

Estudos Óticos e Magneto-óticos em Múltiplos Poços Quânticos com Dopagem Modulada

Flávio Orlando Plentz Filho

orientador

Prof. Dr. Eliermes Arraes Meneses

*Este exemplar
corresponde à redação
final da tese defendida
pelo aluno a aprovação
pela Comissão julgadora
Campinas 05 de agosto de 1993*
E. Arraes Meneses

Tese apresentada no Instituto de Física
"Gleb Wataghin", Universidade Estadual de
Campinas, para a obtenção do Título de
Doutor em Física.

Campinas - São Paulo

1993

Agradecimentos

Quero expressar meus sinceros agradecimentos

ao Prof. Eliermes Arraes Meneses, pela orientação atenta e amiga e pelo empenho e estímulo durante a realização deste trabalho;

ao Prof. Francisco Meseguer, pelo interesse no trabalho, pela inestimável ajuda, pela amizade e receptividade.

ao Prof. J.S. Dehesa e ao Prof. Narcis Mestres pela preciosa ajuda e discussões frutíferas. Ao Narcis também pela ajuda no laboratório.

ao César e ao Brás pela amizade e ajuda nas longas horas de laboratório e pela troca de ideias;

ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Tecnológico (CNPq) e à CAPES pelo suporte financeiro.

a todos que, de forma direta ou indireta ajudaram no desenvolvimento deste trabalho.

a Claudia, pelo amor e pela paciência infinita;

Abstract

In this work we investigated the optical and magneto-optical properties of modulation doped quantum wells. This study was performed by the use of photoluminescence and photoluminescence excitation spectroscopy as experimental techniques. We developed a self-consistent calculation in order to obtain the eigenfunctions and eigenvalues for electrons and holes in these structures. We have demonstrated that, in one of our samples, the density of the two dimensional electron gas is reduced by a photoexcitation done with an energy below the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ band gap. We have also shown the existence of a deep center, with an energy 460 meV below the alloy conduction band minima, which was associated to a substitutional Si atom in a Al site. We described this state within the framework of the configurational coordinate model for deep centers. The mechanism that causes the diminution of the electron gas density is related to the existence of this deep level in the barrier that confine the electrons. In fact, the generation of electron-hole pairs in the barrier, necessary to cause the diminution of the carrier density in the GaAs well, is done through this deep center.

Resumo

Neste trabalho desenvolvemos um estudo, por meio das técnicas de fotoluminescência e excitação de luminescência, das propriedades óticas e magneto óticas de poços quânticos com dopagem modulada. Desenvolvemos um cálculo auto-consistente para a obtenção das autofunções e autovalores de energia em poços com dopagem modulada. Estes estudos nos permitiram caracterizar de forma clara que a densidade do gás bi-dimensional de elétrons, presente em uma das nossas estruturas, sofre uma diminuição quando a amostra é excitada por fótons de energia inferior ao “gap” da barreira de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ que confina os portadores. Mostramos também a existência de um centro profundo na liga, a uma energia de 460 meV, medida a partir do fundo da banda de condução, o qual foi associado a um estado gerado por um átomo de Si substitucional no lugar do Al. Este estado foi descrito em termos do modelo de coordenada configuracional para centros profundos. A diminuição na densidade do gás de elétrons por nós observada está relacionada à existência deste nível profundo na liga. De fato, é este centro que permite a absorção de luz no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, mesmo para fotoexcitação com energia abaixo do “gap”, processo necessário ao mecanismo que gera a diminuição na densidade de portadores no poço de GaAs.

Conteúdo

1	Introdução	8
2	Poços Quânticos com Dopagem Modulada	14
2.1	Arquitetura da Estrutura	14
2.2	Descrição das Amostras	18
2.3	Efeito da Excitação em <i>MDQW</i>	20
3	Parte Teórica	25
3.1	Cálculo Auto-Consistente do Potencial e dos Níveis de Energia em <i>MDQW</i> 's	25
3.2	Sistema Bi-Dimensional Sujeito a um Campo Magnético Perpendicular ao Plano de Crescimento.	38
3.2.1	Níveis de Energia	38
3.2.2	Degenerescência dos Níveis	39
4	Descrição dos Métodos Experimentais	45
4.1	Fotoluminescência	45
4.2	Espectroscopia de Foto-Excitação de Luminescência	48
4.3	Arranjo Experimental	48
5	Apresentação e Discussão dos Resultados Experimentais	54
5.1	Medidas com dupla excitação. Diminuição da densidade do 2DEG.	54
5.2	Magneto Fotoluminescência sob Baixa Excitação	66
5.3	Magneto Luminescência sob Alta Excitação com LD700	73

5.4	Origem da Banda D	80
6	Conclusões	92

Lista de Figuras

1.1	Heteroestrutura semicondutora formada pela superposição de camadas alternadas de semicondutores distintos. Os semicondutores 1 e 2 tem mesma estrutura cristalina e “gaps” de energia diferentes.	9
2.1	Na figura <u>a</u> representamos a estrutura típica de um poço quântico simples. A figura <u>b</u> apresenta um poço com dopagem uniforme e a figura <u>c</u> um poço com dopagem modulada. O aumento da mobilidade, no caso do <i>MDQW</i> , vem do fato de que portadores e impurezas ionizadas ficam espacialmente separados.	15
2.2	Potencial final de um poço quântico com dopagem modulada simétrica. Na situação de equilíbrio o nível de Fermi (ϵ_f) é uniforme ao longo da estrutura. Note a curvatura do potencial final gerada pelo potencial eletrostático.	16
2.3	Ocupação das sub-bandas bi-dimensionais em um <i>MDQW</i> . Mostramos duas bandas ocupadas. O Nível de Fermi é definido a partir do fundo da primeira sub-banda. Consideramos bandas parabólicas no plano XY, com curvatura dada pela massa efetiva de “Bulk”.	17
2.4	Arquitetura das amostras 1 e 2. Mostramos apenas a região correspondente ao MDQW. As amostras diferem basicamente na concentração do 2DEG.	19
2.5	Posição do pico de <i>PL</i> (transição fundamental) em função da potência de excitação, para a amostra 1, com iluminação por lasers de Ar ⁺ e Kr ⁺	21

2.6	Mecanismo pelo qual a densidade do 2DEG é diminuída pela geração de pares e-h na liga que forma a barreira.	22
2.7	Espectros de emissão da amostra 1 sob excitação por lasers de Ar^+ (2,41 eV) e Kr^+ (1,91 eV). Note a profunda mudança na intensidade relativa de QW e D.	23
3.1	Representação de alguns parâmetros usados no cálculo. Veja também as figuras 2.2 e 2.4 para outros detalhes.	26
3.2	Estrutura com base na qual o cálculo é feito, e a distribuição de cargas no n-MDQW, com apenas uma sub-banda ocupada.	29
3.3	Funções de onda correspondentes ao primeiro estado de um poço quadrado. E_0 é a autoenergia correta. Note o comportamento “ruim” da função de onda para valores diferentes de E_0	32
3.4	Função G_{if} , definida no texto, em função da energia E_n . Note os mínimos associados aos autoestados.	33
3.5	Potencial autoconsistente obtido para uma densidade de $7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	35
3.6	Densidades de probabilidade para E_0 , E_1 e HH0. Vemos claramente o efeito da assimetria do potencial.	36
3.7	Banda 2D se desdobrando em níveis de Landau.	43
3.8	Dependência do nível de Fermi com o campo magnético.	44
4.1	Representação gráfica dos aspectos fundamentais relacionados ao processo de PL.	46
4.2	Representação de uma experiência de PLE mostrando a excitação ressonante com os níveis do poço.	49
4.3	Desenho do sistema de medida de PL e PLE com aplicação de campo magnético.	50
4.4	Arranjo experimental das medidas de PL e PLE com dupla excitação.	51
5.1	Representação gráfica do método usado na determinação da densidade do 2DEG.	56

5.2	Espectros de <i>PL</i> para a amostra <u>1</u> obtidos com dupla excitação tomadas sem bombeio (0 mW de Ar^+) e com bombeio.	58
5.3	Espectros de <i>PLE</i> com dupla excitação para as mesmas condições das <i>PL</i> 's mostradas na figura 5.2.	59
5.4	Espectros de <i>PL</i> para a amostra 2 obtidos com dupla excitação. . . .	64
5.5	Espectros de <i>PLE</i> para a amostra 2 obtidos sem (espectro <u>a</u> .) e com bombeio (espectro <u>b</u>).	65
5.6	Espectros representativos da magneto fotoluminescência para a amostra <u>1</u> . Note o desdobramento de E0-HH0 nas componentes de Landau. . . .	68
5.7	Dependência dos picos de <i>MPL</i> da amostra <u>1</u> com o campo magnético. São mostradas também as extrapolações lineares das energias a campo zero. . . .	70
5.8	Espectros de <i>MPL</i> para excitação abaixo do "gap" da barreira e densidade de potência de excitação de 30 W/cm ² . Dados referentes à amostra <u>1</u>	75
5.9	Dependência com o campo magnético dos picos de <i>MPL</i> tomados sob alta excitação por LD700.	76
5.10	Transição L0, para duas potências de excitação por fótons com energia inferior ao "gap" da barreira.	78
5.11	Espectros de <i>PLE</i> sob alta e baixa excitação para a amostra <u>1</u>	79
5.12	Espectros de <i>MPL</i> tomados com excitação por laser de Ar^+ para a amostra 1.	82
5.13	Resumo dos resultados de <i>MPL</i> para excitação com laser de Ar^+ para a amostra <u>1</u>	83
5.14	Espectros de <i>PL</i> tomados com diferentes energias de excitação para a amostra 1. Note o crescimento da banda <u>D</u> quando passamos a excitar com energia acima do "gap" da liga.	85
5.15	Espectro de <i>PLE</i> para a banda <u>D</u> tomado em 1.55 eV.	86
5.16	Representação gráfica do modelo de coordenada configuracional. . . .	88

5.17	Figura extraída da referência 63 mostrando a energia dos estados gerados no “gap” de uma liga de $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ em função do potencial de defeito e da alteração no comprimento da ligação, para várias impurezas substitucionais.	89
------	---	----

Lista de Tabelas

3.1	Autoenergias dos dois primeiros estados ligados para elétrons (E_0 , E_1), buracos pesados (HH_0 , HH_1) e buracos leves (LH_0 , LH_1).A densidade nula corresponde ao poço quadrado. As energias estão dadas em meV.	34
3.2	Integrais de superposição entre as funções de onda de elétrons e buracos pesados para diversas densidades. A densidade nula corresponde ao poço quadrado.	37
3.3	Integrais de superposição envolvendo elétrons e buracos leves para diversas densidades.A densidade nula corresponde ao poço quadrado.	37
5.1	Resumos dos resultados das experiências de dupla excitação da amostra <u>1</u>	57
5.2	Resumo dos resultados obtidos com dupla excitação para a amostra <u>2</u> . O valor “experimental” da renormalização do “gap” também é mostrado.	63

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho tem como objetivo fornecer uma contribuição ao estudo das propriedades óticas e magneto- óticas do sistema eletrônico bi-dimensional que se forma nas chamadas heteroestruturas semicondutoras (*HETS*) [1, 2, 3]. Por heteroestruturas semicondutoras entendemos um material, artificialmente produzido, o qual se forma pela superposição de camadas alternadas de semicondutores distintos. A figura 1.1 apresenta um desenho esquemático da arquitetura deste tipo de material.

Estas estruturas foram originalmente propostas por L. Esaki e R. Tsu [4, 5] com o objetivo de se promover o estudo do tunelamento ressonante, ou transmissão ressonante, no transporte eletrônico perpendicular às camadas semicondutoras [5]. Na proposição original foram escolhidos como base da *HETS* o Arseneto de Gálio (GaAs) e o Arseneto de Gálio com Alumínio ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), que formam o sistema mais extensivamente estudado. A realização prática destes materiais evoluiu concomitantemente com o desenvolvimento e aprimoramento da Epitaxia por Feixe Molecular (*MBE*) [6]. Esta técnica permite, em um ambiente de alto vácuo, um controle rigoroso da espessura e da composição das camadas crescidas, condições necessárias à fabricação das *HETS*. Neste trabalho nos limitaremos à discussão das estruturas III-V de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Uma das primeiras observações experimentais, por técnica ótica, do sucesso na fabricação de poços quânticos de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de boa qualidade, foi feita em 1974. Neste trabalho [7], uma série de transições entre estados confinados

Hetero-estrutura semicondutora - representação geral

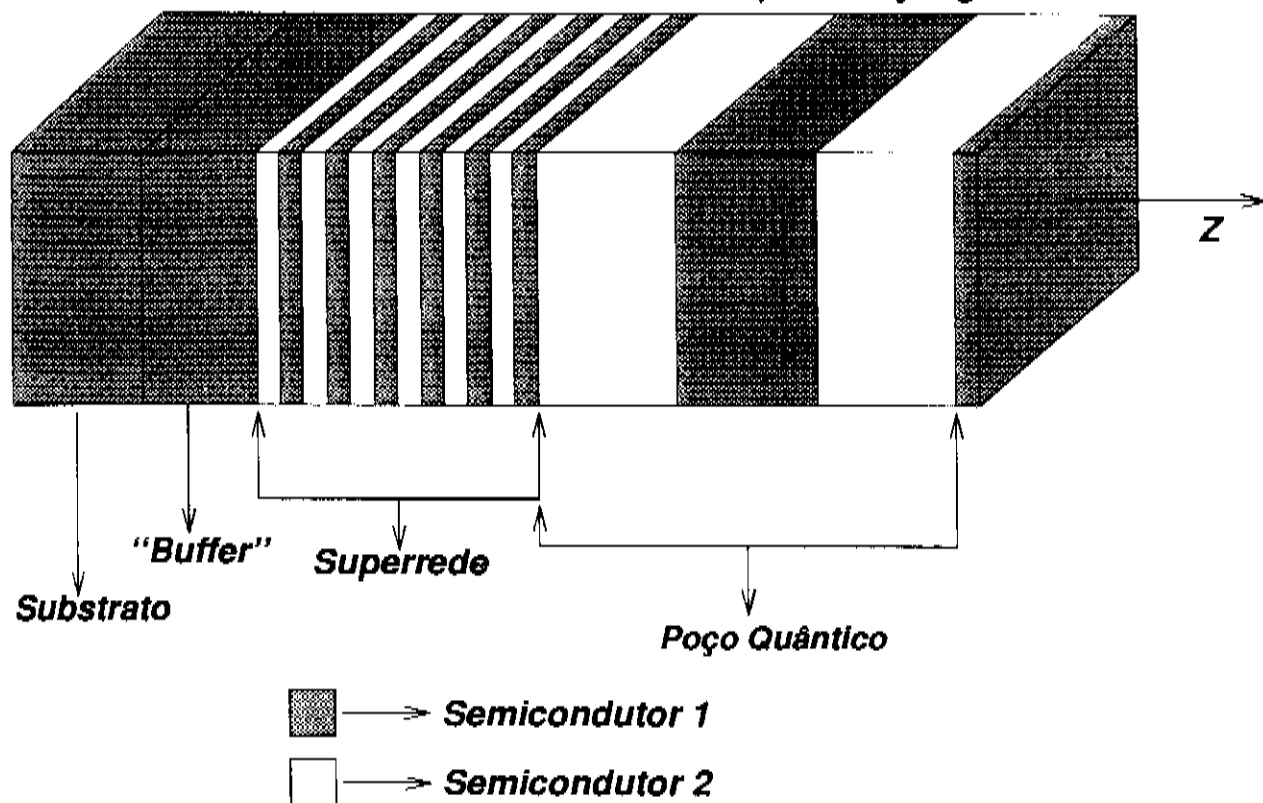


Figura 1.1: Heteroestrutura semicondutora formada pela superposição de camadas alternadas de semicondutores distintos. Os semicondutores 1 e 2 tem mesma estrutura cristalina e "gaps" de energia diferentes.

no poço de GaAs foram observadas por meio de espectroscopia de absorção. Um bom artigo de revisão, relatando a evolução do campo de *HETS* em seus primeiros tempos, é dado na referência [8]. Surgiram também diversos estudos [9, 10, 11, 12, 13] do confinamento eletrônico em *HETS* por fotoluminescência (*PL*), e fotoexcitação de luminescência (*PLE*), técnicas que se tornaram padrão no estudo e caracterização destes materiais. Um exemplo da utilidade destas técnicas é na determinação da porção da descontinuidade entre os “gaps” do GaAs e do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ que se aloja na banda de condução [14]. A *PL* tem também sua aplicação na avaliação da qualidade das estruturas. O estado da arte no crescimento de *HETS* nos fornece poços quânticos apresentando larguras de linha de fotoluminescência entre 0,5 meV e 0,2 meV [13], dependendo da largura do poço. Este fato indica, principalmente, uma alta qualidade das interfaces entre as camadas que formam as *HETS*. Estes materiais, crescidos em diversas arquiteturas, formam a base de uma série de dispositivos eletrônicos, óticos e eletro-óticos [15, 16, 17].

Até 1978 a aplicação de *HETS* a dispositivos envolvendo transporte eletrônico ficou muito limitada, devido à baixa mobilidade dos portadores obtida até então. A partir da introdução do conceito de dopagem modulada [18, 19] este quadro se alterou inteiramente. A Dopagem Modulada (*MD*), conceito que discutiremos com mais detalhe futuramente, permite a obtenção de um gás de elétrons bi-dimensional (*2DEG*), de alta mobilidade, confinado na(s) camada(s) de GaAs de uma *HETS*. Estes são os materiais base para a construção dos transistores de alta mobilidade eletrônica (*HEMT*), empregados como chaves rápidas e dispositivos para operar em altas frequências [16, 20]. Estes dispositivos, embora consideravelmente mais caros, superam em performance o estado da arte em tecnologia de silício.

Estruturas com *MD* abriram também possibilidades inteiramente novas no que diz respeito ao estudo das propriedades eletrônicas de sistemas bi dimensionais contendo altas densidades de portadores. Até então, estes estudos [21], no que diz respeito a semicondutores, se limitavam basicamente à investigação do *2DEG* em superfícies e em *MOSFET*'s de silício. O novo caminho aberto pela *MD* se deve ao fato de que o *2DEG* fica espacialmente separado das impurezas ionizadas.

O espalhamento Coulombiano por impurezas ionizadas é um fator perturbador para o estudo dos efeitos gerados exclusivamente pela redução da dimensionalidade do sistema, e pela alta densidade de portadores.

Podemos tomar como exemplo o caso do Efeito Hall Quântico Integral (*QHE*) [22, 23]. Embora tenha sido originalmente descoberto em *MOSFET's* de silício [22], as *HETS*, principalmente os *HEMT's* de $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, se tornaram padrão para o estudo do *QHE*. A descoberta do Efeito Hall Quântico Fracionário (*FQHE*) [24, 25] só foi possível devido ao uso de dito sistema.

De particular interesse para nós são os Poços Quânticos com Dopagem Modulada (*MDQW*). Nas estruturas tipo *HEMT*, mais usadas em estudos de propriedades de transporte, os elétrons do *2DEG* e os buracos gerados por meio de excitação ótica, ficam espacialmente separados devido ao campo eletrostático interno, inerente a este tipo de *HETS*. Isto dificulta o estudo por meio de *PL* e *PLE*, pois a superposição entre as funções de onda dos portadores (elétrons e buracos) se torna pequena, dificultando a recombinação entre eles. Nos *MDQW* a situação é bem diferente. Os portadores que recombinaem estão na mesma região espacial, confinados pelas barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, e formando um sistema altamente propício à realização de estudos sobre as propriedades óticas do *2DEG* [26, 27, 28, 29, 30, 31]. Um dos efeitos mais interessantes diz respeito à renormalização do “gap”, gerada pelos efeitos de muitos corpos, presentes devido a alta densidade do *2DEG* nestas estruturas [26, 29, 30, 31]. Existe também um bom número de trabalhos teóricos tratando de tais efeitos nos *MDQW* [32, 33, 34, 35, 36].

A aplicação de um campo magnético perpendicular ao plano do *2DEG* gera uma profunda modificação na estrutura eletrônica destes sistemas. As sub-bandas bi-dimensionais se desdobram em níveis de energia, os chamados níveis de Landau (*LL's*). Deste modo, o espectro de energia se torna completamente discretizado, e as transições óticas passam a ocorrer entre as famílias de *LL's* geradas a partir de cada sub-banda. A magneto-ótica tem sido uma poderosa ferramenta para a investigação dos *MDQW* [37, 38, 39, 40, 41].

Outra questão, que tem gerado grande interesse no campo de *HETS* baseadas no sistema $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, diz respeito à incorporação de Si na liga.

Para o desenvolvimento das estruturas com dopagem modulada de tipo n (n -MD), é necessário que se obtenha um alto nível de incorporação de Si como átomo doador. Desta forma, se torna fundamental ter esta incorporação bem caracterizada, no que diz respeito aos estados gerados no “gap” do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ pela introdução do dopante. A dopagem por Si na liga, contrariamente ao que ocorre na GaAs, introduz estados profundos no “gap” denominados centros DX [42]. A PL tem sido uma ferramenta importante no estudo destes centros, e outros estados profundos também associados à dopagem por Si [43, 44, 45, 46, 47].

A motivação para a pesquisa que deu origem a esta tese de doutoramento veio de algumas dúvidas pendentes de um trabalho anterior, que forneceu subsídios para a minha tese de mestrado [30, 48]. Nesta ocasião, estudávamos os efeitos que a excitação ótica tinha sobre as propriedades de emissão de MDQW's. Para tal, fizemos um trabalho no qual se observava o espectro de PL, para várias potências de excitação, e diferentes energias dos fótons incidentes sobre as amostras. Observamos que, ao excitarmos as amostras com fótons de energia acima do “gap” da barreira, a densidade do 2DEG diminuía, quando a potência de excitação era aumentada. Este fato, aparentemente contraditório, será explicado com mais detalhe no capítulo 2. Estudamos também a origem de uma emissão, localizada acima da transição fundamental do poço de GaAs, e que foi atribuída à recombinação entre elétrons ocupando a segunda sub-banda de condução (E_1), e buracos pesados no nível fundamental de valência (HH_0). Oportunamente discutiremos com mais detalhe tal estudo.

Durante o desenvolvimento deste trabalho serão postos em evidência os seguintes efeitos:

a - Ficará demonstrado que a densidade do 2DEG sofre uma diminuição, mesmo quando excitamos a amostra com fótons tendo energia bem inferior ao “gap” da barreira.

b - Ficará caracterizado que o uso da MPL para detectar pequenas alterações no “gap” fundamental é altamente eficiente.

c - Uma nova linha de emissão, relacionada à liga de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, será posta em evidência. Esta linha será associada a um novo centro profundo no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

d - O mecanismo de diminuição da densidade do $2DEG$ será discutido e associado a este centro profundo.

Capítulo 2

Poços Quânticos com Dopagem Modulada

2.1 Arquitetura da Estrutura

Os Poços Quânticos com Dopagem Modulada (*MDQW*) são estruturas de poços quânticos convencionais, nas quais é introduzida uma dopagem de tipo N (*Si*) ou de tipo P (*Be*), de modo seletivo no semiconductor de maior “gap” de energia. No sistema GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ esta dopagem é feita no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Na figura 2.1-a mostramos o que seria a estrutura típica de um Poço Quântico simples. A super-rede, crescimento sequencial de camadas finas de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, que precede o poço quântico propriamente dito, tem o objetivo de fazer com que as interfaces do poço sejam o mais suaves possível. Na figura 2.1-b representamos a mesma estrutura com uma dopagem uniforme. Neste caso, os portadores gerados pela dopagem e as impurezas ionizadas ocupam a mesma região espacial, fazendo com que, uma alta densidade de portadores, se dê às custas de uma baixa mobilidade. Esta característica está associada ao espalhamento Coulombiano pelas impurezas ionizadas. Na figura 2.1-c mostramos a dopagem modulada (*MD*). Na *MD* as impurezas são inseridas apenas em uma determinada região da barreira, de modo que a porção dopada esteja separada do poço, que contém o *2DEG*, por uma camada intrínseca [18, 19]. Portadores gerados pelas impurezas difundir-se-ão para

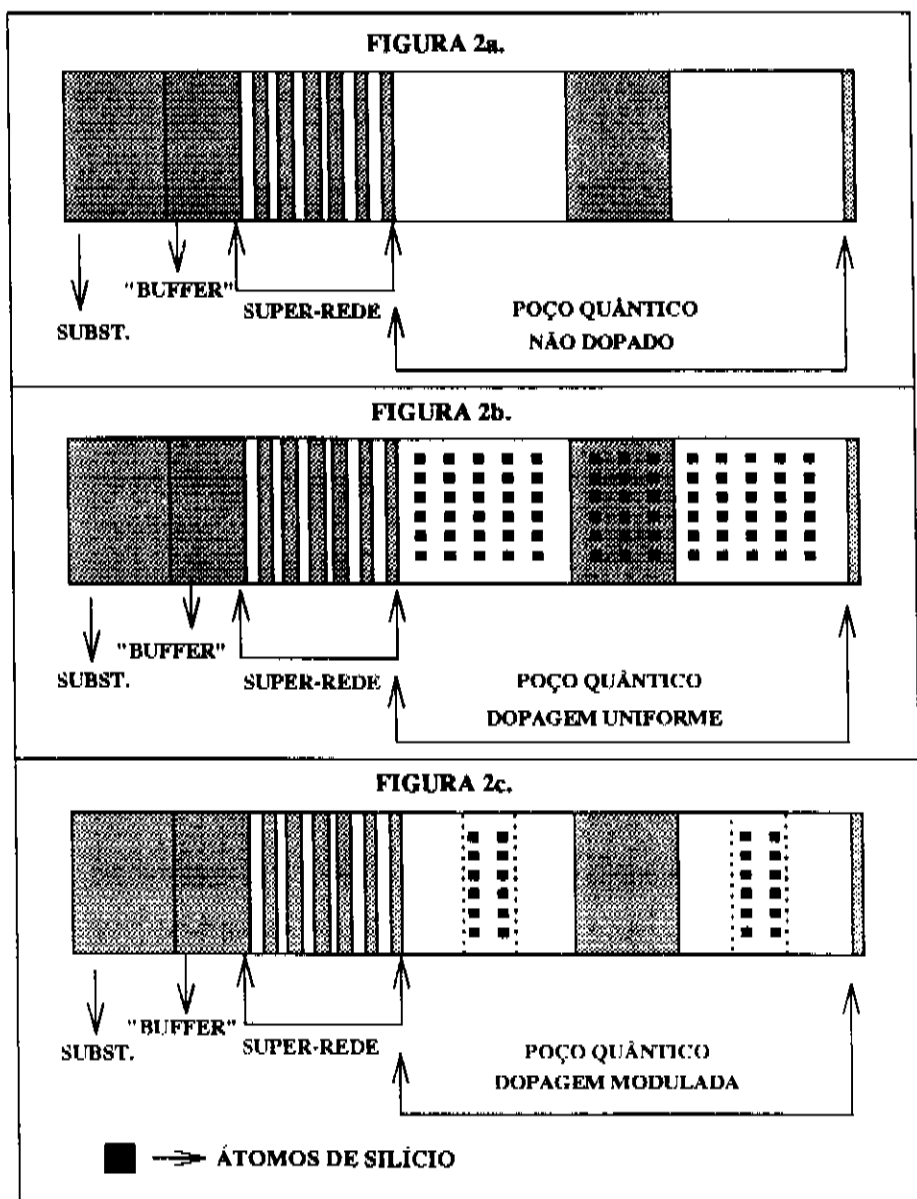


Figura 2.1: Na figura a representamos a estrutura típica de um poço quântico simples. A figura b apresenta um poço com dopagem uniforme e a figura c um poço com dopagem modulada. O aumento da mobilidade, no caso do *MDQW*, vem do fato de que portadores e impurezas ionizadas ficam espacialmente separados.

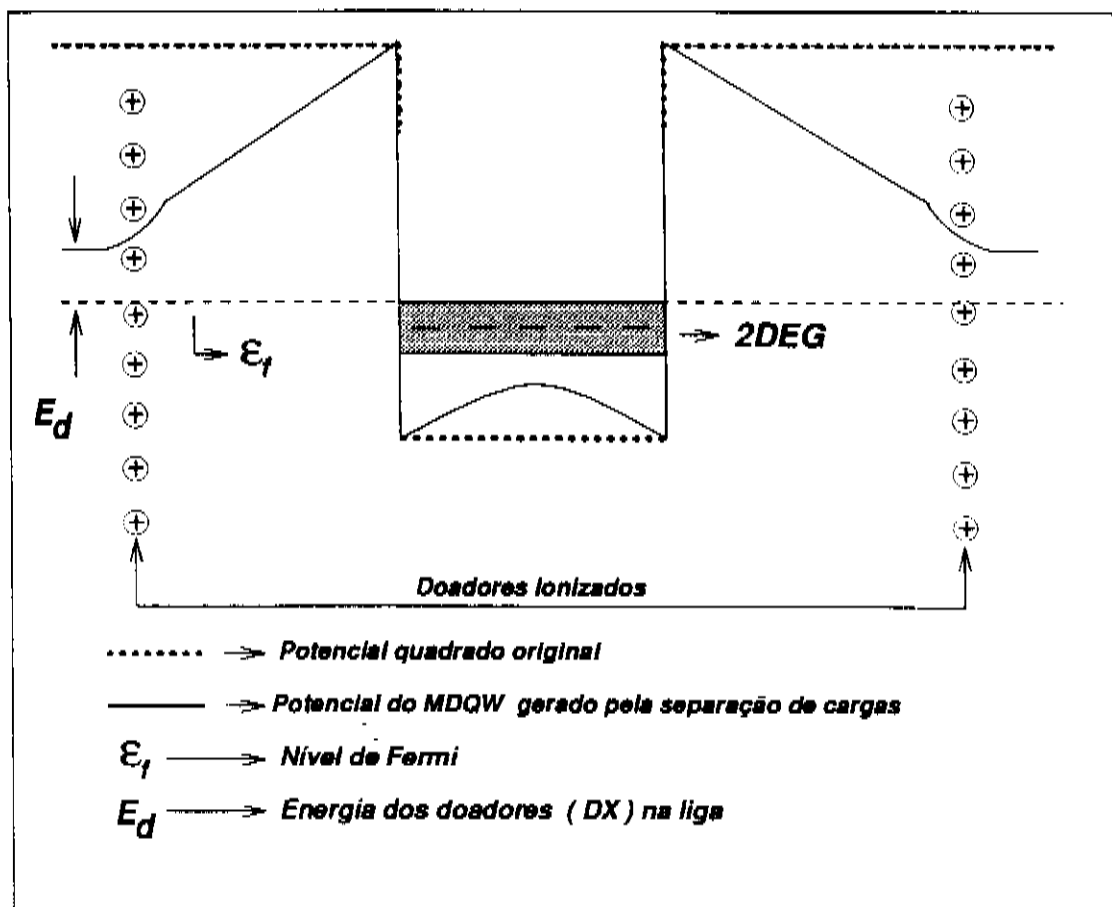


Figura 2.2: Potencial final de um poço quântico com dopagem modulada simétrica. Na situação de equilíbrio o nível de Fermi (ϵ_f) é uniforme ao longo da estrutura. Note a curvatura do potencial final gerada pelo potencial eletrostático.

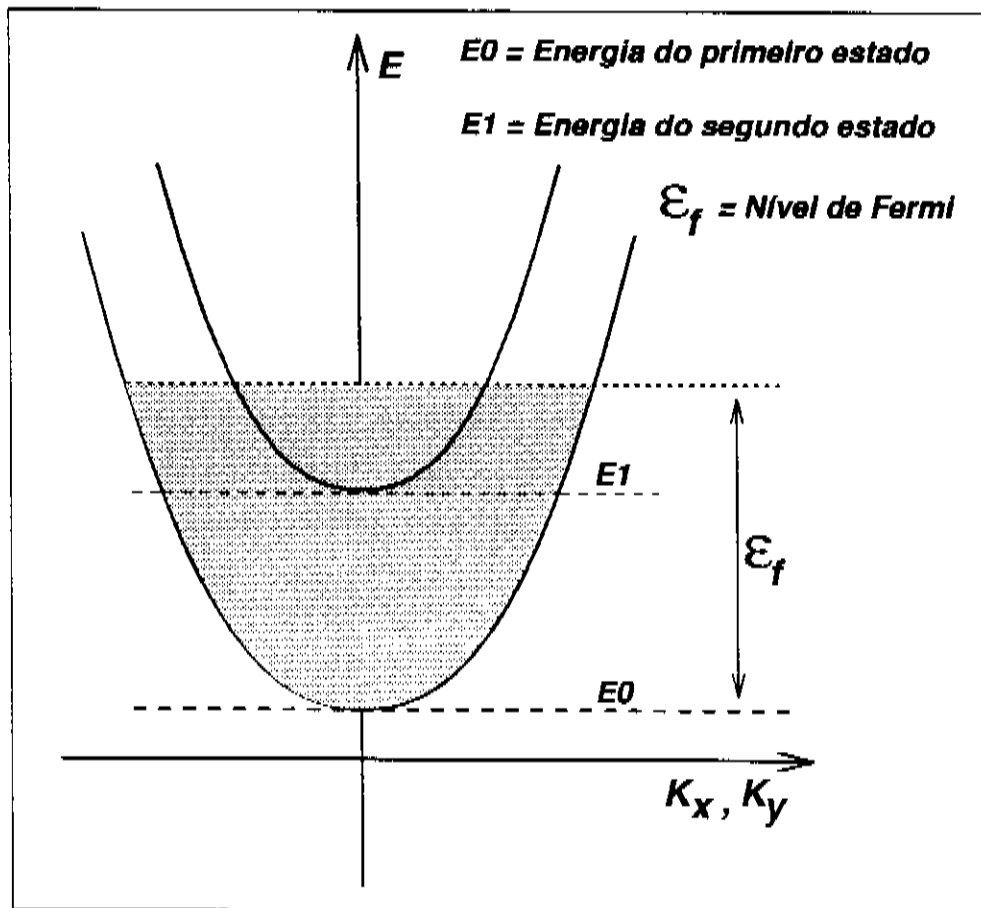


Figura 2.3: Ocupação das sub-bandas bi-dimensionais em um *MDQW*. Mostramos duas bandas ocupadas. O Nível de Fermi é definido a partir do fundo da primeira sub-banda. Consideramos bandas parabólicas no plano *XY*, com curvatura dada pela massa efetiva de "Bulk".

o poço até que o nível de Fermi tenha se igualado em toda a estrutura. A figura 2.2 mostra o potencial que é obtido na situação final de equilíbrio. Note que, a separação de cargas gerada pela transferência de elétrons para o poço, modifica o potencial quadrado original. Este fato é de extrema relevância e se manifesta, como veremos, nas propriedades óticas da *HETS*.

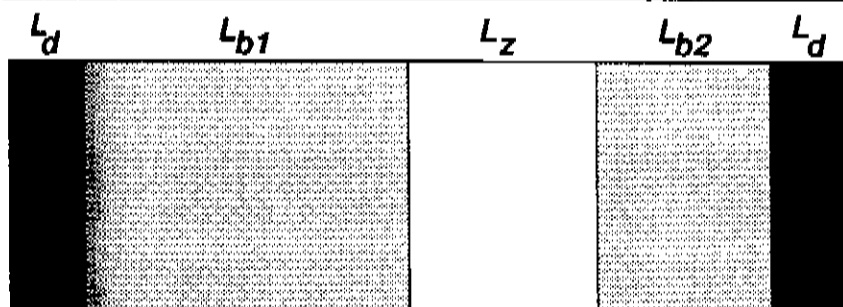
Como consequência da separação espacial entre impurezas ionizadas e portadores o espalhamento Coulombiano é muito reduzido. Isto se manifesta principalmente na mobilidade a baixa temperatura [19]. Somos capazes portanto de, introduzindo uma alta dopagem na barreira, gerar um *2DEG* de alta densidade, preservando a mobilidade dos portadores.

Na figura 2.3 temos a representação da ocupação das sub-bandas em um *MDQW*. Dependendo da dopagem, e da largura do poço, uma ou mais sub-bandas estarão ocupadas. Na figura 2.3 mostramos duas sub-bandas preenchidas e definimos grandezas importantes que serão usadas mais adiante. Vamos prosseguir com a apresentação das amostras usadas neste trabalho.

2.2 Descrição das Amostras

As amostras usadas neste trabalho são múltiplos poços quânticos com dopagem modulada assimétrica crescidos por *MBE*. As amostras 1 e 2 diferem apenas na dopagem da barreira. Apresentam portanto a mesma largura de poço, e densidades diferentes do *2DEG*. Na figura 2.4 estão representadas estas amostras. Não mostramos a parte correspondente ao “buffer” e à superrede. Nos limitamos a apresentar a estrutura correspondente ao poço quântico com dopagem modulada assimétrica.

A amostra 1 é formada pela seguinte sequência: Substrato semi-isolante de GaAs:Cr, camada “buffer” de GaAs intrínseco (GaAsi), superrede $30 \times 30 \text{ \AA}$ de GaAsi/ $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{Asi}$. A região dos *MDQW* é formada por 15 períodos. Cada período por sua vez é formado por um poço de $200 \text{ \AA}$ de GaAsi, seguido de $185 \text{ \AA}$ de $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{Asi}$, $55 \text{ \AA}$ de $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$ dopado com Si ($1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) e finalmente $400 \text{ \AA}$ de $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{Asi}$. A densidade e mobilidade do *2DEG*, medidos a 77 K por Efeito Hall são, respectivamente, $4.8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $5.5 \times 10^4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$.



L_d $\longrightarrow$ Largura da região dopada da barreira.

L_{b1} $\longrightarrow$ Espaçamento de AlGaAs não dopado à esquerda.

L_{b2} $\longrightarrow$ Espaçamento de AlGaAs não dopado à direita.

L_z $\longrightarrow$ Largura do poço.

