^{1/2} = 256/\sqrt{B}$ A (B em Tesla), de modo que $g_m \ll g_y$. Com isso podemos tratar o Hamiltoniano dentro da aproximação de massa efetiva para o potencial cristalino $U(r)$, onde $g_m = (a_z/l_m^2) u_y$ é a única periodicidade que aparece explicitamente no problema⁶⁰. Essa discussão é necessária para estabelecer uma abordagem ao problema. Felizmente a aproximação da massa efetiva, que vínhamos usando até aqui, é válida para todos os valores de campo

magnético utilizados nos cálculos descritos nesse capítulo. Uma vez justificada a aproximação da massa efetiva, precisamos introduzir no hamiltoniano o potencial unidimensional, $V_b(z)$, que define a barreira. Os estados estacionários de todo o sistema são obtidos da equação de Schroedinger, que na aproximação da massa efetiva assume a seguinte forma:

$$\left[\left(\hbar^2 k_x^2 / 2m^*(z) \right) - \left(\hbar^2 / 2 \right) \partial / \partial z \left(m^*(z) \right)^{-1} \partial / \partial z + \left(e^2 B^2 / 2m^*(z) \right) \left(z + \hbar k_y / eB \right)^2 + V_b(z) \right] e^{ik_{xx}} e^{ik_{yy}} \phi(z) = E e^{ik_{xx}} e^{ik_{yy}} \phi(z), \quad (5.5)$$

Notamos claramente nessa equação a mistura entre k_y e z introduzida pelo campo magnético. Muitas vezes é útil relacionar o número quântico k_y com um centro de órbita eletrônica

$$z_0 = \hbar k_y / eB = l_m^2 k_y. \quad (5.6)$$

A discussão dos resultados físicos que aparecem no que segue, é simplificada com a aproximação de massa $m^*(z)$ constante na eq.(5.5). Também utilizaremos essa aproximação nos cálculos apresentados nesse capítulo. Com isso obtemos uma relação de dispersão

$$E = \hbar^2 k_x^2 / 2m^* + E_{n, k_y}, \quad (5.7)$$

onde os níveis magnéticos E_{n,k_y} são obtidos através da solução de

$$[-(\hbar^2/2m^*)\partial^2/\partial z^2 + e^2 B^2/2m^*(z+z_0)^2 + V_b(z) - E_{n,k_y}]\phi(z) = 0. \quad (5.8)$$

Para um dado valor de k_y (ou z_0), a equação (5.8) unidimensional pode ser resolvida numericamente por meio de um método de elementos finitos. Na figura 5.1 mostramos esquematicamente as curvas de dispersão E_{n,k_y} , onde indicamos também que os estados nos anticruzamentos de bandas tem funções de onda que se dividem dos dois lados da barreira. Os autoestados que estão longe desses anticruzamentos tem funções que se concentram em apenas um dos lados da barreira. Os estados nos anticruzamentos formam os canais para magnetotunelamento, pois são os únicos que permitem a pacotes de onda, incidentes em um dos lados da barreira, passar para o outro lado. Esse processo de tunelamento pode ser adequadamente tratado com o uso do método de Hamiltoniano de transferência, que descreveremos a seguir.

5.3 Método de Hamiltoniano de Transferência para Magnetotunelamento

Esse método é uma formulação dependente do tempo do problema de probabilidades de transmissão através de barreiras²². É baseado na separação do hamiltoniano total em duas regiões espaciais, esquerda e direita (ver figura 5.1). Podemos então escrever que

$$H=H_L+V_L=H_R+V_R, \quad (5.9)$$

com $H=H_L$ à esquerda da barreira e $H=H_R$ à direita da barreira. Além disso, H_L e H_R precisam ser definidos de tal maneira que seus autoestados $|L\rangle$ e $|R\rangle$ estejam localizados também à esquerda e à direita da barreira, respectivamente. As funções de onda $\phi_L(r)=\langle r|L\rangle$ e $\phi_R(r)=\langle r|R\rangle$ podem ser consideradas como pacotes de onda do problema real. Desse modo os processos de tunelamento são descritos por uma teoria de perturbação dependente do tempo, que fornece as probabilidades de transmissão entre um estado inicial $\phi_L(r)$ e qualquer estado final $\phi_R(r)$ possível em termos de uma espécie de regra de ouro de Fermi²²

$$P_{LR} = 2\pi/\hbar |\langle R|V_L|L\rangle|^2 \delta(E_L - E_R). \quad (5.10)$$

Com um pouco de manipulação algébrica essa expressão pode ser escrita como

$$P_{LR} = 2\pi/\hbar |T_{LR}|^2 \delta(E_L - E_R), \quad (5.11)$$

onde

$$T_{LR} = (-\hbar^2/2m^*) \int (\phi_R \nabla \phi_L - \phi_L \nabla \phi_R) \cdot dS_{LR}. \quad (5.12)$$

A corrente é calculada sobre uma superfície S_{LR} que separa as regiões esquerda e direita. Em uma dimensão, a integral se reduz

ao cálculo da corrente em algum ponto da barreira. Esse método tem, evidentemente, a restrição de ser um método perturbativo. Sua validade se limita aos casos onde o espectro de H seja aproximadamente descrito pela combinação dos espectros de H_L e de H_R . Essa comparação é feita na figura 5.1, onde vemos que a relação de dispersão de H (figura 5.1a) é uma perturbação das relações de dispersão de H_L e H_R (figura 5.1b).

O procedimento prático para o cálculo das probabilidades de transmissão se divide em três etapas, a saber:

i) resolver duas equações de Schrodinger unidimensionais (eq. 5.8), uma delas com $V_b(z)=H_L$ e a outra com $V_b(z)=H_R$ (fig. 5.1b).

ii) identificar os cruzamentos entre as duas relações de dispersão, $E_{n,ky}^L$ e $E_{n',ky}^R$

iii) calcular as eqs. 5.11 e 5.12 apenas para os autoestados correspondentes a esses cruzamentos.

Deve ser lembrado que esses cruzamentos correspondem aos anticruzamentos na relação de dispersão para H , sendo esses os únicos canais de tunelamento. Uma vez calculadas as probabilidades de transmissão de elétrons da esquerda para a direita, a corrente é computada levando-se em conta a ocupação dos estados iniciais e finais. Isso requer o cálculo do nível de Fermi em cada contato na presença do campo magnético, como já havíamos mencionado no capítulo 4. Com essa informação em mãos, a densidade de corrente é obtida através de uma soma apropriada de

todas as probabilidades de transição entre níveis ocupados à esquerda e níveis desocupados à direita. Para $T=0K$, temos

$$j = (2e/2\pi\hbar) \sum_{nn'} \int dk_x dk_y |T_{LR}(E, k_y)|^2 \times \\ [\theta(E_F^L - E_{n,ky}^L) - \theta(E_F^R - E_{n',ky}^R)] \delta(E_{n,ky}^L - E_{n',ky}^R), \quad (5.13)$$

onde n e n' são índices dos níveis magnéticos de H_L e H_R , respectivamente. Na equação 5.13 a integral em k_x é trivial, já que para essa variável as relações de dispersão são parabólicas. A integral em k_y é calculada com o uso de um artifício,

$$\delta(E_{n,ky}^L - E_{n',ky}^R) = \delta(k_y - k_y^c) |d(E_{n,ky}^L - E_{n',ky}^R)/dk_y|_{k_y^c}, \quad (5.14)$$

onde k_y^c corresponde a um cruzamento nn' , ou seja, quando $E_{nky}^L = E_{n',ky}^R$. Com um pouco de álgebra chegamos a uma expressão final para a densidade de corrente:

$$j = (2e\sqrt{2m^*}) / (\pi\hbar^2) \sum_c |T_{LR}(k_y^c)|^2 / |d(E_n^L - E_{n'}^R)/dk_y|_{k_y^c} \times \\ [\sqrt{(E_F^L - E_c)} (\theta(E_F^L - E_c) - \theta(E_F^R - E_c)) + (\sqrt{(E_F^L - E_c)} - \sqrt{(E_F^R - E_c)}) \theta(E_c) \theta(E_F^R - E_c)]. \quad (5.15)$$

onde a soma é sobre todos os cruzamentos com energia E_c discutidos acima. Nessa eq. 5.15 a origem de energia é dado pelo fundo da banda de condução do emissor à esquerda.

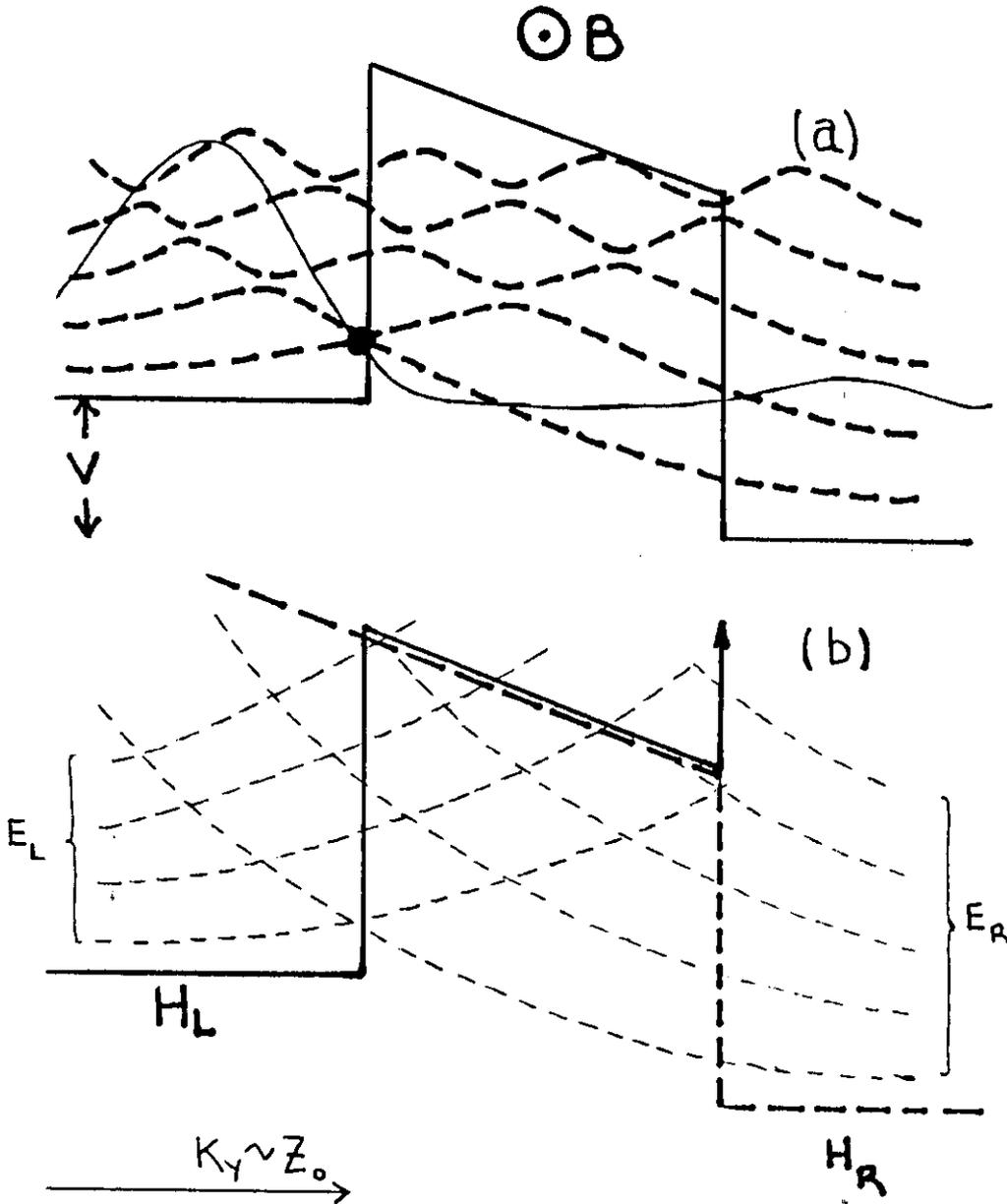


Fig. 5.1. (a) Relações de dispersão $E_{n,ky}$ (curvas tracejadas) do hamiltoniano H para um estrutura de barreira única. A curva contínua e fina representa a probabilidade de densidade de um estado perto de um cruzamento entre as curvas de dispersão (indicado por um círculo cheio). (b) Hamiltonianos modelos, H_L e H_R , para resolver o problema indicado em (a) pelo método de hamiltoniano de transferência. As linhas tracejadas indicam as relações de dispersão para H_L e H_R .

5.4 Oscilações quânticas e resistência diferencial negativa em magnetotunelamento não ressonante

Vimos até agora que a aplicação de um campo magnético perpendicular à corrente de tunelamento através de uma barreira, leva ao aparecimento de uma série de canais de tunelamento relacionados com anticruzamentos na relação de dispersão eletrônica⁵⁴. O propósito agora é discutir duas importantes consequências da estrutura física desses canais. A primeira é que a corrente apresenta oscilações como função de B para uma dada voltagem aplicada à barreira, como foi observado experimentalmente^{52,57}. Discutiremos como esse fenômeno compete com as oscilações do nível de Fermi de volume no emissor, quando variamos o campo magnético. A segunda consequência é mais instigante ainda. Sob certas condições, a corrente de tunelamento, através de uma simples barreira com campo B paralelo às interfaces dessa barreira, apresenta resistência diferencial negativa em um processo não ressonante.

Para analisar essas questões utilizamos o modelo descrito acima, incluindo, porém, duas generalizações importantes. Primeiro, incluímos a possibilidade de um caso assimétrico, onde um semiconductor não degenerado faz o papel do contato emissor⁵⁷, enquanto que o contato coletor permanece degenerado como nos casos discutidos até agora. Nessa situação o processo de tunelamento ocorre a partir de apenas um nível magnético no emissor para vários níveis no coletor. Segundo, incluímos no

perfil de potencial o efeito de entortamento das bandas devido às camadas de acumulação e depleção, que aparecem perto das interfaces da barreira, de modo que a voltagem total aplicada não cai mais exclusivamente na região da barreira⁶¹.

O primeiro caso estudado refere-se ao dispositivo descrito na ref.57, que consiste de uma barreira de 230Å de $\text{Ga}_{0.69}\text{Al}_{0.31}\text{As}$ entre um substrato não degenerado de GaAs ($N_s = 1.7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) e um portão degenerado de GaAs ($N_g = 9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). A relação de dispersão desse sistema, com um campo magnético aplicado paralelamente à barreira e com uma voltagem V aplicada, aparece esquematizado na figura 5.2. A figura 5.3 mostra a densidade de corrente para esse sistema como função de $1/B$ e $V=0.4V$. As oscilações periódicas são devidas à abertura sucessiva de novos canais de tunelamento (anticruzamentos na relação de dispersão e cruzamentos no método de hamiltoniano de transferência utilizado para calcular as correntes de tunelamento) entre os dois níveis de Fermi, quando B é variado. Esse comportamento periódico pode ser entendido em termos das posições dos cruzamentos com respeito à barreira. O painel superior da figura 5.3 mostra que cada canal de tunelamento se move linearmente com $1/B$. Além disso, quando o cruzamento está acima do nível de Fermi do emissor (que está acima em energia do nível de Fermi do coletor), ele não contribui para a corrente através da barreira. Esse corte de sucessivos canais de tunelamento também é linear em $1/B$, como mostra a figura 5.3. Portanto, a densidade de corrente apresenta

oscilações em $1/B$ com período Δ_1 . Esse mecanismo, devido à presença das interfaces da barreira, não é o único capaz de esse tipo de oscilações periódicas. Superpostas a essas oscilações, aparecem outras similares de período Δ_b , produzidas pela dependência do nível de Fermi de volume nos contatos com o campo B. Essa dependência é muito pequena no caso de um substrato não degenerado, mas pode ser responsável por fortes oscilações periódicas em $1/B$ para sistemas com dois contatos de semicondutores degenerados. Na figura 5.4 mostramos a densidade de corrente em função de $1/B$, através de uma barreira de 200Å de $\text{Ga}_{0.08}\text{Al}_{0.92}\text{As}$ com uma voltagem aplicada de $V=0.3\text{V}$, entre dois meios de GaAs com uma dopagem de 10^{18}cm^{-3} . Dois conjuntos de oscilações são claramente observados. Essa dependência de j com B mostrada nas figuras 5.3 e 5.4 foi, como dissemos, observada experimentalmente^{52,57}. A existência de dois conjuntos de oscilações diferentes em $1/B$ foi detectada claramente em alguns casos⁵² (ainda que atribuídas a outras origens), enquanto que em outros casos há apenas indicações de um segundo conjunto de oscilações^{57,62}.

Um fenômeno mais importante aparece quando a corrente é estudada como função da voltagem aplicada para um campo magnético fixo. De um ponto de vista semiclássico, o campo magnético curva as trajetórias dos elétrons, de tal maneira que, para um dado valor de B , uma voltagem limiar é requerida para se ter uma corrente de tunelamento. A descrição quântica é que esse limiar

corresponde ao potencial necessário para abrir o primeiro canal de tunelamento, que se manifesta por provocar um aumento tipo degrau na corrente. O aumento contínuo da voltagem aplicada abaixa a energia desse canal de tunelamento mais rapidamente do que diminui a altura da barreira. O efeito resultante é uma barreira efetiva mais alta para os elétrons. Isso provoca uma diminuição da probabilidade de transmissão e, conseqüentemente, da densidade de corrente, como mostra a figura 5.5 para o mesmo sistema da figura 5.3, para diferentes valores de B . Essa é a origem da resistência diferencial negativa que aqui não está conectada com efeitos de ressonância, que são os mecanismos comuns para produzir esse fenômeno. Quando a voltagem aplicada é suficientemente alta, um segundo canal de tunelamento é aberto e o processo se reinicia (figura 5.5). Essas estruturas produzidas pelo campo magnético são superpostas ao aumento exponencial usual da corrente com a voltagem aplicada à barreira⁷. Portanto, cada pico de corrente se move para valores mais altos de voltagem com o aumento de B , com sua intensidade crescendo exponencialmente. Como a corrente de vale apresenta o mesmo comportamento, mas com um fator exponencial menor, a razão pico-vale da resistência diferencial negativa também aumenta exponencialmente com B , como mostra o quadro inserido na figura 5.5. A razão pico-vale diminui para canais mais altos, mas o comportamento qualitativo de todos eles é o mesmo. Esse comportamento não foi, no entanto, observado experimentalmente até agora.

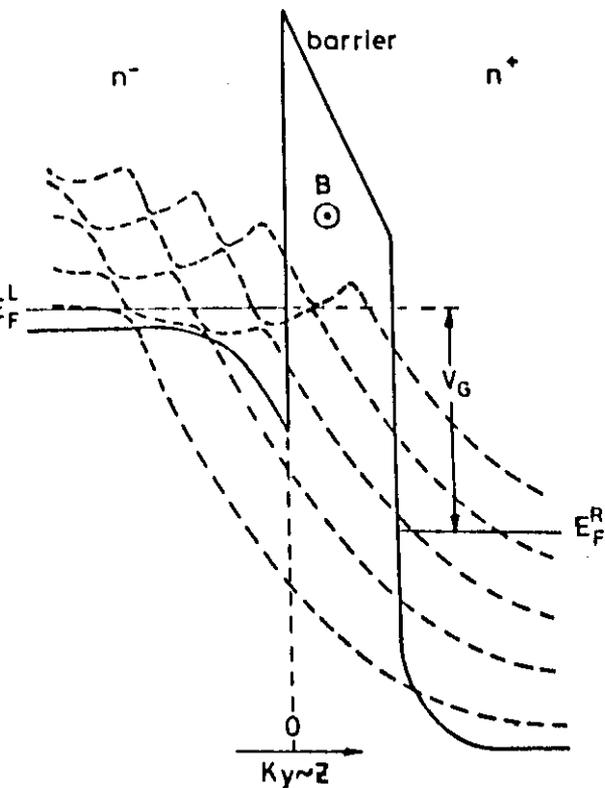


Fig. 5.2. Perfil de potencial para uma estrutura de barreira única com contatos dopados assimetricamente, incluindo o entortamento das bandas devido a efeitos de cargas espaciais. As linhas tracejadas mostram os níveis magnéticos como função de k_y ou os centros de órbita associados.

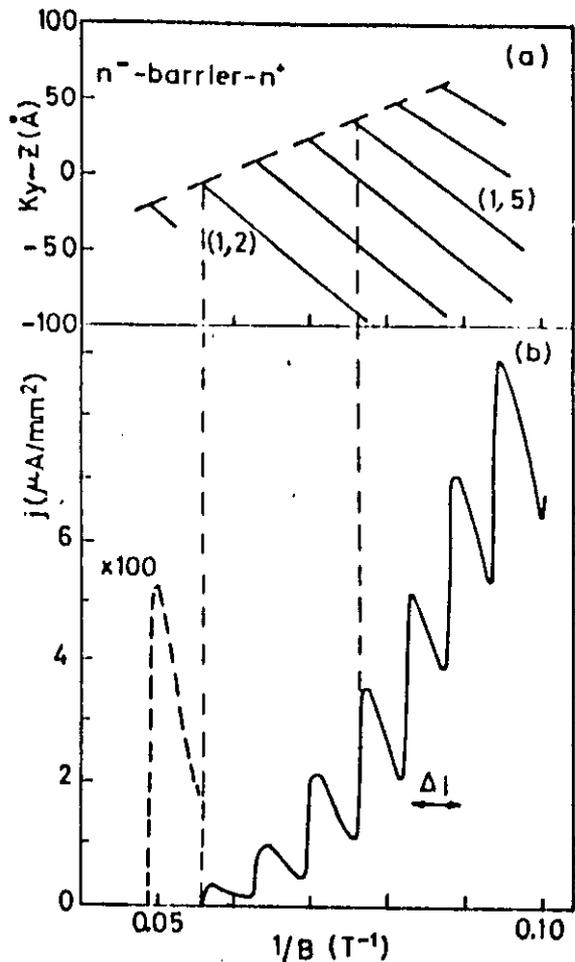


Fig. 5.3. (a) Posição (linhas contínuas) z_1 (em Å) dos canais de tunelamento como função de $1/B$ (em T^{-1}) para a estrutura esquematizada na figura 5.2 e descrita no texto para uma voltagem aplicada de $V_G = 0.4$ V. A linha tracejada indica o corte desses canais, o que produz as oscilações na corrente. Os números em parenteses (n, n') indexam os cruzamentos entre o nível magnético n à esquerda da barreira com o nível m à direita da mesma. (b) Densidade de corrente j como função de $1/B$ para o mesmo sistema.

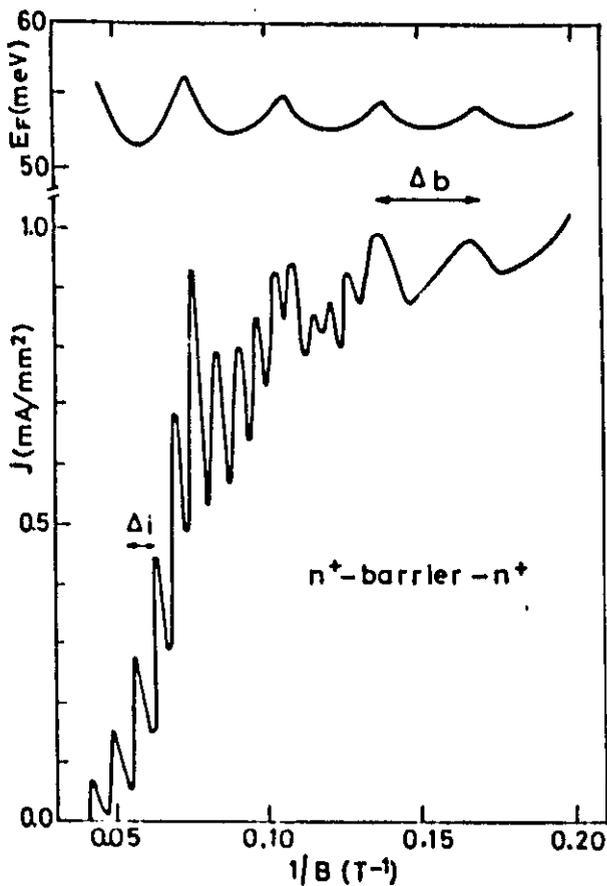


Fig. 5.4. Densidade de corrente e nível de Fermi como função de $1/B$ de um sistema de barreira simples com dois contatos degenerados simétricos (descrição no texto). Δ_i e Δ_b são os períodos de oscilação (ver texto)

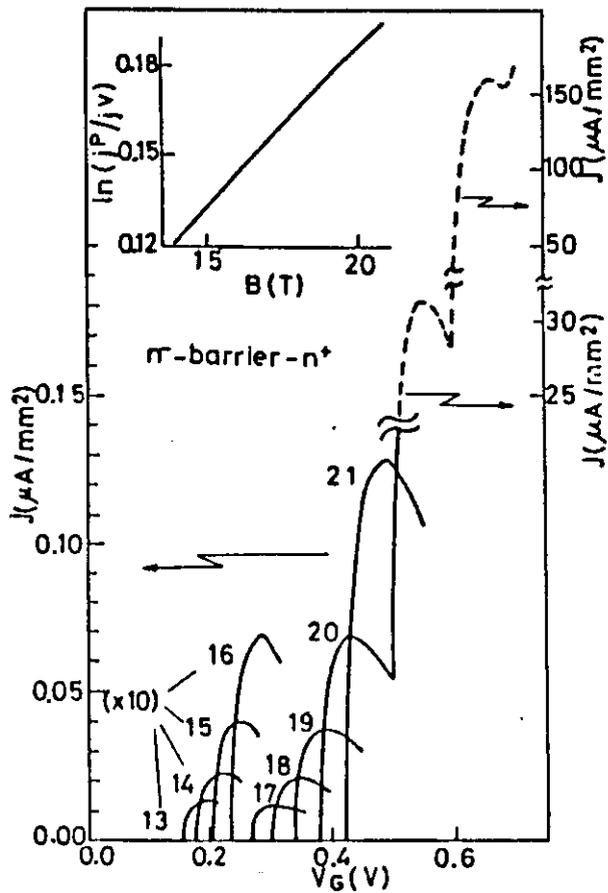


Fig. 5.5. Densidade de corrente como função da voltagem aplicada para o sistema da figura 5.3 para diferentes valores de B . O gráfico inserido na figura mostra o logaritmo da razão entre corrente de pico e de vale para o primeiro pico em j como função do campo magnético.