AMOSTRA 1	AMOSTRA 2		AMOSTRA 1	AMOSTRA 2
$L_d = 55 \text{ \AA}$	$L_d = 25 \text{ \AA}$	Dopagem de Si	$1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
$L_{b1} = 400 \text{ \AA}$	$L_{b1} = 400 \text{ \AA}$	Densidade Nominal	$4.8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	$2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$
$L_{b2} = 185 \text{ \AA}$	$L_{b2} = 215 \text{ \AA}$			
$L_z = 200 \text{ \AA}$	$L_z = 200 \text{ \AA}$			

Figura 2.4: Arquitetura das amostras 1 e 2. Mostramos apenas a região correspondente ao MDQW. As amostras diferem basicamente na concentração do 2DEG.

A amostra 2 tem estrutura semelhante a da amostra anterior, com alteração apenas na região dopada da barreira. A sequência que precede o crescimento dos poços é a mesma. A região dos poços tem a seguinte estrutura: 15 períodos de um poço de 200 Å de GaAs:Si seguido de 215 Å de $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As:Si}$, 25 Å de $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$ dopado com Si ($1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) e 400 Å de $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As:Si}$. A densidade e mobilidade do 2DEG, medidos a 77 K, por Efeito Hall são, respectivamente, $2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $2.7 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

2.3 Efeito da Excitação em *MDQW*

Neste momento é conveniente que façamos uma discussão sobre o trabalho que motivou a pesquisa que deu origem a esta tese de doutorado. Estávamos interessados em determinar qual o efeito das condições de fotoexcitação, energia do fóton incidente e potência de excitação, sobre a *PL* de *n-MDQW*'s. Basicamente dois efeitos foram postos em evidência:

a - Em ambas as amostras se observava um deslocamento do pico de *PL*, relacionado a transição fundamental do poço, em direção ao azul (altas energias), quando a potência de excitação era aumentada.

b - Na amostra 1 ocorria uma profunda modificação no espectro de *PL* quando se fazia a excitação com fótons tendo energia acima do “gap” da barreira.

A figura 2.5 mostra a posição do pico de *PL*, correspondente à transição fundamental do *n-MDQW*, em função da potência de excitação, por fótons com energias de 1,91 eV (laser Kr^+) e 2,41 eV (laser Ar^+). Podemos observar que em ambos os casos o deslocamento para o azul se manifesta. No caso da excitação com o laser de Ar^+ , estamos excitando bem acima da barreira, que tem um gap de 2,01 eV. Com o laser de Kr^+ , embora estejamos abaixo do “gap” do $Al_{0,34}Ga_{0,64}As$, o coeficiente de absorção na barreira é não nulo. Este deslocamento para altas energias foi interpretado em termos de uma diminuição na densidade do *2DEG* [30, 48]. O mecanismo que gera esta diminuição está representado na figura 2.6. Fótons de energia $h\nu_{ex}$ absorvidos nas barreiras da estrutura, geram pares e-h. Devido ao campo eletrostático interno, inerente a este tipo de *HETS*, os buracos são arrastados para o poço de GaAs, enquanto que os elétrons foto gerados se dirigem para a região da barreira que contém as impurezas ionizadas. Deste modo, o potencial particular destas amostras, nos fornece um mecanismo de injeção de buracos nas camadas de GaAs do *n-MDQW*. Estes buracos se recombinam com os elétrons do *2DEG* diminuindo a densidade de portadores no poço [49, 30].

No que diz respeito à alteração do espectro de *PL*, no caso da amostra 2 não existe nenhuma mudança significativa quando alteramos a energia de excitação. O mesmo não se aplica à amostra 1. Na figura 2.7, estão representados os espectros

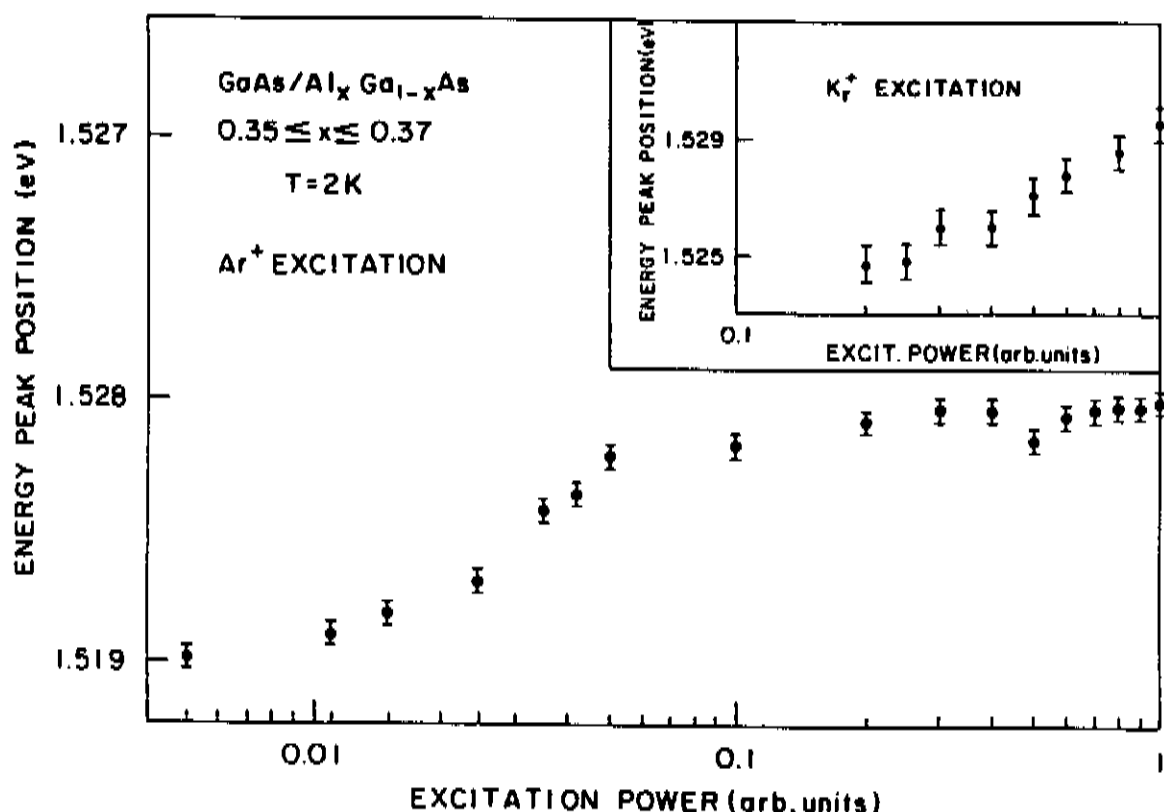


Figura 2.5: Posição do pico de *PL* (transição fundamental) em função da potência de excitação, para a amostra 1, com iluminação por lasers de Ar⁺ e Kr⁺.

de emissão da amostra 1, para as duas excitações (Kr⁺ e Ar⁺). A modificação é profunda. O pico chamado de QW está relacionado à emissão fundamental , a qual se dá pela recombinação entre elétrons que ocupam a primeira sub-banda de condução, e buracos que ocupam a primeira sub-banda de buracos pesados, transição que denominamos *E0 - HH0* . O pico D foi , no trabalho anterior , relacionado a uma transição ocorrendo entre a segunda sub-banda de elétrons e a primeira de buracos pesados, que denominamos *E1-HH0* . Esta transição , que a princípio seria proibida por paridade , ocorre devido à deformação do potencial quadrado original pelo campo eletrostático interno, criado pela dopagem modulada. Observamos uma total inversão na intensidade relativa de QW e D. A emissão D se torna mais intensa quando a excitação é feita com fótons tendo energia superior ao “gap” da liga.

Os nossos objetivos em dar continuidade a esta pesquisa foram , fundamentalmente, os de verificar, de maneira inequívoca, a origem do pico D e de estudar como a *PL* se comportaria para excitação bem abaixo do “gap” da liga , avançando no estudo deste sistema com a aplicação da *PLE* e da magneto- ótica. Era obje-

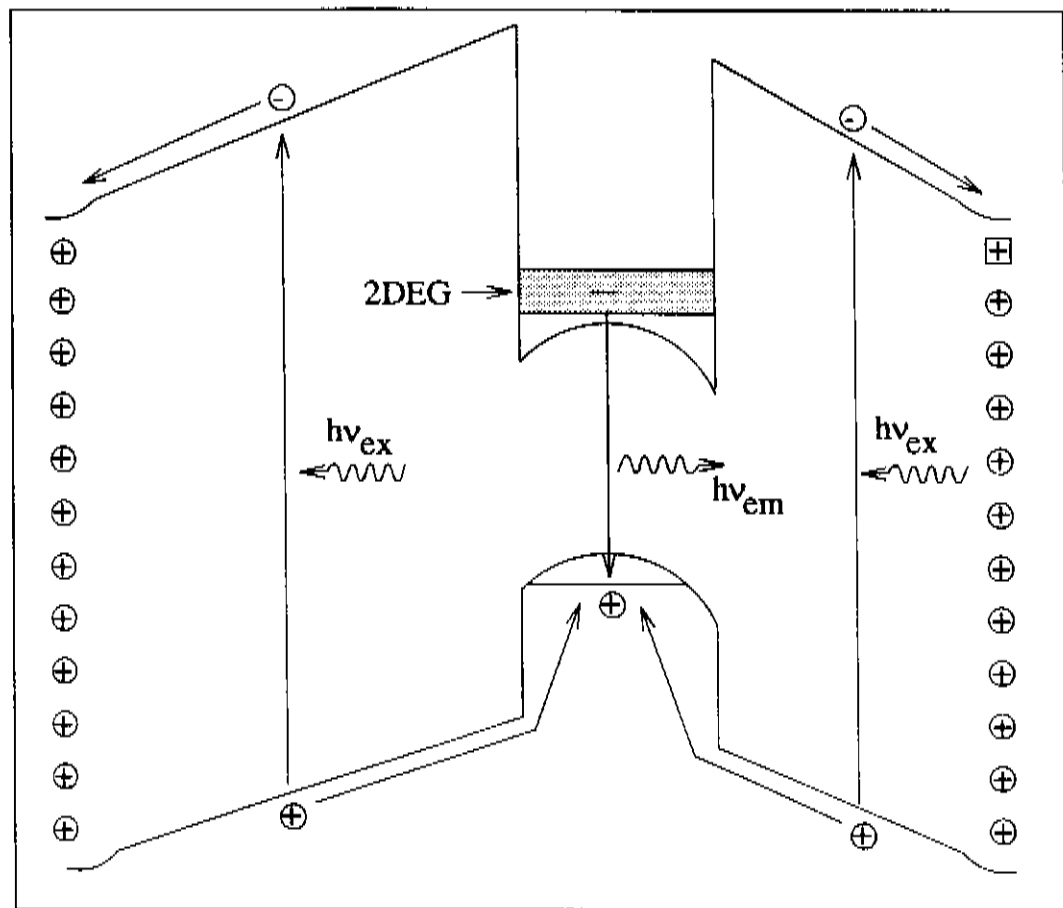


Figura 2.6: Mecanismo pelo qual a densidade do *2DEG* é diminuída pela geração de pares e-h na liga que forma a barreira.

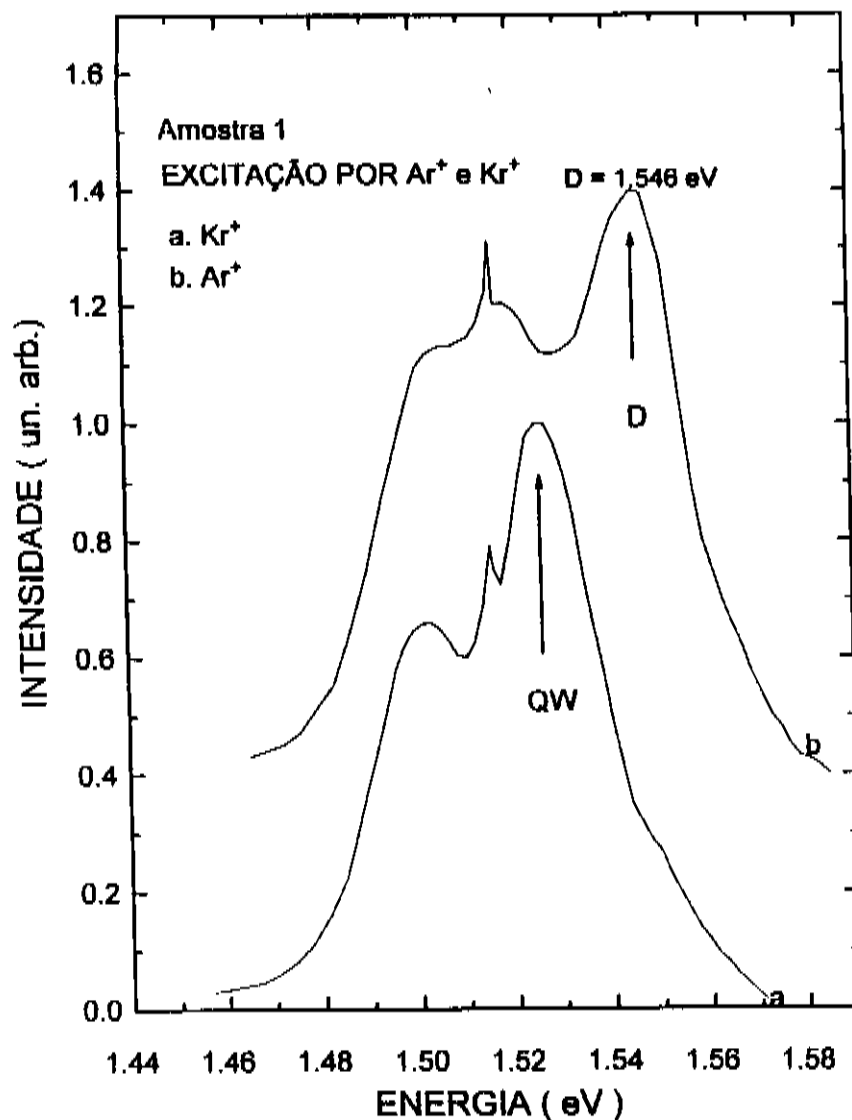


Figura 2.7: Espectros de emissão da amostra 1 sob excitação por lasers de Ar^+ (2,41 eV) e Kr^+ (1,91 eV). Note a profunda mudança na intensidade relativa de QW e D.

tivo também procurar uma medição direta da diminuição da densidade do *2DEG*, gerada pela fotoexcitação de alta intensidade. Queríamos também desenvolver um programa para o cálculo das autoenergias dos portadores no poço, e das probabilidades de transição entre os diversos estados, pretendendo com isto determinar o grau de quebra na simetria das funções de onda devido à deformação do potencial que confina os portadores.

Capítulo 3

Parte Teórica

3.1 Cálculo Auto-Consistente do Potencial e dos Níveis de Energia em *MDQW's*

Vamos descrever o método utilizado para o cálculo das autofunções e autovalores de energia dos portadores, elétrons e buracos, submetidos ao potencial de um *n-MDQW*. Este potencial é formado pela superposição do potencial quadrado do poço quântico, o qual chamamos de V_0 , e do potencial eletrostático, gerado pela separação espacial de cargas, que se dá em dita estrutura. O potencial quadrado é determinado fundamentalmente pelos seguintes parâmetros:

- Largura do poço de GaAs (L_z).
- Largura das barreiras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (L_b)
- “Gap” de energia da barreira, o qual é determinado pela porção de alumínio na liga (x).
- Proporção da descontinuidade entre os “gaps” do GaAs e do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (ΔE_g) que se aloja na banda de condução (ΔE_c), e na banda de valência (ΔE_v).

Na figura 3.1 temos representados alguns destes parâmetros.

O potencial eletrostático que se superpõem ao potencial quadrado, de modo a formar o potencial final depende de:

- Distância entre a região dopada da barreira e o poço de GaAs. Se a dopagem

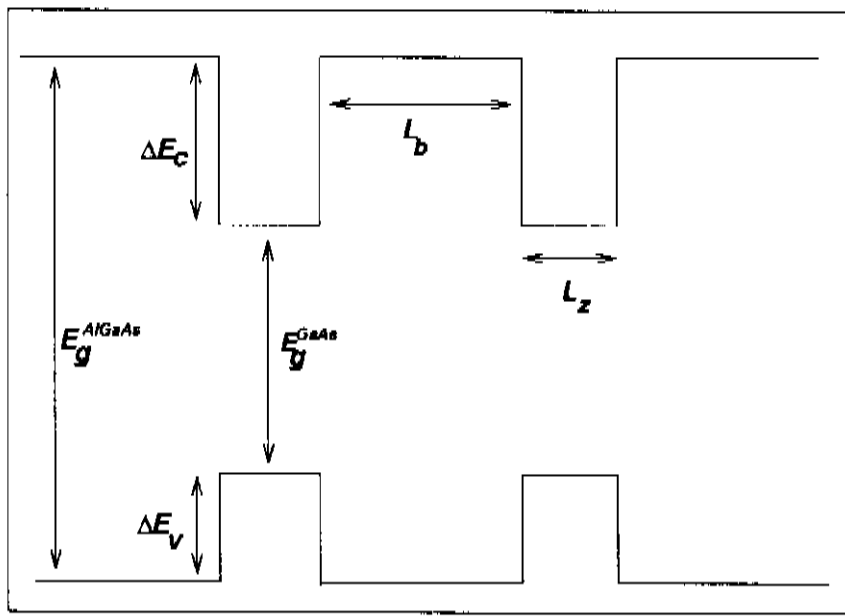


Figura 3.1: Representação de alguns parâmetros usados no cálculo. Veja também as figuras 2.2 e 2.4 para outros detalhes.

não for simétrica, como é o nosso caso, a distância à direita do poço será diferente da distância à esquerda do poço (figura 2.4).

- Concentração de doadores (N_d) na região dopada da barreira.
- Concentração bi-dimensional de portadores no poço de GaAs (N_s).
- Distribuição espacial dos elétrons na camada de GaAs. Esta é determinada pela função de onda eletrônica (função envelope).

As distâncias entre o poço e a região dopada, e N_d , são determinados no crescimento das amostras. A concentração de portadores no poço foi, no nosso caso, medida por efeito Hall. Por razões que veremos mais adiante, usamos também densidades extraídas das medidas de *PL* e *PLE*.

A distribuição espacial de cargas que, determina o potencial eletrostático, é dada pela seguinte expressão:

$$\rho(z) = \rho_d(z) + \sigma(z) \quad (3.1)$$

$$\sigma(z) = \sum_i -eN_s^i |\psi_i(z)|^2 \quad (3.2)$$

onde:

- $\rho_d(z)$ é a densidade de cargas gerada pelas impurezas ionizadas.
- $\sigma(z)$ é a densidade gerada pelos elétrons que se transferiram para o poço.
- N_j^i é a ocupação da sub-banda de índice i .
- ψ_i é a autofunção de energia (função envelope) associada à sub-banda de índice i .

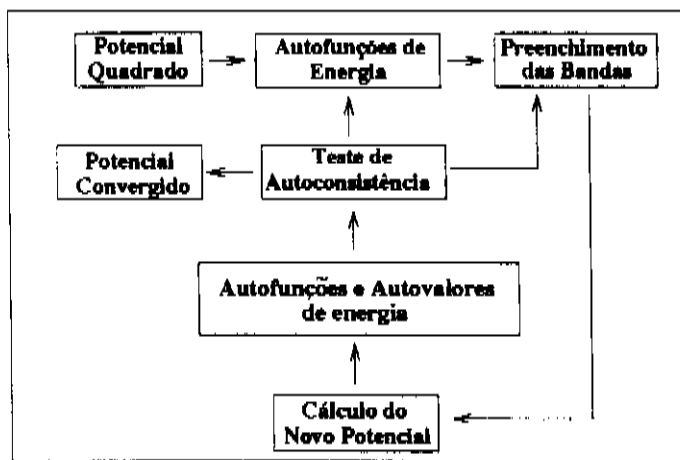
A densidade total de portadores no poço (N_s) é dada por:

$$N_s = \sum_i N_i^i \quad (3.3)$$

Em um sistema bi-dimensional ($2D$) cada sub-banda tem uma densidade de estados (número de estados por unidade de área por unidade de energia) $n_s = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$, onde m^* é a massa efetiva associada ao portador em questão, e onde já se inclui a degenerescência de spin. Deste modo, tendo a densidade total N_s , e a autoenergia de cada nível do poço, podemos determinar o número de sub-bandas preenchidas, e a ocupação N_j^i de cada uma delas. Tendo em mãos esta informação, acrescida do conhecimento das autofunções de energia, determinamos $\sigma(z)$.

Podemos notar que o potencial total depende, através do termo eletrostático, das autofunções de energia. O programa de cálculo deve, portanto, ser feito de modo autoconsistente, e está organizado da forma que se segue. Partimos do potencial quadrado e calculamos as autofunções e autovalores de energia. Distribuimos os elétrons nas sub-bandas e, com as autofunções em mãos, calculamos a largura das camadas ionizadas a esquerda e a direita do poço. Geramos um novo potencial, o qual será usado como ponto de partida para um novo ciclo de cálculos. Repetimos este procedimento até obtermos a convergência, que é testada pela comparação entre os valores da autoenergia da primeira sub-banda obtidos em ciclos consecutivos.





É fundamental no cálculo que seja feita a exigência de que o nível de Fermi seja uniforme ao longo da estrutura. Esta condição aparece no cálculo do potencial eletrostático, conforme veremos futuramente.

Nosso trabalho estará associado a solução da equação de Schrödinger, separadamente para elétrons, buracos pesados e buracos leves, ou seja, trabalharemos com portadores livres, de massa efetiva m^* , sujeitos ao potencial do n -MDQW. A equação que devemos solucionar é portanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi_n(z) + V(z)\psi_n(z) = E_n \psi_n(z) \quad (3.4)$$

onde:

$$V(z) = V_0 + q\phi(z) \quad (3.5)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi(z) = \frac{\rho(z)}{\kappa \epsilon_0} \quad (3.6)$$

sendo que $\rho(z)$ está definido pela equação 3.1. Supomos idênticas as constantes dielétricas dos dois materiais, tomada como $\kappa = 12,6$. Na definição do potencial superpomos o potencial quadrado do poço V_0 e o termo eletrostático $q\phi(z)$.

Nossas amostras são formadas por múltiplos n -MDQW's. Como as barreiras são espessas ($\sim 640 \text{ \AA}$) consideramos os n -MDQW's como sendo isolados, de modo que o cálculo é feito tomando-se a estrutura mostrada na figura 3.2. As regiões 1 e 3 contém a porção dos doadores que se ionizaram transferindo elétrons para o

Estrutura com base na qual o cálculo é feito

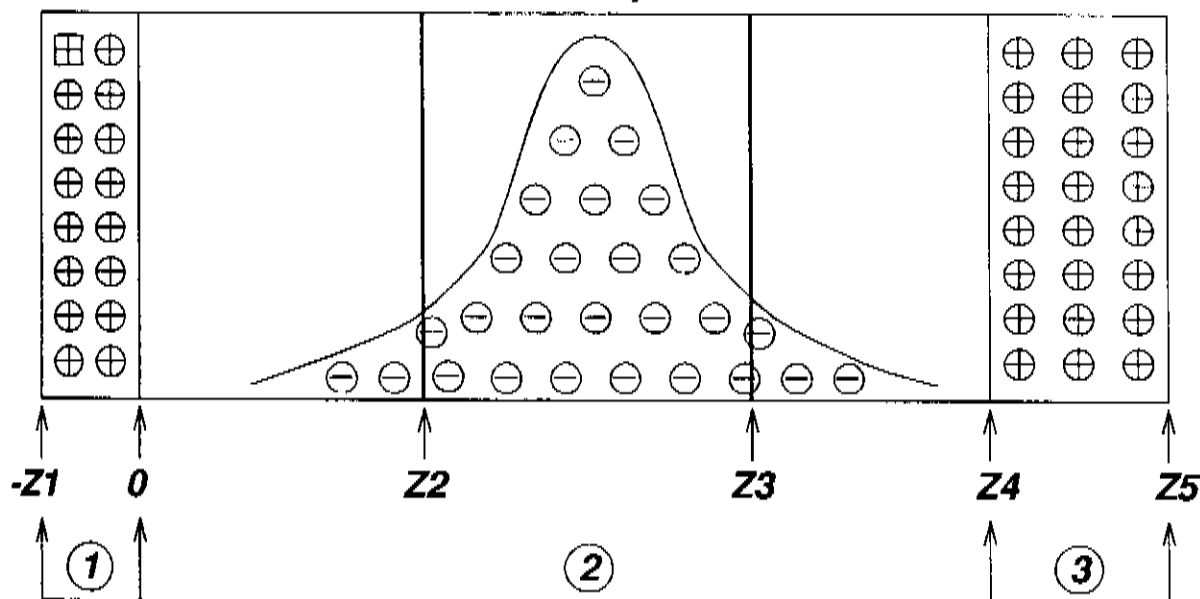


Figura 3.2: Estrutura com base na qual o cálculo é feito, e a distribuição de cargas no n-MDQW, com apenas uma sub-banda ocupada.

poço. Estas regiões possuem uma densidade de carga dada por:

$$\rho(z) = eN_d \quad (3.7)$$

onde N_d é a concentração de doadores em átomos por cm^3 . A região 2 contém apenas os elétrons que se transferiram para o poço, e possui uma densidade de cargas $\sigma(z)$ dada na equação 3.2. Na figura 3.2 mostramos também o panorama da distribuição de cargas na estrutura. Nesta figura assumimos apenas uma sub-banda ocupada.

O campo elétrico $E(z)$ é calculado pela seguinte expressão:

$$E(z) = - \int_{-z_1}^z \frac{\rho(z)}{\kappa \epsilon_0} \quad (3.8)$$

$$E(-z_1) = E(z_5) = 0 \quad (3.9)$$

O potencial eletrostático é calculado a partir do campo elétrico e é dado por:

$$\Phi(z) = - \int_{z_2}^z E(z) dz \quad (3.10)$$

$$\Phi(z_2) = 0 \quad (3.11)$$

tanto o potencial eletrostático, quanto o campo elétrico são calculados, por integração numérica, sobre uma grade de 300 pontos definida entre $-z_1$ e z_5 . Podemos notar que os pontos $-z_1$ e z_5 não são parâmetros de entrada do programa. Estes dois pontos, que determinam a região dopada que se ionizou em cada lado da estrutura, são calculados pelo programa impondo-se duas condições:

- $\Phi(z_1) = \Phi(z_5) = 0$ o que nos levará à expressão:

$$(Z_5 - Z_4) + Z_1 = -\frac{\sigma_E}{\rho_D} \quad (3.12)$$

na qual σ_E é a densidade de carga total do *2DEG* e ρ_D é a densidade de carga na região das impurezas ionizadas.

- $\Phi(-z_1) = \Phi(z_5)$. Esta condição surge devido à imposição de que o nível de Fermi seja uniforme ao longo de toda a estrutura.

O método empregado para a solução da equação de Shrödinger, tem como base a integração desta equação pelo método de Numerov [50]. Consideremos a equação diferencial:

$$\Psi'' = F(z, \Psi) \quad (3.13)$$

No nosso caso:

$$F(z, \Psi) = Q(z)\Psi \quad (3.14)$$

$$Q(z) = \frac{2m^*}{\hbar^2} [V(z) - E_n] \quad (3.15)$$

No método de Numerov, $\Psi(z)$ é calculado ponto a ponto na grade em que foi dividida a região do eixo z de nosso interesse. Isto é feito de acordo com a expressão:

$$\Psi_{n+1} = \frac{[2 + \frac{5}{6}h^2Q_n]\Psi_n - [1 - \frac{h^2}{12}Q_{n-1}]\Psi_{n-1}}{1 - \frac{h^2}{12}Q_{n+1}} \quad (3.16)$$

Nesta equação h é o intervalo entre os pontos da grade, e o sub-índice n indica o valor da função no n ésimo ponto da grade. A questão que surge quando utilizamos este método é como encontrar a energia E_n , que aparece na definição de $Q(z)$ na equação 3.16, para a qual $\Psi(z)$ é um estado estacionário. Sabemos que $\Psi(z)$ é

uma função que decai exponencialmente nas barreiras. Logo, partindo da esquerda com $\Psi_{n-1} \simeq 0$, prosseguindo ponto a ponto com o cálculo, passando pelo poço, e continuando pela barreira direita, devemos obter uma função que, nesta última região, decaia exponencialmente a zero. Na figura 3.3 mostramos três “funções de onda”, para um poço quadrado de $200 \text{ \AA}$, com barreiras de 300 meV , calculadas para três energias: E_0 , que é a energia do primeiro estado ligado do poço, e duas outras, $E_0 + \Delta$ e $E_0 - \Delta$, uma acima e uma abaixo de E_0 . Notamos o comportamento “ruim” das funções, não associadas a um estado estacionário, na barreira direita. Na prática, para determinar E_n , fazemos a exigência de que a função $G_{if} = |\Psi_f - \Psi_i|$, onde Ψ_i é a função de onda no ponto inicial a partir do qual se faz a integração, e Ψ_f o valor da função no ponto final, apresente um mínimo. Na figura 3.4 é mostrado um gráfico de G_{if} em função da energia E_n . Notamos claramente os mínimos associados a energias de estados estacionários.

O método descrito se mostrou bastante eficiente e já foi empregado com sucesso no cálculo de outras estruturas.

Mostramos a seguir os resultados dos cálculos para nossas amostras. Os parâmetros de entrada do programa são: a densidade do *2DEG*, os pontos Z_2 , Z_3 e Z_4 , a densidade, em átomos por cm^3 , de doadores na região dopada da barreira, e a concentração de alumínio na barreira. As massas efetivas para elétrons (m_e^*), buracos pesados (m_{hh}^*) e buracos leves (m_{lh}^*) são tomadas da referência [14], e são $0,067 m_0$, $0,34 m_0$ e $0,09 m_0$, respectivamente. Como parâmetros de alinhamento de bandas, utilizamos os valores: 60 % da descontinuidade entre os “gaps” do GaAs e do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ se aloja na banda de condução e 40 % na banda de valência. Na tabela 3.1 mostramos os resultados correspondentes aos dois primeiros níveis de energia para elétrons, buracos leves e pesados. Mostramos apenas os valores relativos ao cálculo feito para a amostra 1. Devido a pequena diferença entre as estruturas da amostra 1 e da amostra 2 os valores, para uma determinada densidade, são praticamente idênticos para as duas amostras. Foram feitos cálculos para diversas densidades. A densidade de $4,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ é a nominal da amostra 1 e a de $2,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ a da amostra 2. Na figura 3.5 mostramos o potencial autoconsistente final, correspondente a uma densidade de $7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Nesta figura definimos

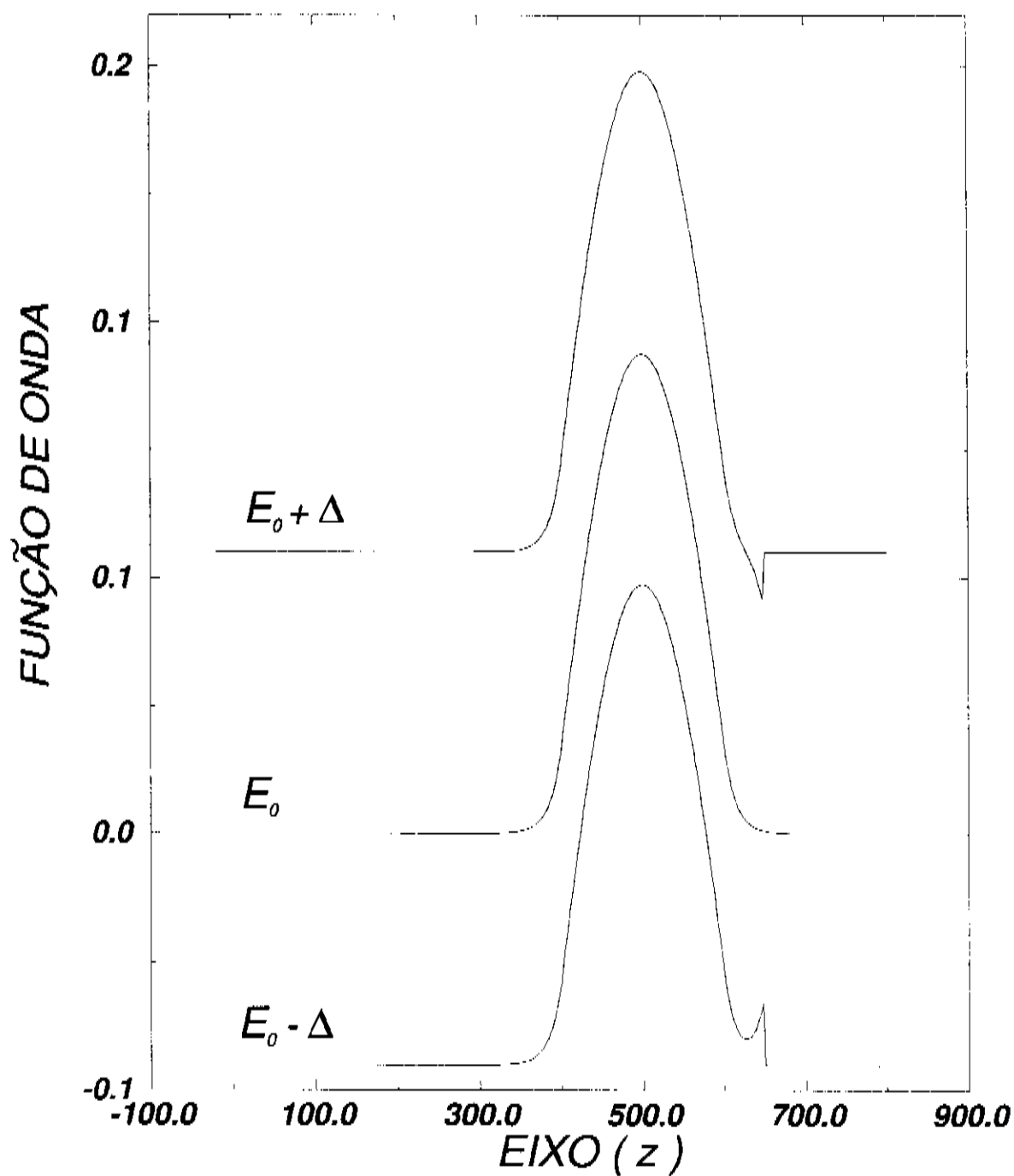


Figura 3.3: Funções de onda correspondentes ao primeiro estado de um poço quadrado. E_0 é a autoenergia correta. Note o comportamento “ruim” da função de onda para valores diferentes de E_0 .

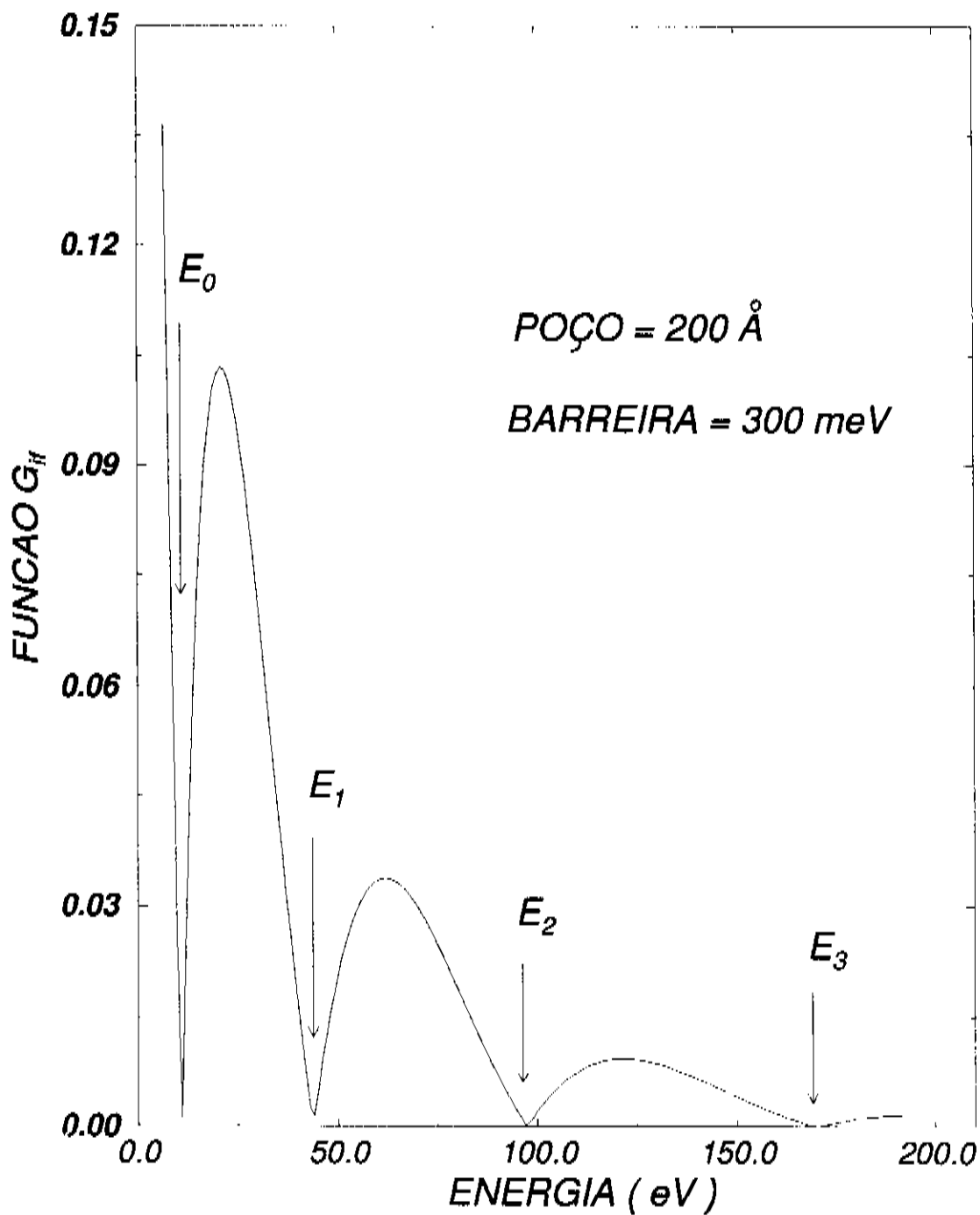


Figura 3.4: Função G_{if} , definida no texto, em função da energia E_n . Note os mínimos associados aos autoestados.