5.5 Quantização elétrica versus quantização magnética

Na secção anterior vimos de uma maneira geral a influência de um campo magnético sobre a estrutura eletrónica numa heteroestrutura de simples barreira e como isso se reflete sobre as propriedades de tunelamento da mesma. Não vamos nos deter nas diferenças entre a configuração estudada aqui ($B_{\perp j}$) e a que estudamos no capítulo 4 ($B_{\parallel j}$), mas observamos que no primeiro caso o campo magnético tende a localizar o elétron na direção perpendicular às interfaces de uma heteroestrutura. Com isso é possível que uma competição entre a quantização elétrica num poço quântico ou superrede e essa quantização magnética leve a transições entre regimes onde predomina uma ou outra quantização, dependendo da intensidade de B , que é um parâmetro ajustável num experimento.

Essa competição se verifica, por exemplo, na eliminação progressiva da resistência diferencial negativa de um diodo de poço quântico na presença de um campo magnético perpendicular à corrente⁵⁵. Esse efeito é ainda mais marcante em medidas de densidade de estados de uma superrede através de tunelamento^{58,63}, onde uma superrede é separada de uma contato emissor fortemente degenerado por uma barreira. Helm e colaboradores⁵⁸ realizaram esse tipo de medidas na presença de campos magnéticos perpendiculares à corrente em um sistema, onde a superrede era pouco dopada e constituída de poços

quânticos largos (330Å) e barreiras estreitas (20Å). A baixa dopagem na superrede faz com que grande parte da voltagem total aplicada ao dispositivo caia na superrede, rompendo a estrutura de subbandas perto da barreira. Com isso os elétrons são injetados via tunelamento nos níveis isolados do primeiro poço quântico da superrede, fazendo com que os picos na característica corrente-voltagem sejam devidos a esses níveis de poço quântico isolado, em vez de subbandas de uma superrede. As características corrente-voltagem medidas para esse sistema na presença de um campo magnético estão na figura 5.6. Os 7 picos que aparecem no caso de $B=0$ são devidos aos sete estados ligados de um poço tão largo. É interessante notar que as oscilações na condutância são progressivamente apagadas com o aumento do campo magnético até serem praticamente suprimidas para $B=10T$. Para campos magnéticos mais intensos ainda um novo conjunto de oscilações começa a aparecer. O primeiro conjunto de oscilações é devido a estados quantizados pelas barreiras de potencial da heteroestrutura, ainda que modificados pelo campo magnético. O segundo conjunto de oscilações tem sua origem na quantização magnética do sistema, num regime onde os elétrons não sentem mais a modulação do potencial de poço quântico. Essa interpretação foi desenvolvida por nós, independentemente de Helm⁶⁴ e colaboradores.

A figura 5.7 ilustra essa competição entre quantização elétrica e magnética em um sistema semiconductor-barreira-superrede. Em (a) temos a relação de

dispersão em presença de um campo magnético $B=10T$ para um sistema semicondutor-barreira-semicondutor, similar aos estudados na secção anterior, onde os canais de tunelamento (anticruzamentos) são determinados pela quantização magnética. Em (b) o contato da direita é constituído de um superrede com poços de 330\AA , o que é muito maior do que o comprimento magnético a $B=10T$ ($\approx 90\text{\AA}$), fazendo com que o elétron praticamente não sinta a modulação de potencial da superrede. Observamos, de fato, que a estrutura dos canais de tunelamento é praticamente igual a do caso (a). A situação modifica-se bastante, quando a largura dos poços é da ordem do comprimento magnético (c). Aqui vemos claramente que a estrutura dos canais de tunelamento é fortemente influenciada pela estrutura de subbandas da superrede. Experimentalmente⁵⁸ esses efeitos são observados com a variação do campo magnético, de modo que para campos magnéticos pequenos (comprimento magnético grande) a espectroscopia de tunelamento detecta a estrutura de subbandas de uma superrede e, para campos magnéticos grandes (comprimento magnético pequeno), observa-se apenas efeitos de quantização magnética como nos casos estudados na secção anterior.

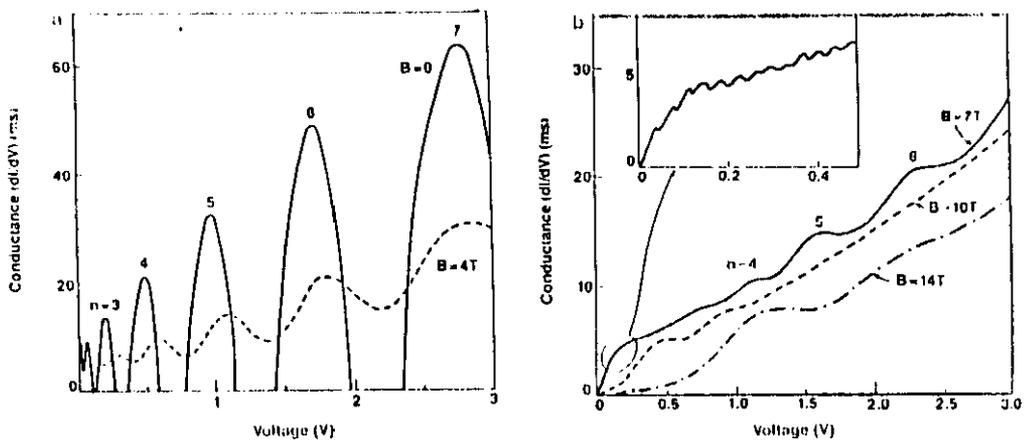


Fig. 5.6. (a) Condutância versus voltagem para a estrutura semiconductor-barreira superrede da ref.58 para $B = 0T$ e $B = 4T$. (b) idem para $B = 7, 10$ e $14 T$.

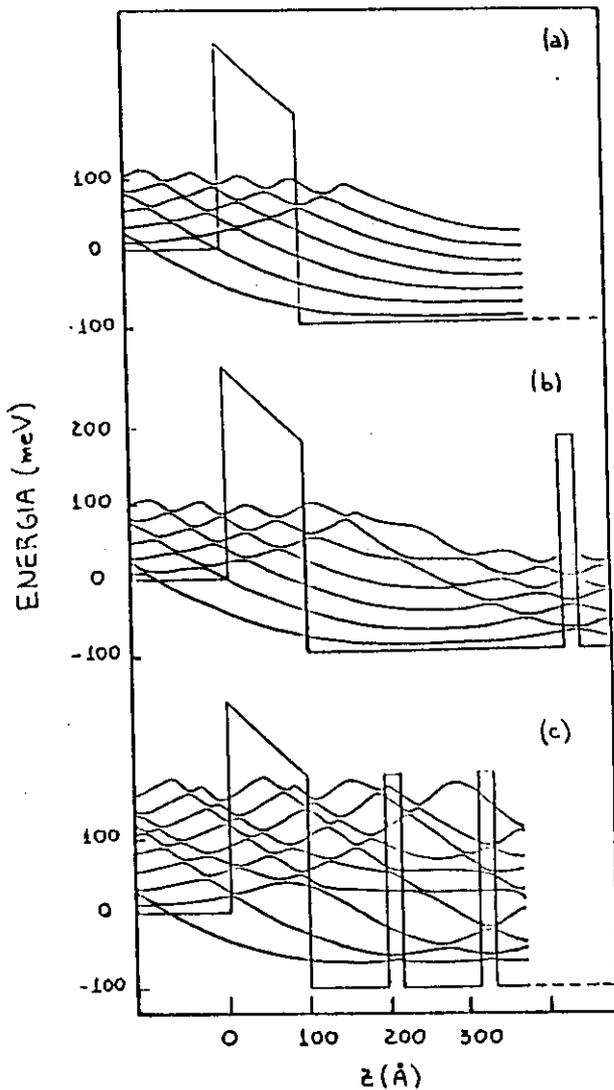


Fig. 5.7. Relações de dispersão dos níveis magnéticos na presença de um campo magnético, $B = 10T$, paralelo às interfaces das heteroestruturas representadas.

6. Modelo simples para tunelamento ressonante além da aproximação de massa efetiva

6.1 Introdução

O trabalho experimental sobre tunelamento ressonante em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As é usualmente analisado através da visão conceitual baseada na aproximação da massa efetiva, onde os parâmetros chave são as alturas das barreiras (descontinuidades das bandas de condução) e as massas efetivas, utilizados no cálculo de probabilidades de transmissão. Embora muito útil, essa abordagem está aberta a críticas, quando efeitos de não parabolicidade das bandas de condução tem que ser levados em conta, ou quando estados de diferentes regiões da zona de Brillouin aparecem envolvidos no processo de tunelamento⁶⁵. Nesses casos torna-se necessária uma abordagem conceitual mais apropriada às dificuldades do problema e que, ao mesmo tempo, preserve tanto quanto possível a clareza da aproximação de massa efetiva.

Estudos quantitativos de tunelamento ressonante tem-se baseado principalmente na aproximação da massa efetiva, uma abordagem que apresenta a vantagem de poder incorporar os efeitos de cargas espaciais⁶⁶. Tunelamento através de uma barreira, incorporando uma estrutura de banda mais realista, foi estudado por McGill e colaboradores⁶⁷, por Kelly e colaboradores⁶⁸ e, para um modelo mais simples, por Brey e Tejedor⁶⁹. Mais recentemente, Inckson e

Ho⁷⁰ apresentaram um tratamento bastante completo de alguns dos problemas que levantamos nesse capítulo. O objetivo do nosso trabalho é o de apresentar um cálculo de tunelamento ressonante através de uma estrutura barreira-poço-barreira simétrica, baseado em um modelo que é solúvel exatamente, isto é, não lança mão da aproximação de massa efetiva e ao qual questões conceituais de interesse podem ser remetidas. Essas questões são: (a) probabilidade de tunelamento para valores arbitrários de energia incidente ou bias aplicado, (b) a competição entre tunelamento por "gap" direto e indireto, e (c) a natureza da função de onda em cada caso. Devido a sua simplicidade, o modelo que apresentaremos é útil para uma discussão inicial desses pontos. Veremos também que esse modelo, embora simples, pode ser aplicado a sistemas reais, na medida em que ele emula a aproximação de massa efetiva com a vantagem de ser bastante apropriado para estudar qualitativamente dois efeitos importantes: (i) não parabolicidade das bandas, e (ii) desordem estática. Esse último item e sua relação com regimes de tunelamento será abordado em outro capítulo (cap. 7).

6.2 Modelo de cálculo

Começaremos por apresentar nosso Hamiltoniano modelo, que consiste de uma cadeia unidimensional de orbitais tipo s, tratados na aproximação de ligações fortes. A cadeia é formada por dois segmentos semi-infinitos de átomos tipo A, entre os

quais introduzimos uma estrutura simétrica de barreira-poço-barreira, composta por três camadas sequenciais de N_B átomos do tipo B, N_A átomos do tipo A, e novamente N_B átomos do tipo B, como no esquema da figura 6.1. Os parâmetros de ligações fortes para uma cadeia somente de átomos do tipo A (B) são os seguintes: energia atômica E_A (E_B) e elementos de acoplamento entre primeiros vizinhos V_{AA} (V_{BB}). Esses parâmetros determinam as relações de dispersão de volume:

$$E_J(k) = 2V_{JJ}\cos(ka), \quad J = A \text{ ou } B, \quad (6.1)$$

onde k é o vetor de onda de Bloch e a é o parâmetro de rede da cadeia. Se $V_{JJ} < 0$, o fundo da banda está em $k = 0$, enquanto que para $V_{JJ} > 0$, o fundo da banda está no limite da zona de Brillouin. Nós tomaremos V_{AA} como sendo sempre menor que zero e V_{BB} como sendo tanto maior ou menor que zero. Referimo-nos ao primeiro caso como de estrutura de banda de "gap direto" e ao segundo como de estrutura de banda de "gap indireto", embora tendo em mente de que aqui se trata de um modelo de banda única. As massas efetivas para elétrons (fundo da banda) e buracos (topo da banda) são iguais nesse modelo, dadas por

$$m_J = \hbar^2 / (2 |V_{JJ}| a^2). \quad (6.2)$$

Essa relação é a que permite, por exemplo, utilizar o modelo

que estamos apresentando como um emulador da aproximação de massa efetiva. Com o propósito de simplificar a apresentação, consideraremos apenas o caso $E_A = E_B$, de modo que a descontinuidades de banda dependem apenas dos valores de V_{JJ} . Assumiremos aqui $|V_{BB}| < |V_{AA}|$, assim o material B constitui-se numa barreira tanto para o caso de gap direto, quanto para o caso de gap indireto, que são ilustrados na figura (6.1). A descontinuidade de bandas é dada por $2(|V_{AA}| - |V_{BB}|)$. Quando consideramos as heterojunções, definimos, para as interfaces, $V_{AB} = -(|V_{AA}V_{BB}|)^{1/2}$.

Para o Hamiltoniano modelo

$$H = \sum_n (E_n |n\rangle\langle n| + V_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + V_{n+1,n} |n+1\rangle\langle n|), \quad (6.3)$$

onde a ocupação de cada sítio n corresponde ao arranjo esquemático da figura 6.1, o problema de transmissão através da barreira-poço-barreira tem solução numérica exata, por meio da técnica de decimação⁷¹. A partir daí a função de onda pode ser avaliada por métodos convencionais de matriz de transferência³², que é a maneira de calcular também a probabilidade de transmissão para casos onde não temos estruturas simétricas, como, por exemplo, o diodo de dois degraus (cap. 3) ou sistemas barreira-poço-barreira com barreiras diferentes. A vantagem, porém, da técnica de decimação é que ela reduz o tempo de computação das amplitudes de transmissão e reflexão. Na presença

de um bias externo ϕ , temos

$$E_n = E_J - \phi_n / (2N_b - N_a), \quad (6.4)$$

onde $E_J = E_A$ ou E_B , dependendo do tipo de átomo no enésimo sítio. Nos resultados numéricos que mostraremos na secção seguinte, tomamos $E_A = E_B = 14.45$ eV, $V_{AA} = 7.225$ eV e $V_{BB} = 6.975$ eV. O valor escolhido para V_{AA} emula um poço de GaAs ($m^* = 0.067m_0$), supondo que cada sítio da cadeia linear corresponde a uma monocamada de GaAs na direcção [100] ($a = 2.83$ Å).

6.3 Resultados

Examinaremos primeiro o caso que chamamos de gap direto, para o qual mostramos os resultados na figura 6.2. O mínimo da banda de condução está no ponto Γ , tanto no poço, quanto nas barreiras. Esse é um caso de menor interesse, sendo, porém, útil para comparação com a situação de gap indireto. Na figura 6.2(a), mostramos a probabilidade de transmissão como função da energia do elétron incidente para duas geometrias diferentes e, na figura 6.2(b), como função de bias aplicado, para duas energias de incidência distintas. Essas curvas de probabilidade de transmissão são qualitativamente muito similares a aquelas obtidas por meio da aproximação de massa efetiva, embora não concordem quantitativamente nos detalhes. Essa discordância vem da não parabolicidade das bandas introduzida pelo presente

modelo. Essa não parabolicidade acentua-se com a diminuição da largura da banda. De interesse maior é o peso espectral da transformada de Fourier da função de onda no interior da região barreira-poço-barreira, mostrada na figura 6.3, para bias igual a zero. Para energias pequenas ($E = 0.01$ eV) a função de onda tem um peso espectral grande perto do centro da zona de Brillouin, mas de modo algum corresponde a um estado puro com $k=0$ (a). O estado tunelante é uma mistura de estados de toda a zona de Brillouin, como se pode esperar intuitivamente. Perto da ressonância de energia mais baixa ($E = 0.086$ eV), (b), o peso espectral está muito mais concentrado em valores pequenos de k . O pico intenso para $k = 0$ reflete o valor acentuado da função de onda no interior do poço em ressonância. As oscilações e picos subsidiários são similares aos obtidos por intermédio da aproximação de massa efetiva. Quando aumentamos mais a energia ($E = 0.1$ eV), (c), o peso espectral se desloca de $k = 0$, devido ao fato de que a segunda ressonância é uma função ímpar em relação ao centro da estrutura, isto é tem um valor médio nulo. Na posição da segunda ressonância ($E = 0.32$ eV), (d), o peso espectral vai a zero em $k = 0$, como esperado. Em acordo com o fato de que estamos tratando de um sistema de gap direto, o peso espectral mantém-se, para energias baixas, concentrado perto do centro da zona.

Cosideremos agora o caso de gap indireto, onde o mínimo em energia na barreira está na borda da zona de Brillouin. Este caso

não pode ser tratado por meio da aproximação de massa efetiva convencional. É interessante observar que a probabilidade de transmissão não se altera em relação ao caso de gap direto, o que indica que, no caso particular analisado aqui, o tunelamento ocorre através da barreira mais baixa, independentemente do seu caráter de simetria. Este resultado pode ser entendido pelo fato de que, na direção perpendicular à interface, o vetor de onda de Bloch não é um bom número quântico. Temos que nos referir, então, à densidade de estados projetada⁷² como quantidade física relevante, em vez da relação de dispersão. No nosso modelo particular, a densidade de estados projetada é a mesma nos dois casos, de gap direto e indireto, indicando que é essa a quantidade que determina a probabilidade de tunelamento, uma vez que vamos além da aproximação de massa efetiva. A distribuição do peso espectral das funções de onda é, no entanto, marcadamente diferente nos dois casos considerados aqui. Essas distribuições são mostradas na figura 6.4 para o caso de gap indireto para os mesmos parâmetros de energia da figura 6.3. Nota-se que o peso espectral para baixas energias está distribuído de uma maneira muito mais uniforme através da zona de Brillouin, mas exibindo um máximo na borda da zona. O estado ressonante mais baixo em energia tem uma forte contribuição de $k = 0$, mas o peso espectral oscila por toda zona de Brillouin.

Uma comparação entre os pesos espectrais das funções de onda para tunelamento direto e indireto mostra que, quando falamos de

tunelamento intravale ou intervalos, temos que ter em mente que a função de onda real é uma superposição de componentes de vetor de onda de diferentes pontos da zona de Brillouin. Isso é particularmente correto em materiais reais, onde a complexidade da estrutura de banda pode dar origem a degenerescências em energia para estados com diferentes vetores de onda. O presente modelo não pode tratar esse caso, posto que numa situação de banda única não há estados degenerados.

Para poder entender melhor esses resultados, apresentamos na figura 6.5 as funções de onda em espaço real para: (a) $E = 0.01$ eV, (b) perto da primeira ressonância a $E = 0.086$ eV, e (c) perto da segunda ressonância a $E = 0.32$ eV, para bias igual a zero. Um ponto importante, que emerge de uma comparação numérica dos resultados, é que as funções de onda de ambos os casos, gap direto e indireto, tem o mesmo envelope - para emprestar um termo da teoria de massa efetiva. As funções de onda para gap indireto são numericamente iguais aquelas para gap direto multiplicadas por uma função de Bloch de simetria tipo X nas regiões de barreira e por uma função de Bloch de simetria tipo Γ na região do poço. Isto parece confirmar a noção intuitiva de que os estados de barreira em tunelamento são aqueles correspondentes a estados propagantes de energia permitida mais baixa.

Na figura 6.6 mostramos um resultado interessante do ponto de vista acadêmico, que não pode ser obtido por meio da aproximação de massa efetiva: a probabilidade de transmissão para o intervalo

completo de energia do nosso modelo de uma banda. Para energias baixas nós temos tunelamento ressonante de elétrons, para energias intermediárias ocorre transmissão através de ondas extendidas tanto nas barreiras, quanto nos poços, e, finalmente, para energias altas temos tunelamento por estados perto do topo da banda. Os parâmetros utilizados aqui são, por razões numéricas, diferentes daqueles utilizados para as outras figuras.

Uma extensão natural desse cálculo deveria levar em conta o acoplamento entre segundos vizinhos na cadeia, de modo a simular situações onde mínimos diferentes da banda de condução estejam praticamente degenerados (Γ e X numa barreira da GaAlAs com \approx 40% de Al, por exemplo). Essa extensão seria útil para estudar melhor a simetria no espaço recíproco das barreiras de potencial que um elétron sente numa heteroestrutura, sem perder a simplicidade de interpretação dos resultados físicos⁷⁰.

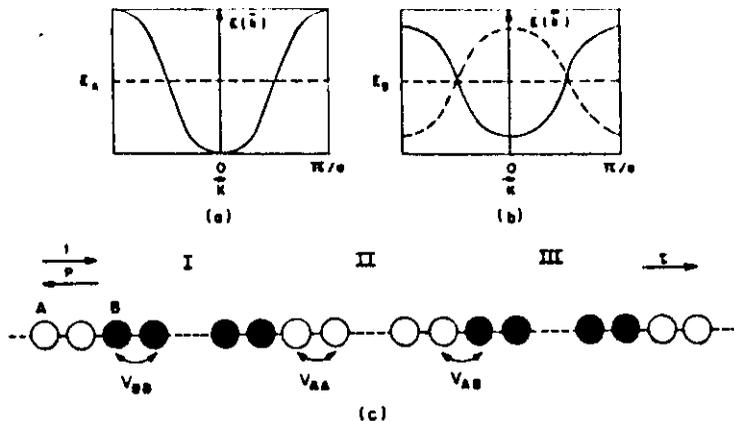


Fig. 6.1. Bandas de condução de volume para os semicondutores no poço (a) e barreiras (b). A cadeia unidimensional de orbitais s aparece esquematizada em (c): regiões I e III são barreiras e II é o poço. Os parâmetros de acoplamento entre primeiros vizinhos e as funções de onda nos contatos também são mostrados.

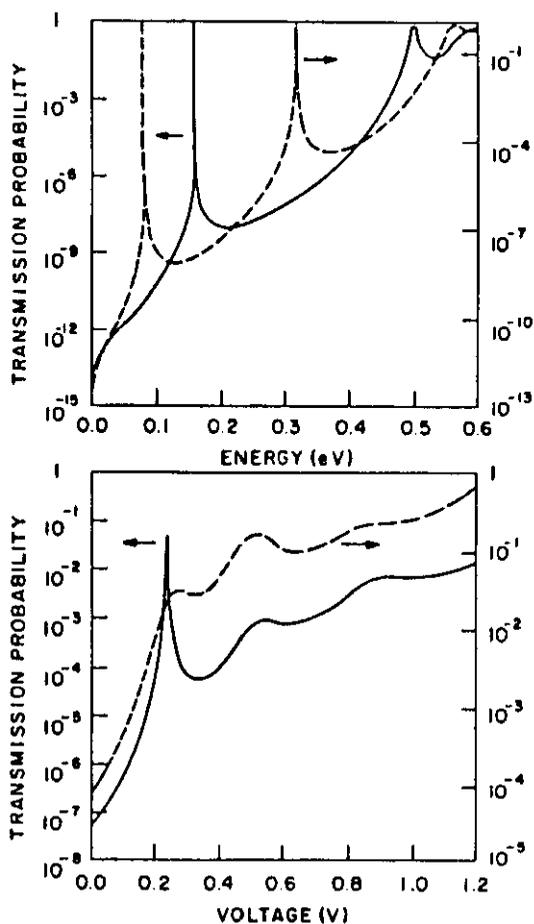


Fig. 6.2. No alto são mostradas curvas de probabilidade de transmissão em função da energia do elétron incidente para duas larguras de poço diferentes: 13 (curva cheia) e 21 (curva tracejada) sítios atômicos. A largura total, barreiras mais poço, é igual nos dois casos, 65 átomos. No gráfico inferior são apresentadas probabilidades de transmissão como função da voltagem aplicada para a estrutura com um poço de 21 átomos com duas energias diferentes para o elétron incidente: 0.20eV (curva cheia) e 0.40eV (curva tracejada). Os parâmetros de ligações fortes são os mesmos em todos os casos e estão descritos no texto.

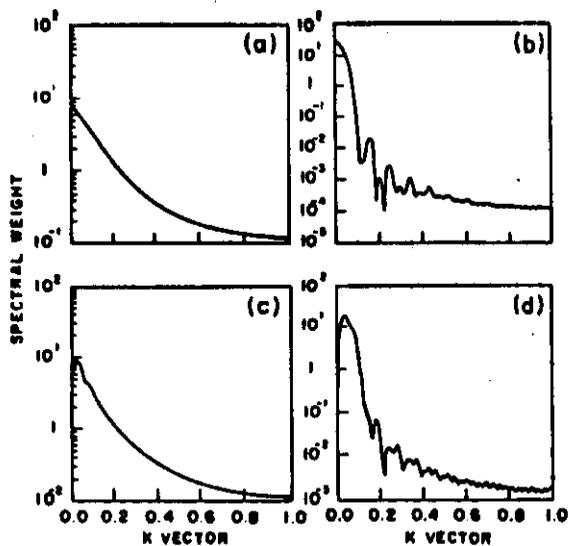


Fig. 6.3 Peso espectral da transformada de Fourier da função de onda no interior da região barreira-poço-barreira para o caso de gap direto sem voltagem aplicada (com os mesmos parâmetros da figura 6.2 e poço de 21 átomos), a quatro diferentes energias para o elétron incidente: (a) 0.01eV, (b) 0.088eV (primeira ressonância), (c) 0.1eV e (d) 0.32eV (segunda ressonância).

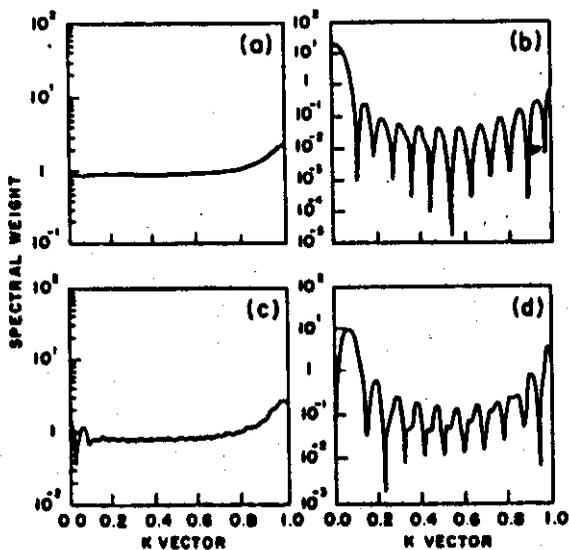


Fig. 6.4. O mesmo que a figura 6.3 para o caso de gap indireto.