Tabela 3.1: Autoenergias dos dois primeiros estados ligados para elétrons (E0, E1), buracos pesados (HH0, HH1) e buracos leves (LH0 , LH1).A densidade nula corresponde ao poço quadrado. As energias estão dadas em meV.

N_s	E0	E1	HH0	HH1	LH0	LH1
$0,0 \times 10^{11} cm^{-2}$	10,7	42,4	2,4	9,4	7,8	31,1
$1,8 \times 10^{11} cm^{-2}$	8,7	38,6	3,8	12,6	9,6	34,8
$2,5 \times 10^{11} cm^{-2}$	8,0	37,3	4,2	13,7	10,1	36,1
$3,2 \times 10^{11} cm^{-2}$	7,3	36,0	4,6	14,6	10,7	37,4
$4,8 \times 10^{11} cm^{-2}$	5,7	33,0	5,3	16,6	11,8	40,0
$5,9 \times 10^{11} cm^{-2}$	4,7	31,1	5,8	17,8	12,5	41,7
$7,5 \times 10^{11} cm^{-2}$	3,5	28,9	6,24	19,1	13,2	43,5

também a referência de energia em relação à qual estão dados as autoenergias dos portadores no poço.As energias na tabela 3.1 são dadas em meV.Nas tabelas 3.2 e 3.3 mostramos o valor das integrais de superposição entre as funções de onda para as mesmas densidades dadas na tabela 3.1.

Na figura 3.6 mostramos as densidades de probabilidade para elétrons (E0 e E1) e buracos pesados (HH0) que foram calculadas para a densidade de $7,5 \times 10^{11} cm^{-2}$. Devido a assimetria do potencial (vide figura 3.5) elétrons ocupando E0 e buracos de HH0 tendem a se posicionar em lados opostos do poço, conforme pode ser observado na comparação entre as densidades de probabilidades mostradas. Isto se reflete nas integrais de superposição que mostramos nas tabelas 3.2 e 3.3 .Não vamos neste momento nos estender na discussão destes resultados.Note que a superposição entre E1 e HH0 deixa de ser nula, mas mantém um valor baixo, mesmo para a densidade mais alta.

Passamos à próxima sessão onde trataremos de alguns dos efeitos oriundos da aplicação de um campo magnético paralelo à direção de crescimento das amostras, ou seja, perpendicular ao plano do 2DEG.

POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

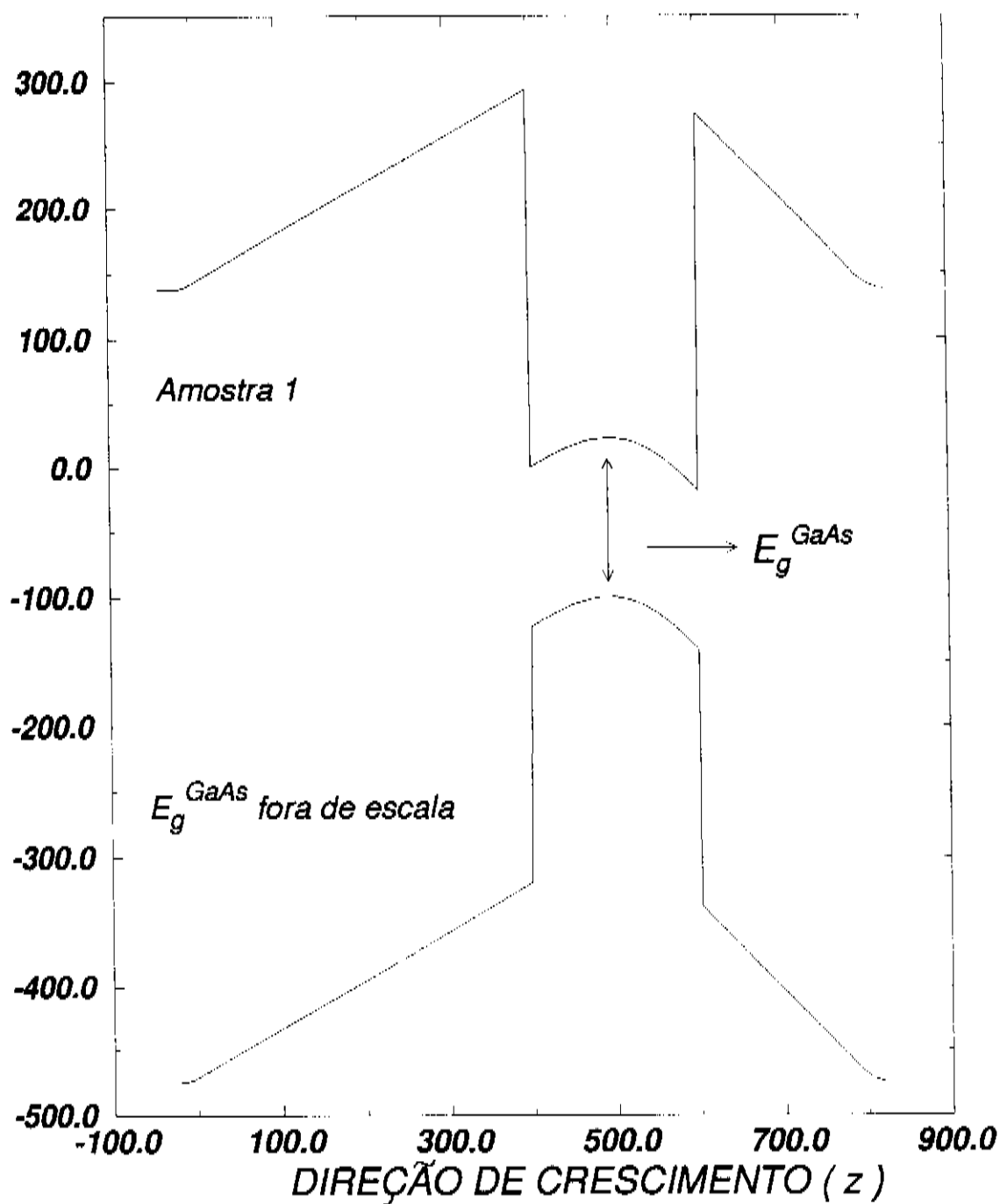


Figura 3.5: Potencial autoconsistente obtido para uma densidade de $7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

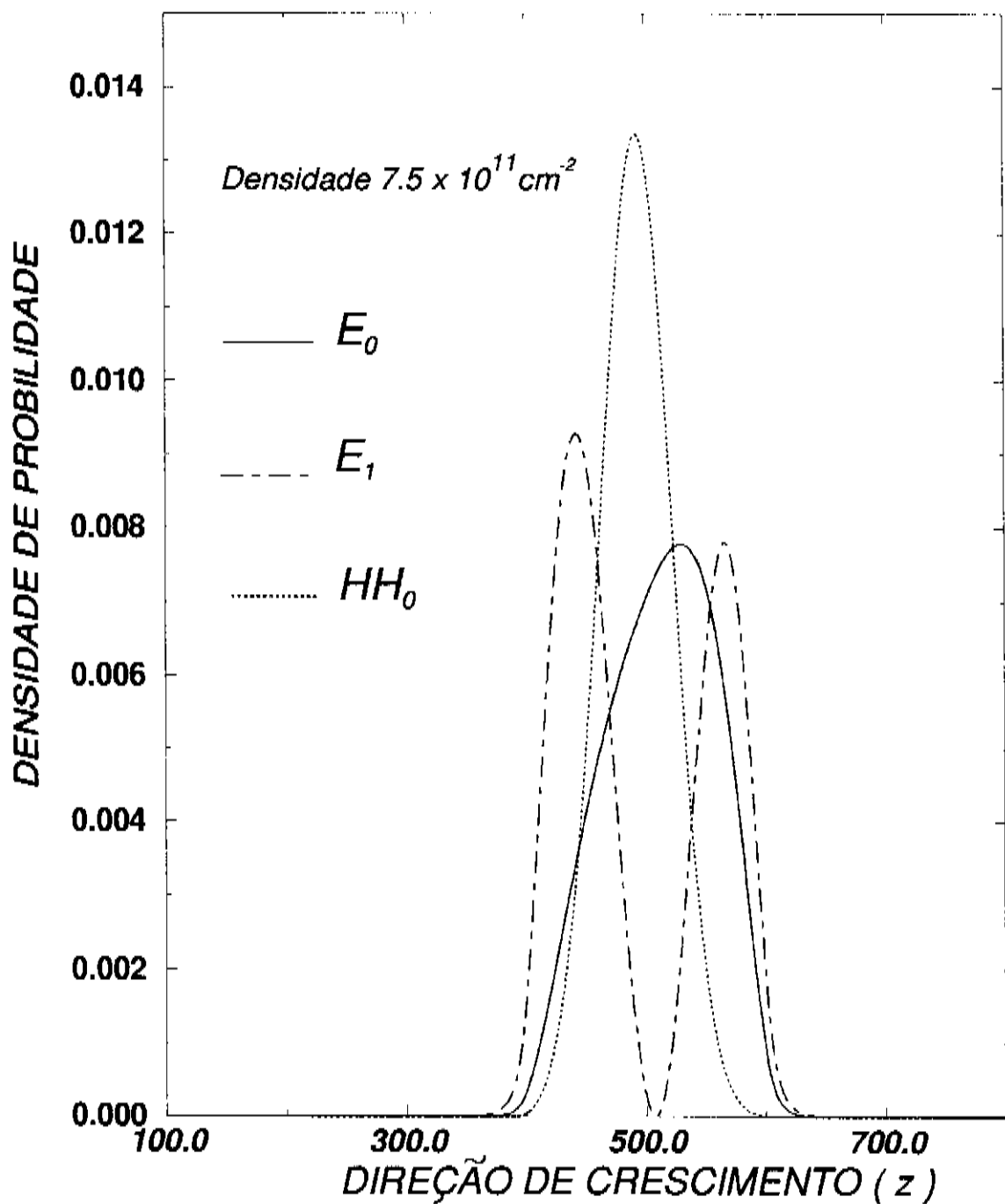


Figura 3.6: Densidades de probabilidade para E_0 , E_1 e HH_0 . Vemos claramente o efeito da assimetria do potencial.

Tabela 3.2: Integrais de superposição entre as funções de onda de elétrons e buracos pesados para diversas densidades. A densidade nula corresponde ao poço quadrado.

N_s	$\langle E0 HH0\rangle$	$\langle E0 HH1\rangle$	$\langle E1 HH0\rangle$	$\langle E1 HH1\rangle$
$0,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,998	0,000	0,000	0,993
$1,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,977	0,12	0,16	0,093
$2,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,967	0,16	0,19	0,049
$3,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,957	0,17	0,21	0,035
$4,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,937	0,18	0,24	0,010
$5,9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,925	0,17	0,25	0,0
$7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,91	0,17	0,26	0,88

Tabela 3.3: Integrais de superposição envolvendo elétrons e buracos leves para diversas densidades. A densidade nula corresponde ao poço quadrado.

N_s	$\langle E0 LH0\rangle$	$\langle E0 LH1\rangle$	$\langle E1 LH0\rangle$	$\langle E1 LH1\rangle$
$0,0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	1	0	0	1
$1,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,995	0,08	0,09	0,994
$2,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,992	0,11	0,11	0,989
$3,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,988	0,13	0,14	0,984
$4,8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,978	0,15	0,17	0,974
$5,9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,971	0,17	0,19	0,970
$7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	0,963	0,18	0,21	0,96

3.2 Sistema Bi-Dimensional Sujeito a um Campo Magnético Perpendicular ao Plano de Crescimento.

3.2.1 Níveis de Energia

Seja um sistema 2D localizado no plano XY, e submetido a um campo magnético $\vec{B}$:

$$\vec{B} = B_0 \vec{k} \quad (3.17)$$

Escolhemos o calibre de Landau para o potencial vetorial magnético $\vec{A}$ dado por:

$$\vec{A} = -B_0 y \vec{i} \quad (3.18)$$

O hamiltoniano do sistema é dado por [23, 51]:

$$\Pi = \frac{1}{2m^*} (\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A})^2 + g\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (3.19)$$

onde:

- m^* é a massa efetiva da partícula.
- $\vec{P}$ é o momento cinético.
- μ_B é o magnetron de Bohr.
- $\vec{S}$ é o spin da partícula.

O segundo termo que aparece na equação é o termo devido ao spin da partícula e será desprezado por nós. Isto se justifica pelo fato deste termo representar, para elétrons no GaAs, apenas cerca de 1,4 meV para um campo de 10 Teslas. Tomando o hamiltoniano anterior na representação $|\vec{r}\rangle$ obtemos:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB_0}{\hbar c} y \right) \vec{i} + \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} \right]^2 \quad (3.20)$$

que pode ser colocado na forma:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB_0}{\hbar c} y \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \quad (3.21)$$

Adotando uma solução do tipo:

$$\Psi \propto \exp(iK_x x) \varphi(y) \quad (3.22)$$

somos levados à seguinte equação de autovalores e autovetores:

$$\frac{\hbar\omega_c}{2} \left[-l^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left(\frac{y}{l} - lK_x \right)^2 \right] \varphi(y) = E\varphi(y) \quad (3.23)$$

$$\omega_c = \frac{eB_0}{m^*c} \quad (3.24)$$

$$l^2 = \frac{\hbar c}{eB_0} \quad (3.25)$$

que pode finalmente ser escrita como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m^*\omega_c^2}{2} (y - l^2 K_x)^2 \right] \varphi(y) = E\varphi(y) \quad (3.26)$$

que é justamente a equação do oscilador harmônico centrado em $Y = l^2 K_x$. As autofunções de energia serão funções do tipo:

$$\Psi_{\nu,k_x}(x,y) = \text{Cexp}(iK_x x) \varphi_{\nu}(y - l^2 K_x) \quad (3.27)$$

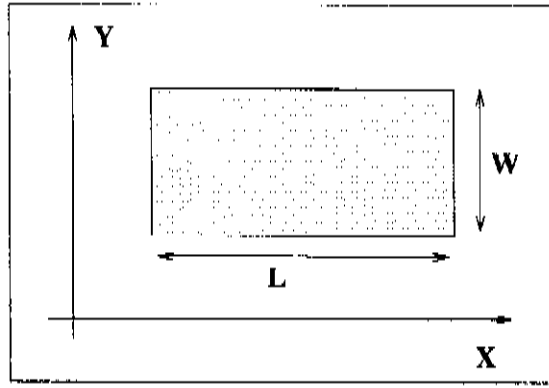
com autovalores de energia dados por:

$$E_{\nu,k_x} = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \quad (3.28)$$

onde $\varphi_{\nu}(y')$ são as autofunções do oscilador harmônico. Podemos notar que os autoestados dependem de K_x e de ν enquanto que as autoenergias apresentam dependência apenas no número quântico ν . Os autovalores de energia são portanto degenerados sendo que a degenerescência será dada pelo número de valores possíveis de K_x .

3.2.2 Degenerescência dos Níveis

Sejam $\underline{L}$ e $\underline{W}$ as dimensões laterais de nosso sistema 2D.



Vimos anteriormente que as autofunções são osciladores harmônicos centrados em $Y = l^2 K_x$ segundo a direção $\underline{y}$ e ondas planas segundo a direção $\underline{x}$. Em vista disto somos levados a fazer a exigência de que $\underline{Y}$ seja tal que os osciladores estejam contidos dentro dos limites de nosso sistema 2D. Esta condição se expressa como:

$$0 \leq Y \leq W \quad (3.29)$$

gerando uma restrição para K_x dada por:

$$0 \leq K_x \leq \frac{W}{l^2} \quad (3.30)$$

Tendo esta restrição em mãos impomos condições de contorno periódicas segundo a direção $\underline{x}$ obtendo:

$$\Psi_{\nu, K_x}(x, y) = \Psi_{\nu, K_x}(x + L, y) \Rightarrow K_x = \frac{2\pi}{L} q \quad (3.31)$$

onde q é um número inteiro. Desta relação extraímos que o número de valores permitidos para K_x entre 0 e $\frac{W}{l^2}$ é:

$$N = \frac{LW}{2\pi l^2} \quad (3.32)$$

ou seja, obtemos finalmente que a degenerescência de cada um dos níveis de Landau em termos do número de estados disponíveis por unidade de área é dada por:

$$\eta_B = \frac{eB}{hc} \quad (3.33)$$

Observamos portanto que cada um dos níveis de Landau é altamente degenerado. Cada nível comporta $\eta_B = 2,418 \times 10^{11}$ portadores por cm^2 para cada Tesla de campo magnético.

Tendo em vista o exposto acima, podemos descrever como se comporta o nosso sistema 2D sob a ação do campo magnético. Para campo nulo, o espectro de energia é formado por uma série de sub-bandas bi-dimensionais, cujo número é ditado pela quantidade de estados ligados no poço de GaAs. Estas sub-bandas são parabólicas, com curvatura dada pela massa efetiva do portador. O fundo de cada uma das bandas coincide com a energia de um dos estados ligados no poço. Com a aplicação do campo magnético, cada uma das bandas se desdobra em uma família de níveis de Landau espaçados de $\hbar\omega_c$. Cada nível de Landau tem a capacidade de “armazenar” $2,418 \times 10^{11}$ portadores por cm^2 para cada Tesla de campo magnético aplicado. Representamos na figura 3.7 uma sub-banda 2D, contendo um 2DEG e cuja densidade é determinada pela posição do nível de Fermi ϵ_{f0} , medido a partir do fundo desta banda. Mostramos os níveis de Landau nos quais esta sub-banda se desdobra quando um campo magnético $\vec{B} = B_0 \vec{k}$ é aplicado sobre a estrutura. Vamos agora tecer algumas considerações sobre a “dinâmica de ocupação” dos níveis de Landau (LL) em função do campo magnético.

A densidade de estados (número de estados por unidade de área por unidade de energia) de uma banda parabólica 2D é dada, considerando-se a degenerescência de spin, por:

$$\eta_{2D} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (3.34)$$

Sabemos que os LL 's estão separados por uma energia igual a $\hbar\omega_c$. Multiplicando-se a densidade de estados da banda 2D , pela separação em energia entre os LL 's, obtemos exatamente o número de estados por unidade de área englobados por dois LL 's consecutivos. Este valor é:

$$\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \hbar\omega_c = 2 \frac{eB}{h c} = 2\eta_H \quad (3.35)$$

Justamente a degenerescência do nível de Landau, onde já se considera a degenerescência de spin, que duplica o valor obtido na equação 3.33 . Ou seja, quando uma sub-banda se desdobra em LL 's, um determinado nível, digamos o de $\nu = 5$, é capaz de acomodar exatamente os portadores que ocupavam os estados da banda 2D compreendidos entre o LL de $\nu = 5$ e o nível anterior, ou seja, o de $\nu = 4$. Trazemos este fato graficamente na figura 3.7. Tendo preenchido o LL de $\nu = 0$ com

restantes nesta banda. Chamamos de ϵ_{f0} a energia do ultimo estado ocupado, medida a partir do fundo da banda 2D. Note-se que a medida que $\vec{B}$ tende a zero ϵ_{f0} tende ao Nível de Fermi a campo zero. Seguindo a figura 3.7, o LL de $\nu = 1$ acomodará os elétrons do intervalo a, o de $\nu = 2$ os do intervalo b, e assim por diante até que todos os portadores estejam acomodados. Para a situação mostrada, na qual o ϵ_{f0} se localiza dentro do intervalo c, o LL de $\nu = 5$ está parcialmente ocupado. Quando o campo magnético for tal que o LL de $\nu = 4$ coincida exatamente com ϵ_{f0} , o LL de $\nu = 5$ estará completamente desocupado, e o de $\nu = 4$ integralmente preenchido. Para um campo suficientemente elevado todos os elétrons estarão acomodados no nível fundamental de $\nu = 0$. É bom frizar neste momento que o Nível de Fermi (ϵ_f) real coincidirá sempre com o ultimo LL ocupado, já que, entre níveis de Landau, não existem estados acessíveis. Na figura 3.8 mostramos a representação da dependência de ϵ_f com o campo magnético. Consideramos a situação ideal descrita acima, ou seja, temperatura igual a zero Kelvin e densidade de estados representada por uma função delta.

O que ocorre fundamentalmente é que ϵ_f fica “ligado” a um LL até o momento em que este se desocupa. Neste momento ϵ_f se desloca de modo a coincidir com o nível de número quântico imediatamente inferior. Esta mesma análise é válida para as sub-bandas de valência sendo que buracos leves e pesados dão, cada um, origem a uma família de LL's, que se deslocam com o campo de acordo com $\hbar\omega_c$ calculado para as massas efetivas destes portadores. Notamos que $\hbar\omega_c$ é inversamente proporcional à massa efetiva do portador. Buracos pesados se deslocam portanto bem menos que buracos leves e elétrons.

Tendo exposto até este momento os aspectos teóricos fundamentais que utilizaremos na análise dos resultados passamos a fazer uma descrição dos métodos experimentais utilizados durante o desenvolvimento deste trabalho.

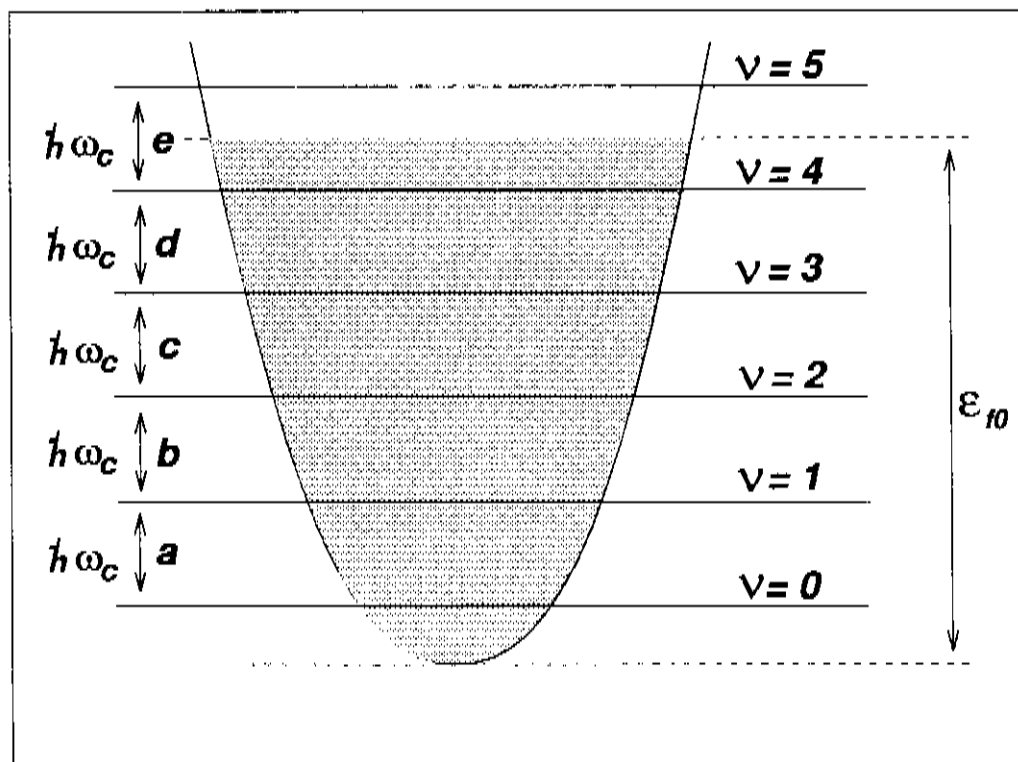


Figura 3.7: Banda 2D se desdobrando em níveis de Landau.

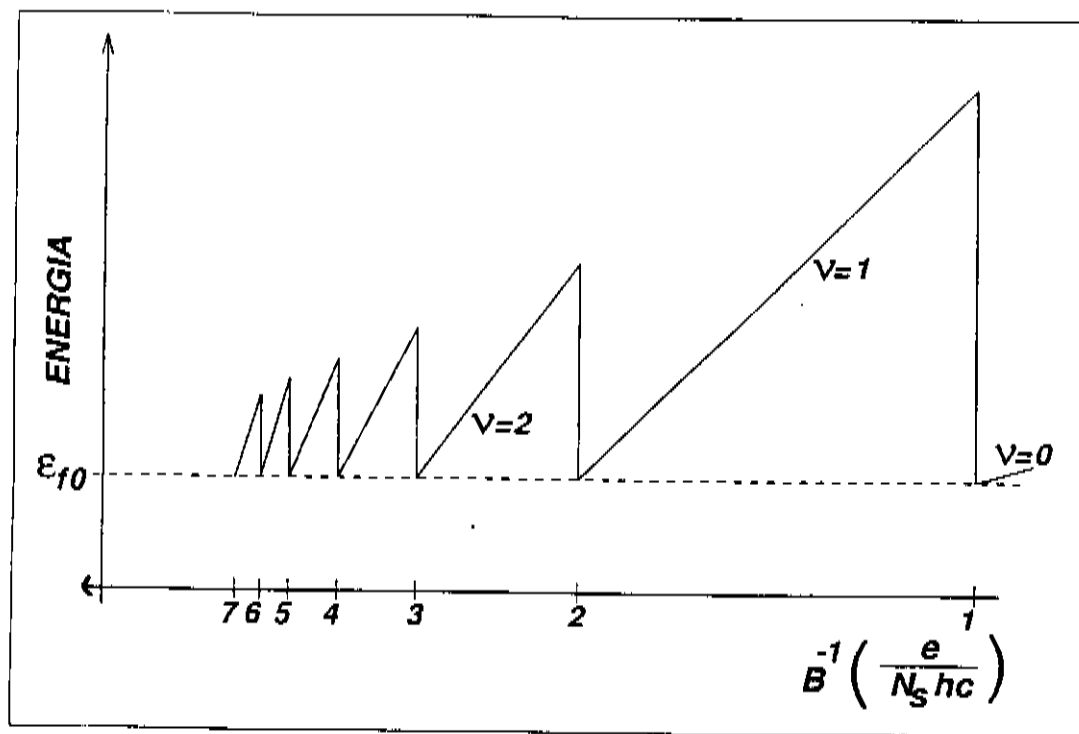


Figura 3.8: Dependência do nível de Fermi com o campo magnético.

Capítulo 4

Descrição dos Métodos Experimentais

4.1 Fotoluminescência

O nome fotoluminescência (*PL*) resume o seguinte significado: emissão de luz (luminescência) induzida por fótons. Um determinado material, em resposta à incidência de fótons sobre ele, emite luz. Como veremos a seguir, uma série de informações a respeito do material podem ser obtidas a partir da análise das características da radiação emitida. A emissão de luz pelo material é o último estágio de uma cadeia de três processos básicos: Absorção da luz, relaxação dos portadores gerados e recombinação radiativa destes portadores.

Resumimos na figura 4.1 os aspectos fundamentais relacionados à *PL*. Imaginamos um fóton com energia $h\nu_{ex}$, superior à do “gap” do GaAs, incidindo sobre o material e sendo absorvido. A absorção se dá pela geração de um par elétron-buraco (e-h). Como se exige a conservação de $\vec{K}$ esta transição se dá verticalmente no espaço de momentos, tendo em vista que o momento do fóton é desprezível em relação ao momento cristalino. Por este processo o semiconductor é levado a um estado excitado. Tanto o elétron gerado na banda de condução (*BC*) quanto o buraco gerado na banda de valência (*BV*) possuem um excesso de energia em relação ao estado fundamental das respectivas bandas. O primeiro passo em busca

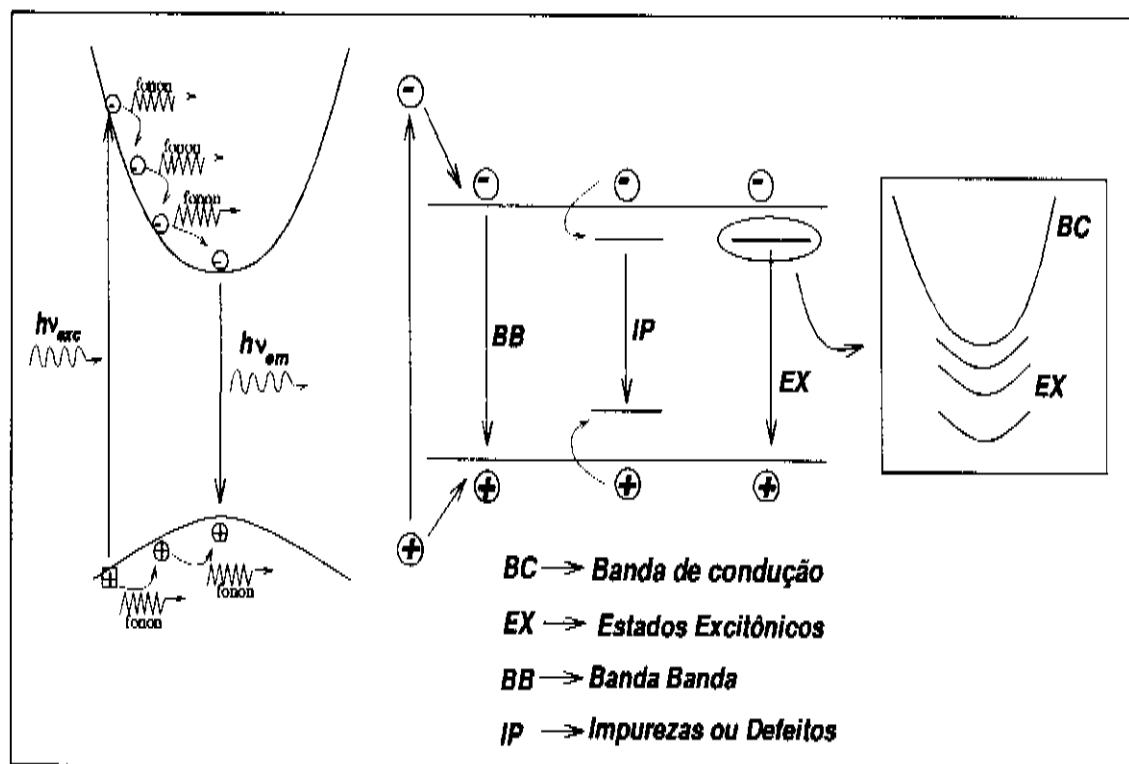


Figura 4.1: Representação gráfica dos aspectos fundamentais relacionados ao processo de PL.

do equilíbrio é a relaxação intrabanda por emissão de fônons óticos e acústicos. Isto se dá até o momento no qual o elétron atinge o fundo da *BC* e o buraco o topo da *BV*. O passo final corresponde a perda do excesso de energia correspondente ao “gap” do semicondutor. Isto se dá pela recombinação radiativa do par $e-h$, ou por processos não radiativos. A recombinação se dará verticalmente em $\vec{k}$, e poderá ocorrer diretamente entre portadores ocupando o mínimo de energia das respectivas bandas, ou precedida da captura do portador por estados que, eventualmente, estejam presentes, por influência de impurezas e/ou defeitos, no “gap” proibido do material. No primeiro caso, obtemos uma medida do “gap” fundamental e no segundo caso, seremos capazes de obter informações a respeito da energia de ligação dos estados gerados por impurezas e/ou defeitos. Na discussão feita acima desprezamos completamente a interação Coulombiana existente entre os portadores gerados. Esta interação é fundamental e se manifesta de forma bastante acentuada, principal-

mente a baixa temperatura. A atração Coulombiana entre o par e-h age no sentido de formar um átomo hidrogenoide, o qual denominamos exciton [52], e que corresponde ao verdadeiro estado excitado do semiconductor. No caso de bandas esféricas, como para o GaAs, no ponto Γ ($\vec{K} = 0$), nas vizinhanças do "gap" fundamental, o problema da interação e-h se reduz, formalmente, ao de um átomo hidrogenoide. O estado excitônico é descrito pela função de onda:

$$\Phi_{iK,n}(\vec{r}) = V^{-1} \text{EXP}(\vec{K} \cdot \vec{R}) \phi_n(\vec{r}) \quad (4.1)$$

onde:

$$\vec{R} = \frac{m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h}{m_e^* + m_h^*} \quad (4.2)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad (4.3)$$

$$\vec{K} = \vec{k}_e + \vec{k}_h \quad (4.4)$$

A exponencial 4.1 representa o movimento do centro de massa e $\phi_n(\vec{r})$ satisfaz a seguinte equação de Shrödinger:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}|} \right\} \phi_n(\vec{r}) = \epsilon_n \phi_n(\vec{r}) \quad (4.5)$$

$$\mu^{-1} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad (4.6)$$

O raio de Bohr a_0 é substituído pelo raio do exciton $a_x = \frac{a_0 \kappa m}{\mu}$, e o espectro de energia resultante é dado por:

$$E_{ex}(\vec{K}) = E_G + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \epsilon_n \quad (4.7)$$

$$M = m_e^* + m_h^* \quad (4.8)$$

$$\epsilon_n = -\frac{e^2}{2\kappa a_{ex} n^2} \quad (4.9)$$

O processo de recombinação neste caso se dará pela dissociação do exciton. O fóton gerado terá energia dada por $h\nu = E_g - \epsilon_{n=1}$, onde $\epsilon_{n=1}$ é a energia de ligação do estado fundamental do exciton de $\vec{K} = 0$. Mostramos na figura 4.1 uma representação de tais estados.

4.2 Espectroscopia de Foto-Excitação de Luminescência

A espectroscopia de foto-excitação de luminescência (*PLE*), constitui-se da ideia de medir-se a foto-absorção de um material usando a intensidade do sinal de *PL* como prova indireta do coeficiente de absorção. Para ilustrar esta técnica tomemos um poço quântico de GaAs com seus níveis de energia. Para a discussão que se segue nos referimos à figura 4.2. Em regime de baixa excitação, no qual os portadores se encontram plenamente relaxados, a *PL* ocorrerá entre elétrons que ocupam a primeira sub-banda de condução (E_0), e buracos da primeira sub-banda de valência correspondente a buracos pesados (HH_0). A esta transição chamamos E_0 - HH_0 .

O procedimento seguido é o de medir-se a intensidade do pico de *PL*, relacionado à transição E_0 - HH_0 , em função da energia com a qual excitamos a amostra. Para excitação com energia inferior a E_0 - HH_0 a intensidade será nula, pois não há absorção e a correspondente formação de pares e-h. Sempre que a energia de excitação corresponder a uma transição permitida entre estados ligados do poço, teremos uma situação de ressonância, a qual se refletirá em um aumento da intensidade do sinal monitorado. Temos portanto uma técnica complementar à *PL*, a qual nos permite investigar os estados excitados do sistema eletrônico em questão. São estas duas técnicas, acopladas ao uso de um campo magnético paralelo a direção de crescimento, que utilizaremos neste trabalho.

4.3 Arranjo Experimental

Na figura 4.3 mostramos o arranjo experimental que foi usado para as medidas de *PL* e *PLE* com campo magnético. A amostra foi colocada em um criostato contendo um magneto supercondutor de NbTi capaz de gerar campos de até 13 T. A amostra fica localizada de modo a ter sua face voltada para baixo, sendo que o campo é aplicado de baixo para cima, ou seja, na mesma direção e sentido da luz incidente. O criostato usado era dotado de uma janela ótica em sua parte inferior, de modo a permitir a incidência da luz, e o recolhimento do sinal de *PL*. O feixe de laser, fonte

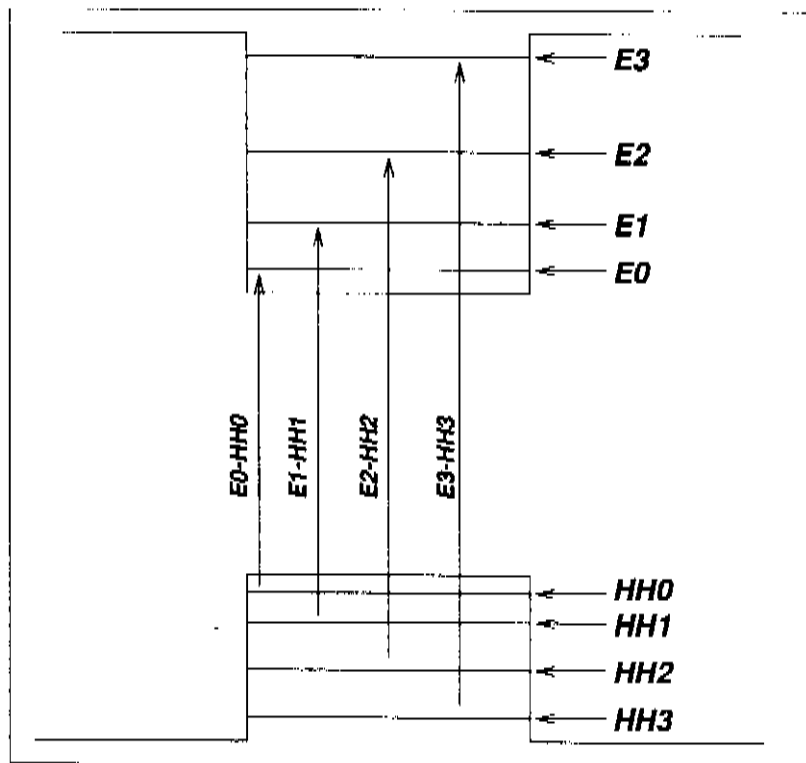


Figura 4.2: Representação de uma experiência de *PLE* mostrando a excitação ressonante com os níveis do poço.