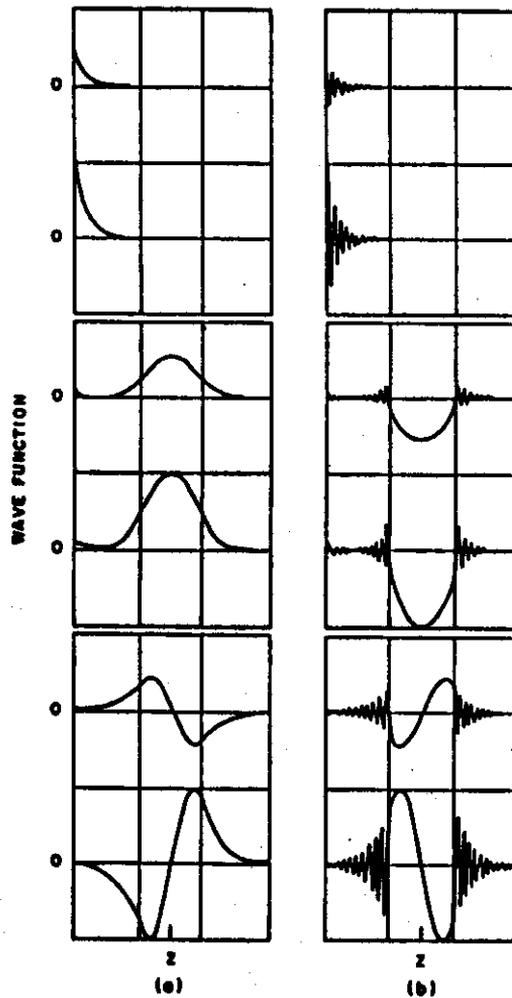


Fig. 6.5. Funções de onda no espaço real em estruturas simétricas de barreira-poço-barreira com um poço de 21 átomos sem campo elétrico aplicado. Os parâmetros de cálculo são os mesmos da figura 6.2. As linhas verticais indicam as interfaces barreira/poço e poço/barreira. (a) apresenta o caso de gap direto e (b) de gap indireto. A curva acima(abaixo) de cada diagrama representa a parte real(imaginária) da função de onda. Topo: $E=0.01\text{eV}$. Meio: $E=0.086\text{eV}$. Abaixo: $E=0.32\text{eV}$.

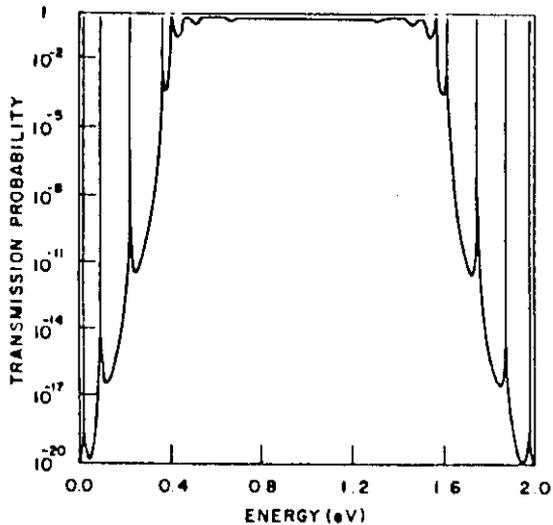


Fig.6.6. Probabilidade de transmissão como função da energia do elétron incidente sem voltagem aplicada para toda a largura de banda do poço de uma estrutura simétrica barreira-poço-barreira com 11 átomos no poço e 11 átomos em cada barreira. Os parâmetros de cálculo foram escolhidos para dar uma descontinuidade de bandas de 0.4eV tanto para elétrons (fundo da banda), quanto para "buracos" (topo da banda).

7. Efeitos de desordem sobre tunelamento ressonante em poços quânticos de barreira dupla

7.1 Introdução

A melhoria crescente na qualidade dos dispositivos para transporte vertical de sistemas de poços quânticos de GaAs/GaAlAs, foi acompanhada por uma evolução sistemática das características corrente-voltagem dos mesmos. O principal parâmetro levado em conta aqui é a razão entre a corrente de pico e a corrente de vale. Predições teóricas dessa razão tem que levar em conta, necessariamente, os desvios da situação idealizada de interfaces perfeitas, ausência de defeitos e mecanismos de espalhamento dinâmico; desvios esses que levam a uma redução da razão pico-vale das características de corrente-voltagem de diodos de poços quânticos. Vimos anteriormente, que as correntes de pico são razoavelmente bem previstas por cálculos realizados dentro da aproximação da massa efetiva e que supõe dispositivos idealizados. Por outro lado, as correntes de vale assim obtidas são muito inferiores às de dispositivos reais.

Em estruturas ideais o tunelamento ressonante de elétrons é coerente²³. Se esse elétron sofre, durante o processo de tunelamento, algum tipo de espalhamento inelástico ele perde sua memória de fase e diz-se então que o tunelamento é sequencial⁴⁰. Os processos de espalhamento são caracterizados por um tempo ,

que deve ser comparado com o tempo de tunelamento dos elétrons, de modo que estamos falando de probabilidades de que eventos de espalhamento e perda de memória de fase ocorram. O regime de tunelamento sequencial é um regime intermediário entre o regime de tunelamento coerente e o completamente incoerente, onde todos os elétrons perdem sua memória de fase³¹, como já havíamos discutido no capítulo 4 desta tese. De um modo geral a presença de processos de espalhamento levam a um alargamento e a uma diminuição do pico de transmissão ressonante, paralelamente a um alargamento da densidade de estados no poço quântico³¹, e, conseqüentemente, a uma diminuição da razão pico-vale.

Nesse contexto, a observação de tunelamento ressonante em heteroestruturas baseadas em semicondutores amorfos é bastante surpreendente. A ausência de estruturas bem definidas na densidade de estados e o crescente grau de localização das funções de onda eletrônicas, à medida que nos aproximamos das extremidades das bandas de energia, sugerem a ausência desse efeito em sistemas de barreira dupla fabricados de semicondutores amorfos. Miyazaki e colaboradores⁷³, no entanto, anunciaram a existência de tunelamento ressonante através de poços quânticos de barreira dupla de silício amorfo hidrogenado (poço) e nitreto de silício amorfo hidrogenado (barreiras). Pelo menos um segundo grupo de pesquisadores⁷⁴ obteve o mesmo tipo de resultados. Esses resultados experimentais foram comparados pelos autores com cálculos de probabilidade de transmissão baseados na aproximação

de massa efetiva. Gu Benyuan e colaboradores⁷⁵ estudaram recentemente o efeito de centros de espalhamento sobre tunelamento ressonante com um modelo também baseado na aproximação de massa efetiva.

7.2 Modelo de cálculo e simulação de desordem

Nesse contexto é útil a proposta de um modelo heurístico, onde o efeito da desordem possa ser estudado sistematicamente. O modelo que propomos aqui é o da cadeia de orbitais tipo s, tratados na aproximação de ligações fortes, descrito no capítulo 6, no qual introduzimos desordem diagonal nos sítios atômicos correspondentes às barreiras e ao poço. Essa desordem é introduzida através da redefinição do parâmetro de energia atômica em cada sítio n:

$$E_n' = E_n + \delta R_n E_n, \quad (7.1)$$

onde $E_n = E_A = E_B$, segundo o capítulo 6, R_n é uma função aleatória do índice de sítio n, variando entre $-1 < R_n < 1$, e δ define o desvio máximo de E_n' , relativo a E_n ($\delta=0$ nos contatos semi infinitos).

Para o Hamiltoniano modelo (vide capítulo 6)

$$H = \sum_n (E_n' |n\rangle\langle n| + V_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + V_{n+1,n} |n+1\rangle\langle n|), \quad (7.2)$$

o problema de calcular a probabilidade de transmissão através da

estrutura barreira-poço-barreira pode ser resolvido numericamente usando a técnica de matriz de transferência, formalmente similar à utilizada para a aproximação de massa efetiva e descrita por Price²⁰. As probabilidades de transmissão são calculadas para estruturas relativamente pequenas (< 30 sítios atômicos), de maneira que tomamos uma média sobre várias centenas de cálculos para diferentes conjuntos de valores para energias atômicas aleatórias. A média das energias atômicas ao longo da cadeia é $\langle E_n \rangle = E_n$. Portanto, as descontinuidades das bandas são, em média, as mesmas que no caso ordenado correspondente.

No capítulo 6 nos referimos à densidade de estados como quantidade física relevante ao problema de tunelamento ressonante. Aqui estaremos interessados diretamente na avaliação da densidade local de estados no poço e a correlação entre essa densidade de estados com as probabilidades de transmissão na presença de desordem. Para isso calculamos funções de Green, das quais obtemos a densidade local de estados em um dado sítio n da cadeia, através da relação

$$g_n(E) = -1/\pi \operatorname{Im} [G_{nn}(E+i\theta^+)], \quad (7.3)$$

onde E é a energia do elétron e θ é uma parte imaginária de energia infinitesimal adicionada. As funções de Green são obtidas pela resolução do seguinte conjunto de equações:

$$\sum_k \langle \langle k | H - E | \sum_m | m \rangle \langle m | G | n \rangle - \langle k | n \rangle \rangle = 0. \quad (7.4)$$

O Hamiltoniano H é dado pela equação (7.2). Esse conjunto de equações é mantido finito pelo uso de matrizes de transferência para os contatos semi infinitos ordenados. A média da densidade de estados é calculada sobre um "ensemble" de várias centenas de estruturas, como mencionado acima.

7.3 Resultados

Discutiremos aqui os resultados para probabilidades de transmissão e densidades de estados para estruturas muito finas. Para todos os casos, as barreiras tem cinco sítios atômicos de espessura. As espessuras dos poços são de 9,7 e 5 sítios atômicos. Se pensarmos em uma emulação da aproximação de massa efetiva, fazendo a correspondência de cada sítio com uma monocamada de GaAs crescida na direção [100], esses números corresponderiam a espessuras entre 25 e 15 Å, aproximadamente. Para silício ou germânio, crescidos epitaxialmente, essas espessuras seriam ainda menores. Devemos, no entanto, lembrar que não estamos interessados em fazer comparações diretas com dados experimentais e sim em estabelecer um ponto de partida para a análise dos efeitos de desordem sobre tunelamento ressonante. Um dos objetos de estudo que se adequa a esse procedimento é o das propriedades de poços quânticos de semicondutores amorfos. Nesse caso, estruturas tão estreitas são escolhas razoáveis, dado que

efeitos de quantização espaciais são observados apenas em poços quânticos amorfos bastante estreitos⁷⁶.

Para os resultados mostrados a seguir, os parâmetros de ligações fortes são: $E_n = 1.0$ eV, $V_{n,n+1} = 0.5$ eV (poço) e $V_{n,n+1} = 0.4$ eV (barreira). Os sítios de interface são tratados como no capítulo 6. O zero da nossa escala de energia coincide com o fundo da banda do material do poço no caso ordenado.

A figura 7.1 mostra probabilidades de transmissão, como função da energia dos elétrons incidentes, da estrutura com nove sítios atômicos no poço, para diferentes magnitudes de desordem. Em 7.1(a) temos o caso ordenado, com ressonâncias correspondentes aos dois estados quase ligados do poço, $E_0 = 0.034$ eV e $E_1 = 0.124$ eV. Os painéis seguintes correspondem aos casos desordenados com os seguintes parâmetros: (b), $\delta = 0.05$; (c), $\delta = 0.1$; e (d), $\delta = 0.15$. Observamos o crescente alargamento dos picos e a decrescente razão pico-vale com o aumento da desordem. Por outro lado, não há desvios nas posições dos picos em função dessa desordem. Para $\delta = 0.15$, podemos ver apenas os "ombros" relacionados com ressonâncias muito alargadas. Aumentando mais ainda a desordem, mesmo esses "ombros" tendem a desaparecer, fazendo com que a curva de probabilidade de transmissão se assemelhe com a correspondente para uma cadeia desordenada, onde todos os átomos são do tipo poço (figura 7.1(e)). Devemos notar, no entanto, a diferença de ordens de magnitude nos valores para as probabilidades de transmissão entre os casos 1(e) e 1(d), devido

ao fato de que no último caso as barreiras continuam presentes. A curva tracejada na figura 7.1(c) mostra a probabilidade de transmissão para a mesma estrutura, mas com desordem de $\delta=0.1$ apenas nas barreiras. Isso mostra que os efeitos de alargamento são devidos principalmente à desordem no poço, como é esperado do fato de que o estado de tunelamento ressonante tem uma amplitude maior no interior do poço²³, fazendo com que a influência da desordem na barreira seja menos importante.

Para poder analisar melhor as mudanças do estado eletrônico a uma energia de ressonância com a desordem, calculamos a parte diagonal da matriz densidade, definida por

$$\langle \rho(E) \rangle_n = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \Psi_{n\alpha}^*(E) \Psi_{n\alpha}(E), \quad (7.5)$$

onde n é um índice de sítio. A contribuição de cada conjunto de parâmetros de desordem é pesado por P_{α} e a soma é sobre todo "ensemble" desses conjuntos. No presente caso todos os P_{α} são iguais a $1/N$, onde N é o número de conjuntos de parâmetros de desordem levados em conta no "ensemble". Para os resultados apresentados $N=500$.

A figura 7.2 apresenta $\langle \rho(E) \rangle$ através da estrutura barreira(5 átomos)-poço(9 átomos)-barreira(5 átomos) para $E_0=0.034$ eV. As curvas de cima para baixo correspondem a desordem crescente, com $\delta=0.0, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.15$ de (a) a (f), respectivamente. As amplitudes estão normalizadas a 1.0 na

interface contato-barreira à esquerda, já que estamos assumindo elétrons incidentes da esquerda nos nossos cálculos. Em (a), o caso ordenado, notamos claramente o estado quase ligado com a característica acumulação da função de onda no poço²³. Essa condição é drasticamente perturbada mesmo com um grau bastante pequeno de desordem, mas em (b) e (c) ainda se pode ver uma amplitude maior da função de onda no poço, do que no contato da esquerda. Ainda assim, a amplitude à direita da estrutura é ordens de magnitude menor que no contato da esquerda, o que é característico de estados fora da ressonância. Essas características são ainda mais marcantes nos casos de maior desordem, (d), (e) e (f), onde o máximo no interior do poço, mais baixo que no contato da esquerda, se desloca para a direita, desviando do caráter tipo s desse estado (o primeiro estado ligado de um poço).

É bastante conhecido que a desordem induz uma localização crescente das funções de onda eletrônicas, quando a energia se aproxima dos extremos de uma banda. Para discutir uma possível relação entre o alargamento dos picos de transmissão ressonante e o grau de localização, calculamos o comprimento de localização em cadeias desordenadas constituídas apenas de átomos tipo poço com o mesmo comprimento (10 átomos) da estrutura barreira-poço-barreira estudada até agora. A expressão usada é⁷⁷

$$L(E) = -2L / \ln T(E), \quad (7.6)$$

onde L é o comprimento da cadeia e $T(E)$ a probabilidade de transmissão. A figura 7.3 mostra o comprimento de localização médio (em número de sítios da cadeia) como função do parâmetro de desordem δ , para as energias $E_0=0.034$ eV e $E_1=0.124$ eV. Nota-se que o comprimento de localização diminui com a desordem. Quando aquele é da mesma ordem de grandeza do comprimento da cadeia, os picos de ressonância começam a desaparecer.

O alargamento dos picos de ressonância com a desordem é acompanhado por um alargamento das estruturas da densidade de estados no poço. A figura 7.4 mostra a densidade local de estados no sítio central da estrutura simétrica com 5 átomos na barreira e 9 átomos no poço estudada até agora. Em 4(a) vemos o pico na densidade de estados devido ao estado tipo s em $E_0=0.034$ eV, que tem amplitude máxima no centro. A seta indica a posição em energia do segundo estado ligado, $E_1=0.124$ eV, que não dá nenhuma contribuição à densidade local de estados no sítio central. As figuras 7.4(b)-(d) mostram a densidade de estados no mesmo sítio central para desordem crescente, com $\delta=0.05$, 0.1 , e 0.15 , respectivamente. O crescente alargamento na densidade de estados é visto claramente. O aparecimento de um pequeno pico na posição do segundo estado quase ligado indica uma mistura de estados induzida pela desordem. A partir de um certo grau de desordem (figs. 7.4(c) e 7.4(d)), existem estados abaixo do mínimo da banda de condução do poço, resultando em um "desvio para o vermelho" no lugar de um "desvio para o azul" do gap efetivo. Num

sistema como o da fig. 7.4(d) não se espera a observação de efeitos de quantização espacial, devido à forte localização dos estados.

Ao compararmos as figs. 7.1 e 7.4, podemos ver que o desaparecimento de estruturas de ressonância bem definidas na probabilidade de transmissão com desordem crescente se correlaciona bem com a suavização das estruturas nas densidades de estado sob as mesmas condições.

A competição entre o "desvio para o vermelho" e o "desvio para o azul", mencionado acima, em sistemas de poços quânticos desordenados é ilustrado na figura 7.5. Aqui mostramos a densidade local de estados no centro do poço das estruturas com nove (fig. 7.5(a)), sete (5(b)) e cinco (5(c)) átomos no poço para um mesmo parâmetro de desordem, $\delta=0.1$. As curvas tracejadas indicam os picos correspondentes nas densidades de estados para os casos ordenados dessas estruturas. Vemos a mistura de estados em 5(a) e 5(b) e nenhuma estrutura relacionada é visível no último caso, pois um segundo estado não se liga nesse poço. A linha vertical no zero de energia indica o fundo da banda. Esse resultado ressalta o fato de que, no caso ordenado, efeitos de quantização espacial já são perceptíveis em poços largos com um estado quase ligado bem definido acima do fundo da banda; enquanto que, no caso desordenado devemos ir a poços quânticos mais estreitos para observar claramente tais efeitos.

7.4 Discussões preliminares

O alargamento nas probabilidades de transmissão e densidades locais de estados, induzido por desordem, que discutimos acima, é produzido por espalhamento elástico, que é distinto da situação discutida por Buttiker³¹, que aborda efeitos inelásticos. No nosso caso tratamos de alargamento inhomogêneo, já que para cada membro do "ensemble" estatístico de cadeias desordenadas, as energias de ressonância são distintas. Num cálculo realista as duas contribuições tem que ser levadas em conta. A contribuição relativa no alargamento da amplitude de transmissão, devido a espalhamentos elástico e inelástico, deve ser estudada em maior detalhe, para entender os resultados experimentais e o limiar na largura do poço para observação de efeitos de quantização espacial nesse tipo de sistemas amorfos. Além disso, a situação tridimensional real de sistemas desordenados é modelada através de uma média sobre canais de espalhamento elástico unidimensionais. Um efeito importante, espalhamento lateral, que acoplaria esses canais, é desprezado. Isso torna o nosso modelo pouco adequado para calcular as densidades de corrente de tais sistemas. O presente cálculo, no entanto, indica que, de acordo com dados experimentais, efeitos de quantização espacial devem realmente existir em heteroestruturas de semicondutores amorfos, de uma maneira similar a de seus análogos cristalinos.

Finalmente, uma questão central se coloca quanto a dinâmica do elétron que tunela, e que envolve o conceito de tempo de

tunelamento. A definição desse tempo ainda se constitui numa questão controversa²⁵, embora uma sugestão recente de Luryi⁷⁸ indica que essa quantidade pode ser efetivamente medida em certas condições especiais. O projeto cuidadoso de experimentos poderia tornar possível a separação das contribuições dos efeitos elásticos e inelásticos sobre o fenômeno de tunelamento ressonante. Até agora a única abordagem experimental do tema foi feita por Tsuchiya e colaboradores⁷⁹.

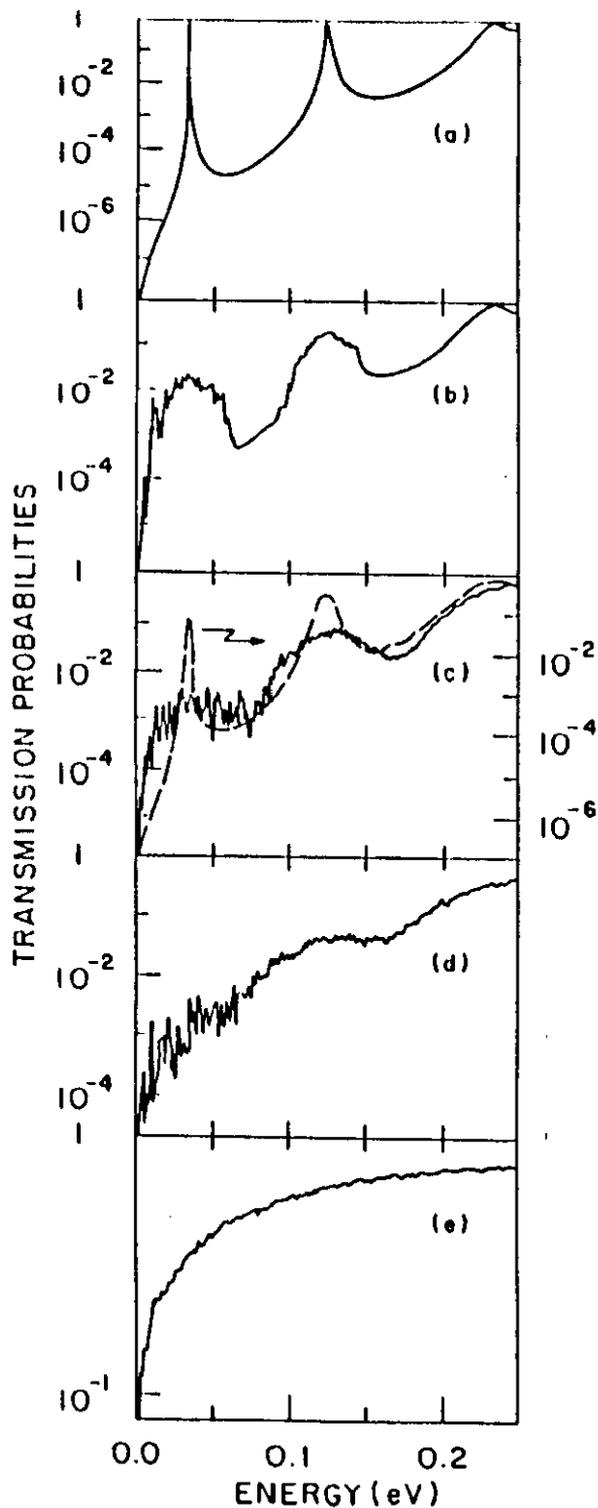


Fig. 7.1. Probabilidades de transmissão versus energia de elétron incidente para uma estrutura barreira (cinco átomos) - poço (nove átomos) - barreira (cinco átomos) com desordem crescente (de cima para baixo). A desordem é definida pelo parâmetro de amplitude da desordem, δ : (a) $\delta=0.0$ (estrutura ordenada), (b) $\delta=0.05$, (c) $\delta=0.1$, (d) $\delta=0.15$. A curva tracejada em (c) corresponde a $\delta=0.1$ nas barreiras e $\delta=0.0$ no poço. Os parâmetros de cálculo são: $E_{\text{poço}} = E_{\text{barreira}} = 1.0\text{eV}$, $V_{\text{p,p}} = 0.5\text{eV}$ e $V_{\text{b,b}} = 0.4\text{eV}$. Em (e) temos a probabilidade de transmissão vs energia do elétron incidente para uma cadeia sem barreiras e $\delta=0.15$.

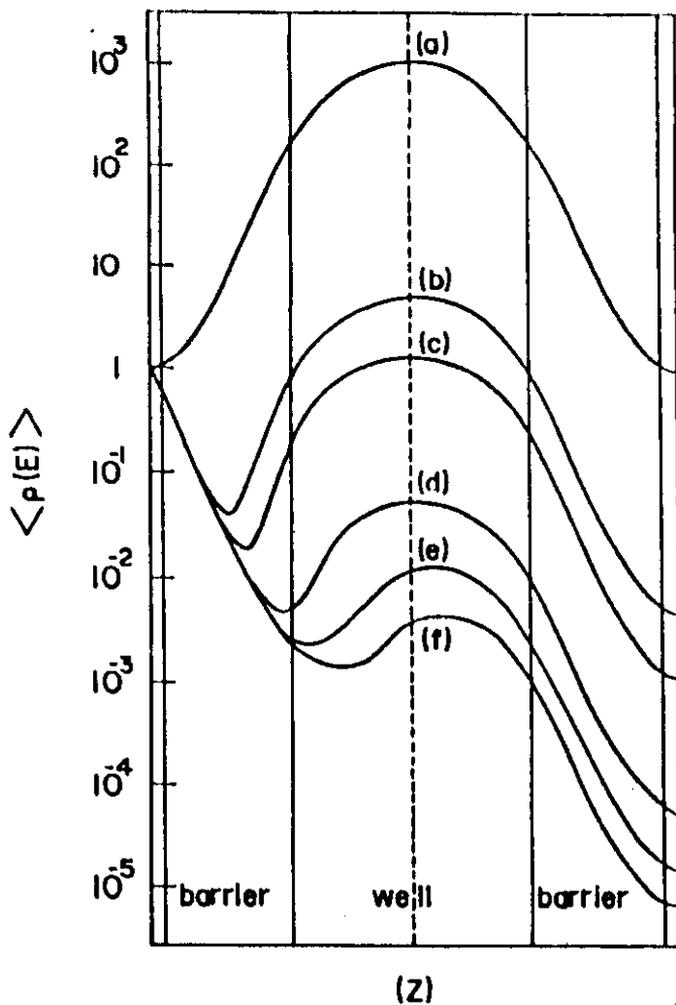


Fig. 7.2. Parte diagonal da matriz densidade para $E_0=0.034\text{eV}$ para a mesma estrutura e parâmetros de cálculo das figuras 7.1(a)-7.1(d), com desordem crescente: (a) $\delta=0.0$, (b) $\delta=0.005$, (c) $\delta=0.01$, (d) $\delta=0.05$, (e) $\delta=0.1$, e (f) $\delta=0.15$.

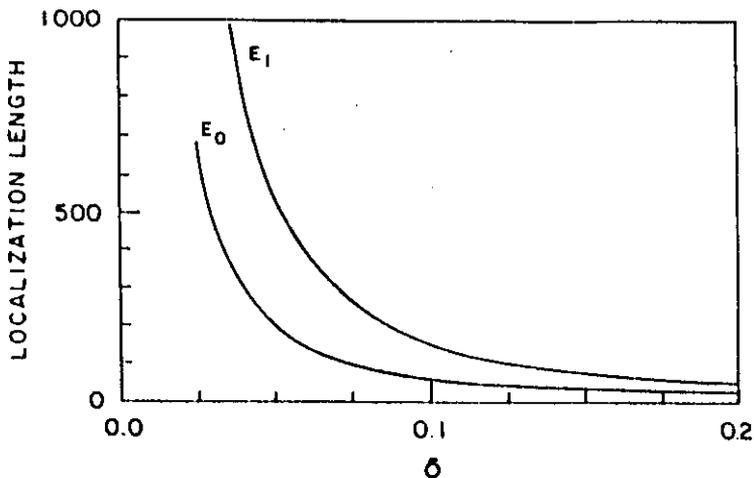


Fig. 7.3. Comprimento de localização como função do parâmetro de desordem para uma cadeia de 19 átomos tipo poço para $E_0=0.034\text{eV}$ e $E_1=0.124\text{eV}$, que correspondem às energias de ressonância da figura 7.1(a).