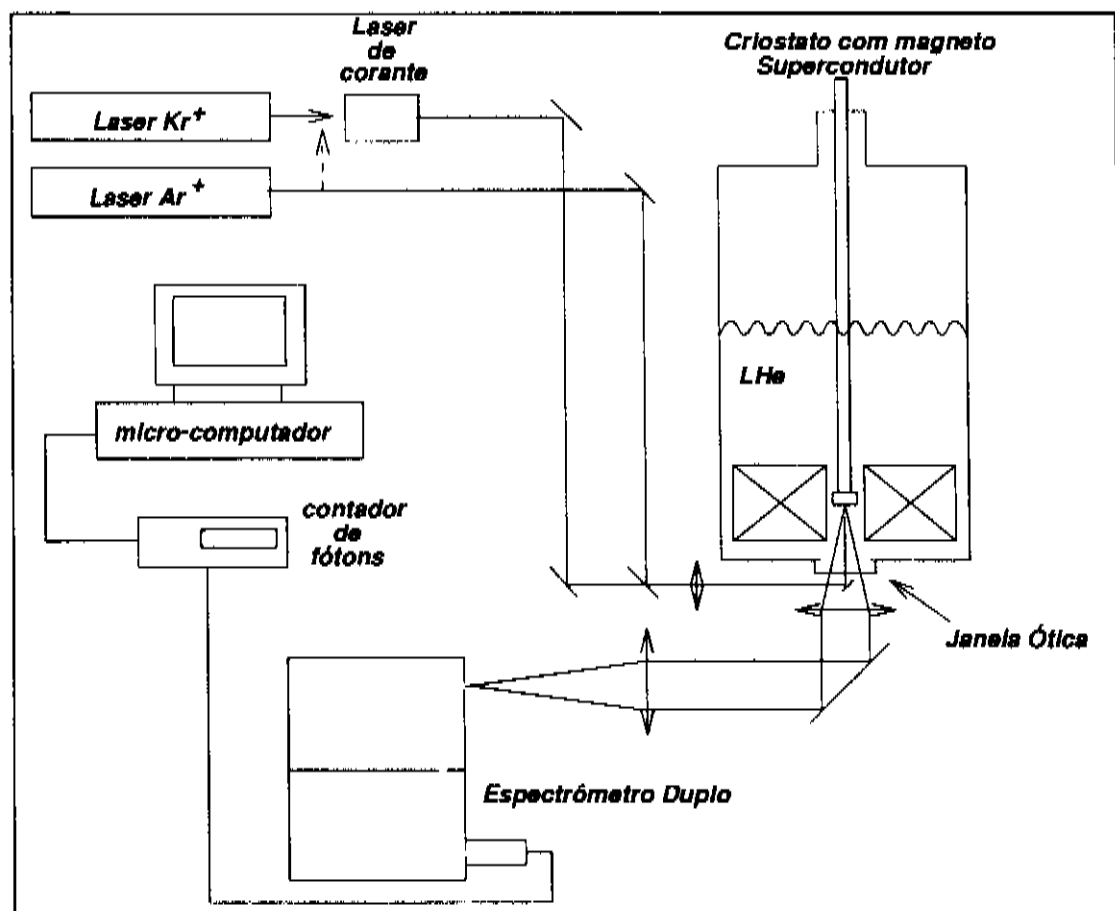


Figura 4.3: Desenho do sistema de medida de *PL* e *PLE* com aplicação de campo magnético.

de excitação, era focalizado na amostra por uma lente bi-côvexa, e o sinal recolhido por uma lente, de 3 polegadas de diâmetro colocada junto a janela do criostato, com a amostra em seu foco. O sinal recolhido emergia da lente em um feixe de raios paralelos e era desviado por um espelho plano, de aproximadamente 10 x 15 cm, que permitia, juntamente com uma lente de focalização, introduzir o sinal no espectrometro, no qual a *PL* seria então dispersada.

Para excitar a amostra usamos dois sistemas de laser. O primeiro sistema era formado por um laser de corante, usando o corante LD700, e bombeado por um laser de Kr^+ operando em suas linhas do vermelho. Este primeiro sistema podia ser sintonizado para fornecer fótons com energia entre 1,52 eV e 1,77 eV. Esta sintonia

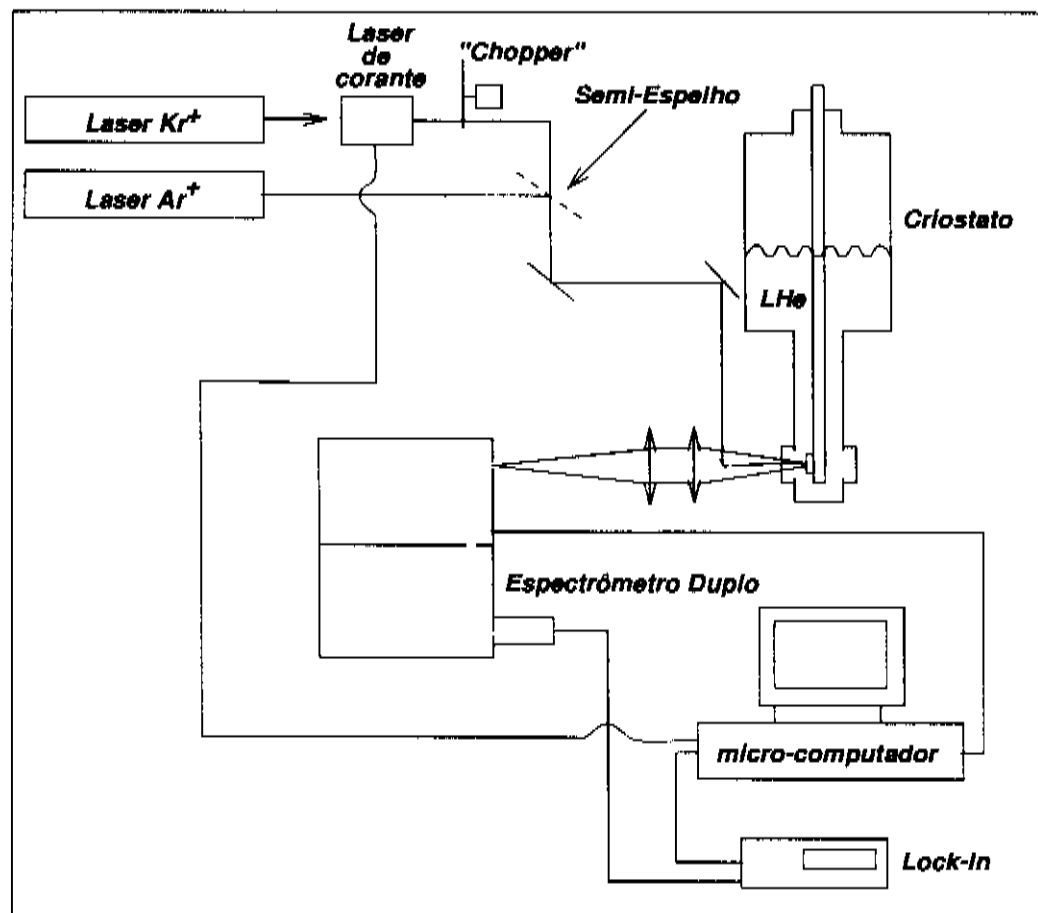


Figura 4.4: Arranjo experimental das medidas de *PL* e *PLE* com dupla excitação.

era feita por um micrômetro externo, que fazia girar um filtro bi-refringente colocado na cavidade do laser. A este micrômetro era acoplado um motor síncrono para as medidas de *PLE*. O segundo sistema era formado pelo mesmo laser de corante, usando agora o corante Rodamina 6G, e bombeado por um laser de Ar^+ operando em suas linhas 5145 Å e 4880 Å. Este sistema nos fornecia fótons com energia entre 1,91 e 2,2 eV. A amostra foi também excitada pelo laser de Ar^+ operando na linha 5145 Å.

O sistema de detecção do sinal era formado por uma fotomultiplicadora, colocada em uma câmara de resfriamento, e posicionada na fenda de saída do espectrômetro. A esta fotomultiplicadora estava ligado um sistema de contagem de fótons controlado por um micro computador, o qual fazia a aquisição de dados.

As medidas com campo magnético foram feitas na Universidade Autônoma de Madri, em um laboratório conjunto entre a universidade e o Conselho Nacional de Investigações Científicas da Espanha. Os experimentos contaram com a orientação e supervisão do Prof. Dr. Francisco Meseguer e a colaboração do Prof. Dr. Narcis Mestres. Saliento também a colaboração do Prof. Dr. José Sánchez-Dehesa na discussão dos dados experimentais e na realização de cálculos na Espanha.

Medidas de *PL* e de *PLE*, sem a aplicação de campo magnético, foram realizadas no Brasil com o uso de um laser de corante com cavidade em anel, usando o corante LD700, e bombeado por uma laser de Kr^+ operando em suas linhas do vermelho. A figura 4.4 mostra o esquema do arranjo experimental. Neste caso estávamos interessados em realizar medidas com dupla excitação. As amostras foram colocadas em um criostato de imersão de He. O objetivo destas medidas foi o de usar o laser de Ar^+ como bombeio da amostra, no sentido de alterar suas características, e o laser de corante como prova dos efeitos deste bombeio. Para tal detectamos apenas o sinal de *PL* que era gerado pela excitação do laser de corante. Isto foi feito da seguinte forma. O feixe do laser de corante foi modulado com o uso de um "chopper" em uma determinada frequência f_0 . O sinal de *PL* gerado pelo corante tinha, portanto, a mesma frequência f_0 . O sinal era detectado por um amplificador sintonizável "Lock-In" capaz de medir apenas o sinal com a frequência f_0 . Para obtermos a *PLE* um motor de passo controlado pelo computador foi conectado ao

micrômetro do laser de corante. Toda a aquisição de dados foi feita pelo computador.

Passamos a seguir a discutir os resultados experimentais.

Capítulo 5

Apresentação e Discussão dos Resultados Experimentais

5.1 Medidas com dupla excitação. Diminuição da densidade do 2DEG.

A idealização destas medidas teve como objetivo caracterizar as mudanças, geradas no sistema *n-MDQW* pela excitação por fótons com energia acima do “gap” da liga, de maneira mais completa do que a realizada anteriormente. Para tal, foram feitas medidas de *PL* e *PLE* de prova. Entendemos por *PL* e *PLE* de prova medidas feitas com uma excitação tal que o sistema estudado sofra o mínimo de perturbação possível. Um feixe de bombeio, que tem o objetivo de alterar as propriedades do sistema, proveniente do laser de Ar^+ (2,41 eV), e um feixe de baixa intensidade (0,04 mW), proveniente do laser de corante (excitação de prova), foram focalizados sobre a amostra e cuidadosamente superpostos. Modulando o feixe de prova com um “chopper” de frequência f_0 , e utilizando um amplificador “lock-in” para fazer a detecção, fomos capazes de medir apenas os sinais de *PL* e *PLE* gerados pela excitação de prova. Esta excitação foi feita por fótons com energia de 1,77 eV, portanto abaixo do “gap” da liga, de modo a não perturbar os resultados. A partir deste momento sempre que nos referirmos a feixe, ou excitação de bombeio, estaremos falando do laser de Ar^+ . Determinamos através destes espectros, tomados sob dife-

rentes potências de bombeio, a diminuição da densidade do *2DEG* de maneira direta. Este efeito havia antes sido caracterizado por um deslocamento em direção ao azul da transição E0-HH0 [30]. Antes de apresentar os resultados experimentais, vamos discutir brevemente como podemos, a partir dos espectros de *PL* e *PLE* tomados sob as mesmas condições de excitação, determinar a densidade do *2DEG*.

Na figura 5.1 mostramos uma representação gráfica de como se dão os processos de absorção e emissão de luz em um sistema contendo um *2DEG*. A energia E_{abs} , definida na figura 5.1, corresponde à absorção de luz por uma transição que envolve os primeiros estados de energia disponíveis na banda de condução, ou seja, aqueles localizados na região do nível de Fermi. Chamamos E_{abs} de limiar de foto-excitação. Mostramos também a transição fundamental, cuja energia denominamos E_L . Lembramos aqui que transições radiativas interbandas ocorrem verticalmente no espaço $\vec{K}$. Logo, E_{abs} envolve estados de $\vec{K} \approx \vec{K}_f$, onde $\vec{K}_f$ é o vetor de onda de Fermi. Devido ao fato de assumirmos baixa população e relaxação plena dos buracos pesados, E_L envolve estados de $\vec{K} \approx 0$. A partir do gráfico vemos claramente que:

$$(E_{abs} - E_L) = \frac{\hbar^2 K_F^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 K_F^2}{2m_{hh}^*} \quad (5.1)$$

Desta expressão obtemos finalmente que:

$$\Delta E_s = E_F \left(1 + \frac{m_e^*}{m_{hh}^*} \right) \quad (5.2)$$

onde:

$$\Delta E_s = (E_{abs} - E_L) \quad (5.3)$$

expressões a partir das quais estimamos a densidade do *2DEG*. Ao adotarmos tal procedimento, devemos deixar claro que temos em mente transições interbanda, ou seja, desconsideramos quaisquer efeitos relacionados à interação Coulombiana e-h. Ao discutirmos os resultados da amostra 2 voltaremos a esta questão.

Vamos introduzir os resultados obtidos para a amostra 1. Na figura 5.2 mostramos espectros de *PL* tomados sem bombeio por laser de Ar^+ (espectro a), e com bombeio por laser de Ar^+ (espectro b). Notamos claramente o deslocamento da transição E0-HH0 em direção a altas energias, e o fato de que esta emissão

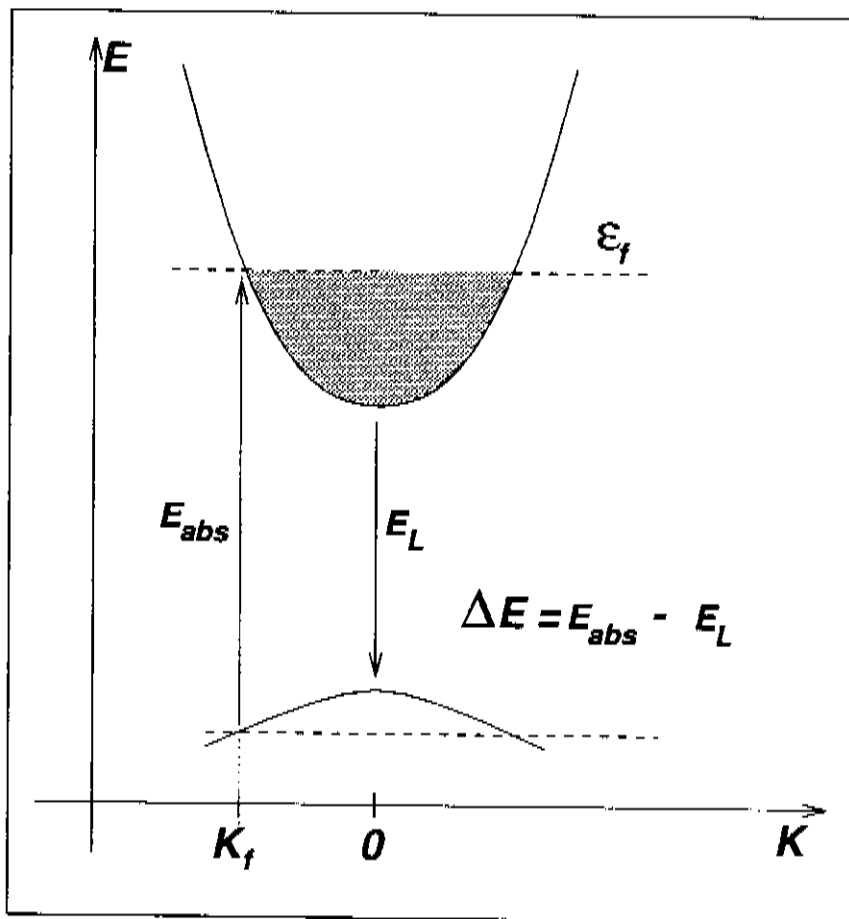


Figura 5.1: Representação gráfica do método usado na determinação da densidade do 2DEG.

Tabela 5.1: Resumos dos resultados das experiências de dupla excitação da amostra 1.

	0 mW Ar ⁺	600 mW Ar ⁺
E_L (eV)	1,511	1,5255
E_{abs} (eV)	1,543	1,533
E_F (meV)	27	6,3
n_s ($10^{11} cm^{-2}$)	7,5	1,8
E_R^{exp} (meV)	18	6

evidência no trabalho anterior, e que agora se mostra através da alteração da *PL* de prova. Tal efeito corresponde, portanto, a uma modificação do sistema físico em questão, não estando relacionado de maneira específica ao processo de *PL* gerado pela absorção de fótons com energia acima do “gap” da liga. O pico denominado D é o mesmo que foi atribuído à transição E1-HH0 na discussão feita na sessão 2.3. Mais adiante teremos algumas considerações sobre esta banda. Nos parece melhor, neste momento, introduzir os dados de *PLE*, obtidos sob as mesmas condições das *PL*'s mostradas. Na figura 5.3 apresentamos estes dados. Observamos dois efeitos. O primeiro diz respeito ao deslocamento do limiar de fotoexcitação, em direção a baixas energias, quando o bombeio é introduzido. O segundo se refere a alteração da forma de linha da *PLE* na região do limiar de fotoexcitação. Tratem-se do primeiro aspecto.

O deslocamento de E_{abs} para baixas energias reflete a diminuição do nível de Fermi, medido a partir do fundo da primeira sub-banda de condução. Usando o método descrito anteriormente podemos estimar a mudança na densidade do *2DEG* gerada pelo feixe de bombeio. Na tabela 5.1 apresentamos os resultados obtidos. Mostramos também a renormalização do “gap” fundamental do *n-MDQW* (E_R^{exp}) obtida “experimentalmente”. Esta quantidade é obtida fazendo-se a diferença entre o valor calculado da transição E0-HH0, sem a inclusão de efeitos de muitos corpos, e o valor medido experimentalmente.

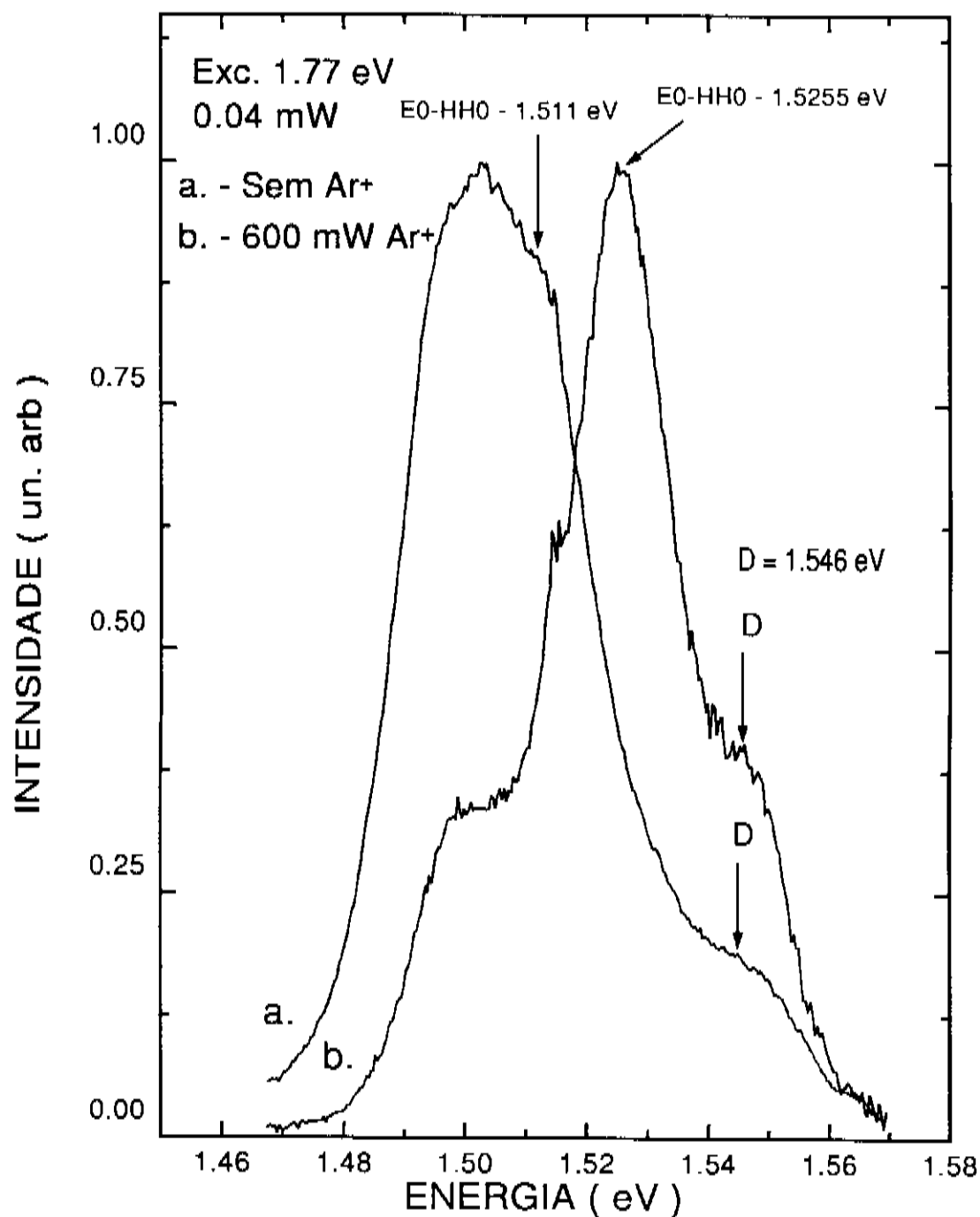


Figura 5.2: Espectros de *PL* para a amostra 1 obtidos com dupla excitação tomadas sem bombeio (0 mW de Ar⁺) e com bombeio.

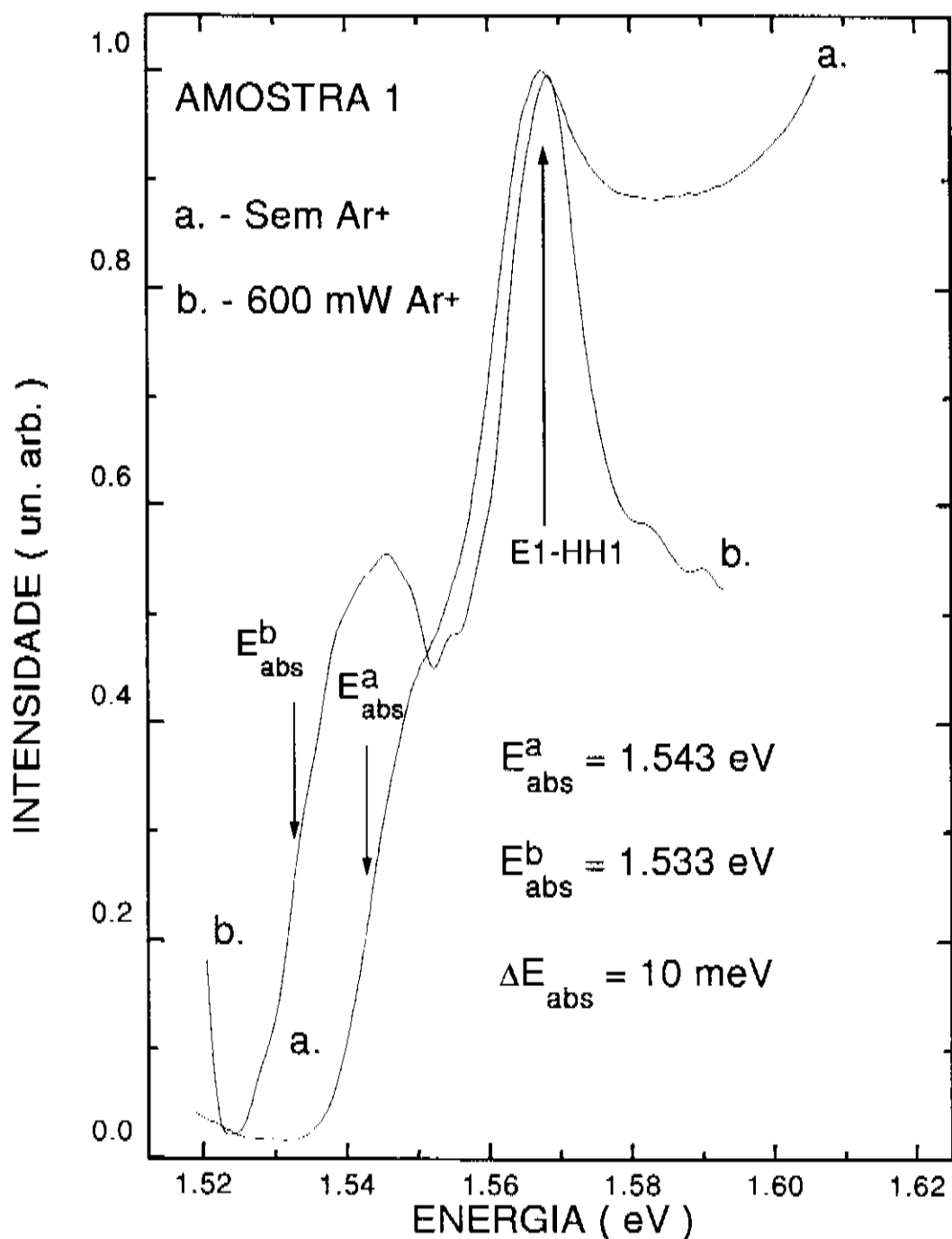


Figura 5.3: Espectros de *PLE* com dupla excitação para as mesmas condições das *PL*'s mostradas na figura 5.2.

Destes resultados fica claro, tanto de modo qualitativo quanto de modo quantitativo, que a fotoexcitação por fótons de energia superior a da barreira gera nesta amostra uma diminuição acentuada da densidade do *2DEG*. Outro fato a ser observado é que o valor da densidade, sem o bombeio por Ar^+ , é bastante superior à medida por efeito Hall, e tida como a densidade nominal da amostra. Este aumento na densidade, sob condições de fraca fotoexcitação, é bem conhecido e é uma consequência do efeito de fotocondutividade persistente (PPC) [53, 54]. Elétrons presos aos centros profundos de Si na liga (centros DX), são fotoionizados e se transferem para o poço de GaAs, aumentando a densidade do *2DEG*. Estes portadores permanecem no poço, mesmo depois que a iluminação é retirada, se a amostra é mantida a baixas temperaturas, tipicamente até 100 K. É portanto a densidade medida sob condições de baixa excitação que tomamos como sendo a densidade nominal da amostra. Passamos agora a discutir a alteração na forma de linha da *PLE*. Antes porém, faremos uma breve introdução a respeito de blindagem em sistemas 2D.

Em um sistema contendo um gás de elétrons a interação Coulombiana entre os portadores deve ser substituída pela interação Coulombiana blindada [55]. Isto se deve ao fato de que devemos considerar a resposta do nosso meio (gás de elétrons) a um potencial externo aplicado sobre ele. Seja $\Phi^{ext}(\vec{r})$ o potencial externo ao qual o gás de elétrons está sujeito. Pode-se mostrar [55] que existe uma relação simples entre a q -ésima componente de Fourier do potencial externo $\Phi^{ext}(\vec{q})$ e a q -ésima componente de Fourier do potencial real que age sobre o meio, $\Phi(\vec{q})$. Esta relação é:

$$\Phi(\vec{q}) = \frac{\Phi^{ext}(\vec{q})}{\varepsilon(\vec{q})} \quad (5.4)$$

onde $\varepsilon(\vec{q})$ é a função dielétrica dependente do vetor de onda. A blindagem age no sentido de transformar a interação Coulombiana de longo alcance em uma interação de alcance mais curto. O caso de uma carga de prova puntiforme em um gás de elétrons tri-dimensional é bastante representativo. O potencial Coulombiano original, quando blindado, se transforma em um potencial do tipo Yukawa [55], e portanto de curto alcance. Isto se reflete de forma bastante clara na interação c-h

responsável pela formação do exciton. Sob o efeito da blindagem esta interação se torna fraca o suficiente para que a formação do exciton seja inibida, de modo que os processos óticos passam a ser transições diretas entre a banda de condução e a banda de valência (banda-banda). A dimensionalidade do sistema tem forte influência sobre o efeito de blindagem. Para uma carga puntiforme em um sistema puramente 2D, o comportamento assintótico do potencial blindado visto pelos elétrons, tem uma dependência cúbica inversa [21]. A blindagem em duas dimensões é menos efetiva, no sentido de que a interação Coulombiana terá um alcance maior em 2D do que em 3D.

Passemos à análise da mudança da forma de linha da *PLE* da amostra 1. Para uma densidade de $7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, mesmo em um sistema 2D, a interação Coulombiana e-h se torna bastante fraca de modo que o espectro de fotoexcitação reflete, no que diz respeito a E0 e HH0, uma transição banda-banda. No espectro tomado a esta densidade (figura 5.3 , espectro a) não observamos nenhuma estrutura relacionada ao limiar de fotoexcitação. O espectro mostra apenas a forte ressonância correspondente à transição E1-HH1. O espectro, na região do limiar de absorção, reflete basicamente a densidade conjunta de estados (E0-HH0), não mostrando efeitos de interação e-h. A estrutura fraca, porém clara, que aparece nesta região quando o bombeio por laser de Ar^+ é introduzido (figura 5.3, espectro b), surge devido a diminuição do efeito de blindagem, que, por sua vez, é gerada pela diminuição na densidade do *2DEG*. A interação e-h se torna mais efetiva a ponto dela se refletir no espectro de *PLE*. Aqui contribui o fato de estarmos tratando com um sistema quase 2D onde a blindagem é menos efetiva. Este comportamento é também uma “assinatura” da diminuição na densidade do *2DEG*. Sua importância ficará evidenciada quando discutirmos os dados com excitação de energia abaixo do “gap” da liga. Dentro desta colocação, lembramos que o método descrito para a determinação da densidade do *2DEG* somente é válido quando tratamos de transições banda-banda. Sob ação do bombeio (menor densidade) determinamos a diminuição da densidade do *2DEG* de modo qualitativo. Este valor está sendo sub-estimado pois a interação e-h tende a trazer o limiar de fotoexcitação para baixas energias, fornecendo portanto um valor menor para E_f . Este efeito ficará claro nos resultados da amostra

Cabe, neste momento, uma discussão a respeito da banda D. Como dito anteriormente esta emissão foi associada a transição E1-HH0. Segundo a interpretação dada, a sub banda E1 se tornava ocupada, devido ao PPC, quando a amostra era iluminada por laser de Ar^+ . Segundo o argumento, tal ocupação tornava o potencial do poço assimétrico a ponto de que a transição E1-HH0 fosse mais intensa que a E0-HH0. Nos dados aqui apresentados a banda D está presente, com intensidade pequena, mesmo quando a amostra é iluminada por laser de Ar^+ . Quando comparamos espectros tomados, sob baixa excitação pelo feixe de bombeio (não mostrados), e alta excitação, não observamos nenhuma alteração significativa na intensidade de D. Desta forma a modificação na intensidade de D não está associada a uma alteração do sistema físico, e sim ao fato da *PL* observada estar sendo gerada por fótons de energia acima da barreira. Lembramos ainda que o valor calculado para a integral de superposição entre E1 e HH0 é de 0,26 para $n_s = 7,5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, valor não compatível com a intensidade observada de D no espectro apresentado na figura 2.7. O fato de D ser muito mais intensa quando a *PL* detectada provem da excitação por laser de Ar^+ deve, portanto, ter outra origem. Passamos os resultados obtidos para a amostra 2.

Na figura 5.4 mostramos os espectros de *PL* obtidos sem bombeio (espectro a) e com bombeio (espectro b) para a amostra 2. Não notamos uma alteração tão grande nas características espectrais como no caso da amostra 1. A transição fundamental se desloca apenas cerca de 1 meV quando um bombeio de 60 mW de Ar^+ é por nós introduzido. A diminuição na densidade do *2DEG* ficará qualitativamente clara a partir dos espectros de *PLE* mostrados na figura 5.5. O primeiro aspecto que notamos é a diferença entre as formas de linha da *PLE* desta amostra em comparação com a da amostra 1. O espectro de *PLE* apresenta um pico extremamente forte na região do limiar de absorção, característico de uma transição intermediada por uma interação Coulombiana efetiva entre os pares e-h. Nesta amostra a menor densidade do *2DEG* e o fato do sistema ser quase 2D contribuem para que, apesar da presença dos portadores no poço a interação Coulombiana e-h se manifeste. É também notado o deslocamento para baixas energias do limiar

Tabela 5.2: Resumo dos resultados obtidos com dupla excitação para a amostra 2. O valor “experimental” da renormalização do “gap” também é mostrado.

	0 mW Ar ⁺	60 mW Ar ⁺
E_L (eV)	1,5247	1,5254
E_{abs} (eV)	1,534	1,526
E_F (meV)	7,8	0,5
n_s ($10^{11} cm^{-2}$)	2,2	0,14
E_R^{exp} (meV)	6,7	6,9

de absorção com a introdução do bombeio. Embora não possamos quantificar a diminuição da densidade do *2DEG* qualitativamente ela fica perfeitamente caracterizada. Na tabela 5.2 mostramos os resultados obtidos, levando-se em conta o limiar de absorção tomado exatamente como no caso da amostra 1.

Perccebemos que o valor da densidade sem a introdução do bombeio é menor que o valor medido por efeito Hall . Isto é inconsistente com o efeito PPC, que está bem caracterizado nestas estruturas, e que se observa de forma bastante clara no caso da amostra 1. Notamos também que a renormalização “experimental” por nós obtida é praticamente a mesma nos dois casos. Na verdade este valor (da ordem de 7 meV) é por nós associado, em grande parte, à energia de ligação do exciton e não à renormalização do “gap”. Podemos apesar destes fatos caracterizar a diminuição na densidade do *2DEG* quando o bombeio por Ar⁺ é introduzido.

A experiência com dupla excitação nos permitiu caracterizar de forma inequívoca a diminuição na densidade do *2DEG* quando as amostras são excitadas por fótons com energia superior ao “gap” da liga, corroborando a interpretação do trabalho anterior. Apontamos também uma característica importante que ocorre no espectro de *PLE* da amostra 1 quando a densidade do *2DEG* é reduzida, qual seja, o aparecimento de evidencia da interação Coulombiana entre os pares e-h gerados. Este se manifesta pelo aparecimento de uma estrutura em forma de pico na região do limiar de absorção. Colocamos também em dúvida a interpretação anterior para

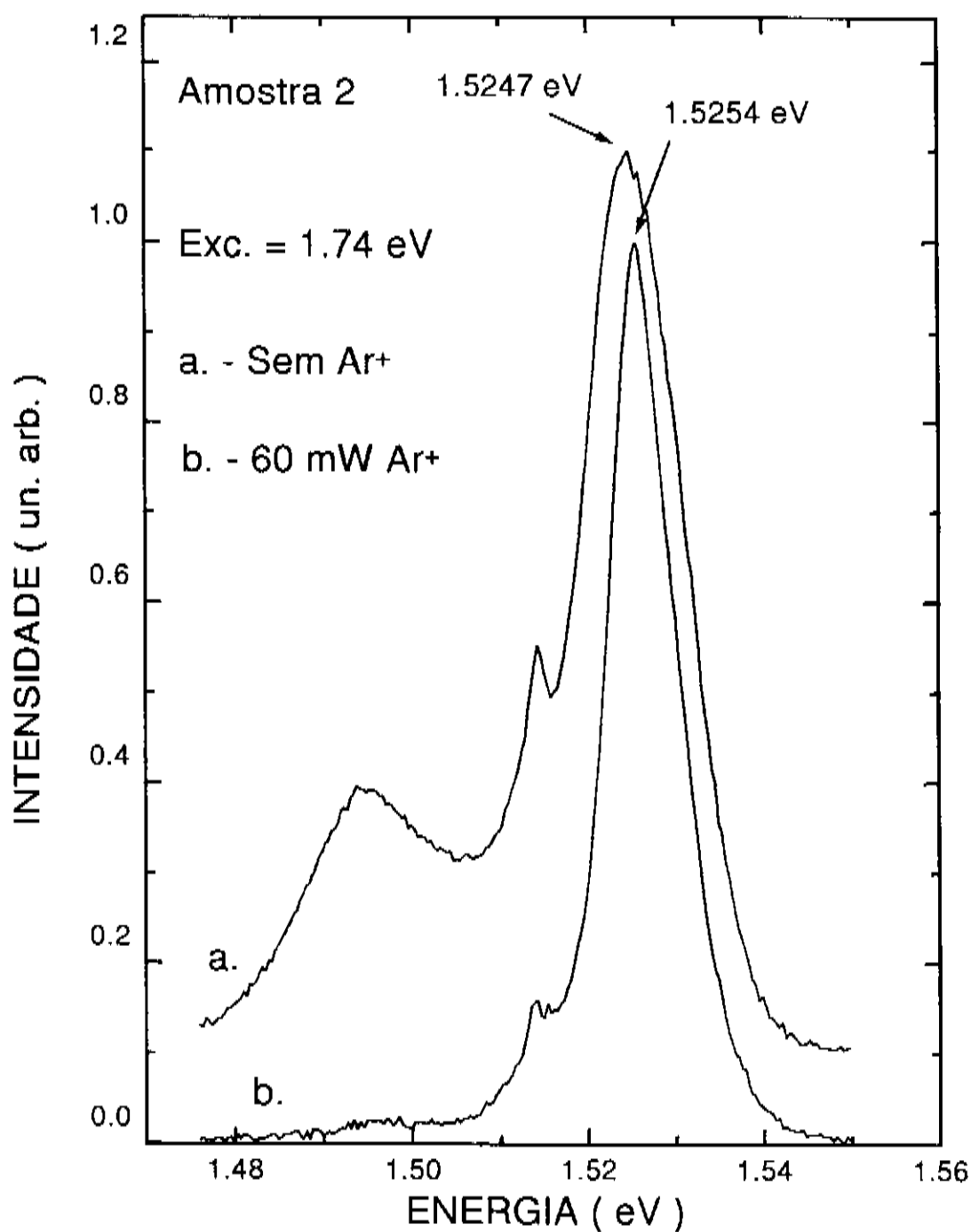


Figura 5.4: Espectros de *PL* para a amostra 2 obtidos com dupla excitação.

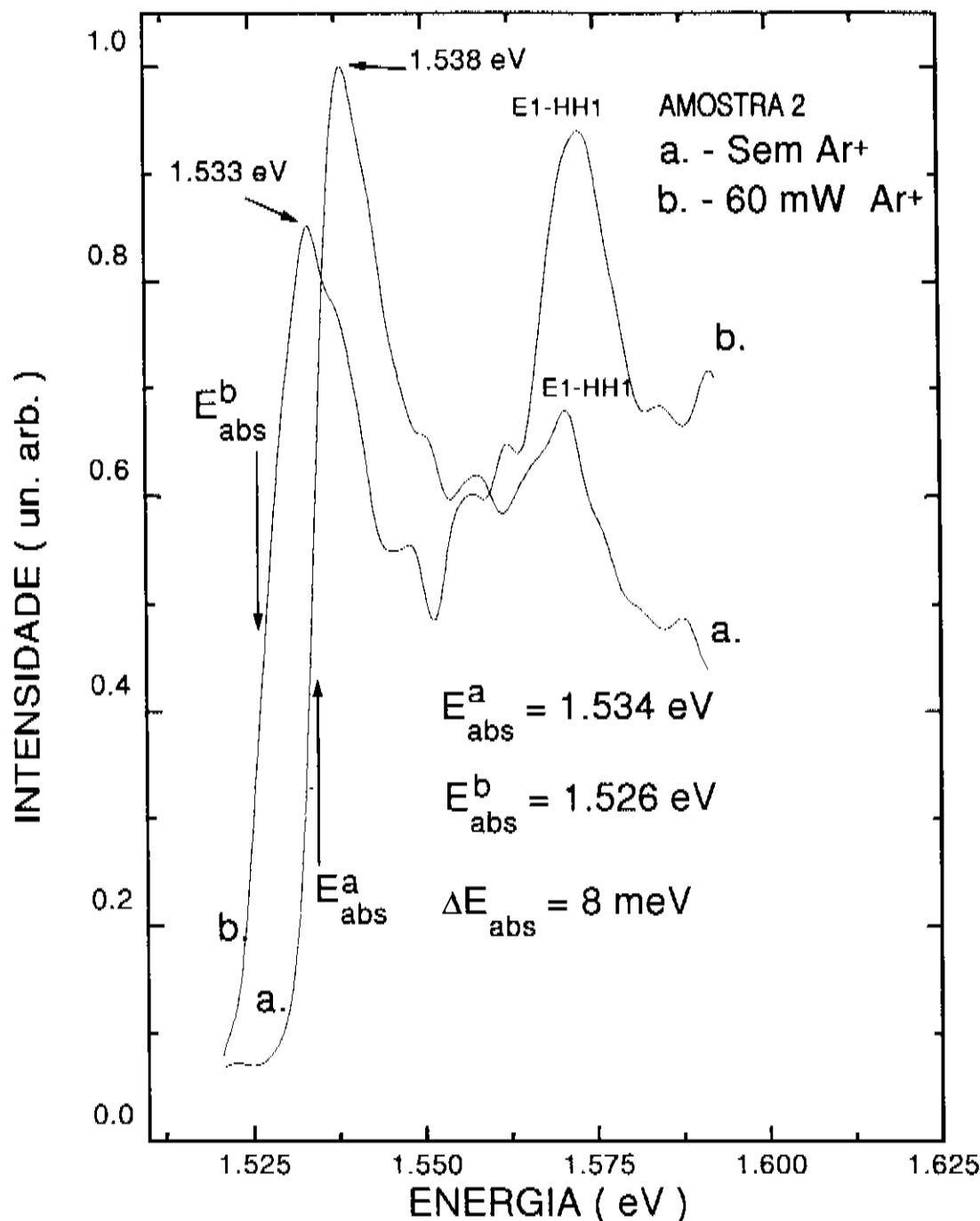


Figura 5.5: Espectros de *PLE* para a amostra 2 obtidos sem (espectro a.) e com bombeio (espectro b.).

a origem de D. O aumento na intensidade de D parece estar associado ao fato da *PL* ser gerada a partir da absorção de fótons com energia superior ao “gap” da liga. Ficou evidenciada a característica excitônica da luminescência da amostra 2.

Passemos a seguir a fazer a discussão dos resultados de *MPL* para a amostra 1 sob baixa excitação por fótons com energia abaixo do “gap” do $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$.

5.2 Magneto Fotoluminescência sob Baixa Excitação

Os resultados de *MPL* sob baixa excitação foram obtidos com o uso do sistema de laser de corante (LD700) e magneto supercondutor já descrito anteriormente. Sintonizamos o laser de modo a obter fótons com energia de 1,69 eV, e estimamos a densidade de potência de excitação como sendo de $0,2 \text{ W/cm}^2$. Realizaremos a discussão dos resultados concomitantemente com sua apresentação e tendo em mente o apresentado no capítulo 3, sessão 3.2, sobre os efeitos da aplicação de um campo magnético perpendicular a um sistema contendo um 2DEG. Neste trabalho consideramos as massas efetivas tomadas da referência 14. São estas:

$$m_e^* = 0,067m_0 \quad (5.5)$$

$$m_{hh}^* = 0,34m_0 \quad (5.6)$$

$$m_{lh}^* = 0,09m_0 \quad (5.7)$$

a partir destes valores calculamos $\hbar\omega_c$ para cada tipo de portador considerado. Obtemos:

$$\hbar\omega_c^e = 1,73\text{meV/Tesla} \longrightarrow \text{elétrons} \quad (5.8)$$

$$\hbar\omega_c^{hh} = 0,34\text{meV/Tesla} \longrightarrow \text{buracos pesados} \quad (5.9)$$

$$\hbar\omega_c^{lh} = 1,29\text{meV/Tesla} \longrightarrow \text{buracos leves} \quad (5.10)$$

O que esperamos, a medida que aumentamos o campo magnético aplicado sobre a amostra, é observar o desdobramento da luminescência nas componentes correspondentes a transições entre níveis de Landau ocupados. Dentro desta análise

devemos levar em conta que, devido a baixa intensidade de excitação e baixa temperatura (2K), apenas a primeira sub-banda de valência correspondente aos buracos pesados (HH0) estará óticamente ocupada. Estamos no regime de relaxação plena dos portadores fotoexcitados. Na figura 5.6 apresentamos espectros representativos da MPL, entre 0 T e 10 T, para a amostra 1. Na *PL*, tomada a campo zero, a seta indica a transição fundamental E0-HH0. Observamos a presença da banda D mesmo para excitação bem abaixo do "gap" da liga. No espectro tomado a 5 T já vemos claramente o desdobramento da transição E0-HH0 em suas componentes de Landau, denominadas L0, L1 e L2. Vale lembrar que cada sub-banda dará origem a uma família de níveis de Landau. Em nossa nomenclatura L0 corresponde à transição entre os níveis de Landau de $\nu = 0$, originados de E0, e os níveis de Landau de $\nu = 0$, originados de HH0. Logo, L1 corresponde aos *LL*'s $\nu=1$ e L2 aos de $\nu=2$, gerados a partir de E0 e HH0. Observamos na figura a evolução do espectro a medida que aumentamos o campo magnético. Os picos denominados EX correspondem a transições excitônicas provenientes do GaAs "bulk".

Quando o campo é elevado os picos L0, L1 e L2 se deslocam para altas energias e suas intensidades se alteram. Os picos L1 e L2 diminuem sua intensidade em relação a L0. Ainda a medida que o campo é elevado os níveis de Landau aumentam linearmente em energia, de acordo com $\hbar\omega_c$, de tal forma que os estados superiores se depulam a medida que cruzam o nível de Fermi. Este é fundamentalmente um processo de transferência de portadores dos *LL*'s de $\nu > 0$ para o nível fundamental de $\nu = 0$. O pico L0 ganha intensidade às custas da diminuição da intensidade (por desocupação) de L1 e L2. Esta é a análise válida para os estados gerados a partir de E0, sub banda já ocupada por um *2DEG*. Note-se também que os picos, principalmente L0, se tornam mais estreitos. Este é um efeito gerado também pelo aumento na densidade de estados com o campo.

No que diz respeito aos *LL*'s gerados a partir de HH0, a medida que os *LL*'s de $\nu > 0$ aumentam em energia a probabilidade destes se tornarem ocupados pela fotoexcitação diminui. Deste modo, uma transição mais elevada, por exemplo E0 ($\nu = 1$) $\rightarrow$ HH0 ($\nu = 1$), diminui muito em probabilidade, por desocupação do estado final da transição. Por sua vez os portadores fotogerados relaxam para

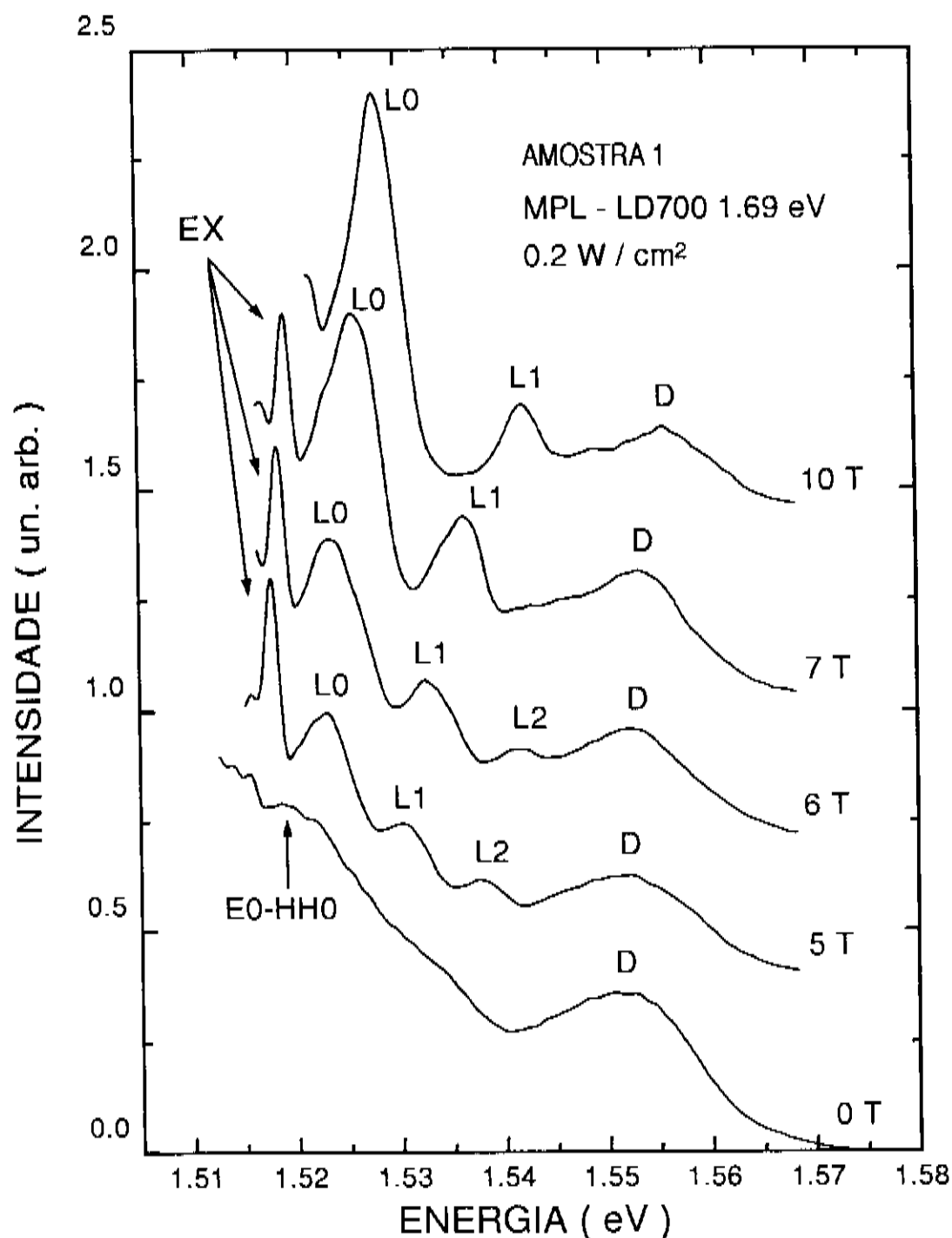


Figura 5.6: Espectros representativos da magneto fotoluminescência para a amostra 1. Note o desdobramento de E0-HH0 nas componentes de Landau.

HH0 ($\nu = 0$), estado fundamental de valência. A desocupação dos estados inicial e final das transições de energia mais elevada, corresponde ao mecanismo básico que explica a redução na intensidade de L1 e de L2, com o eventual desaparecimento destes picos.

Na figura 5.7 apresentamos um resumo dos dados de *MPL* a partir do qual aprofundaremos a nossa análise. Mostramos a dependência com o campo da posição em energia dos picos de *MPL* e as extrapolações lineares a campo zero dos ajustes mostrados. Dentro do modelo por nós adotado o valor teórico das inclinações das retas, que representam esta dependência é dado por:

$$\alpha_{\nu} = (\nu + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^e + (\nu + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^{hh} \tag{5.11}$$

onde ν é o índice dos níveis de Landau entre os quais a transição ocorre. Estes valores são, para o nosso caso :

$$\alpha_{L0} = 1,04 \text{ meV/Tesla} \tag{5.12}$$

$$\alpha_{L1} = 3,12 \text{ meV/Tesla} \tag{5.13}$$

$$\alpha_{L2} = 5,2 \text{ meV/Tesla} \tag{5.14}$$

Voltemos à figura 5.7. A transição L0 tem um comportamento que pode ser bem descrito por um ajuste linear, apresentando uma inclinação de 1,1 meV/T , portanto consistente com α_{L0} calculado acima. Nosso modelo se aplica de maneira bastante razoável ao comportamento de L0, tanto no que diz respeito à linearidade, quanto no que concerne ao valor da inclinação da reta que representa tal transição. Tomamos α_{L0} medido como base para análise posterior. É portanto um procedimento seguro tomar a extrapolação a campo zero de L0 como uma medida do “gap” ótico fundamental do n-MDQW. Lembramos ainda que na sessão anterior ficou claro que os efeitos excitônicos não são importantes neste caso e a extrapolação nos fornece diretamente a quantidade almejada. Note-se que o valor do “gap” obtido por este procedimento é mais preciso do que o extraído do espectro a campo zero. Isto vem da observação de que esta transição é alargada, e do fato de que emissões provenientes do GaAs estão a ela convoluídas. Nas sessões subsequentes ficará clara a vantagem de se adotar este método.

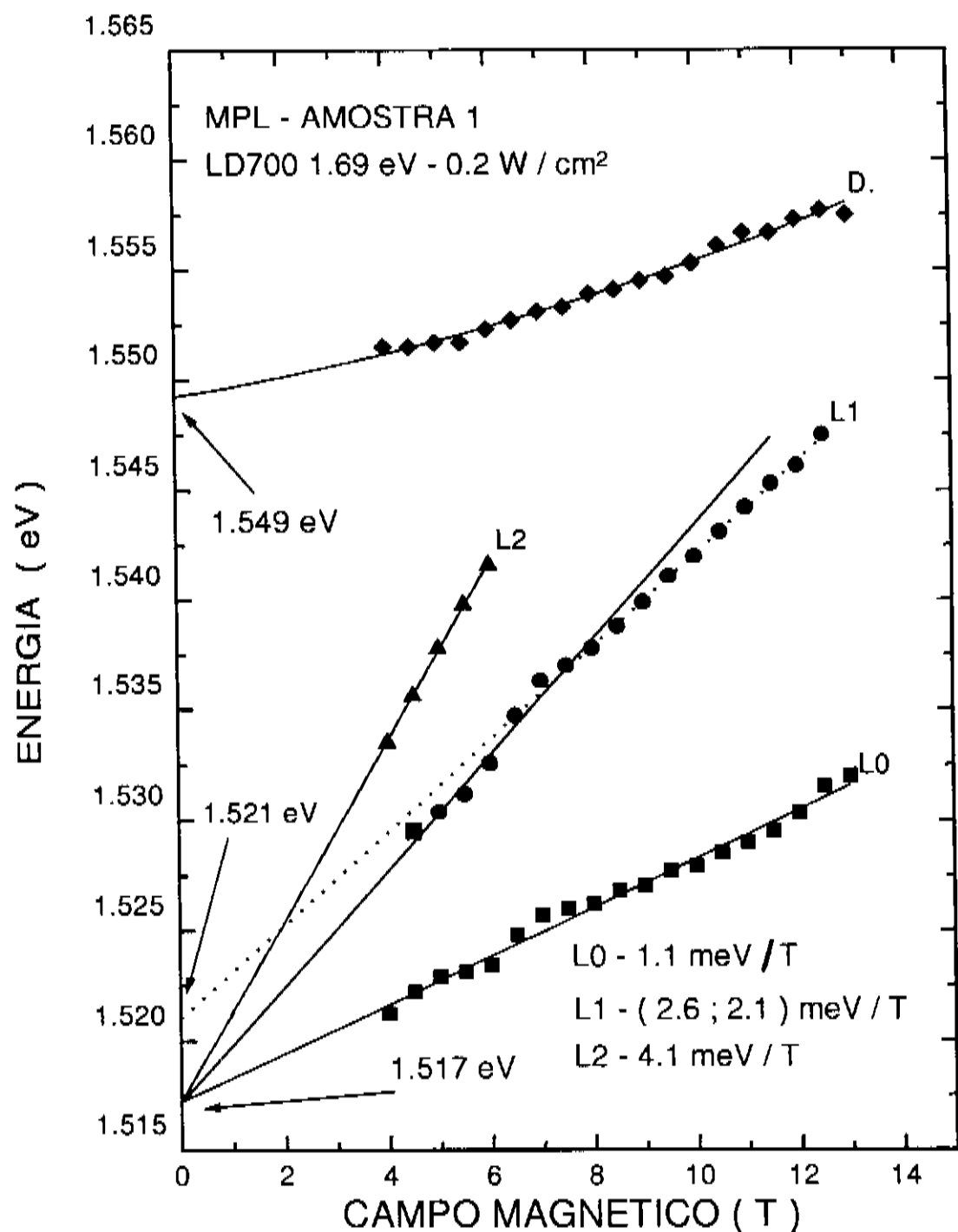


Figura 5.7: Dependência dos picos de *MPL* da amostra 1 com o campo magnético. São mostradas também as extrapolações lineares das energias a campo zero.

Quanto às linhas L1 e L2 notamos desvios em relação ao comportamento esperado dentro de nosso modelo. O pico L1 apresenta desvio, tanto em relação à linearidade, quanto no que diz respeito à inclinação predita. Podemos determinar duas regiões de campo. Uma que chamamos de campo médio, entre 4,5 T e 7,5 T, na qual L1 mostra uma inclinação de 2,6 meV/T e converge, a campo zero, para o “gap” fundamental, origem comum das transições de *MPL* mostradas. Observa-se um desvio de 22 % em relação ao coeficiente angular teórico ($3 \times \alpha_{L0} = 3,3 \text{ meV/T}$). Em uma segunda região, denominada de campo alto, entre 8 T e 12,5 T, L1 mostra uma inclinação de 2,1 meV/T e converge, a campo zero, para uma energia de 1,521 eV, 4 meV superior a da origem comum das transições. Temos, nesta região um desvio de 36 % em relação à inclinação esperada. O pico L2, embora apresente um comportamento linear na dependência de sua energia com o campo, mostra um coeficiente angular de 4,1 meV/T, representando um desvio de 25 % em relação à teórica ($5 \times \alpha_{L0} = 5,5 \text{ meV/T}$). Este pico converge, como esperado, para 1,517 eV, origem comum das transições.

Tratemos primeiramente da discrepância existente entre os coeficientes angulares dos ajustes lineares. Parte da explicação para este comportamento recai sobre a mistura entre os estados de valência. O acoplamento entre as bandas de valência deve ser levado em conta tanto quando se diagonaliza o hamiltoniano correspondente ao potencial que confina os portadores, quanto ao se resolver o hamiltoniano com a inclusão do campo magnético. No segundo caso, a forte interação entre os estados $\Gamma_8(m_j = \pm \frac{1}{2})$ e $\Gamma_8(m_j = \pm \frac{3}{2})$ [37, 40], gera uma estrutura complexa para os níveis de Landau gerados a partir do primeiro estado confinado de buracos pesados. Estamos falando aqui de modificações geradas apenas nos *LL*'s de valência. Os desvios observados para L1 e L2 ocorrem no sentido diminuir o coeficiente angular da dependência linear com o campo. Isto significa ir em direção a massas efetivas maiores, já que $\hbar\omega_c$ é inversamente proporcional à massa do portador. Eliminando completamente a contribuição dos buracos na dependência com o campo (massa infinita) obteríamos para L1 uma inclinação de cerca de 2,7 meV/T e para L2 aproximadamente 4,2 meV/T. Entretanto, não é razoável assumir tal proposição. Somos levados portanto a considerar que parte destes desvios tem sua origem no

comportamento dos níveis de Landau gerados à partir de E0.

Efeitos de muitos corpos sabidamente renormalizam as massas efetivas [56, 57, 58]. Isto vem do fato de que, a correção na autoenergia dos portadores, é uma função $\Sigma(\kappa, \epsilon)$ e, portanto, dependente tanto do vetor de onda quanto da energia do portador em questão [21, 58, 59]. Este efeito se torna mais pronunciado em sistemas 2D, onde a blindagem da interação Coulombiana é menos efetiva [21, 58]. Na referência [59] se desenvolve uma teoria de muitos corpos do espectro magneto-ótico de poços quânticos com dopagem tipo $\underline{n}$. A correção nas autoenergias $\Sigma^j(n)$ depende do índice $\underline{n}$ do nível de Landau e de sua ocupação. O índice j diz respeito a níveis gerados a partir de elétrons ou buracos. Tendo em vista o discutido acima, vemos que as inclinações dos ajustes lineares, pelos quais aproximamos a dependência com o campo de nossas transições, não refletem apenas o valor de $\hbar\omega_c$ obtido a partir das massas efetivas, e sim uma soma complexa de efeitos. Não é surpreendente portanto que observemos tais desvios.

Tratemos agora do desvio em relação à linearidade do pico L1 (E0-HH0, $\nu = 1$), o qual apresenta claramente duas regiões com inclinações distintas. A teoria de muitos corpos do espectro magneto ótico desenvolvida na referência [59] não explica desvio semelhante de E0-HH0($\nu = 1$) de um dado experimental apresentado no próprio artigo. Desvio deste tipo, apresentado neste caso pela transição E0-HH0($\nu = 0$) [39], foi discutido em termos da formação do magneto-exciton, que nada mais é do que a recuperação da interação Coulombiana e-h induzida pela ação do campo. Em plasmas carregados, se consideramos um buraco na presença do mar de Fermi, existe um estado ligado relativamente ao nível de Fermi e que é denominado "exciton de Mahan" [60, 61]. Ao considerarmos tal efeito no espectro magneto ótico de poços contendo um plasma carregado, obtemos um comportamento que corresponde a alteração da inclinação, das energias das transições entre níveis de Landau, para certos valores de campo [61]. Isto ocorre na região de campos para os quais os níveis de Landau de E0 anti-cruzam tal estado.

Neste trabalho não temos dados suficientes para elucidar tais efeitos e não é este o ponto central desta tese. Tecemos estes comentários no sentido de apontar efeitos importantes que devem ser levados em conta em uma análise de resultados de

MPL, quando temos um 2DEG de alta densidade no poço. Lembramos ainda, que devido ao fato da blindagem da interação Coulombiana ser mais efetiva nos sistemas 2D, efeitos de muitos corpos provenientes da interação entre os elétrons do 2DEG se tornam mais importantes que no caso de sistemas 3D.

O fato fundamental que ressaltamos é que L_0 se mostra, pelo seu comportamento nos resultados experimentais apresentados, um bom candidato para se obter, a partir da extrapolação de medidas de MPL a campo zero, o “gap” fundamental do n-MDQW. É neste ponto que iremos centralizar a nossa discussão.

Nos parece também conveniente salientar que o pico $\underline{D}$ não apresenta o comportamento esperado para uma transição partindo da segunda sub-banda de elétrons. Não observamos nem o seu desdobramento em transições entre níveis de Landau nem a sua despopulação a qual é esperada para altos campos. Voltaremos a estas questões envolvendo a banda $\underline{D}$ futuramente.

5.3 Magneto Luminescência sob Alta Excitação com LD700

Passamos neste momento a apresentar os dados de MPL obtidos com a mesma energia de excitação dos dados mostrados anteriormente , porém com uma densidade de potência bem mais elevada. Enquanto os dados anteriores foram obtidos com $0,2 \text{ W/cm}^2$ de excitação , os dados que passamos a discutir foram obtidos com uma excitação de 30 W/cm^2 . Os espectros de MPL são mostrados na figura 5.8 para alguns campos representativos. O espectro tomado a campo zero está bastante alargado em seu lado de alta energia em relação ao obtido sob baixa excitação. Isto ocorre devido a maior ocupação dos níveis de buracos pesados, gerada pela alta excitação. Observamos claramente o desdobramento de E_0-HH_0 nas transições entre níveis de Landau, e mudança nas intensidades relativas entre os picos de MPL . Comparando os dados obtidos sob alta e baixa excitação observamos dois fatos. A transição L_2 permanece presente até um campo de 11 T (espectro não mostrado), enquanto que no caso anterior esta transição só era observada até um

campo de 6 T. Surge uma nova transição denominada L3 a energias mais elevadas. Estes fatos são explicados justamente com base na maior população dos níveis de buracos pesados . Uma maior população de HH0 permite que os LL 's de $\nu > 0$ estejam ocupados para campos mais altos. Desta forma surge uma transição (L3) envolvendo os LL 's de E0 e HH0 de $\nu = 3$ e a transição envolvendo níveis de $\nu = 2$ permanece presente até campos mais elevados.

Estes efeitos ficam mais claros com a apresentação da figura 5.9, a qual resume os dados de *MPL* sob alta excitação. Nesta figura representamos o diagrama da dependência da posição dos picos de *MPL* com o campo magnético aplicado. Como no caso anterior tomamos a extrapolação da transição L0, que mais uma vez se apresenta compatível com o modelo por nós adotado, como medida do "gap" fundamental da estrutura. Fica bastante claro na figura a convergência dos picos para uma origem comum a campo zero, isto é, a recombinação entre o 2DEG ocupando E0 e os buracos pesados em HH0. Estes picos são transições entre famílias de LL 's geradas a partir de E0 e de HH0. No que diz respeito às inclinações, L0 se mantém coerente com o modelo por nós adotado. Quanto aos demais picos seguem existindo os desvios em relação a inclinação predita em nosso modelo e notamos que elas se alteram em relação as dos espectros anteriores. O pico L1 apresenta agora um comportamento adequado quanto a sua linearidade convergindo, como dito anteriormente, para o ponto comum E0-HH0.

Dentre os resultados de *MPL* apresentados vamos focalizar um resultado absolutamente não esperado, e que diz respeito à mudança do "gap" fundamental da estrutura. Notamos que a convergência de L0 se dá para uma energia de 1,5196 eV e portanto 2,6 meV superior a obtida no caso em que baixa excitação foi empregada. Este deslocamento em direção a altas energias, quando a potência de excitação é elevada, é surpreendente tendo-se em conta que a energia dos fótons que excitam a amostra é de 1,69 eV, e portanto bem abaixo do "gap" do $Al_{0,36}Ga_{0,64}As$ (2,01 eV). Ora, qualquer alteração no "gap" fundamental que fosse eventualmente esperada, deveria ocorrer exatamente em sentido oposto. Visto que estamos introduzindo uma população extra de pares e-h, gerados diretamente e, a princípio exclusivamente no poço de GaAs, esta população adicional agiria no sentido de introduzir uma

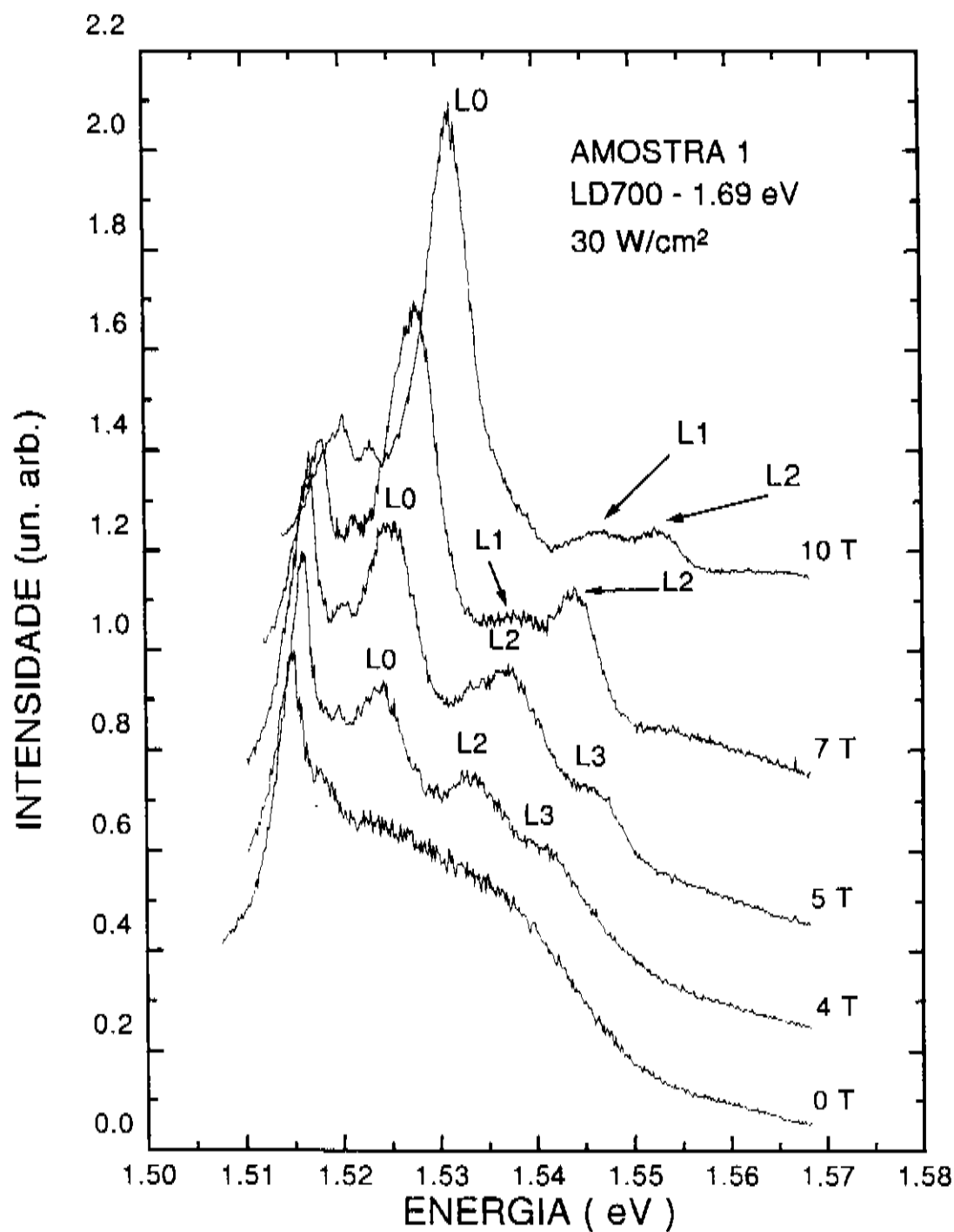


Figura 5.8: Espectros de *MPL* para excitação abaixo do “gap” da barreira e densidade de potência de excitação de 30 W/cm². Dados referentes à amostra 1.

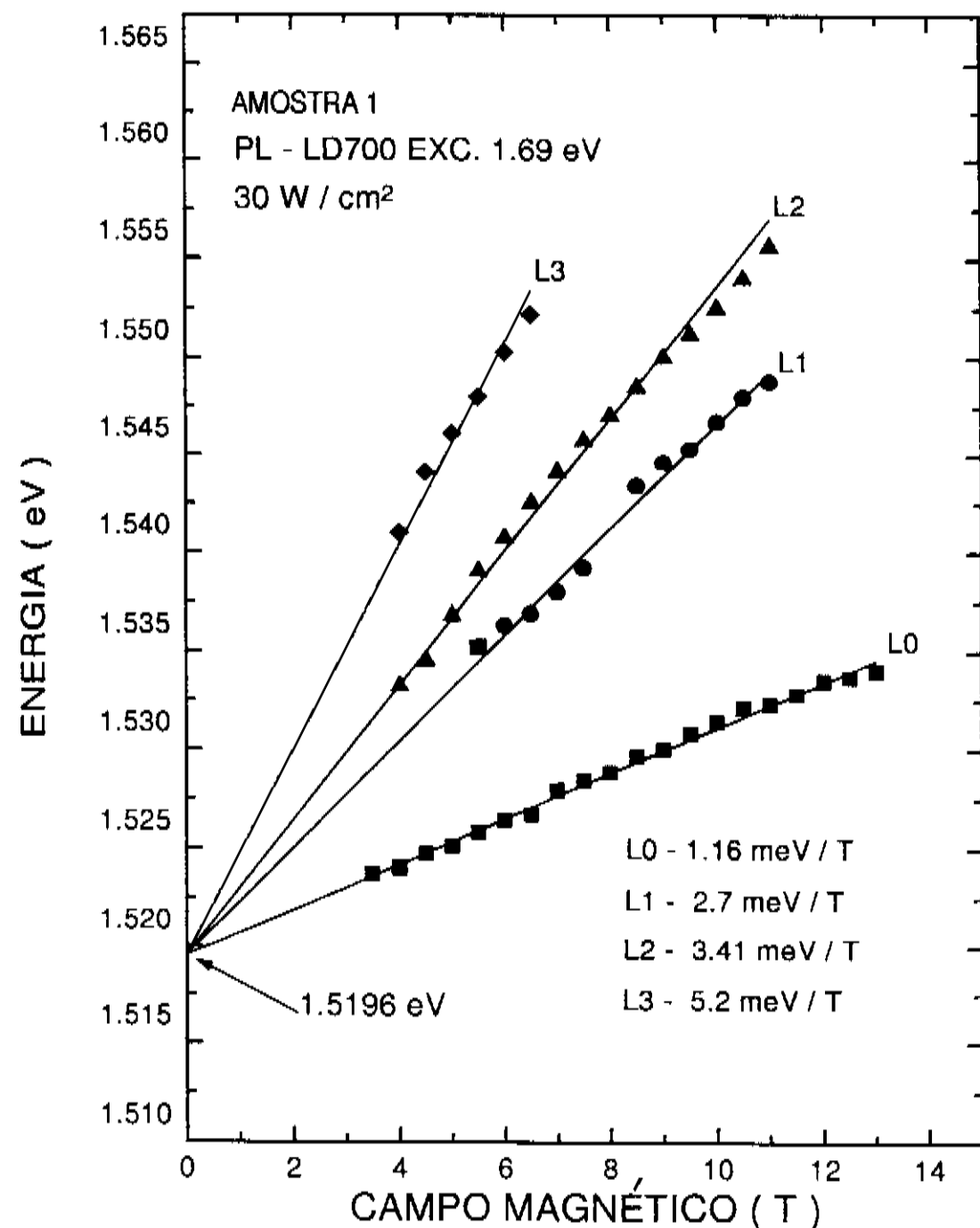


Figura 5.9: Dependência com o campo magnético dos picos de *MPL* tomados sob alta excitação por LD700.

renormalização adicional no “gap” de nossa estrutura. Poderíamos, neste momento, questionar a validade de assumir uma precisão tal que nos permita determinar um deslocamento tão pequeno desta energia. Para esclarecer quaisquer dúvidas a este respeito graficamos na figura 5.10 , o pico L0 obtido sob as duas condições de fotoexcitação. Fica evidente a ocorrência do deslocamento. Este é praticamente rígido, no sentido de que todo o conjunto de pontos representando L0 se desloca em direção ao azul, quando aumentamos a potência de excitação. Cabe aqui ressaltar que sem a utilização da *MPL* seria praticamente impossível determinar tal alteração de maneira confiável.

Nos cabe agora determinar a origem de tal efeito. Associamos este deslocamento a uma diminuição na densidade do 2DEG que seria gerada, por um mecanismo a ser desvendado, também por uma excitação com fótons com energia abaixo do “gap” da liga. Antes de prosseguir com tal hipótese, e de modo a caracterizar tal diminuição, tomamos o espectro de fotoexcitação de luminescência da amostra 1 sob baixa ($0,5 \text{ W/cm}^2$) e alta (30 W/cm^2) excitação, onde a baixa excitação foi obtida simplesmente pela introdução de um filtro de densidade neutra no feixe proveniente do laser de corante. O resultado de tal experimento é mostrado na figura 5.11. Aqui notamos claramente o deslocamento do limiar de fotoexcitação E_{abs} . Para uma excitação de $0,5 \text{ W/cm}^2$ obtemos um E_{abs} de 1,55 eV enquanto que para alta excitação este valor é de $E_{abs} = 1,544 \text{ eV}$. Usando o mesmo procedimento, que adotamos na sessão onde discutimos os experimentos com dupla excitação, e usando os valores para a transição fundamental obtidos dos dados de *MPL*, podemos estimar a redução na densidade do 2DEG. Daí obtemos o valor do nível de Fermi sob baixa excitação como sendo $E_f^l = 28 \text{ meV}$ e sob alta excitação como sendo $E_f^h = 21 \text{ meV}$. Isto corresponde a uma alteração de $1,9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ na densidade do 2DEG.