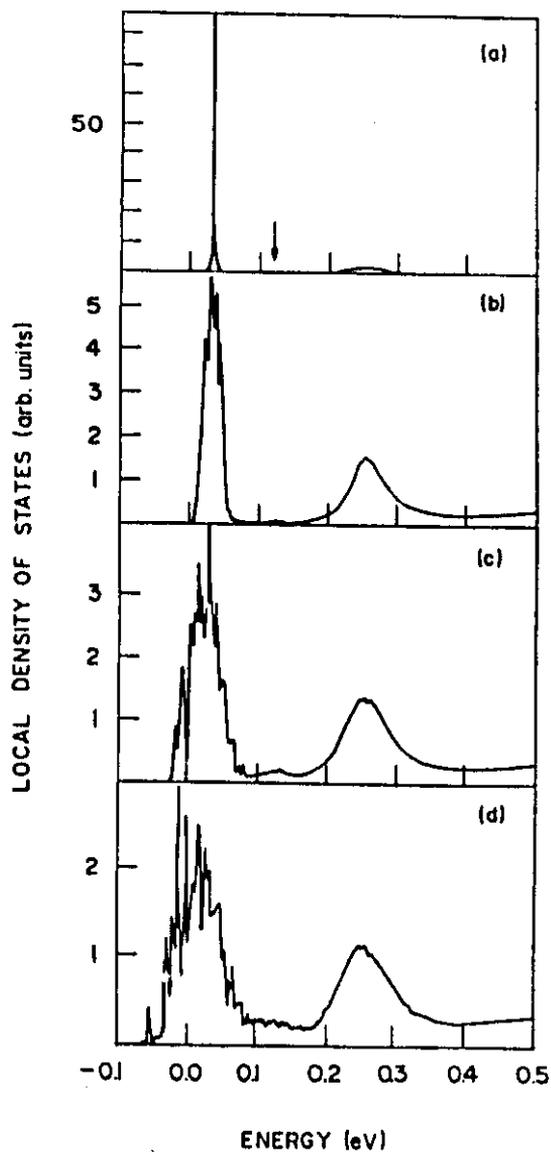


Fig. 7.4. Densidade local de estados no átomo central do poço da estrutura da figura 7.2. Em (a) temos o caso ordenado, $\delta=0.0$, com uma seta indicando a posição em energia do segundo estado quase ligado, $E_1=0.124\text{eV}$. As figuras seguintes são para desordem crescente: (b) $\delta=0.05$, (c) $\delta=0.1$ e (d) $\delta=0.15$.

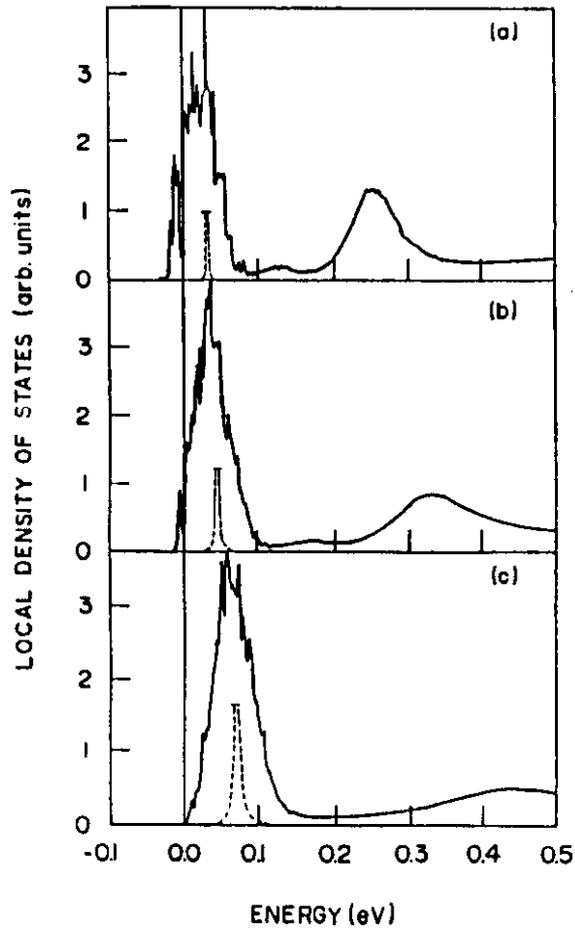


Fig. 7.5. Densidade local de estados no átomo central de uma estrutura barreira-poço-barreira simétrica. As larguras das barreiras são mantidas constantes (cinco átomos), mas a largura do poço é variada: (a) nove átomos, (b) sete átomos e (c) cinco átomos. As curvas cheias são para casos desordenados com $\delta=0.1$ e as curvas tracejadas mostram a contribuição da primeira ressonância nas respectivas estruturas ordenadas. A linha vertical a $E=0.0\text{eV}$ visualiza a posição em energia do fundo do poço.

8. Conclusões

No início desse trabalho discutimos a validade de modelos baseados na aproximação da massa efetiva para avaliar numericamente as características de corrente-voltagem de dispositivos de tunelamento ressonante baseados em semicondutores. Vimos que os resultados numéricos, obtidos com tais modelos, concordam qualitativamente com as medidas experimentais correspondentes, mesmo quando efeitos de carga espacial e desvios na geometria ideal da heteroestrutura (rugosidade nas interfaces, por exemplo) não são levados em conta. De fato, apesar da simplicidade, esses modelos chegam a ter um acordo quantitativo razoável, no que se refere à posição e intensidade do pico da corrente de tunelamento, com as medidas de dispositivos projetados com o intuito de minimizar os efeitos de cargas espaciais e das flutuações nos parâmetros das barreiras e defeitos nas interfaces³⁰. Uma descrição quantitativa deve levar em conta esses efeitos, o que pode ser feito dentro da aproximação da massa efetiva^{66,80}. No caso de tunelamento através de poços quânticos múltiplos, efeitos de acúmulo de carga nos poços²⁷ alteram qualitativamente os resultados, com a formação de domínios de campo intenso⁸¹.

A nossa preocupação inicial foi a de estabelecer a utilidade de um modelo simples para prever comportamentos de características de corrente-voltagem de diodos de tunelamento com concepções alternativas, como é o caso do diodo de barreira única

com dois degraus⁸² (capítulo 3).

Os efeitos de campo magnético sobre o tunelamento eletrônico também podem ser estudados com modelos baseados na aproximação da massa efetiva. A presença de campos magnéticos introduz alterações na estrutura eletrônica do sistema, que dependem da orientação desses campos em relação às interfaces da heteroestrutura. Assim, com o campo magnético paralelo às interfaces, a estrutura eletrônica modifica-se de maneira a criar canais de tunelamento na vizinhança das interfaces de uma heteroestrutura de barreira única. O comportamento desses canais é, portanto, modulado pela intensidade do campo magnético. Verificamos que é possível em princípio obter resistência diferencial negativa nas características corrente-voltagem de dispositivos de barreira única na presença de campos magnéticos paralelos à barreira⁸³. De um modo geral, os dispositivos de multicamadas finas de semicondutores proporcionam sistemas únicos, onde a competição entre a quantização espacial devido à estrutura eletrônica e aquela devido a efeitos de localização através de campos magnéticos, podem ser estudados (capítulo 4). Um outro caso interessante é o de um diodo de poço quântico com um campo magnético aplicado perpendicularmente aos planos da heteroestrutura, o que leva a uma diminuição da dimensionalidade efetiva do gás bidimensional no poço, alterando a integral de densidade de corrente. A interpretação dos resultados experimentais nesse caso permite estudar o efeito de fenômenos de

espalhamento inelástico sobre o tunelamento ressonante⁸⁴ (capítulo 5). Os efeitos de campo magnético nesses sistemas de semicondutores crescidos artificialmente tem um interesse acadêmico em si, além de proporcionarem uma ferramenta adicional e importante para a análise dos modelos utilizados no projeto de dispositivos para aplicação tecnológica.

Com o tópico mencionado acima, vasculhamos um pouco as limitações de um modelo simples para descrever quantitativamente o transporte por tunelamento através de diodos de poços quânticos. Vimos que essa descrição pode ser melhorada dentro da própria aproximação da massa efetiva, onde efeitos de carga espacial e centros de espalhamento elástico ou inelástico podem ser introduzidos. Uma limitação severa de tal visão, no entanto, aparece quando efeitos da estrutura eletrônica dos semicondutores constituintes das heteroestruturas tem que ser incluídos. Tais efeitos podem ser estudados mediante modelos de ligações fortes (capítulo 6). Nosso modelo⁸⁵ permitiu levantar questões sobre a competição entre tunelamento através de barreiras com gap direto ou indireto e a natureza da função de onda em cada caso. Essas questões foram tratadas posteriormente de maneira mais sofisticada por outros autores⁷⁰.

O modelo de cadeias lineares tratadas na aproximação de ligações fortes permite também estudar efeitos de espalhamento elástico sobre o tunelamento ressonante. Isso é feito através da introdução de desordem diagonal na cadeia que simula o poço

quântico de barreira dupla. Esse é um modelo bastante útil para estudar o comportamento qualitativo de tunelamento ressonante na presença de centros de espalhamento elástico, bem como dar um primeiro passo em direção a interpretar resultados de tunelamento ressonante em heteroestruturas de semicondutores amorfos⁸⁶, para o qual é mais apropriado do que um modelo baseado na aproximação da massa efetiva.

9. Apêndice

9.1 Resolução numérica da equação da massa efetiva

Introduzimos no capítulo 2 o procedimento geral para obter as probabilidades de transmissão através de um sistema de barreiras de potencial. Esse procedimento leva em conta as descontinuidades na massa efetiva que ocorrem a cada interface entre camadas de materiais diferentes. Vimos que esse procedimento se baseia na resolução de uma equação de Schroedinger unidimensional, eq.2.1, que tem a seguinte forma geral²⁰

$$[d/dz(p(z))d/dz + \alpha q(z)]\psi = 0, \quad (9.1a)$$

onde

$$p(z) = 1/m^*(z) \text{ e} \quad (9.1b)$$

$$\alpha q(z) = (2/\hbar^2)[E - V(z)]. \quad (9.1c)$$

Essa equação diferencial pode ser facilmente transformada numa equação de diferenças finitas, onde a variável contínua z se converte no índice n de uma cadeia linear de pontos discretos:

$$[(p_{n+1} + 2p_n + p_{n-1}) - 2a^2 \alpha q_n] \psi_n = (p_{n+1} + p_n) \psi_{n+1} + (p_n + p_{n-1}) \psi_{n-1}, \quad (9.2)$$

onde a é o 'parâmetro de rede' da cadeia de pontos discretos. Longe de uma interface as variáveis p_n e q_n são constantes, de

modo que a eq. 0.2 pode também ser escrita como

$$[p_{n+1} + p_{n-1} - a^2 \alpha q_n] \psi_n = p_{n+1} \psi_{n+1} + p_{n-1} \psi_{n-1} . \quad (0.3)$$

Para seguir adiante devemos ainda definir a equação de diferenças finitas na região de uma interface qualquer, onde as variáveis p_n e q_n apresentam descontinuidades. Para uma interface localizada no ponto n , definimos:

$$p_{n+1} + p_n = 2p_{n+1} , \quad (0.4a)$$

$$p_n + p_{n-1} = 2p_{n-1} . \quad (0.4b)$$

$$q_n = 1/2(q_{n-1} + q_{n+1}) . \quad (0.4c)$$

Com isso a eq. 0.2 perto de uma interface também pode ser colocada na forma da eq. 0.3, de modo que um sistema de equações para as funções de onda em cada ponto n da estrutura pode ser estabelecido. Esse sistema de equações é resolvido numericamente de modo a relacionar a função de onda , ψ_0 , em um ponto à esquerda do sistema de barreiras de potencial em questão, com a função de onda, ψ_L , em um ponto à direita desse sistema. Assim o problema se reduz a um sistema de duas equações:

$$A\psi_0 = B\psi_L + p_{-1}\psi_{-1} . \quad (0.5a)$$

$$C\psi_L = p_{L+1}\psi_{L+1} + D\psi_0 , \quad (0.5b)$$

As probabilidades de transmissão, eq. 2.6, são finalmente obtidas com a definição de matrizes de transferência³², T_E e T_D , para as regiões semi infinitas à esquerda e à direita da estrutura de barreiras, respectivamente:

$$\psi_0 = 1 + \rho \quad (9.6a)$$

$$\psi_{-1} = T_E + T_E^* \rho \quad (9.6b)$$

$$\psi_L = \tau \quad (9.6c)$$

$$\psi_{L+1} = T_D \tau \quad (9.6d)$$

Uma vez conhecidos ρ e τ , a função de onda em todos os pontos do sistema de barreiras de potencial pode ser calculada, aplicando o método da matriz de transferência ao sistema de equações 9.3.

O cálculo de probabilidades de transmissão na aproximação de ligações fortes (capítulo 6) é formalmente igual ao procedimento descrito aqui a partir do estabelecimento da eq. 9.3. A relação de recorrência que essa equação estabelece entre um ponto de uma linha discretizada com seus primeiros vizinhos é a mesma estabelecida pelas equações obtidas a partir do hamiltoniano da eq. 6.3 para sítios primeiros vizinhos de uma cadeia linear tratada na aproximação de ligações fortes.

9.2 O método das funções de Green

Probabilidades de transmissão também podem ser definidas

por meio de funções de Green na aproximação de massa efetiva. Para isso consideramos um potencial arbitrário que se estende por uma região de comprimento finito L , ou seja, $V(z) = 0$ para $x \leq 0$ e $x \geq L$. As soluções da equação de Schroedinger para as regiões onde $V(z) = 0$ são combinações lineares de ondas planas:

$$\psi(k) = \exp(ikz) + \rho(k)\exp(-ikz) \text{ , para } x \leq 0, \quad (9.7a)$$

$$\psi(k) = \tau(k)\exp(ikz) \text{ , para } x \geq L. \quad (9.7b)$$

Aqui estamos definindo que os eletrons incidem à esquerda da barreira de potencial, com energia $E = k^2$ com unidades $\hbar = 2m = 1$. Por simplicidade não incluímos descontinuidade de massa nas interfaces. Usando o teorema de Green entre a equação para ψ e a equação para o propagador $G^+(z, z', k)$ correspondente ao problema, que obedece a condições de contorno expansivas, chegamos a uma relação entre a amplitude de transmissão e o propagador⁸⁷:

$$\tau(k) = 2ikG^+(0, L; k)e^{-ikL} \text{ .} \quad (9.8)$$

Essa relação também pode ser obtida para o problema tratado na aproximação de ligações fortes (capítulo 6), utilizando o teorema de Green, com o mesmo tipo de condições de contorno, entre as equações para a função de onda e para o propagador de Green:

$$(E_n - E)\psi_n + V_{n,n+1}\psi_{n+1} + V_{n,n-1}\psi_{n-1} = 0 \quad (9.9)$$

$$(E_n - E)G_{n,p} + V_{n,n+1}G_{n+1,p} + V_{n,n-1}G_{n-1,p} = -\delta_{n,p} \quad (9.10)$$

Com um pouco de álgebra e relacionando amplitudes de funções de onda e propagadores entre sítios vizinhos com matrizes de transferência (vide eqs. 9.6), chegamos a uma expressão para a amplitude de transmissão:

$$\tau(E) = -i2V_{ij}\text{sen}(ka)G_{O,L}(E) \quad (9.11)$$

onde V_{ij} é o parâmetro de acoplamento entre dois sítios primeiros vizinhos localizados nas cadeias semi infinitas que se acoplam a estrutura de barreiras de potencial (capítulo 6). O termo trigonométrico vem das matrizes de transferência, obtidas também da eq. 9.9 para uma cadeia uniforme com parâmetro de rede a e uma relação de dispersão dada pela eq. 6.1.

10. Referências

1. Tunneling Phenomena in Solids, editado por E. Burstein e S. Lundqvist, Plenum Press, 1969
2. R. H. Fowler e L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. (London) A119, 173 (1928)
3. L. Esaki, Phys. Rev. 109, 603 (1958)
4. I. Giaver, p. 19 (ref. 1)
5. S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, John Wiley and Sons, New York, 1969
6. C. R. Crowell e S. M. Sze, Physics of Thin Films, ed. G. Hass e R. E. Thun, Academic Press, New York, 1967 Vol. 4 p. 325
7. C. B. Duke, Tunneling in Solids, Academic Press, New York, 1969
8. L. Esaki e R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970)
9. K. Ploog em Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices, ed. E. E. Mendez e K. von Klitzing, Plenum Press, p. 43 (1987)
10. L. L. Chang, L. Esaki e R. Tsu, Appl. Phys. Lett. 24, 593 (1974)
11. A. G. Milnes, Solid State Electronics 29, 99 (1986)
12. Ver, por exemplo, Proc. 2nd. Int. Conf. Metalorganic Vapour Phase Epitaxy, J. Crys. Growth 77 (1986)
13. S. Adachi, J. Appl. Phys. 58, R1 (1985)
14. W. I. Wang, Solid State Electronics 29, 133 (1986)
15. B. Zimmermann, E. Marclay, M. Ilegems e P. Guéret, J. Appl. Phys. 64, 3581 (1988)

16. C. B. Duke, p. 31 (ref.1)
17. J. Thomsen, G. T. Einevoll e P. C. Hemmer, Phys. Rev. B39, 12783 (1989)
18. B. J. BenDaniel e C. B. Duke, Phys. Rev. 152, 683 (1966)
19. R. Tsu e L. Esaki, Appl. Phys. Lett. 22, 562 (1973)
20. Peter. J. Price, Superlattices and Microstructures, vol. 2, 213 (1986)
21. K. M. S. V. Bandara e D. D. Coon, J. Appl. Phys. 66, 603 (1989)
Essa referência é interessante por exemplificar a controversia que se criou em torno da eq. 2.5, onde muitos interpretam $T(E_z)$ como sendo o modulo quadrado da função de onda somente, em vez da eq. 2.6.
22. E. O. Kane, p.1 (ref.1)
23. B. Ricco e M. Ya. Azbel, Phys. Rev. B29, 1970 (1984)
24. Peter J. Price, Superlattices and Microstructures Vol. 2, 593 (1986)
25. S. Collins, D. Lowe e J. R. Barker, J. Phys. C. 20, 6233 (1987).
Esse artigo é uma discussão interessante sobre tempos característicos de tunelamento, uma questão ainda em aberto.
26. A. R. Bonnefoi, D. H. Chow, e T. G. McGill, J. Appl. Phys. 62, 3826 (1987)
27. F. W. Sheard e G. A. Toombs, Appl. Phys. Lett. 52, 1228 (1988)
28. P. Guéret, C. Rossel, E. Marclay e H. Meier, J. Appl. Phys. 66, 278 (1989)
29. E. Wolack et al., Appl. Phys. Lett. 53, 201 (1988)

30. P. Guéret, C. Rossel, W. Schlup e H. P. Meier, J. Appl. Phys. 66, 4312 (1989)
31. M. Buttiker, IBM J. Res. Develop. 32, 63 (1988)
32. E. E. Mendez, em Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices, ed. E. E. Mendez e K. von Klitzing, Plenum Press, pag. 159 (1987)
33. F. Capasso, S. Sen e A. Y. Cho, Appl. Phys. Lett. 51, 526 (1987)
34. T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannenwald, C. D. Parker, e D. D. Peck, IEEE Trans. Electron. Devices ED-30, 1577 (1983)
35. D. D. Coon e H. C. Liu, Appl. Phys. Lett. 49, 94 (1986)
36. T. C. L. G. Sollner, E. R. Brown, e W. D. Goodhue, *Microwave and Millimeter-Wave Resonant Tunneling Diodes*, Picosecond Electronics and Optoelectronics Technical Digest (Optical Society of America, Washington, D. C., 1987), Vol. 87-1, p. 143
37. H. C. Liu e D. D. Coon, Appl. Phys. Lett. 50, 1669 (1987)
38. Ver capítulo 2a
39. W. R. Frensley, Phys. Rev. B36, 1570 (1987)
40. S. Luryi, Appl. Phys. Lett. 47, 496 (1987)
41. A. D. Stone e P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. 54, 1196 (1985)
42. W. Cai, T. F. Zheng, P. Hu, B. Yundain, e M. Lax, Phys. Rev. Lett. 63, 418 (1989)
43. V. J. Goldman, D. C. Tsui, e J. E. Cunningham, Phys. Rev. B35, 9387 (1987)
44. M. L. Leadbeater, E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, A. Celeste, J. C. Portal, G. Hill, e M. A. Pate, Phys. Rev. B39,

3438 (1989)

45. C. E. T. Gonçalves da Silva e E. E. Mendez, *Phys. Rev. B* **38**, 3994 (1988)
46. A. H. Kahn e H. P. R. Frederikse, em *Solid State Physics*, ed. F. Seitz e D. Turnbull (Academic Press, 1959), vol. 9, p. 257
47. H. C. Liu e G. C. Aers, *Solid State Commun.* **67**, 1131 (1988)
48. Rita Gupta e B. K. Ridley, *Superlattices and Microstructures*, vol. 5, 417 (1989)
49. D. Thomas, F. Chevoir, P. Bois, E. Barbier, Y. Guldner, e J. P. Vieren, *Superlattices and Microstructures*, vol. 5, 219 (1989)
50. E. Boeckenhoff, K. v. Klitzing e, K. Ploog, *Phys. Rev. B* **38**, 10120 (1988)
51. P. Guéret, A. Baratoff, e E. Marclay, *Europhys. Lett.* **3**, 367 (1987)
52. B. R. Snell, K. S. Chan, F. W. Sheard, L. Eaves, G. A. Toombs, D. K. Maude, J. C. Portal, S. J. Bass, P. Claxton, G. Hill, e M. A. Pate, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2806 (1987)
53. R. A. Davis, D. J. Newson, T. G. Powell, M. J. Kelly, e H. W. Myron, *Semicond. Sci. Technol.* **2**, 61 (1987)
54. L. Brey, G. Platero, e C. Tejedor, *Phys. Rev. B* **38**, 9649 (1988)
55. S. Ben Amor, K. P. Martin, J. J. L. Rascol, R. J. Higgins, A. Torabi, H. M. Harris, e C. J. Summers, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 2540 (1988)
56. G. Platero, L. Brey, e C. Tejedor, *Phys. Rev. B* (1989)

57. T.W.Hickmott, Solid State Commun. 63, 371 (1987)
58. M.Helm, P.England, E.Colas, R.Bhat, e S.J.Allen Jr.,
Superlattices and Microstructures 5, 535 (1989)
59. D.J.Thouless, M.Kohmoto, M.P.Nightingale, e M.den Nijs,
Phys.Rev.Lett. 49, 405 (1982)
60. J.C.Maan, em Festkoerperprobleme (Springer-Verlag, Berlin
1984), vol.27, 137 (1987)
61. I.Hase, H.Kawai, K.Kaneko, e N.Watanabe, J.Appl.Phys. 59,
3792 (1986)
62. T.W.Hickmott, comunicação particular
63. P.England, J.R.Hayes, J.P.Harbison, D.M.Hwang, e
L.T.Florez, Appl.Phys.Lett. 53, 391 (1988)
64. M.Helm, F.M.Peeters, P.England, J.R.Hayes, e E.Colas,
Phys.Rev. B39, 3427 (1989)
65. E.E.Mendez, W.I.Wang, E.Calleja, e C.E.T.Gonçalves da
Silva, Appl.Phys.Lett. 50, 1263 (1987)
66. M.Cahay, M.McIennan, S.Datta, e M.S.Lundstrom,
Appl.Phys.Lett. 50, 612 (1987)
67. C.Mailhot, D.L.Smith, e T.C.McGill, J.Vac.Sci.Technol.B1,
637 (1983)
68. N.R.Couch, D.G.Parker, M.J.Kelly, e T.M.Kerr, Proceedings
of ICPS 18(Estocolmo 1986), editado por O.Engstrom, (World
Science 1987), p.247
69. L.Brey e C.Tejedor, Solid State Commun. 61, 537 (1987)
70. D.Y.K.Ko e J.C.Inkson, Phys.Rev. B38, 9945 e 12416 (1988)

71. C.E.T.Gonçalves da Silva e B.Koiller, Solid State Commun. 40, 2151 (1981)
72. C.E.T.Gonçalves da Silva e B.Laks, J.Phys.C 10, 851 (1977)
73. S.Miyazaki, Y.Ihara, e M.Hirose, Phys.Rev.Lett. 59, 125 (1987)
74. I.Pereira, M.P.Carreno, R.A.Onmori, C.A.Sasaki, A.M. Andrade, e F.Alvarez, J.Non-Cryst.Solids 97-98, 871 (1987)
75. Gu Benyuan, C.Coluzza, M.Mangiantini, e A.Frova, J.Appl.Phys. (1989)
76. L.Ley, em *Proceedings of the Third Brazilian School of Semiconductor Physics*, ed. C.E.T.Gonçalves da Silva, L.E.Oliveira, e J.R.Leite (World Scientific, Singapore, 1987), p.84
77. F.Guinea e J.A.Verges, Phys.Rev. B35, 979 (1987)
78. S.Luryi, Solid State Commun. 65, 787 (1988)
79. M.Tsuchiya, T.Matsusue, e H.Sakaki, Phys.Rev.Lett. 59, 2356 (1987)
80. James Leo e A.H.MacDonald, Phys.Rev.Lett. 64, 817 (1990)
81. K.K.Choi et al. Phys.Rev.B35, 4172 (1987)
82. P.A.Schulz e C.E.T.Gonçalves da Silva, Appl.Phys.Lett. 52, 960 (1988)
83. P.A.Schulz e C.Tejedor, Phys.Rev.B39, 11187 (1989)
84. P.A.Schulz e C.Tejedor, Phys.Rev.B41, 3053 (1990)
85. P.A.Schulz e C.E.T.Gonçalves da Silva, Phys.Rev.B35, 8126 (1987)

86. P. A. Schulz • C. E. T. Gonçalves da Silva, Phys. Rev. B38, 10718
(1988)
87. Gastón Garcia-Calderón, Solid State Commun. 62, 441 (1987)