Notamos também uma alteração na forma de linha da *PLE* na região do limiar de fotoexcitação, qualitativamente idêntica a que ocorre no espectro desta amostra nas experiências realizadas com dupla excitação. Vemos surgir uma estrutura em forma de pico e observamos um crescimento mais acentuado da intensidade de *PL* (vide figura 5.11) , denotando o surgimento de interação Coulombiana entre os pares e-h gerados. Conforme a discussão dos resultados de dupla excitação este

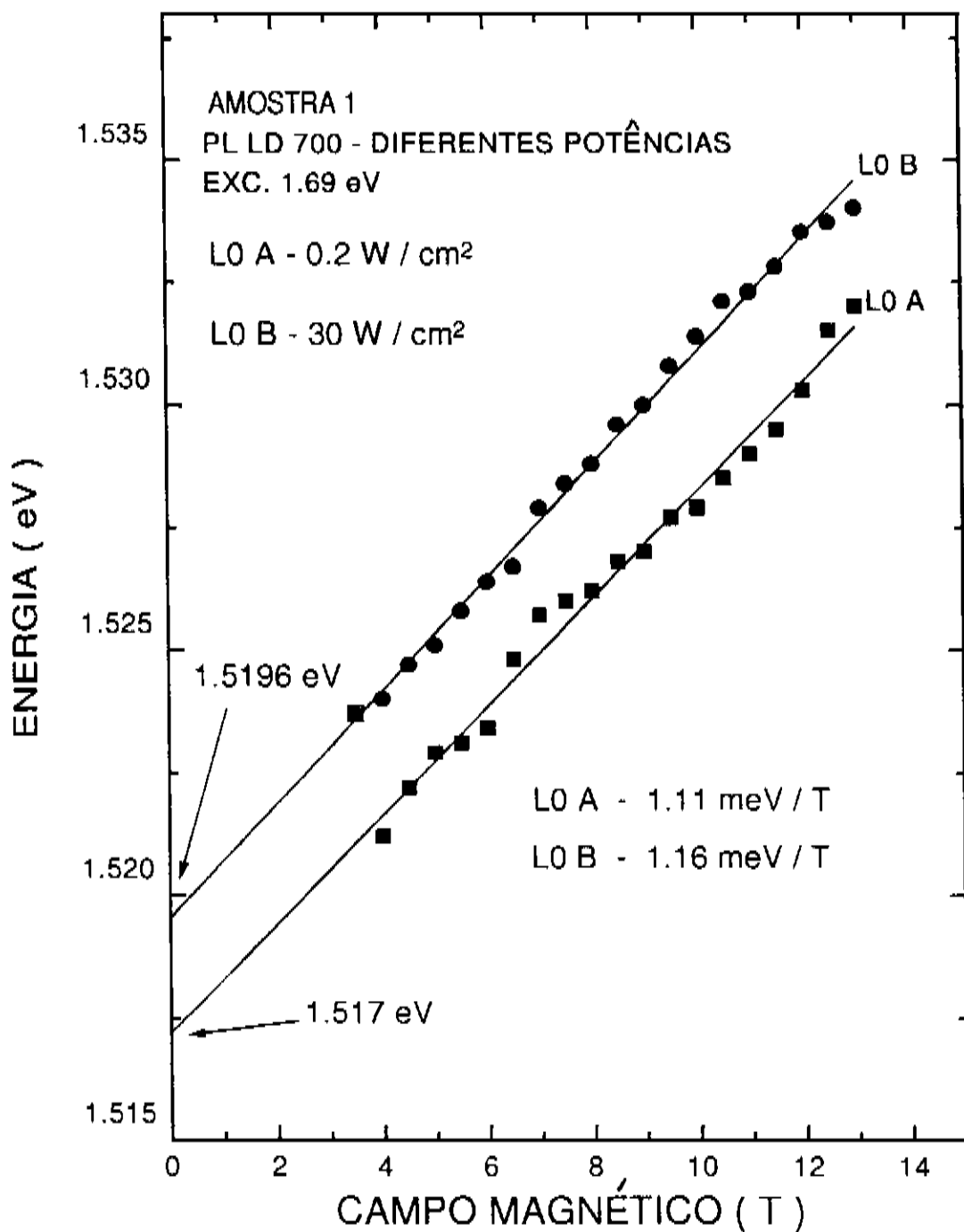


Figura 5.10: Transição L0, para duas potências de excitação por fótons com energia inferior ao “gap” da barreira.

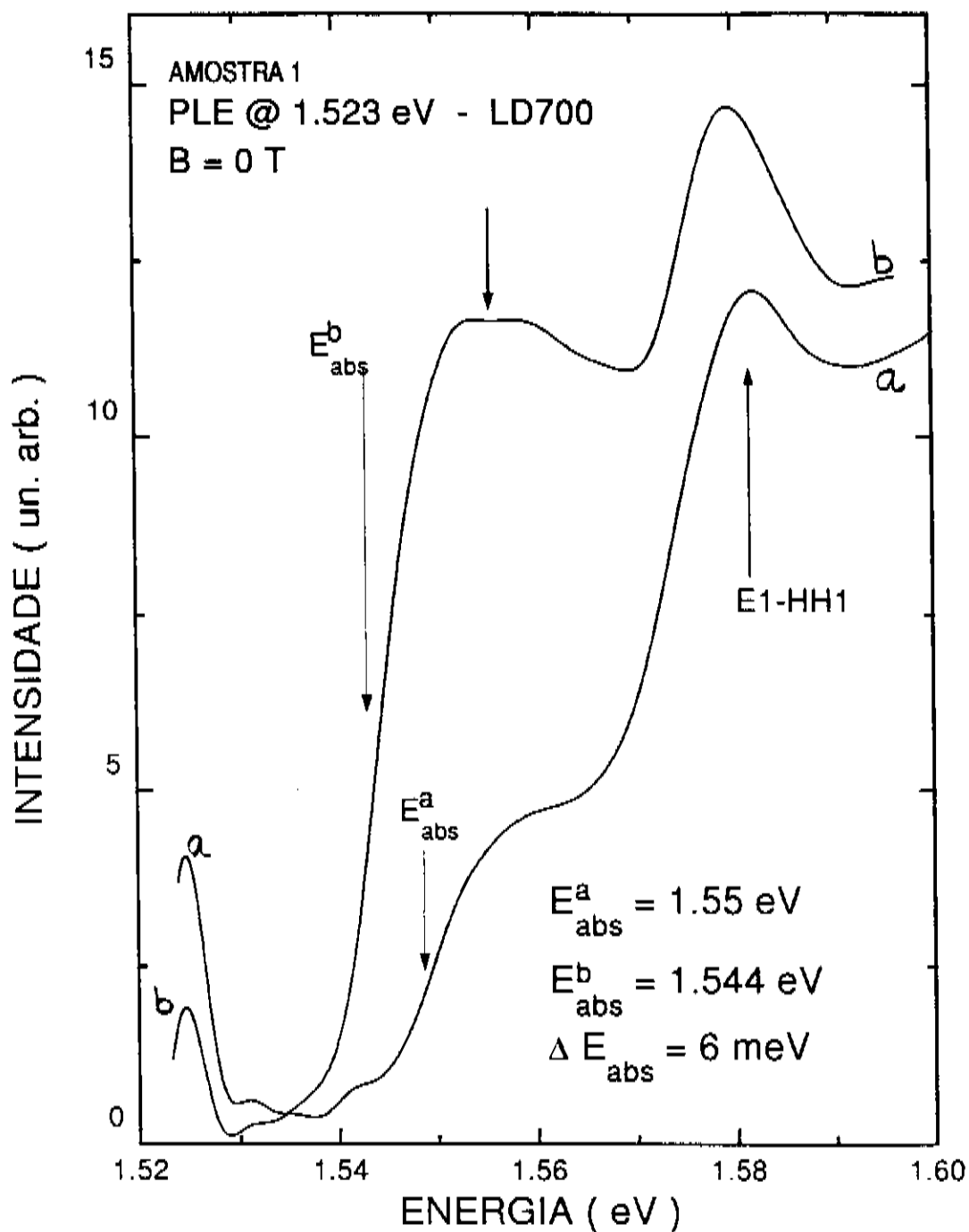


Figura 5.11: Espectros de *PLE* sob baixa (espectro a) e alta (espectro b) excitação para a amostra 1.

comportamento nos dá uma comprovação da ocorrência da diminuição na densidade do 2DEG [62]. Fica portanto caracterizado que a densidade do 2DEG diminui mesmo quando a amostra é excitada com fótons tendo energia inferior ao “gap” da barreira que confina os portadores.

O mecanismo que propomos para explicar tal diminuição é basicamente o mesmo que leva à diminuição por excitação acima da barreira. Tal mecanismo está baseado, conforme discutido no capítulo 2, sessão 2.3, na geração de buracos na barreira pela fotoexcitação, e na transferência destes buracos para o poço de GaAs, induzida pela ação do campo elétrico interno existente em tal estrutura (vide figura 2.6). Devemos agora elucidar o mecanismo de geração de buracos na barreira, mesmo por excitação abaixo do “gap” da mesma. Na discussão a ser realizada a seguir ficará claro que tal mecanismo está intimamente relacionado à existência e à origem da banda D. Demonstraremos que os buracos são gerados pela absorção de luz por um estado profundo até então desconhecido no $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$.

5.4 Origem da Banda D

Pelo comportamento apresentado pela banda D nas experiências de *MPL*, e pela discussão dos resultados obtidos com dupla excitação, mostrados na figura 5.2, , passamos a questionar a interpretação anterior sobre a origem deste pico de PL, que parece não relacionar-se ao *n*-MDQW. Um dos fatos marcantes relacionados a esta emissão diz respeito ao comportamento de sua intensidade, quando a excitação é feita por fótons com energia superior ao “gap” da liga. Recordando um pouco o que foi apresentado anteriormente observamos claramente que:

a - esta emissão está presente para excitação abaixo do “gap” da liga com intensidade inferior à emissão proveniente do *n*-MDQW.

b - Quando aumentamos a energia dos fótons incidentes sobre a amostra a banda D se torna mais intensa que a transição $E_0\text{-HH}_0$, e passa a ser a estrutura que domina o espectro.

c - A banda D não apresenta, nos espectros de *MPL* já discutidos, um comportamento condizente com uma transição originada do *n*-MDQW.

Com base nestas observações, e de modo a proceder a uma caracterização mais completa a respeito da origem desta transição, realizamos medidas de *MPL* sob baixa excitação por laser de Ar^+ (2,41 eV). Nesta situação teremos a oportunidade de focalizar nossa atenção, de forma mais eficaz, sobre o comportamento de $\underline{D}$ com o campo magnético, já que esta estrutura domina o espectro. Na figura 5.12 apresentamos os espectros de *MPL* para alguns campos. Se observamos o espectro tomado a campo zero, notamos que a *PL* proveniente do n-MDQW é dificilmente identificada separadamente das demais emissões (GaAs e banda $\underline{D}$). A medida que o campo se eleva vemos quão dramático é o efeito do campo magnético sobre as transições relacionadas ao 2DEG. Note que L_0 passa a ser, no espectro tomado a 11 T, uma estrutura de bastante intensa e de largura de linha estreita. Em contra partida, a banda $\underline{D}$ não apresenta nenhuma das características esperadas para uma emissão associada ao n-MDQW. Observe na figura que a intensidade de $\underline{D}$ praticamente não se altera, nem tão pouco sua forma de linha. Podemos observar, ainda a medida que o campo é elevado, que as transições provenientes do n-MDQW ($E_0\text{-HH}_0$, níveis de Landau) vão simplesmente se superpondo a banda $\underline{D}$. O único efeito que notamos é um pequeno deslocamento de $\underline{D}$ em direção a altas energias. Na figura 5.13 está representada a dependência dos picos de *MPL* com o campo magnético.

A transição L_0 tem, mais uma vez, o comportamento previsto por nosso modelo, com uma dependência com o campo marcadamente linear, e apresentando uma inclinação de 0,95 meV/T, bem próxima do valor esperado de 1 meV/T. A extrapolação a campo zero deste pico nos fornece um “gap” fundamental de 1,52 meV/T. Note-se, portanto, que mesmo sob baixa excitação por laser de Ar^+ , a densidade do 2DEG se mostra alterada. O pico L_1 se mostra também linear com o campo, e tem convergência para a origem comum correspondente a $E_0\text{-HH}_0$. Como nos demais espectros sua inclinação se mostra alterada. Neste caso o desvio é de 20 % em relação ao valor esperado (3 meV/T). Representamos também a transição da banda de condução para aceitador neutro de carbono ($c\text{-A}^0$), proveniente do GaAs, a qual converge a campo zero exatamente para o valor esperado de 1,494 eV.

Passemos à banda $\underline{D}$. Esta emissão além de não apresentar as características de uma emissão do n-MDQW tem a campo zero uma energia incom-

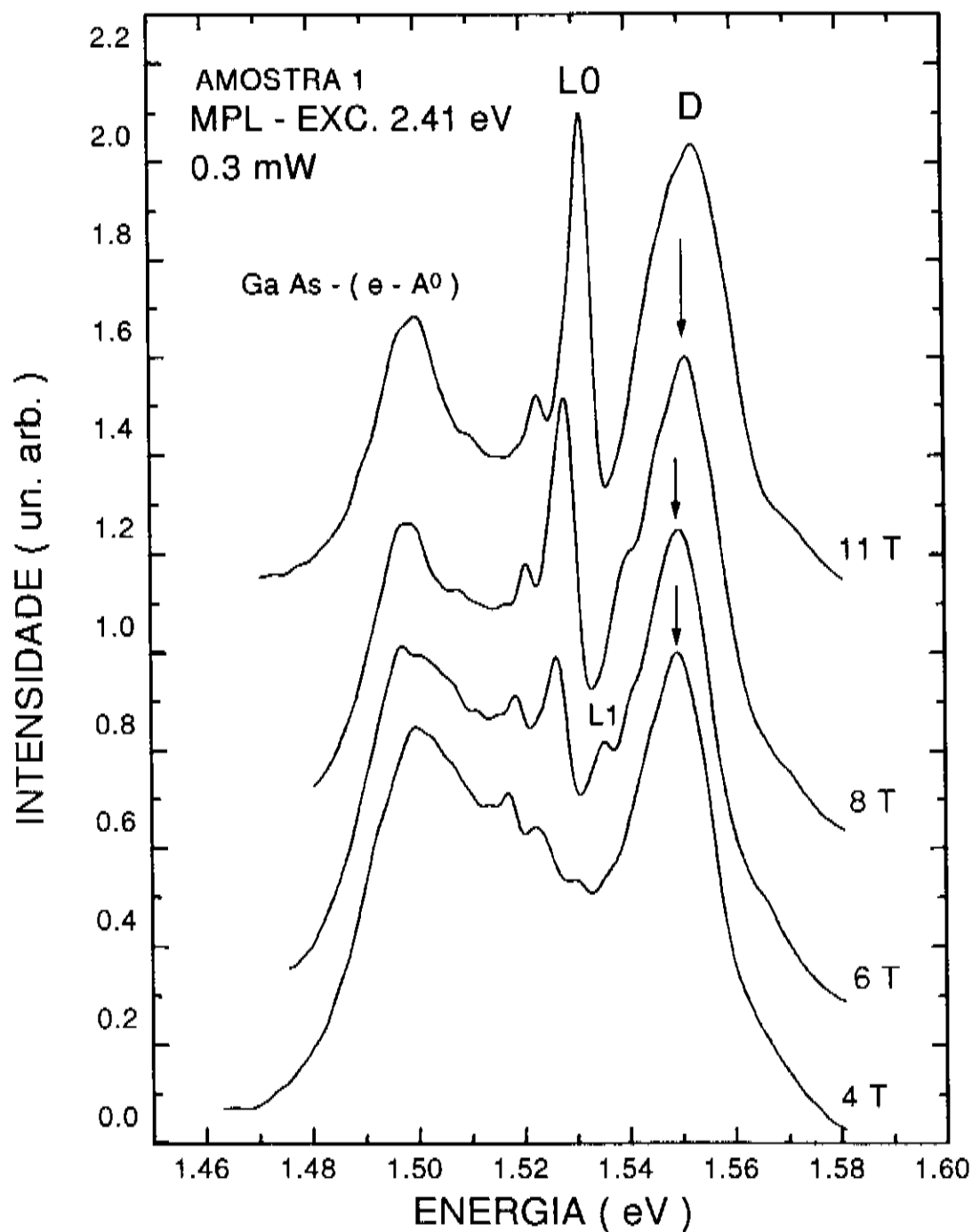


Figura 5.12: Espectros de *MPL* tomados com excitação por laser de Ar^+ para a amostra $\perp$.

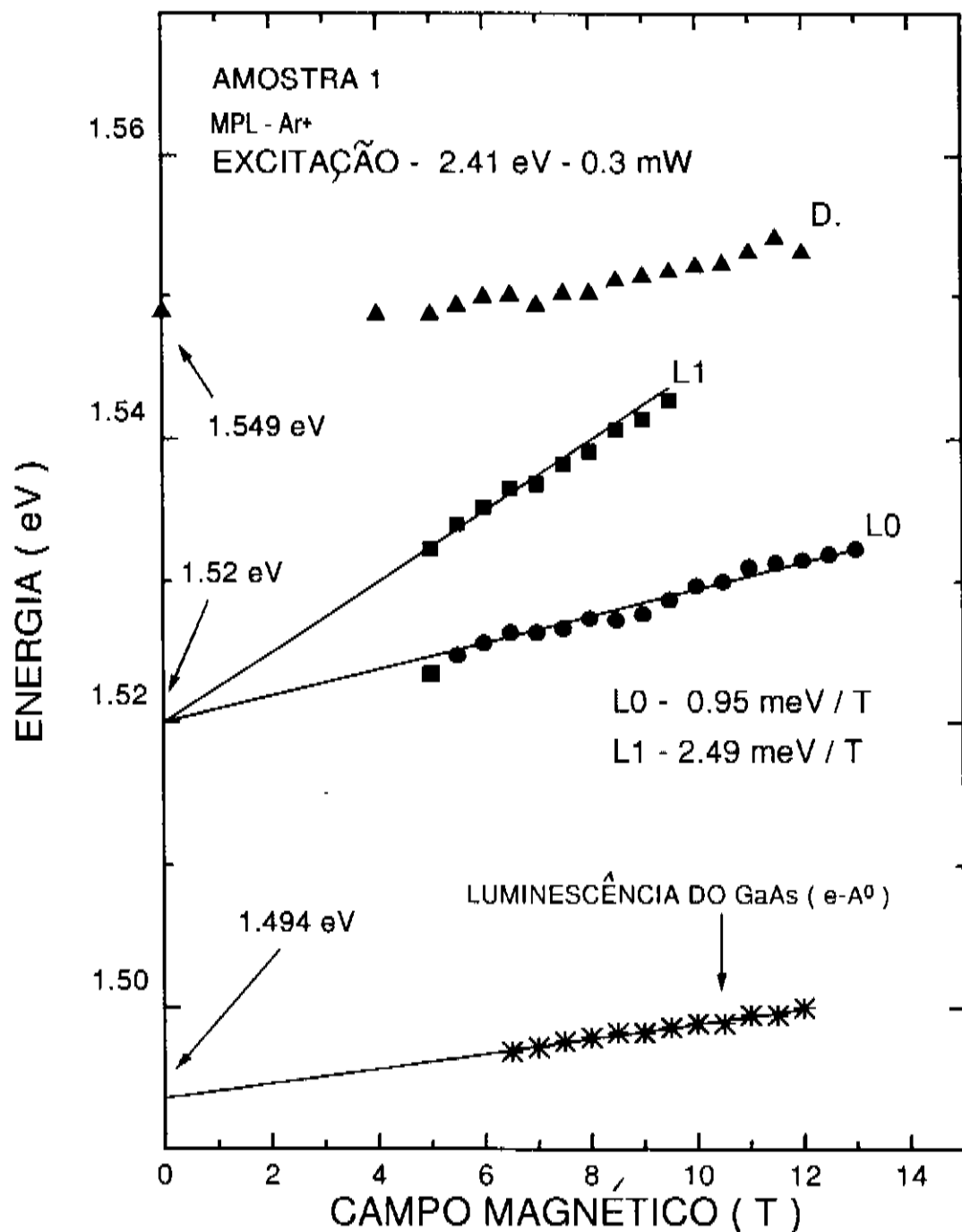


Figura 5.13: Resumo dos resultados de *MPL* para excitação com laser de Ar⁺ para a amostra 1.

patível com qualquer transição, de probabilidade significativa, entre sub-bandas de condução e de valência. Se tomarmos a inclinação média desta emissão, forçando um comportamento linear, obteremos um valor de $0,3 \text{ meV/T}$, mais uma vez incompatível com as do n-MDQW. Esperariamos, caso $\underline{D}$ tivesse origem no n-MDQW, a diminuição de sua intensidade e seu eventual desaparecimento para altos campos devido a despopulação dos estados iniciais e finais da transição, pela ação do campo magnético. Com base no aqui apresentado e nas discussões anteriores podemos afirmar que $\underline{D}$ não tem sua origem ligada ao n-MDQW.

Nos últimos anos tem surgido na literatura uma série de trabalhos demonstrando a existência de estados profundos relacionados à dopagem com Si no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [43, 44, 45, 46, 47]. Basicamente, com o uso da *PL* picos associados a complexos envolvendo os centros DX, responsáveis pelo PPC, e outros complexos como por exemplo o formado por Si e uma vacância de As (Si-V_V) [45], ou vacância de Ga (Si-V_{III}) [43], tem sido observados. Existem também bandas de *PL* cujas origens ainda não foram identificadas [47]. Estes estados são, em geral, bastante profundos gerando níveis entre 550 meV e 750 meV dentro do “gap” da liga, tendo como referência o fundo da banda de condução. Deste modo fica clara a complexidade da incorporação de Si no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e da identificação dos estados por ele gerados. Dai o grande interesse no estudo desta incorporação, principalmente tendo-se em vista a importância de se determinar os estados de energia introduzidos no “gap” pela dopagem. Um elemento que devemos acrescentar a nossa análise é o fato de que o Si se incorpora majoritariamente como átomo substitucional na rede, e que os centros DX são atribuídos ao Si substitucional [42]. Os resultados que temos em mãos nos fornecem evidências de que a banda $\underline{D}$ esteja relacionada a um nível profundo na liga o qual seria, devido às características de dopagem da amostra, associado ao Si. Isto representaria um estado a 460 meV do fundo da banda de condução.

Para não deixar dúvidas quanto a associação entre a banda $\underline{D}$ e o $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$, tomamos espectros de *PL* onde a energia de excitação dos fótons incidentes sobre a amostra foi variada. Esta experiência foi realizada com o sistema de laser de corante usando Rodamina 6G, e bombeado por uma laser de Ar^+ . Na figura 5.14 mostramos

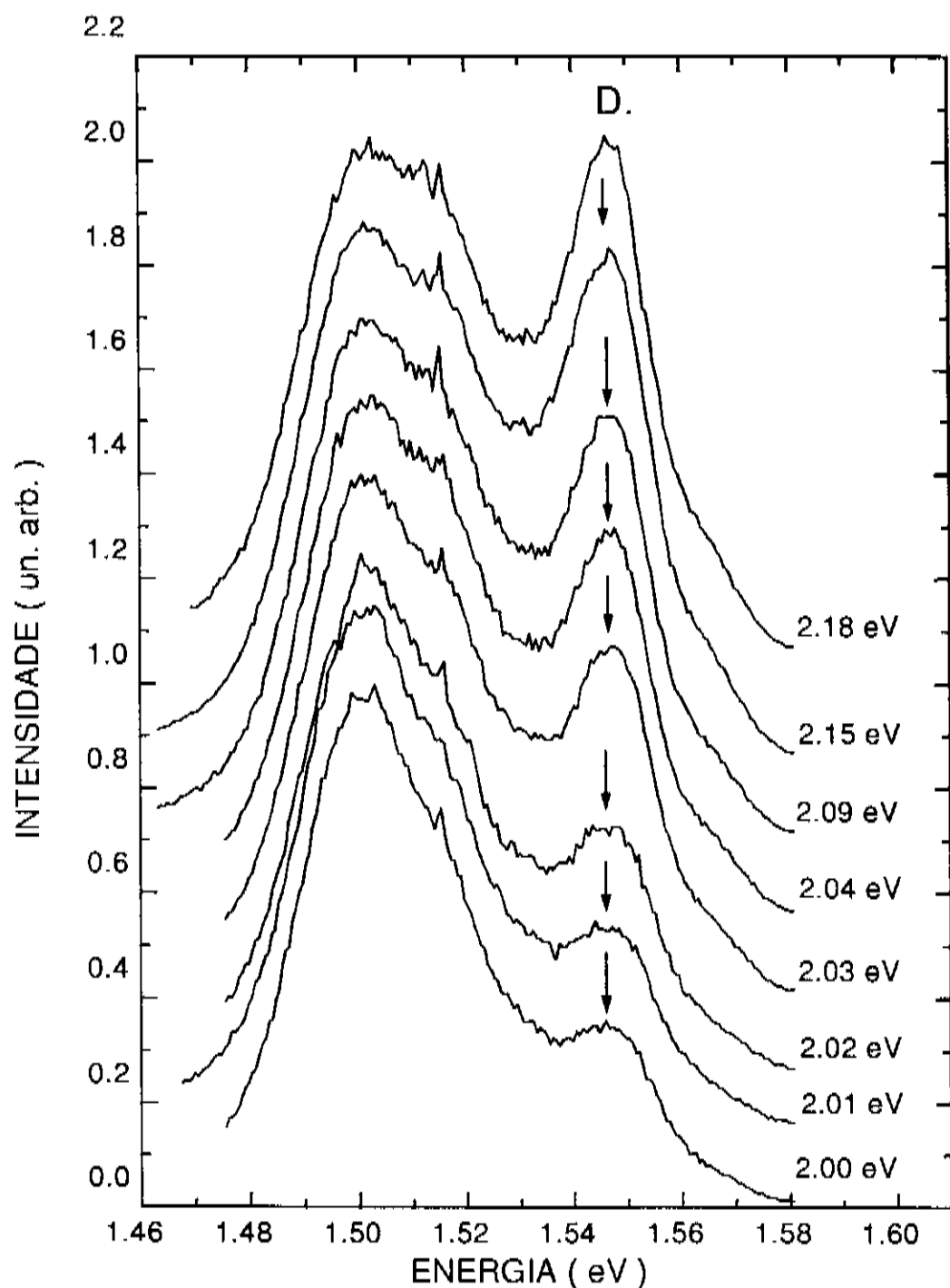


Figura 5.14: Espectros de *PL* tomados com diferentes energias de excitação para a amostra 1. Note o crescimento da banda D quando passamos a excitar com energia acima do “gap” da liga.

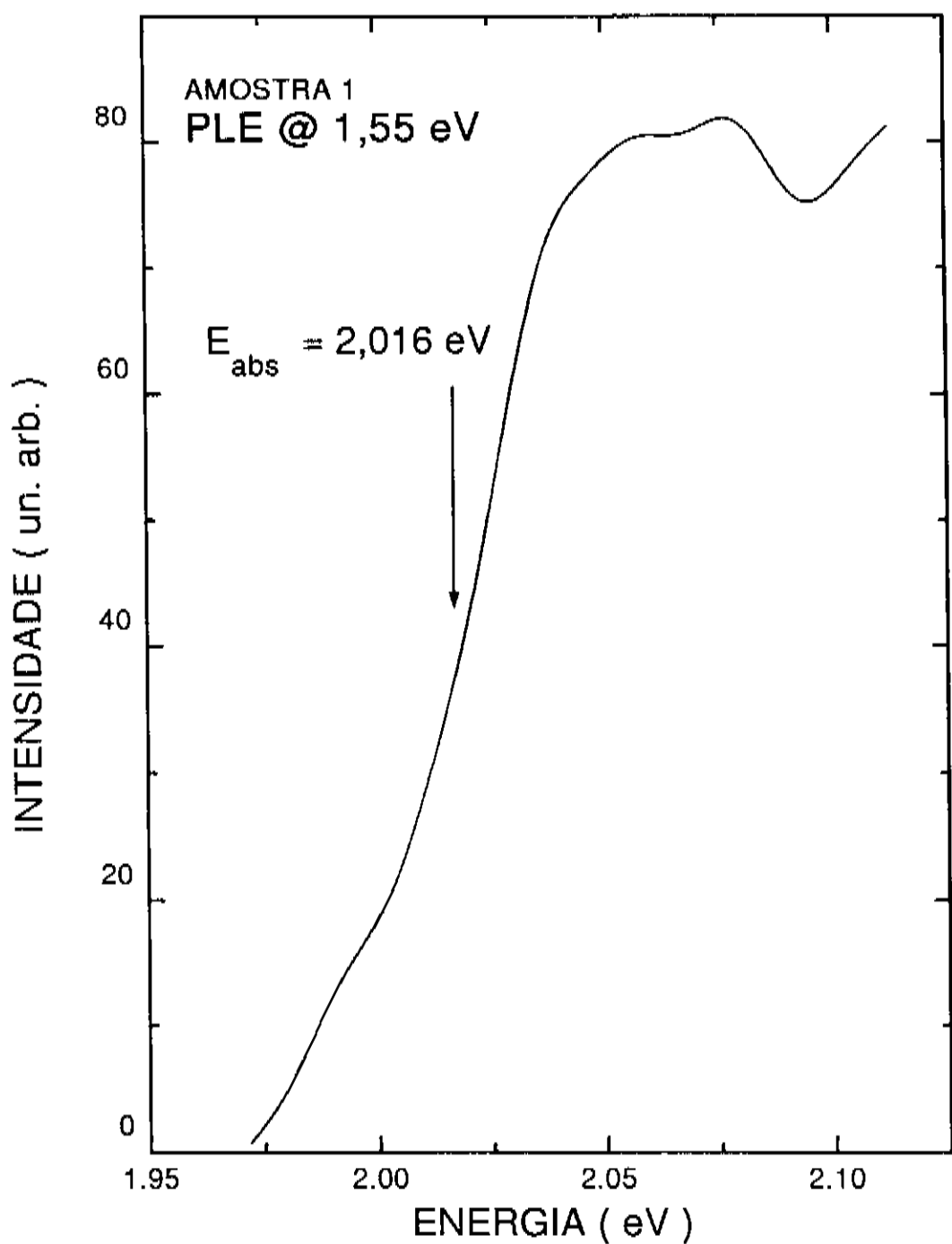


Figura 5.15: Espectro de *PLE* para a banda D tomado em 1.55 eV.

tais resultados. Fica evidente o crescimento da banda D quando alteramos a energia de excitação. No momento em que ela é feita por fótons tendo energia acima do “gap” da liga, D passa a ser mais intensa até dominar o espectro. Esta medida foi feita com o intuito de tornar clara a interpretação do espectro de *PLE*, referente à banda D que é mostrado na figura 5.15. Este espectro de *PLE* reflete o aumento da intensidade de D a medida a energia de excitação é elevada e não reflete, de maneira significativa, influência espúria das demais emissões que aparecem no espectro. Ainda deste espectro obtemos um limiar de fotoabsorção para D $E_{abs} = 2,016$ eV perfeitamente compatível com o “gap” de 2,01 eV que foi por nós estimado para a barreira de nossa amostra. A emissão D tem portanto, pelas várias evidências apresentadas, sua origem nas camadas de $Al_{0,36}Ga_{0,64}As$ de nossa estrutura.

Ao buscarmos o mecanismo pelo qual a emissão de D é gerada devemos levar em conta que esta transição está presente mesmo para excitação feita abaixo do “gap” da barreira. De modo que esta emissão é explicada com base no modelo de coordenada configuracional para centros profundos. Este trata, de maneira simplificada, o problema da interação entre estados eletrônicos e vibracionais para estes centros [63, 64]. Estados eletrônicos profundos no “gap” de um semicondutor sabidamente interagem fortemente com a rede em torno do centro. Esta interação com os estados vibracionais locais significa que a energia destes centros depende fortemente da posição dos átomos vizinhos à impureza, ou complexo que gera tal estado. Em outras palavras, no que diz respeito a impurezas profundas a aproximação adiabática já não é mais válida. De modo a tratar este problema de maneira simplificada o modelo da coordenada configuracional descreve o movimento da rede através de única coordenada Q . O modelo de coordenada configuracional (*CC*) tem sido amplamente empregado no estudo dos estados profundos de Si no $Al_xGa_{1-x}As$ [42, 44]. Na figura 5.16 reproduzimos uma figura adaptada da referência 62 representando graficamente este modelo.

Nesta figura representa-se a energia total (eletrônica + elástica) para o nosso sistema, que envolve a banda de condução (*BC*), banda de valência (*BV*), e o centro profundo (*CP*). As linhas horizontais introduzidas dentro das parábolas tem o objetivo de representar os estados vibracionais locais da rede. A energia dos

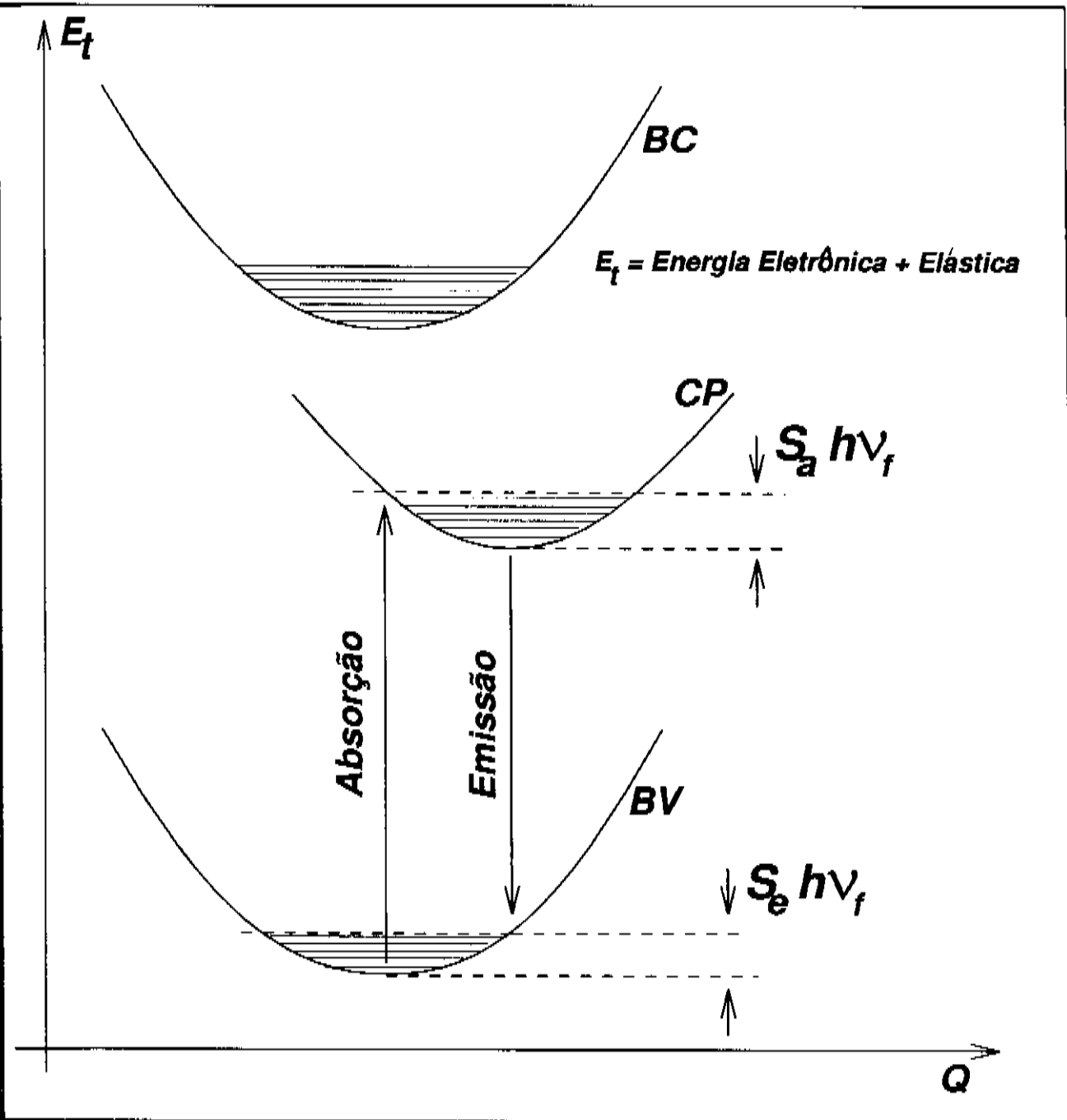


Figura 5.16: Representação gráfica do modelo de coordenada configuracional.

(a) A_1 Level

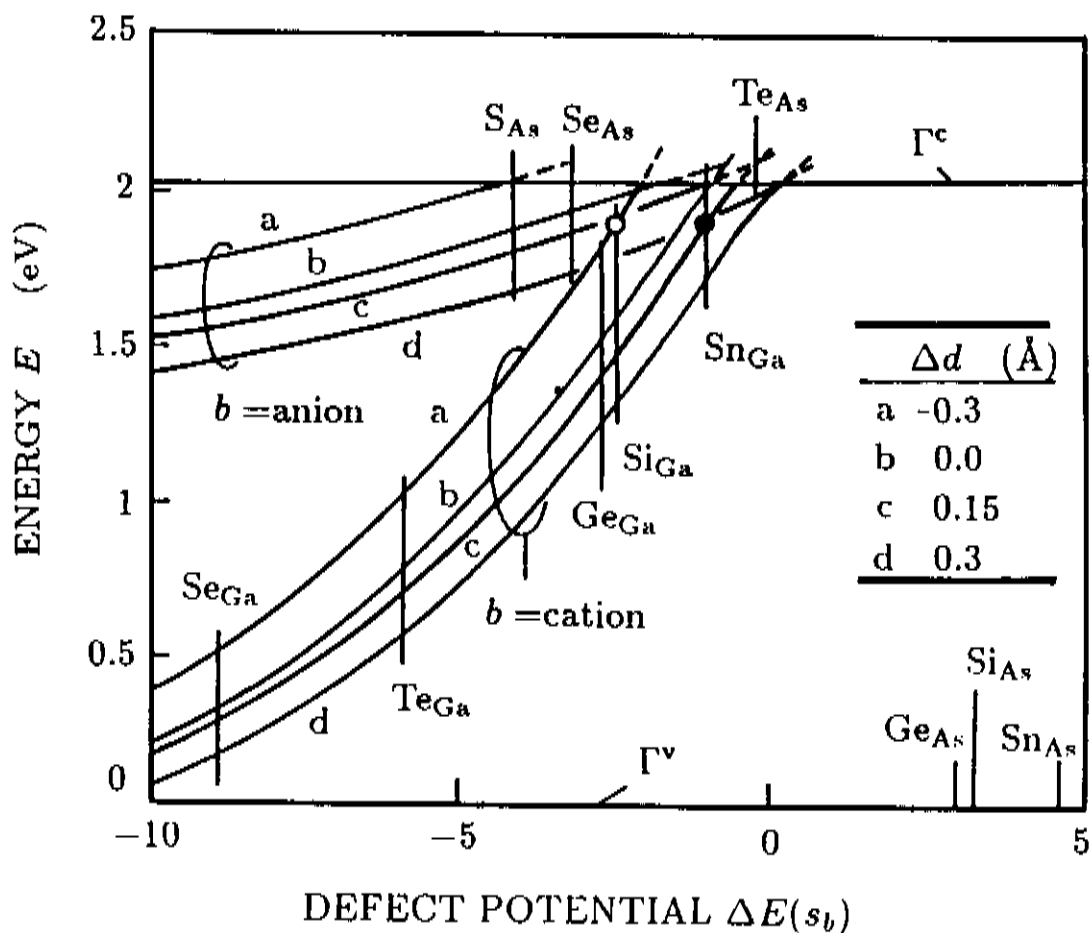


Figura 5.17: Figura extraída da referência 63 mostrando a energia dos estados gerados no “gap” de uma liga de $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ em função do potencial de defeito e da alteração no comprimento da ligação, para várias impurezas substitucionais.

fótons absorvidos é $h\nu_{ab}$ e a dos fótons emitidos é $h\nu_{em}$. Estas energias são dadas por:

$$h\nu_{ab} = E_g - E_p + S_a h\nu_f \quad (5.15)$$

$$h\nu_{em} = E_g - E_p - S_e h\nu_f \quad (5.16)$$

Nestas equações E_p representa a energia do centro medida a partir do fundo da banda de condução, S_a é o número de fónons absorvidos e S_e o número de fónons emitidos. Notamos que existe um deslocamento em energia entre absorção e emissão igual a $2S_a h\nu_f$. Este é o chamado deslocamento de Frank-Condon. A quantidade S_a representa o número de fónons de energia $h\nu_f$ emitidos durante a relaxação pelos estados vibracionais locais. Pela figura vemos que uma excitação com fótons de energia inferior ao “gap” da liga, é portanto capaz induzir luminescência a partir deste nível. É esta a emissão observada para excitação com baixa energia. Quando a amostra é excitada com energia superior a altura da barreira a geração de buracos na banda de valência é muito mais eficiente. Os portadores presos ao nível profundo tem disponíveis um número bem maior de buracos com os quais recombinar, e a emissão proveniente deste centro tem sua intensidade elevada. Este centro foi por nós interpretado como um nível doador gerado a partir de um átomo de Si substitucional ocupando um sítio de Al na liga $Al_xGa_{1-x}As$. Esta atribuição foi feita com base no cálculo feito por E. Yamaguchi [65]. Neste trabalho é desenvolvida uma teoria do centro DX em semicondutores III-V. Reproduzimos na figura 5.17 o resultado numérico mostrado por Yamaguchi em seu trabalho. Nesta figura está representada a energia do estado em função do potencial de defeito $\Delta E(s_\alpha)$, e da alteração no comprimento de ligação Δd , quando o cátion é substituído pela impureza. No potencial de defeito $\Delta E(s_\alpha)$ $\hat{=}$ corresponde à simetria do estado e α ao cátion substituído. Usando a equação 4, e os valores dados na tabela II deste trabalho, obtemos para o potencial de defeito associado ao Si substitucional no lugar do Ga um valor de $\Delta E(s_{Ga}) = -2,5$ eV que é o valor mostrado na figura 5.17. Para o Si substitucional no lugar do Al encontramos $\Delta E(s_{Al}) = -3,2$ eV. Note que ao usarmos $\Delta E(s_{Al})$ na figura 5.17 e mantendo-nos na curva $\Delta d = -0,3$ Å, que o autor considera adequada para Si_{Ga} , somos levados a um estado bem mais profundo

apenas ser uma indicação qualitativa na análise dos dados. Notamos pelos dados do autor que os resultados tem uma grande dependência com Δd , de modo que um pequeno aumento deste valor, seria capaz de gerar um estado com energia da ordem da observada por nós para o caso da banda D. Com base nesta discussão sugerimos que o estado por nós observado esteja relacionado ao Si substitucional em um sítio de Al na liga. Nossa análise pretendeu ser qualitativa, tomando como base um resultado teórico, e foi realizada no sentido de mostrar que, a presença de um estado relacionado a um átomo de Si substitucional com uma energia de 460 meV, pode ocorrer na liga. O pico D por nós discutido representa a primeira observação experimental de um nível com tais características em ligas de AlGaAs.

Deste modo a existência do estado profundo, que foi mostrada através dos dados experimentais apresentados, e que teve a dinâmica de absorção e emissão de luz analisada dentro do modelo de coordenada configuracional, explica o fato da densidade do 2DEG ser alterada em nossa amostra, quando a excitação é feita por fótons com energia inferior ao “gap” da liga.

Capítulo 6

Conclusões

Ao longo deste trabalho estudamos as propriedades óticas de múltiplos poços quânticos com dopagem modulada, através das técnicas de fotoluminescência (*PL*) e de fotoexcitação de luminescência (*PLE*), com e sem a aplicação de campo magnético. Inicialmente , por meio de medidas com dupla excitação, ficou definitivamente caracterizado que, quando este tipo de amostra é iluminada por fótons tendo energia superior ao “gap” da barreira da estrutura, a densidade do 2DEG é diminuída. Para mostrar esta diminuição, fizemos uso dos espectros de *PL* e *PLE*, tomados sob diferentes bombeios por um laser de Ar^+ (2,41 eV), para estimar a densidade do 2DEG em cada situação. Esta diminuição é consequência de um efeito de transferência de buracos, fotogerados na barreira, para o poço de GaAs. Este mecanismo é induzido pelo campo elétrico interno existente neste sistema. Foi colocado em evidência na amostra 1 que, quando a densidade do 2DEG é diminuída a interação Coulombiana e-h, antes inibida, através do efeito de blindagem, pela alta densidade inicial do 2DEG, passa a se mostrar presente. Este efeito é uma indicação extra da diminuição da densidade estimada pelos espectros de *PL* e *PLE*.

Com o uso da magneto-fotoluminescência (*MPL*), tomada sob diferentes intensidades de iluminação, por fótons com energia inferior ao “gap” do $\text{Al}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{As}$, ficou evidenciado que a diminuição na densidade do 2DEG, observada anteriormente apenas para excitação com alta energia, ocorre também, na amostra 1, para uma excitação por fótons com energia bem inferior ao “gap” da liga. Pela

primeira vez na literatura se observa tal efeito [62]. Relacionamos esta diminuição a geração de buracos na barreira de AlGaAs pela absorção através de um estado profundo na liga.

Por meio das técnicas já descritas, e pelos cálculos teóricos realizados, fomos capazes de elucidar a origem de uma transição (banda D) que aparece acima da emissão fundamental do poço. Mostramos que , esta emissão, anteriormente relacionada a transição E1-HH0, tem sua origem na liga e está relacionado a um centro doador profundo originado, provavelmente, pela dopagem com Si. Foi sugerido que tal estado corresponde a um átomo de Si substitucional em um sítio de Al. A dinâmica de absorção e emissão de luz por este centro foi analisada dentro do modelo de coordenada configuracional para centros profundos. Tal análise mostrou a compatibilidade de tal centro com as características da banda D, e demonstrou qual é o mecanismo de produção de buracos na barreira, quando a amostra é excitada com fótons de baixa energia.

Bibliografia

- [1] L.Esaki , Science Vol. 183 , 1149 (1974).
- [2] D.S.Chemla , Physics Today , 57 (Maio/1985).
- [3] L.J.Challis , Contemporary Physics Vol. 33 , 111 (1992).
- [4] R.Tsu e L. Esaki , Appl. Phys. Lett. , Vol. 19 , 246 (1971).
- [5] R. Tsu e L.Esaki , Appl. Phys. Lett. , Vol. 22 , 562 (1973).
- [6] C. Weisbuch, em “Fundamental Properties of III-V Semiconductor Two-Dimensional Quantized Structures: The Basis for Optical and Eletronic Device Applications”, Semiconductors and Semimetals Vol. 24, 1 (1987).
- [7] R.Dingle , W.Wiegmann e C.H.Henry , Phys. Rev. Lett. Vol. 33 , 827 (1974).
- [8] R.Dingle , Festkörperprobleme XV , 21 (1975).
- [9] R.C.Miller , D.A.Kleinman,W.A.Nordland,Jr. e A.C.Gossard , Phys. Rev. B(22) , 863 (1980).
- [10] B.A.Vojak , N.Holonyak,Jr. , W.D.Laidig, K.Hess ,J.J. Coleman e P.D. Dapkus, Solid State Commun. Vol. 35 , 477 (1980).
- [11] R.C.Miller , A.C.Gossard , W.T.Tsang e O.Munteanu , Phys. Rev. B(25) , 3871 (1982).
- [12] R.C.Miller e D.A.Kleinman , Journal of Luminescence Vol. 30 , 520 (1985).

- [13] K.Ploog , A.Fischer , L.Tapfer e B.F.Feuerbacher , Appl. Phys. A(52) , 135 (1991).
- [14] R.C. Miller, D.A. Kleinman e A.C. Gossard, Phys. Rev. B(29), 7085(1984).
- [15] D.S.Chemla e D.A.B.Miller , J. Opt. Soc. Am. B(2) , 1155 (1985).
- [16] M. Abe, T. Mimura, K.Nishiuchi,A.Shibatomi,M.Kobayaski e T.Misigi, em "Fundamental Properties of III-V Semiconductor Two-Dimensional Quantized Structures: The Basis for Optical and Eletronic Device Applications", Semiconductors and Semimetals Vol. 24, 249 (1987).
- [17] W.T.Tsang em "Fundamental Properties of III-V Semiconductor Two-Dimensional Quantized Structures: The Basis for Optical and Eletronic Device Applications", Semiconductors and Semimetals Vol. 24, 397 (1987).
- [18] R.Dingle , H.L.Störmer , A.C.Gossard e W.Wiegmann , Appl. Phys. Lett. Vol. 33 , 665 (1978).
- [19] H.L.Störmer , Surface Science Vol. 132 , 519 (1983).
- [20] L.F.Eastman , Physics Today , 77 (Outubro/1986).
- [21] T. Ando, A.B. Fowler e F. Stern, Rev. Mod. Phys., Vol. 54, 437(1982) e referências nele contidas.
- [22] K.v.Klitzing , G.Dorda e M.Pepper , Phys. Rev. Lett. Vol. 45 , 494 (1980).
- [23] R.E. Prange, em " The Quantum Hall Effect" , segunda edição, Springer-Verlag, 1 (1990), e referências nele contidas.
- [24] D.C. Tsui, H.L. Störmer e A.C. Gossard, Phys. Rev. Lett. Vol. 48, 1559(1982).
- [25] A.M. Chang em " The Quantum Hall Effect" , segunda edição, Springer-Verlag, 175 (1990), e referências nele contidas.
- [26] A.Pinczuk , J. Shah , H.L.Störmer , R.C.Miller , A.C.Gossard e W.Wiegmann , Surface Science Vol. 142 , 492 (1984).

- [27] A.E. Ruckenstein, S. Schmitt-Rink e R.C. Miller, Phys. Rev. Lett. Vol. 56, 504(1986).
- [28] C. Delalande, Physica Scripta Vol. T19, 129(1987).
- [29] C.Delalande, G.Bastard, J.Orgonasi, J.A.Brum, H.W. Liu , M. Voos, G. Wiemann e W. Schlapp, Phys. Rev. Lett. Vol. 59, 2690(1987).
- [30] E.A. Meneses, F. Plentz e C.A.C. Mendonca, Superlattices and Microstructures, Vol. 5, 11(1989).
- [31] R. Cingolani, K. Ploog, A. Cingolani, C. Moro e M. Ferrara, Phys. Rev. B(42), 2893(1990).
- [32] D.A.Kleinman e R.C.Miller , Phys. Rev. B(32), 2266(1985).
- [33] G.E.W.Bauer e T.Ando , Phys. Rev. B(31) , 8321 (1985).
- [34] S. Schmitt-Rink , C.Ell e H.Haug , Phys. Rev. B(33) , 1183 (1986).
- [35] G.Tränkle , H.Leier , A.Forchel , H.Haug , C.Ell e G.Wiemann , Phys. Rev. B(58) , 419 (1987).
- [36] J.C. Ryan e T.L. Reinecke, Phys. Rev. B(47), 9615(1993).
- [37] C.Delalande , J.A.Brum , J.Orgonasi , M.H.Meynadier , G.Bastard , J.C.Maan , G.Weimann e W.Schlapp , Superlattices & Microstructures Vol. 3, 416(1987).
- [38] F.Mcseguer , J.C.Mann e K.Ploog , Phys. Rev. B(35) , 2505 (1987).
- [39] H. Yoshimura e H. Sakaki, Phys. Rev. B(39), 13024(1989).
- [40] J.S. Lee, N. Miura e T. Ando, J. Phys. Soc. Japan, Vol. 59, 2254(1990).
- [41] R. Cingolani, G.C. La Rocca, H. Kalt, K. Ploog, M. Potemski e J.C. Maan, Phys. Rev. B(43), 9662(1991).
- [42] P.M. Mooney, J. Appl. Phys. Vol. 67, R1(1990).

- [43] T. Oh-hori, H. Ioth, H. Tanaka, K. Kasai, M. Takikawa e J. komeno, J. Appl. Phys. Vol. 61, 4603(1987).
- [44] S. Alaya, II. Maaref e J.C. Bourgoin, Appl. Phys. Lett. Vol. 55, 1406(1989).
- [45] P. Sousa, E.V.K. Rao, F. Alexandre e M. Gauneau, J. Appl. Phys. Vol. 64, 444(1988)..
- [46] E.P. Visser, X. Tang, R.W. Wiclceman e L.J. Giling, J. Appl. Phys. Vol. 69, 3266(1991).
- [47] E. Calleja, C. Fontaine, E. Muñoz, A. Muñoz-Yagüe, M. Fockele e J-M Spaeth, Semicond. Sci. Technol. Vol. 6, 1006(1991).
- [48] F. Plentz, Tese de Mestrado, "Efeito da Excitação no Espectro de Emissão de Multiplos Poços Quânticos ($Al_xGa_{1-x}As$) com Dopagem Modulada Assimétrica, defendida em dez/1988 no IFGW-UNICAMP.
- [49] A.S. Chaves, A.F.S. Penna, J.M. Worlock, G. Weimann e W. Schlapp, Surf. Sci. 170, 618(1986).
- [50] R.W. Hamming, "Numerical Methods for Scientists and Engineers", McGrall Hill 2ª edição, 416(1973) .
- [51] Semiconductors and Semimetals Vol. 1 cap. 6, editado por R.K. Willardson e A.C. Beer, Academic Press 1966.
- [52] B. Segall e D.T.F. Marple em " Physics and Chemistry of II-VI Compounds", North-Holland, 319 (1967).
- [53] R.J. Nelson, Appl. Phys. Lett. Vol. 31, 351(1977).
- [54] A. Kastalsky e J.C.M. Hwang, Solid State Commun. Vol. 51, 317(1984).
- [55] N.W. Ashcroft e N.D. Mermin, "Solid State Physics", Saunders College, 337 (1976).
- [56] S. Yarlagadda, G.F. Giuliani, Surf. Sci. Vol.229, 410(1990).

- [57] S. Adams, I. Galbraith, B.N. Murdin, K.W. Mitchell, B.C. Cavenett, C.R. Pidgeon, P.B. Kirby, R.S. Smith e B. Miller, Phys. Rev. B(46), 13611(1992).
- [58] L.V. Butov, V.D. Kulakovskii, E. Lach, A. Forchel and D. Grützmacher, Phys. Rev. B(44), 10680(1991).
- [59] T. Uenoyama and L.J. Sham, Phys. Rev. B(39), 11044(1989).
- [60] G.D. Mahan, Phys. Rev. Vol. 153, 882(1967).
- [61] G.E.W. Bauer, Surface Science Vol. 229, 374(1990).
- [62] F. Plentz, F. Meseguer, J. Sánchez-Dehesa, N. Mestres e E.A. Meneses, accito para publicação Phys. Rev. B em fev. 1993.
- [63] D. Curie, J.S. Prener em " Physics and Chemistry of II-VI Compounds", North-Holland, 435 (1967).
- [64] C.H. Henry, D.V. Lang, Phys. Rev. B(15), 989(1977).
- [65] E. Yamaguchi, J. Phys. Soc. Japan Vol 56, 2835(1987).

```
C
C *****#
C ESTE PROGRAMA CALCULA OS AUTOESTADOS E AUTOFUNCOES EM UM POCO
C COM DOPAGEM MODULADA ASSIMETRICA EM AMBOS OS LADOS.
C NAO ESTA INCLUIDA A MISTURA ENTRE AS BANDAS DE VALENCIA.
C O POTENCIAL INICIAL E UM POCO QUADRADO.
C
C*****#
C
C$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$#
C
C                                VERSAO 30-03-93
C                                FLAVIO PLENTZ
C
C$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$#
C*****#
C
C DEFINO A PARTIR DESTA PONTO AS VARIÁVEIS DE ENTRADA.
C
C SIGE - DENSIDADE DO GAS DE ELETRONS BI-DIMENSIONAL.
C
C XAL - CONCENTRACAO DE ALUMINIO NAS BARREIRAS
C
C ND - CONCENTRACAO DE DOADORES NA REGIAO DOPADA DA BARREIRA.
C
C TEMP - TEMPERATURA.
C
C NPTG - NUMERO DE PONTOS NO GRID.
C
C *****#
C *      *      *          *              *           *        *       *
C *      *      *          *              *           *        *       *
C *      *    AL   *         AL            GA          *     AL   *    GA   *    AL   *
C *    GA   *    AS   *         GA          *          AS          *    GA   *    AS   *    GA   *
C *    AS   *    ..   *         AS          *             AS          *    ..   *    AS   *
C *      *    SI   *          *             *           *    SI   *          *
C *      *      *          *             *           *          *          *
C *      *      *          *             *           *          *          *
C *****#
C      -Z1      0                Z2               Z3                 Z4        Z5
C
C Z2,Z3,Z4 SAO PARAMETROS DE ENTRADA DO PROGRAMA
C
C Z1 E Z5 CORRESPONDEM A PORCAO DOS DOADORES QUE FOI IONIZADA
C E SAO CALCULADOS PELO PROGRAMA.
C
C DEC - PORCAO DA DESCONTINUIDADE DO GAP QUE SE ALOJA NA BANDA DE
C CONDUCAO.
C
C DEV - PORCAO DA DESCONTINUIDADE DO GAP QUE SE ALOJA NA BANDA DE
C VALENCIA.
C
C ME - MASSA EFETIVA DE ELETRONS.
C
C MMH - MASSA EFETIVA DE BURACOS PESADOS.
C
C MLH - MASSA EFETIVA DE BURACOS LEVES.
C
C OS PARAMETROS SERAO LIDOS DO ARQUIVO PARAM.DAT NO INICIO DO PROGRAMA
```

```

C*****#
C#####
C
C DEFINO A PARTIR DESTES PONTOS AS VARIÁVEIS DO PROGRAMA.
C
C
C
C
C
C
C#####
C
C*****#
C
C INICIO DO PROGRAMA.
C
C*****#
C
C
C PROGRAM MDQW
C
C
C#####
C
C DECLARAÇÃO DE VARIÁVEIS.
C
C#####
C
C*****#
C
C * ZGR CONTEM OS PONTOS DA GRADE NA QUAL A ESTRUTURA
C 'E DIVIDIDA PARA FINS DE CALCULO.
C * HN 'E A SEPARAÇÃO ENTRE OS PONTOS DA GRADE. HN 'E
C DEFINIDO PELO NUMERO DE PONTOS DA GRADE.
C * NPTG 'E O NUMERO DE PONTOS DA GRADE. PARAMETRO DE
C ENTRADA DO PROGRAMA.
C
C*****#
C
C DIMENSION ZGR(2001)
C REAL*8 ZGR, HN
C INTEGER NPTG
C
C*****#
C
C * VHEL CONTEM O VALOR DO POTENCIAL PARA ELETRONS EM CADA
C PONTO DA GRADE.
C * CEL CONTEM OS COEFICIENTES DA INTERPOLAÇÃO DE VHEL POR
C SPINES CUBICOS.
C * VHH CONTEM O VALOR DO POTENCIAL PARA BURACOS EM CADA PONTO
C DA GRADE.
C * CHH CONTEM OS COEFICIENTES DA INTERPOLAÇÃO DE VHH POR
C SPINES CUBICOS.
C * IER CONTEM A MENSAGEM DE ERRO NAS SUB-ROTINAS DO IMSL.
C
C*****#
C
C DIMENSION VHEL(2001), CEL(2000, 3), VHH(2001), CHH(2000, 3)
C REAL*8 VHEL, CEL, VHH, CHH
C INTEGER IER

```



```

C*****
C * RHOE CONTEM A DENSIDADE ELETRONICA EM CADA ONTO DA GRADE.
C * CRE CONTEM OS COEFICIENTES DE INTERPOLACAO DE RHOE.
C * INT CONTEM A INTEGRAL DE RHOE , CALCULADA DA ESQUERDA
C PARA A DIREITA , EM CADA PONTO DA GRADE.
C * CINT CONTEM OS COEFICIENTES DA INTERPOLACAO DE INT.
C * CAMPO CONTEM O VALOR DO CAMPO ELETRICO EM CADA PONTO
C DA GRADE.
C * CAP CONTEM OS COEFICIENTES DA INTERPOLACAO DE CAMPO.
C
C*****

      DIMENSION RHOE(2001),CRE(2000,3),CV(2000,3)
      DIMENSION INT(2001),CINT(2000,3),CAMPO(2001),CAP(2000,3)
      REAL*8 CAMPO,CAP,INT,CINT,RHOE,CRE,CV

C*****
C
C * EFUN0 , EFUN1 , EFUN3 E EFUN4 SAO AS FUNCOES DE ONDA DO
C PRIMEIRO,SEGUNDO,TERCEIRO E QUARTO ESTADOS LIGADOS NO
C POCO.
C * HFUN0 , HFUN1 , HFUN2 E HFUN3 SAO O MESMO PARA OS BURACOS
C PESADOS.
C * LFUN0 , LFUN1 , LFUN3 E LFUN4 SAO O MESMO PARA OS BURACOS
C LEVES.
C
C*****

      DIMENSION EFUN0(2001),EFUN1(2001),EFUN2(2001),EFUN3(2001)
      DIMENSION HFUN0(2001),HFUN1(2001),HFUN2(2001),HFUN3(2001)
      DIMENSION LFUN0(2001),LFUN1(2001),LFUN2(2001),LFUN3(2001)
      REAL*8 EFUN0,EFUN1,EFUN2,EFUN3
      REAL*8 HFUN0,HFUN1,HFUN2,HFUN3
      REAL*8 LFUN0,LFUN1,LFUN2,LFUN3

C*****
C
C *
C
C*****

      DIMENSION VALOR1(2001),VALOR2(2001),VALOR3(2001),VALOR4(2001)
      DIMENSION VALOR5(2001),VALOR6(2001),VALOR7(2001),VALOR8(2001)
      DIMENSION VALOR9(2001),VALOR10(2001)
      REAL*8 VALOR1,VALOR2,VALOR3,VALOR4,VALOR5,VALOR6,VALOR7,VALOR8
      REAL*8 VALOR9,VALOR10

C*****
C
C * O VETOR EE(I) CONTEM AS ENERGIAS DOS 5 PRIMEIROS ESTADOS DE
C ELETRONS.
C * EEH(I) REPRESENTA O MESMO PARA BURACOS PESADOS E ELH(I) PARA
C OS BURACOS LEVES.
C * DEC E DEV SAO AS DESCONTINUIDADES NAS BANDAS DE CONDUCAO E DE
C VALENCIA.
C * DH 'E UMA VARIAVEL AUXILIAR USADA PARA PASSAR O VALOR DA BARREIRA
C PARA SUB-ROTINAS. ESTE VALOR 'E PASSADO POR DECLARACAO COMMON.
C
C*****

      DIMENSION EE(5),EEH(5),ELH(5)
      REAL*8 EE,EEH,ELH,E1,E2,E3,E4,EIN,EF,ED,AUTOVA,DESC,PARAM,DELTA
      REAL*8 DEC,DEV,EFAUX
      INTEGER DB,DE,DH,LIM1,LIM2,LIM3

```

```

C*****
C * SIGE 'E A DENSIDADE ELETRONICA NO POCO E 'E PARAMETRO DE
C ENTRADA.
C * SIGMA 'E A DENSIDADE DE PORTADORES FOTO-EXCITADOS E 'E
C PARAMETRO DE ENTRADA.
C * SIGMAT 'E A DENSIDADE DE CARGA TOTAL INCLUINDO OS PORTADORES
C FOTO-EXCITADOS.
C * SIGE1 E SIGE2 SAO AS OCUPACOES DA PRIMEIRA E DA SEGUNDA
C SUB-BANDAS.
C * RHOD 'E A DENSIDADE VOLUM'ETRICA DE DOPANTES NA LIGA.
C * R1,R2,XA E XB SAO VARIAVEIS AUXILIARES.
C * Z1,Z2,Z3,Z4 E Z5 SAO AS DISTANCIAS MOSTRADAS NA FIGURA.
C Z1 E Z5 SAO CALCULADAS PELO PROGRAMA.
C * ME , MHH E MLH SAO AS MASSAS EFETIVAS DE ELETRONS,BURACOS
C PESADOS E BURACOS LEVES.
C * XAL 'E A PROPORCAO DE AL NA LIGA.
C * HB 'E H-BARRA.
C * CME,CMHH,CMLH SAO CONSTANTES QUE APARECEM NA EQUACAO DE
C SCHRODINGER.
C * CM 'E USADA PARA PASSAR ESTES VALORES PARA AS SUB-ROTINAS.
C * EP 'E A CONSTANTE DIELETRICA DO GAAS.
C * Q A Q10 SAO VARIAVEIS AUXILIARES PARA RETORNO DE VALORES
C DA SUB-ROTINA DE INTEGRACAO.
C * NI , NF MARCAM OS LIMITES DENTRO DOS QUAIS CALCULAREMOS
C AS FUNCOES DE ONDA.
C * LOOP MARCA O NUMERO DE INTERACOES ATE A CONVERGENCIA.
C * FIM 'E VARIABEL AUXILIAR.
C * INTER 'E O INTERVALO NO QUAL SE DIVIDE A GARDE DE ENERGIA
C PARA A PROCURA DOS AUTOVALORES GROSSEIROS.
C
C*****

```

```

REAL*8 SIGE,SIGE1,SIGE2,SIGMA,SIGMAT,RHOD

```

```

REAL*8 R1,R2,Z1,Z2,Z3,Z4,Z5,XA,XB

```

```

REAL*8 MEGA,MHHGA,MLHGA,MEAL,MHHAL,MLHAL,XAL,HB,CMAL

```

```

REAL*8 CMEGA,CMHHGA,CMLHGA,CMEAL,CMHHAL,CMLHAL,CMGA,EP,Q

```

```

REAL Q1,Q2,Q3,Q4,Q5,Q6,Q7,Q8,Q9,Q10

```

```

REAL*8 TESTE1,TESTE2

```

```

INTEGER NI,NF,LOOP,FIM,INTER,JOB,TJOB

```

```

C*****

```

```

COMMON /GRID/ZGR,NPTG

```

```

COMMON /H/HN

```

```

COMMON /LIM/NI,NF

```

```

COMMON /WELL/LIM1,LIM2

```

```

COMMON /CONST/CMGA,CMAL

```

```

COMMON /BARR/DB

```

```

COMMON /INT/INTER

```

```

C#####
C
C LEITURA DOS PARAMETROS DO PROBLEMA
C
C#####

```

```

OPEN (UNIT=1, STATUS='OLD', FILE='param.dat')
READ (1, *) SIGE
READ (1, *) SIGMA
READ (1, *) RHOD
READ (1, *) Z2
READ (1, *) Z3
READ (1, *) Z4
READ (1, *) MEGA
READ (1, *) MHHGA
READ (1, *) MLHGA
READ (1, *) XAL
READ (1, *) NPTG
READ (1, *) INTER
READ (1, *) TJOB
CLOSE (1)

```

HB=1.0545887D-34

DELTA = 1.155*XAL+.37*XAL*XAL

DEC=294

DEV=196

EP=12.6*8.85418782D-22

RHOD=1.60219D-19*RHOD*1D-24

SIGE=-1.60219D-19*SIGE*1D-16

SIGMA=-1.60219D-19*SIGMA*1D-16

SIGMAT=SIGE+SIGMA

EF=-6.241457D34*SIGMAT/2.7987D10

EFAUX=EF

write(*,*) ''

write(*,*) 'Nivel De Fermi Para = ', efaux

write(*,*) ''

MEAL=(MEGA+0.083*XAL)*9.1D-31

MHHAL = (MHHGA + 0.29*XAL)*9.1D-31

MLHAL = (MLHGA + 0.063*XAL)*9.1D-31

MEGA=MEGA*9.1D-31

MHHGA=MHHGA*9.1D-31

MLHGA=MLHGA*9.1D-31

CMEGA=2*MEGA/(HB*HB)

CMEGA=CMEGA * 1.60219D-42

CMHHGA=2*MHHGA/(HB*HB)

CMHHGA=CMHHGA * 1.60219D-42

CMLHGA=2*MLHGA/(HB*HB)

CMLHGA=CMLHGA * 1.60219D-42

CMEAL=2*MEAL/(HB*HB)

CMEAL=CMEAL*1.60219D-42

CMHHAL=2*MHHAL/(HB*HB)

CMHHAL=CMHHAL*1.60219D-42

CMLHAL=2*MLHAL/(HB*HB)

CMLHAL=CMLHAL*1.60219D-42

CMEAL=CMEGA

CMHHAL=CMHHGA

CMLHAL=CMLHGA

DE=200
DH=150

C
C DEFINE OS PONTOS DO GRID DE INTERPOLACAO.NO GRID DE INTERPOLACAO
C O INTERVALO ENTRE OS PONTOS E DE NH/4.
C
C#####

HN=(Z4+90)/(NPTG-1)

DO 10, I=1, NPTG, 1
ZGR(I)=-40+HN*(I-1)
IF ((ZGR(I).GE.Z2).AND.(XA.EQ.0)) THEN
LIM1=I
XA=1
END IF
IF ((ZGR(I).GE.Z3).AND.(XB.EQ.0)) THEN
LIM2=I
XB=1
END IF
IF ((ZGR(I).GE.Z4).AND.(R1.EQ.0)) THEN
LIM3=I
R1=1
END IF

10 CONTINUE

Z2=ZGR(LIM1)
Z3=ZGR(LIM2)
Z4=ZGR(LIM3)

C
C Z2 passa a ser ZGR(LIM1)
C Z3 passa a ser ZGR(LIM2)
C Z4 passa a ser ZGR(LIM3)

write(*,*) 'Z2 = ZGR(LIM1) = ',zgr(lim1)
write(*,*) 'Z3 = ZGR(LIM2) = ',zgr(lim2)
write(*,*) 'Z4 = ZGR(LIM3) = ',zgr(lim3)
write(*,*) ''

C
C DEFINICAO E INTERPOLACAO DO POTENCIAL DE ENTRADA.
C
C#####

DO 15 I=1, NPTG
IF ((I.LT.LIM1).OR.(I.GT.LIM2)) THEN
VHEL(I)=DEC
END IF
IF ((I.GE.LIM1).AND.(I.LE.LIM2)) THEN
VHEL(I)=0
END IF
15 CONTINUE

c
c open(unit=1, file='/home/des01/mendonca/saifor/vinic')
c do 16, i=1, nptg, 1
c read(1, *) zgr(i), vhel(i)

```

c16      continue
c        close(1)

CALL JCSCCU(ZGR,VHEL,NPTG,CEL,2000,IER)

open(unit=1,file='/home/des01/mendonca/saifor/vinic')
do 16,i=1,nptg,1
write(1,*) zgr(i),vhel(i)
16      continue
        close(1)

#####
C AGORA VOU SOLUCIONAR A EQUACAO DE SCHRODINGER PARA ESTE POTENCIAL.
C CALCULO OS QUATRO PRIMEIROS AUTOVALORES DE ENERGIA.
C
#####

CMGA=CMEGA
CMAL=CMEAL
DB=DE
LOOP=0
FIM=0

35      LOOP=LOOP+1

EIN=EE(1)

XA=Z2-100
XB=Z3+100
CALL EI(E1,E2,E3,E4,VHEL,XA,XB,1)

c      write(*,*) ''
c      write(*,*) 'E1 = ',e1
c      write(*,*) 'E2 = ',e2
c      write(*,*) ''

XA=Z2-100
XB=Z3+100
JOB=TJOB
EE(1)=AUTOVA(E1,XA,XB,VHEL,JOB)
XA=Z2-150
XB=Z3+150
JOB=TJOB
EE(2)=AUTOVA(E2,XA,XB,VHEL,JOB)

c      write(*,*) ''
c      write(*,*) 'EE(1) = ',ee(1)
c      write(*,*) 'EE(2) = ',ee(2)
c      write(*,*) 'PARAM = ',ee(2)-ee(1)
c      write(*,*) ''

PARAM=EE(2)-EE(1)

IF (PARAM.LT.EFAUX) THEN
    SIGE1=(SIGMAT+PARAM*-4.48415d-25)/2
    SIGE2=SIGMAT-SIGE1
    EF=-(SIGE1*6.241457D34)/(2.7987D10)
c      write(*,*) sigel/-1.60219d-35
c      write(*,*) sigel2/-1.60219d-35

GOTO 37

```

END IF

SIGEL=SIGMAT
EF=-(SIGEL*6.241457D34)/(2.7987D10)

C SIGEL = DENSIDADE DE CARGA NA PRIMEIRA SUB-BANDA
C SIGE2 = DENSIDADE DE CARGA NA SEGUNDA SUB-BANDA
C EF = NIVEL DE FERMI MEDIDO A PARTIR DO FUNDO DA
C PRIMEIRA SUB-BANDA

37 IF (LOOP.GT.1) THEN

TESTE1=ABS (EE(1)-EIN)

write(*,*) loop,' ',teste1

C IF (LOOP.GT.2) THEN

C IF (TESTE2.LT.TESTE1) THEN

C WRITE(*,*) 'CALCULO DIVERGENTE'

C GOTO 500

C END IF

C END IF

TESTE2=TESTE1

IF (TESTE1.LT.3.1D-2) THEN

FIM=1

END IF

END IF

C#####

C
C CALCULO E INTERPOLO AS DUAS PRIMEIRAS FUNCOES DE ONDA,DADOS O
C POTENCIAL E O AUTOVALOR DE ENERGIA.

C
C#####

XA=Z2-100

XB=Z3+100

CALL FUN(XA,XB,EE(1),VHEL,EFUN1,VALOR1,0)

IF (PARAM.LT.EFAUX) THEN

CALL FUN(XA,XB,EE(2),VHEL,EFUN2,VALOR2,0)

END IF

C open(unit=1,file='/home/des01/mendonca/saifor/efun1')

C open(unit=2,file='/home/des01/mendonca/saifor/efun2')

C open(unit=3,file='/home/des01/mendonca/saifor/vhel')

C do 39,i=1,nptg,1

C write(1,*) zgr(i),efun1(i)

C write(2,*) zgr(i),efun2(i)

C write(3,*) zgr(i),vhel(i)

c39 continue

C close(1)

C close(2)

C close(3)

C#####

C

C CALCULO A LARGURA DAS CAMADAS IONIZADAS.UNIDADE DE COMPRIMENTO E ANGSTRON.
C CALCULO TAMBEM A INTEGRAL DA DENSIDADE DE CARGA PARA CADA PONTO DO GRID.

C *****#

```
IF (PARAM.LT.EFAUX) THEN
  DO 40,I=1,NPTG,1
    RHOE(I)=SIGE1*VALOR1(I)+SIGE2*VALOR2(I)
40  CONTINUE
    GOTO 50
END IF
```

```
DO 45,I=1,NPTG,1
  RHOE(I)=SIGE1*VALOR1(I)
45  CONTINUE
```

```
50  CALL ICSCCU(ZGR,RHOE,NPTG,CRE,2000,IER)
```

```
DO 55,I=1,NPTG,1
```

```
  IF (I.LE.NI) THEN
    INT(I)=0
    GOTO 55
  END IF
```

```
  IF (I.GE.NF) THEN
    INT(I)=INT(NF-1)
    GOTO 55
  END IF
```

```
  XA=ZGR(I-1)
  XB=ZGR(I)
  CALL DCSQDU(ZGR,RHOE,NPTG,CRE,2000,XA,XB,Q,IER)
  INT(I)=Q+INT(I-1)
```

```
55  CONTINUE
```

```
C  INT(I) = INTEGRAL DA DENSIDADE DE CARGA GERADA PELOS
C  ELETRONS NO POCO. INTEGRAL DE ZERO A Z.
```

```
CALL ICSCCU(ZGR,INT,NPTG,CINT,2000,IER)
```

```
XA=0
```

```
XB=Z4
```

```
CALL DCSQDU(ZGR,INT,NPTG,CINT,2000,XA,XB,Q,IER)
```

```
R1=SIGMAT*SIGMAT/(2*RHOD)-Q
```

```
R2=-SIGMAT+RHOD*Z4
```

```
Z1=R1/R2
```

```
Z5=-SIGMAT/RHOD+Z4-Z1
```

```
C  write(*,*) 'Z1 = ',Z1
C  write(*,*) 'Z5 = ',Z5
```

C *****#

C
C CALCULO O CAMPO ELETRICO.UNIDADES VOLTS/ANGSTRON.
C COM CAMPO ELETRICO CALCULO O POTENCIAL ELETROSTATICO E A NOVA
C ENERGIA POTENCIAL PARA OS ELETRONS.

C

```

XA=-(RHOD/EP)*Z1
XB=(RHOD/EP)
R1=(RHOD/EP)*(Z4-Z1)
R2=(SIGMAT/EP)

```

```

DO 60,I=1,NPTG,1
  IF (ZGR(I).LT.-Z1) THEN
    CAMPO(I)=0
  END IF
  IF ((ZGR(I).GE.-Z1).AND.(ZGR(I).LT.0)) THEN
    CAMPO(I)=XA-XB*ZGR(I)
  END IF
  IF ((ZGR(I).GE.0).AND.(ZGR(I).LT.Z4)) THEN
    CAMPO(I)=XA-INT(I)/EP
  END IF
  IF ((ZGR(I).GE.Z4).AND.(ZGR(I).LT.Z5)) THEN
    CAMPO(I)=R1-R2-XB*ZGR(I)
  END IF
  IF (ZGR(I).GE.Z5) THEN
    CAMPO(I)=0
  END IF

```

60 CONTINUE

```

c   open(unit=1,file='/home/des01/mendonca/saifor/campo')
c   do 61,i=1,nptg,1
c   write(1,*) zgr(i),campo(i)
c61  continue
c   close(1)

```

CALL ICSCCU(ZGR,CAMPO,NPTG,CAP,2000,IER)

VHEL(LIM1)=0

DO 62,I=LIM1,2,-1

```

  XA=ZGR(I)
  XB=ZGR(I-1)
  CALL DCSQDU(ZGR,CAMPO,NPTG,CAP,2000,XA,XB,Q,IER)
  VHEL(I-1)=VHEL(I)-Q*1D3

```

62 CONTINUE

DO 63,I=LIM1,NPTG-1,1

```

  XA=ZGR(I)
  XB=ZGR(I+1)
  CALL DCSQDU(ZGR,CAMPO,NPTG,CAP,2000,XA,XB,Q,IER)
  VHEL(I+1)=VHEL(I)-Q*1D3

```

63 CONTINUE

DO 64,I=1,NPTG,1

```

  IF ((I.LT.LIM1).OR.(I.GT.LIM2)) THEN
    VHEL(I)=VHEL(I)+DEC
  END IF

```

64 CONTINUE

```

c   J=LIM1-1
c   VHEL(J)=DEC
c   DO 65,i=J,2,-1

```



```

C      XA=ZGR(I)
C      XB=ZGR(I-1)
C      CALL DCSQDU(ZGR,CAMPO,NPTG,CAP,2000,XA,XB,Q,IER)
C      VHEL(I-1)=VHEL(I)-Q*1D3
C65    CONTINUE
C
C      VHEL(J+1)=0
C      K=LIM2
C      DO 70,I=J+1,K,1
C      XA=ZGR(I)
C      XB=ZGR(I+1)
C      CALL DCSQDU(ZGR,CAMPO,NPTG,CAP,2000,XA,XB,Q,IER)
C      VHEL(I+1)=VHEL(I)-Q*1D3
C70    CONTINUE
C
C      VHEL(J+1)=DEC
C      K=1
C      VHEL(K+1)=VHEL(K)+DEC
C      K=I
C      DO 75,I=K+1,NPTG-1,1
C      XA=ZGR(I)
C      XB=ZGR(I+1)
C      CALL DCSQDU(ZGR,CAMPO,NPTG,CAP,2000,XA,XB,Q,IER)
C      VHEL(I+1)=VHEL(I)-Q*1D3
C75    CONTINUE
C
C      open(unit=1,file='/home/des01/mendonca/saifor/vhel')
C      do 76,i=1,nptg,1
C      write(1,*) zgr(i),vhel(i)
C76    continue
C      close(1)
C
C      goto 500
C
CALL ICSCCU(ZGR,VHEL,NPTG,CEL,2000,IER)

IF (FIM.EQ.0) THEN
    GOTO 35
END IF

85  XA=Z2-100
    XB=Z3+100
    CALL EI(E1,E2,E3,E4,VHEL,XA,XB,5)
    XA=Z2-150
    XB=Z3+150
    EE(1)=AUTOVA(E1,XA,XB,VHEL,30)
    XA=Z2-200
    XB=Z3+200
    EE(2)=AUTOVA(E2,XA,XB,VHEL,30)
    EE(3)=AUTOVA(E3,XA,XB,VHEL,30)
    XA=Z2-200
    XB=Z3+200
    EE(4)=AUTOVA(E4,XA,XB,VHEL,30)

    DO 90,I=LIM1+1,LIM2-1,1
    IF (VHEL(J+1).LT.VHEL(I)) THEN
        GOTO 95
    END IF
90    CONTINUE
95    DESC=VHEL(I)

    ED=VHEL(1)-EF-EE(1)
    WRITE(*,*) 'POTENCIAL CONVERGIDO'
    WRITE(*,*) ''
    IF (PARAM.LT.EF) THEN

```

```

WRITE(*,*) 'DUAS SUB-BANDAS OCUPADAS'
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'SEPARACAO ENTRE ELAS = ',PARAM
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'OCUPACAO DA SUB-BANDA 1 =',SIGEL/(-1.60219D-35)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'OCUPACAO DA SUB-BANDA 2 =',SIGE2/(-1.60219D-35)
WRITE(*,*) ''
END IF
WRITE(*,*) 'NUMERO DE INTERACOES = ',LOOP
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'ENERGIA DO PRIMEIRO ESTADO = ',(EE(1)-DESC)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'ENERGIA DO SEGUNDO ESTADO = ',(EE(2)-DESC)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'ENERGIA DO TERCEIRO ESTADO = ',(EE(3)-DESC)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'ENERGIA DO QUARTO ESTADO = ',(EE(4)-DESC)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'MAXIMO DO POTENCIAL DENTRO DO POCO = ',DESC
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'CAMADA IONIZADA A ESQUERDA = ',Z1
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'CAMADA IONIZADA A DIREITA = ',(Z5-Z4)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'NIVEL DE FERMI A PARTIR DO FUNDO DA BANDA = ',EF
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'DESCONTINUIDADE NA BANDA DE CONDUCAO = ',DEC
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'DECONTINUIDADE NA BANDA DE VALENCIA = ',DEV
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'POTENCIAL EM Z1 = ',VHEL(1)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'NIVEL DOADOR = ',ED
WRITE(*,*) ''

```

```

OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/e0')
open(unit=2,file='/home/des01/mendonca/saifor/ve')

```

```

XA=Z2-100

```

```

XB=Z3+100

```

```

CALL FUN(XA,XB,EE(1),VHEL,EFUN0,VALOR1,0)

```

```

DO 100,I=1,NPTG,1

```

```

WRITE(1,*) ZGR(I),EFUN0(I)

```

```

WRITE(2,*) ZGR(I),VHEL(I)

```

```

CONTINUE

```

```

CLOSE(1)

```

```

CLOSE(2)

```

```

XA=Z2-130

```

```

XB=Z3+130

```

```

OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/e1')

```

```

CALL FUN(XA,XB,EE(2),VHEL,EFUN1,VALOR1,0)

```

```

DO 105,I=1,NPTG,1

```

```

WRITE(1,*) ZGR(I),EFUN1(I)

```

```

CONTINUE

```

```

CLOSE(1)

```

```

OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/e2')

```

```

XA=Z2-150

```

```

XB=Z3+150

```

```

CALL FUN(XA,XB,EE(3),VHEL,EFUN2,VALOR1,0)

```

```

DO 110,I=1,NPTG,1

```

```

WRITE(1,*) ZGR(I),EFUN2(I)

```

```

CONTINUE

```

```

CLOSE(1)

```

```

XA=Z2-180
XB=Z3+180
OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/e3')
CALL FUN(XA,XB,EE(4),VHEL,EFUN3,VALOR1,0)
DO 115,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) ZGR(I),EFUN3(I)
115 CONTINUE
CLOSE(1)

C*****
C
C INICIA CALCULO DAS INTEGRAIS DE SUPERPOSICAO ENTRE AS
C FUNCOES DE ONDA DE ELETRONS
C
C*****

DO 117,I=1,NPTG,1
VALOR1(I)=EFUN0(I)*EFUN0(I)
VALOR2(I)=EFUN0(I)*EFUN1(I)
VALOR3(I)=EFUN0(I)*EFUN2(I)
VALOR4(I)=EFUN0(I)*EFUN3(I)
VALOR5(I)=EFUN1(I)*EFUN1(I)
VALOR6(I)=EFUN1(I)*EFUN2(I)
VALOR7(I)=EFUN1(I)*EFUN3(I)
VALOR8(I)=EFUN2(I)*EFUN2(I)
VALOR9(I)=EFUN2(I)*EFUN3(I)
VALOR10(I)=EFUN3(I)*EFUN3(I)
117 CONTINUE

XA=Z2-105
XB=Z3+105
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR1,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR1,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q1=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR2,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR2,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q2=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR3,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR3,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q3=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR4,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR4,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q4=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR5,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR5,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q5=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR6,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR6,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q6=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR7,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR7,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q7=Q

XA=Z2-155
XB=Z3+155
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR8,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR8,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)

```

Q8=Q

CALL ICSCCU(ZGR, VALOR9, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU(ZGR, VALOR9, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q9=Q

CALL ICSCCU(ZGR, VALOR10, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU(ZGR, VALOR10, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q10=Q

```
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E0 | E0 > =', Q1
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E0 | E1 > =', Q2
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E0 | E2 > =', Q3
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E0 | E3 > =', Q4
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E1 | E1 > =', Q5
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E1 | E2 > =', Q6
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E1 | E3 > =', Q7
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E2 | E2 > =', Q8
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E2 | E3 > =', Q9
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< E3 | E3 > =', Q10
WRITE(*,*) ''
```

C*****
C FIM DO CALCULO DAS SUPERPOSICOES.
C*****

C
C CALCULO DOS NIVEIS PARA BURACOS
C

C
C COSTRUCAO DO POTENCIAL
C
#####

```
DO 130, I=1, NPTG, 1
  IF ((I.LT.LIM1).OR.(I.GT.LIM2)) THEN
    VHH(I) = -(VHEL(I) - DEC) + DEV + DESC
  END IF
  IF ((I.GE.LIM1).AND.(I.LE.LIM2)) THEN
    VHH(I) = -VHEL(I) + DESC
  END IF
```

130 CONTINUE

```
OPEN(UNIT=1, FILE='/home/des01/mendonca/saifor/vh')
DO 135, I=1, NPTG, 1
  WRITE(1, *) ZGR(I), VHH(I)
```

135 CONTINUE

CLOSE(1)

CALL ICSCCU(ZGR,VHH,NPTG,CHH,2000,IER)

POTENCIAL CONSTRUIDO E INTERPOLADO

C
C
C
C
C#####
C#####
C
C
C#####

C CALCULO DAS AUTO ENERGIAS

CMGA=CMHHGA
CMAL=CMHHAL
DB=DH

XA=Z2-60
XB=Z3+60
CALL EI(E1,E2,E3,E4,VHH,XA,XB,5)

XA=Z2-100
XB=Z3+100
JOB=TJOB
EEH(1)=AUTOVA(E1,XA,XB,VHH,30)
JOB=TJOB
EEH(2)=AUTOVA(E2,XA,XB,VHH,30)
XA=Z2-150
XB=Z3+150
JOB=TJOB
EEH(3)=AUTOVA(E3,XA,XB,VHH,35)
JOB=TJOB
EEH(4)=AUTOVA(E4,XA,XB,VHH,35)

WRITE(*,*)''
WRITE(*,*) 'PRIMEIRO NIVEL DE BURACOS PESADOS = ',EEH(1)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'SEGUNDO NIVEL DE BURACOS PESADOS = ',EEH(2)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'TERCEIRO NIVEL DE BURACOS PESADOS = ',EEH(3)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'QUARTO NIVEL DE BURACOS PESADOS = ',EEH(4)
WRITE(*,*) ''

XA=Z2-60
XB=Z3+60
CALL FUN(XA,XB,EEH(1),VHH,HFUN0,VALOR1,0)
OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/h0')
DO 140,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) ZGR(I),HFUN0(I)
140 CONTINUE
CLOSE(1)

OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/h1')
CALL FUN(XA,XB,EEH(2),VHH,HFUN1,VALOR1(1),0)
DO 145,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) ZGR(I),HFUN1(I)
145 CONTINUE
CLOSE(1)

OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/h2')

```

XA=Z2-100
XB=Z3+100
CALL FUN(XA,XB,EEH(3),VHH,HFUN2,VALOR1,0)
DO 150,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) ZGR(I),HFUN2(I)
150 CONTINUE
CLOSE(1)

OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/h3')
CALL FUN(XA,XB,EEH(4),VHH,HFUN3,VALOR1,0)
DO 155,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) ZGR(I),HFUN3(I)
155 CONTINUE
CLOSE(1)

DO 156,I=1,NPTG,1
VALOR1(I)=EFUN0(I)*HFUN0(I)
VALOR2(I)=EFUN0(I)*HFUN1(I)
VALOR3(I)=EFUN0(I)*HFUN2(I)
VALOR4(I)=EFUN0(I)*HFUN3(I)
VALOR5(I)=EFUN1(I)*HFUN0(I)
VALOR6(I)=EFUN1(I)*HFUN1(I)
VALOR7(I)=EFUN1(I)*HFUN2(I)
VALOR8(I)=EFUN1(I)*HFUN3(I)
VALOR9(I)=EFUN2(I)*HFUN1(I)
VALOR10(I)=EFUN2(I)*HFUN2(I)
156 CONTINUE

XA=Z2-105
XB=Z3+105
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR1,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR1,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q1=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR2,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR2,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q2=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR3,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR3,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q3=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR4,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR4,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q4=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR5,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR5,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q5=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR6,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR6,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q6=Q

CALL ICSCCU(ZGR,VALOR7,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR7,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q7=Q

XA=Z2-155
XB=Z3+155
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR8,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR8,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q8=Q

```

```

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR9, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR9, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q9=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR10, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR10, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q10=Q

```

```

WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE0 | HH0 > =', Q1
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE0 | HH1 > =', Q2
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE0 | HH2 > =', Q3
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE0 | HH3 > =', Q4
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE1 | HH0 > =', Q5
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE1 | HH1 > =', Q6
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE1 | HH2 > =', Q7
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE2 | HH3 > =', Q8
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE2 | HH1 > =', Q9
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) '< EE3 | HH2 > =', Q10
WRITE (*, *) ''

```

```

C*****#
C
C CALCULO PARA BURACOS LEVES
C
C*****#

```

```

CMGA=CMLHGA
CMAL=CMLHAL

```

```

XA=Z2-60
XB=Z3+60
CALL EI (E1, E2, E3, E4, VHH, XA, XB, 5)

```

```

XA=Z2-150
XB=Z3+150
JOB=TJOB
ELH (1)=AUTOVA (E1, XA, XB, VHH, 30)
JOB=TJOB
ELH (2)=AUTOVA (E2, XA, XB, VHH, 30)
XA=Z2-150
XB=Z3+150
JOB=TJOB
ELH (3)=AUTOVA (E3, XA, XB, VHH, 30)
XA=Z2-200
XB=Z3+200
JOB=TJOB
ELH (4)=AUTOVA (E4, XA, XB, VHH, 30)

```

```

WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) 'PRIMEIRO NIVEL DE BURACOS LEVES =', ELH (1)
WRITE (*, *) ''
WRITE (*, *) 'SEGUNDO NIVEL DE BURACOS LEVES =', ELH (2)
WRITE (*, *) ''

```

```
WRITE(*,*) 'TERCEIRO NIVEL DE BURACOS LEVES =',ELH(3)
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) 'QUARTO NIVEL DE BURACOS LEVES =',ELH(4)
WRITE(*,*) ''
```

```
OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/l0')
XA=Z2-100
XB=Z3+100
CALL FUN(XA,XB,ELH(1),VHH,LFUN0,VALOR1,0)
DO 160,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) ZGR(I),LFUN0(I)
160 CONTINUE
CLOSE(1)
```

```
OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/l1')
XA=Z2-130
XB=Z3+130
CALL FUN(XA,XB,ELH(2),VHH,LFUN1,VALOR1,0)
DO 165,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) REAL(ZGR(I)),REAL(LFUN1(I))
165 CONTINUE
CLOSE(1)
```

```
OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/l2')
XA=Z2-150
XB=Z3+150
CALL FUN(XA,XB,ELH(3),VHH,LFUN2,VALOR1,0)
DO 170,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) REAL(ZGR(I)),REAL(LFUN2(I))
170 CONTINUE
CLOSE(1)
```

```
OPEN(UNIT=1,FILE='/home/des01/mendonca/saifor/l3')
XA=Z2-180
XB=Z3+180
CALL FUN(XA,XB,ELH(4),VHH,LFUN3,VALOR,0)
DO 175,I=1,NPTG,1
WRITE(1,*) REAL(ZGR(I)),REAL(LFUN3(I))
175 CONTINUE
CLOSE(1)
```

```
DO 180,I=1,NPTG,1
VALOR1(I)=EFUN0(I)*LFUN0(I)
VALOR2(I)=EFUN0(I)*LFUN1(I)
VALOR3(I)=EFUN0(I)*LFUN2(I)
VALOR4(I)=EFUN0(I)*LFUN3(I)
VALOR5(I)=EFUN1(I)*LFUN0(I)
VALOR6(I)=EFUN1(I)*LFUN1(I)
VALOR7(I)=EFUN1(I)*LFUN2(I)
VALOR8(I)=EFUN1(I)*LFUN3(I)
VALOR9(I)=EFUN2(I)*LFUN1(I)
VALOR10(I)=EFUN2(I)*LFUN2(I)
180 CONTINUE
```

```
XA=Z2-105
XB=Z3+105
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR1,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR1,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q1=Q
```

```
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR2,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR2,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
Q2=Q
```

```
CALL ICSCCU(ZGR,VALOR3,NPTG,CV,2000,IER)
CALL DCSQDU(ZGR,VALOR3,NPTG,CV,2000,XA,XB,Q,IER)
```


Q3=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR4, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR4, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q4=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR5, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR5, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q5=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR6, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR6, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q6=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR7, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR7, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q7=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR8, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR8, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q8=Q

XA=Z2-155
XB=Z3+155
CALL ICSCCU (ZGR, VALOR9, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR9, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q9=Q

CALL ICSCCU (ZGR, VALOR10, NPTG, CV, 2000, IER)
CALL DCSQDU (ZGR, VALOR10, NPTG, CV, 2000, XA, XB, Q, IER)
Q10=Q

WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE0 | LH0 > =', Q1
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE0 | LH1 > =', Q2
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE0 | LH2 > =', Q3
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE0 | LH3 > =', Q4
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE1 | LH0 > =', Q5
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE1 | LH1 > =', Q6
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE1 | LH2 > =', Q7
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE1 | LH3 > =', Q8
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE2 | LH1 > =', Q9
WRITE(*,*) ''
WRITE(*,*) '< EE2 | LH2 > =', Q10
WRITE(*,*) ''

#####

```
C#####
C#####
C
C SUBROTINAS
C
C#####
C#####
```

SUBROUTINE EI(II,III,IV,V,POT,XA,XB,JOB)

DIMENSION POT(2001)
REAL*8 POT

DIMENSION FUNCAO(2001),VALOR(2001)
REAL*8 FUNCAO,VALOR,XA,XB
INTEGER DC,JOB

DIMENSION VAL(1500)
REAL*8 I,II,III,IV,V,VAL
INTEGER INTER,NI,NF

COMMON /BARR/DC
COMMON /INT/INTER
COMMON /LIM/NI,NF

```
C#####
```

C A IDEIA DESTA SUB-ROTINA 'E CALCULAR O VALOR DA FUNCAO DE ONDA
C (INTEGRADA POR NUMEROV A PARTIR DE NI) NO PONTO DE NUMERO NF
C PARA UMA GRADE DE VALORES DE ENERGIA ENTRE ZERO E A ENERGIA MAXIMA
C ATE A QUAL PROCURAMOS POR AUTOVALORES. DEPOIS ACHAMOS A ENERGIA PARA
C AS QUAIS FUNCAO(NF) E' MINIMO. ESTAS SAO AS PRIMEIRAS APROXIMACOES
C PARA AS AUTOENERGIAS.

C * INTER DEFINE O INTERVALO ENTRE OS PONTOS DA GRADE DE ENERGIA.

C * DC 'E PASSADO POR DECLARACAO COMMON E 'E A ENRGIA MAXIMA ATE A
C QUAL PROCURAMOS AUTO-VALORES.

C * FUN 'E A SUB-ROTINA QUE CALCULA (POR NUMEROV) A FUNCAO DE ONDA.

C * O VALOR DA FUNCAO DE ONDA NOS DIVERSOS PONTOS DO GRID ESTA CONTIDO
C NO VETOR FUNCAO. O VETOR VALOR CONTEM O MODULO AO QUADRADO.

C * VAL 'E O VETOR QUE CONTEM OS VALORES DE FUNCAO(NF) PARA AS DIVERSAS
C ENERGIAS DA GRADE.

```
C#####
```

```
C#####
```

C CALCULA O VALOR DE FUNCAO(NF) PARA AS ENERGIAS DA GRADE E AS
C ARMAZENA NO VETOR VAL(I).

```
C#####
```

DO 20,I=1,DC,INTER

CALL FUN(XA,XB,I,POT,FUNCAO,VALOR,1)

VAL(I)=ABS(FUNCAO(NI)-FUNCAO(NF))

20 CONTINUE

```
if (job.eq.10) then
  open(unit=1,file='/home/des01/plentz/fortran/doc/saida/val')
  do 21,i=1,dc,inter
    write(1,*) i,val(i)
21  continue
    close(1)
  end if
```

```
C#####
C
C   FIM DESTE CALCULO.
C
C#####
```

```
C*****
C PRIMEIRO AUTOVALOR
C*****
```

```
DO 25,I=1,DC,INTER
  IF (VAL(I+INTER).GT.VAL(I)) THEN
    GOTO 30
  END IF
```

25 CONTINUE

30 II=I

```
IF (JOB.EQ.0) THEN
  GOTO 100
END IF
```

```
C*****
```

```
C*****
C SEGUNDO AUTOVALOR
C*****
```

```
DO 35,I=(II+INTER),DC-2,INTER
```

```
IF (VAL(I+INTER).LT.VAL(I)) THEN
```

```
  IF (VAL(I+2*INTER).GT.VAL(I+INTER)) THEN
    GOTO 40
  END IF
```

```
END IF
```

35 CONTINUE

40 IF (I.EQ.DC) THEN

III=-1

IV=-1

V=-1

GOTO 100

END IF

III=I+INTER

IF (JOB.EQ.1) THEN

GOTO 100

END IF

```
C*****
```



```

C INICIO DA FUNCAO AUTOVA QUE CALCULA OS VALORES REFINADOS DAS
C AUTOENERGIAS.
C
C#####
C#####
C * A IDEIA AQUI 'E SEMELHATEA DA SUB-ROTINA EI SO QUE NESTE CASO
C ESTABELECEMOS UMA GRADE FINA DE ENERGIAS EM TORNO DE UM VALOR
C GROSSEIRO QUE 'E OBTIDO DE EI.
C
C * II 'E O AUTOVALOR GROSSEIRO DE ENERGIA.
C
C * NI E NF SAO OS MESMOS JA DEFINIDOS NA INTRODUCAO DA SUB-ROTINA EI.
C
C * POT 'E O VETOR CONTENDO OS AUTOVALORES DO PONTENCIAL NOS PONTOS DO
C GRID NO QUAL A AMOSTRA 'E DIVIDIDA.
C
C * JOB DEFINE O GRAU DE REFINAMENTO DO AUTOVALOR CALCULADO.
C
C * TODOS SAO ENTRADAS.
C
C
C * INTER 'E PASSADO POR DECLARACAO COMMON E 'E O MESMO INTER DEFINIDO
C NA SUB-ROTINA EI.
C
C#####
C#####
C PARA UM DADO POTENCIAL REFINA O CALCULO DO AUTOVALOR II
C
C#####
C
FUNCTION AUTOVA(E, XA, XB, POT, JOB)

DIMENSION POT(2001)
REAL*8 POT

DIMENSION FUNCAO(2001), VALOR(2001)
REAL*8 FUNCAO, VALOR

REAL*8 E, TIN, TESTE, AUTOVA, INT, AUXE, I, XA, XB

INTEGER JOB, INTER, N, NI, NF

COMMON /INT/INTER
COMMON /LIM/NI, NF

C#####
C
C
C
IF (E.EQ.-1) THEN
  AUTOVA=-1
  RETURN
END IF

INT=INTER

DO 60, N=1, JOB, 1

  E = E - INT

```

```
CALL FUN(XA,XB,E,POT,FUNCAO,VALOR,1)
TIN=ABS(FUNCAO(NI)-FUNCAO(NF))
```

```
INT = INT * 0.5
```

```
DO 30,I=1,4,1
```

```
AUXE = E + INT * I
```

```
IF (I.GT.1) THEN
  TIN=TESTE
END IF
```

```
CALL FUN(XA,XB,AUXE,POT,FUNCAO,VALOR,1)
```

```
TESTE=ABS(FUNCAO(NI)-FUNCAO(NF))
```

```
IF (TESTE.GT.TIN) THEN
  E = AUXE - INT
  GOTO 60
END IF
```

```
30    CONTINUE
```

```
60    CONTINUE
```

```
C      write(*,*) e,'',(e-int),'',int
```

```
AUTOVA=E-INT
```

```
100   RETURN
      END
```

```
#####
```

```
C
C FIM DA SUB-ROTINA AUTOVA.
```

```
#####
```

```
C#####
```

```
C
C INICIO DA FUNCAO FUN.
```

```
C
C FUN CALCULA A FUNCAO DE ONDA E A DENSIDADE DE PROBABILIDADE PARA
C UM DADO POTENCIAL UNIDIMENSIONAL ARBITRARIO DADO UM VALOR DE
C ENERGIA.
```

```
C
C GRID LIMITADO EM 2001 PONTOS.
```

```
C#####
```

```
C*****#
```

```
C
C XA = PONTO A ESQUERDA PARA INICIO DO CALCULO.
```

```
C
C XB= PONTO A DIREITA PARA INICIO DO CALCULO.
```

```
C
C NI = NUMERO DO PONTO DO GRID A PARTIR DO QUAL A FUNCAO E' CALCULADA.
C ESTE E' O LIMITE ESQUERDO DO CALCULO.
```

```
C
C NF = NUMERO DO PONTO ATE O QUAL A FUNCAO DE ONDA E' CALCULADA. ESTE
```

```

C      E' O LIMITE DIREITO.
C
C      E = VALOR DA ENERGIA PARA O QUAL CALCULAMOS A FUNCAO.
C
C      POT = VETOR CONTENDO O VALOR DO POTENCIAL NOS PONTOS DO GRID.A FUNCAO
C           E CALCULADA PARA ESTE POTENCIAL.
C
C      JOB = 0 CALCULA FUNCAO DE ONDA E DENSIDADE DE PROBABILIDADE.
C      JOB = 1 CALCULA SO A FUNCAO DE ONDA.
C
C      XA , XB , E , POT , E JOB SAO AS ENTRADAS.
C
C      FUNCAO = VETOR CONTENDO O VALOR DA FUNCAO DE ONDA NOS PONTOS DO
C           GRID.
C
C      VALOR = VETOR CONTENDO A DENSIDADE DE PROBABILIDADE NOS PONTOS
C           DO GRID.
C
C      FUNCAO E VALOR SAO AS SAIDAS DA SUB-ROTINA.
C
C      >>>>> DETERMINADAS VARIAVEIS USADAS NA SUB-ROTINA SAO PASSADAS
C           COM O USO DE UMA DECLARACAO COMMON. SAO ELAS:
C
C      >>> ZGR = VETOR COM OS PONTOS DO GRID.
C      >>> NPTG = NUMERO DE PONTOS DO GRID.
C
C      >>> HN = INTERVALO ENTRE OS PONTOS DO GRID
C
C      >>> CMGA E CMAL = CONSTANTES USADAS NO CALCULO E QUE ESTAO
C           COMENTADAS NO PROGRAMA PRINCIPAL.SEUS VALORES SAO PASSADOS
C           POR DECLARACAO COMMON.
C
C      >>> LIM1 E LIM2 = DEFINEM OS NUMEROS DOS PONTOS NOS QUAIS
C           ESTAO AS DUAS INTERFACES DO POÇO.LIM1 E' A INTERFACE
C           ESQUERDA E LIM2 E' A INTERFACE DIREITA.
C*****#
C
C      SUBROUTINE FUN(XA,XB,E,POT,FUNCAO,VALOR,JOB)
C
C*****
C      $ XA E' O LIMITE ESQUERDO A PARTIR DO QUAL A FUNCAO DE ONDA E'
C      SOLICITADA A SER CALCULADA. A PARTIR DE XA CALCULAMOS O PONTO DO
C      GRID MAIS PROXIMO DE XA. ESTE PONTO E' CHAMADO DE NI. PORTANTO
C      O LIMITE ESQUERDO PARA O CALCULO DA FUNCAO DE ONDA E' O PONTO
C      ZGR(NI). XA E' DETERMINADO NO PROGRAMA PRINCIPAL O QUAL CALCULA
C      O NUMERO DO PONTO ( NI ) E O PASSA A SUB-ROTINA FUN QUE CALCULA
C      A FUNCAO DE ONDA A PARTIR DE ZGR(NI).
C
C      $ XB E' O ANALOGO DE XA SO' QUE PARA O LIMITE DIREITO. NF E' O
C      ANALOGO A NI SO' QUE PARA O LIMITE DIREITO.
C*****
C
C      DIMENSION FUNCAO(2001),VALOR(2001),ZGR(2001),POT(2001)
C      DIMENSION C(2000,3)
C      REAL*8 FUNCAO,VALOR,ZGR,POT,C
C
C      REAL*8 E,HN,HHN,CM,C1,C2,Q,QQ,Q1,Q2,XA,XB,CMGA,CMAL
C
C      INTEGER JOB,I,NPTG,IER,NI,NF,LIM1,LIM2

```

```

COMMON /GRID/ZGR,NPTG
COMMON /H/HN
COMMON /CONST/CMGA,CMAL
COMMON /LIM/NI,NF
COMMON /WELL/LIM1,LIM2

```

```

C1=0.8333333333333333
C2=0.0833333333333333

```

```

HHN=HN*HN

```

```

NI=20/HN+XA/HN
NF=20/HN+XB/HN+1

```

```

C*****
C DEFINE VALORES DOS DOIS PRIMEIROS PONTOS PARA O NUMEROV.
C*****

```

```

CM=CMAL
IF ((NI.GT.LIM1).AND.(NI.LT.LIM2)) THEN
  CM=CMGA
END IF

```

```

FUNCAO(NI)=1D-5
FUNCAO(NI+1)=1D-5+1D-5*DSQRT(ABS(POT(NI)-E)*CM)*HN

```

```

C*****

```

```

C*****
C INICIA O CALCULO PONTO A PONTO DA FUNCAO INTEGRANDO
C POR NUMEROV.
C*****

```

```

DO 10,I=1,NPTG,1

```

```

  IF ((I.LT.NI).OR.(I.GT.NF)) THEN
    FUNCAO(I)=0
    GOTO 5
  END IF

```

```

  IF ((I.GE.(NI+2)).AND.(I.LE.NF)) THEN

```

```

    IF ((I.GE.LIM1).AND.(I.LE.LIM2)) THEN
      CM=CMGA
    END IF

```

```

    IF ((I.LT.LIM1).OR.(I.GT.LIM2)) THEN
      CM=CMAL
    END IF

```

```

      Q1=(2+C1*HHN*(POT(I-1)-E)*CM)*FUNCAO(I-1)
      Q1=Q1-(1-C2*HHN*(POT(I-2)-E)*CM)*FUNCAO(I-2)
      Q2=1-C2*HHN*(POT(I)-E)*CM
      FUNCAO(I)=Q1/Q2

```

```

    END IF

```

```

5      IF (JOB.EQ.0) THEN
        VALOR(I)=FUNCAO(I)*FUNCAO(I)
      END IF

```

```

10     CONTINUE

```



```

C*****
C*****
C NORMALIZA A FUNCAO DE ONDA E CALCULA A DENSIDADE DE PROBABILIDADE SE
C JOB = 0 .
C*****

```

```

      IF (JOB.EQ.0) THEN

          CALL ICSCCU(ZGR, VALOR, NPTG, C, 2000, IER)
          CALL DCSQDU(ZGR, VALOR, NPTG, C, 2000, ZGR(NI), ZGR(NF), Q, IER)
          QQ=DSQRT(Q)
          Q=1/Q
          QQ=1/QQ

          DO 20, I=NI, NF, 1

              FUNCAO(I)=FUNCAO(I)*QQ
              VALOR(I)=VALOR(I)*Q

```

```

20      CONTINUE

      END IF

50      RETURN
      END

```

```

C*****
C
C FIM DA SUB-ROTINA FUN.
C
C*****

```

C	IMSL ROUTINE NAME	- ICSCCU	ICAC0010
C			ICAC0020
C			ICAC0030
C			ICAC0040
C	COMPUTER	- VAX/DOUBLE	ICAC0050
C			ICAC0060
C	LATEST REVISION	- JUNE 1, 1980	ICAC0070
C			ICAC0080
C	PURPOSE	- CUBIC SPLINE INTERPOLATION	ICAC0090
C		(EASY-TO-USE VERSION)	ICAC0100
C			ICAC0110
C	USAGE	- CALL ICSCCU (X,Y,NX,C,IC,IER)	ICAC0120
C			ICAC0130
C	ARGUMENTS	X - VECTOR OF LENGTH NX CONTAINING THE ABSCISSAE	ICAC0140
C		OF THE NX DATA POINTS (X(I),Y(I)) I=1,...,	ICAC0150
C		NX. (INPUT) X MUST BE ORDERED SO THAT	ICAC0160
C		X(I) .LT. X(I+1).	ICAC0170
C		Y - VECTOR OF LENGTH NX CONTAINING THE ORDINATES	ICAC0180
C		(OR FUNCTION VALUES) OF THE NX DATA POINTS.	ICAC0190
C		(INPUT)	ICAC0200
C		NX - NUMBER OF ELEMENTS IN X AND Y. (INPUT) NX	ICAC0210
C		MUST BE .GE. 2.	ICAC0220
C		C - SPLINE COEFFICIENTS. (OUTPUT) C IS AN NX-1 BY	ICAC0230
C		3 MATRIX. THE VALUE OF THE SPLINE	ICAC0240

	APPROXIMATION AT T IS	ICAC0250
	$S(T) = ((C(I,3)*D+C(I,2))*D+C(I,1))*D+Y(1)$	ICAC0260
	WHERE X(I) .LE. T .LT. X(I+1) AND	ICAC0270
	D = T-X(I).	ICAC0280
IC	- ROW DIMENSION OF MATRIX C EXACTLY AS	ICAC0290
	SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT IN	ICAC0300
	THE CALLING PROGRAM. (INPUT)	ICAC0310
IER	- ERROR PARAMETER. (OUTPUT)	ICAC0320
	TERMINAL ERROR	ICAC0330
	IER = 129, IC IS LESS THAN NX-1.	ICAC0340
	IER = 130, NX IS LESS THAN 2.	ICAC0350
	IER = 131, INPUT ABSCISSA ARE NOT ORDERED	ICAC0360
	SO THAT X(1) .LT. X(2)LT. X(NX).	ICAC0370
		ICAC0380
PRECISION/HARDWARE	- SINGLE AND DOUBLE/H32	ICAC0390
	- SINGLE/H36,H48,H60	ICAC0400
		ICAC0410
REQD. IMSL ROUTINES	- UERTST,UGETIO	ICAC0420
		ICAC0430
NOTATION	- INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND	ICAC0440
	CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL	ICAC0450
	INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP	ICAC0460
		ICAC0470
COPYRIGHT	- 1980 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.	ICAC0480
		ICAC0490
WARRANTY	- IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN	ICAC0500
	APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,	ICAC0510
	EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.	ICAC0520
		ICAC0530
-----		ICAC0540
		ICAC0550
SUBROUTINE ICSCCU (X,Y,NX,C,IC,IER)		ICAC0560
	SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS	ICAC0570
INTEGER	NX,IC,IER	ICAC0580
DOUBLE PRECISION	X(NX),Y(NX),C(IC,3)	ICAC0590
	SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES	ICAC0600
INTEGER	IM1,I,JJ,J,MM1,MP1,M,NM1,NM2	ICAC0610
DOUBLE PRECISION	DIVDF1,DIVDF3,DTAU,G,CNX(3)	ICAC0620
	FIRST EXECUTABLE STATEMENT	ICAC0630
		ICAC0640
NM1 = NX-1		ICAC0650
IER = 129		ICAC0660
IF (IC .LT. NM1) GO TO 9000		ICAC0670
IER = 130		ICAC0680
IF (NX .LT. 2) GO TO 9000		ICAC0690
IER = 131		ICAC0700
IF (NX .EQ. 2) GO TO 45		ICAC0710
	COMPUTE NOT-A-KNOT SPLINE	ICAC0720
DO 5 M = 2,NM1		ICAC0730
MM1=M-1		ICAC0740
C(M,2) = X(M)-X(MM1)		ICAC0750
IF (C(M,2) .LE. 0.0D0) GO TO 9000		ICAC0760
C(M,3) = (Y(M)-Y(MM1))/C(M,2)		ICAC0770
5 CONTINUE		ICAC0780
CNX(2) = X(NX)-X(NM1)		ICAC0790
IF (CNX(2) .LE. 0.0D0) GO TO 9000		ICAC0800
CNX(3) = (Y(NX)-Y(NM1))/CNX(2)		ICAC0810
IER = 0		ICAC0820
NM2 = NX-2		ICAC0830
IF (NX .GT. 3) GO TO 10		ICAC0840
C(1,3) = CNX(2)		ICAC0850
C(1,2) = C(2,2)+CNX(2)		ICAC0860
C(1,1) = ((C(2,2)+2.0D0*C(1,2))*C(2,3)+C(2,2)**2*CNX(3))		ICAC0870
1/C(1,2)		ICAC0880
GO TO 20		ICAC0890
10 C(1,3) = C(3,2)		ICAC0900
C(1,2) = C(2,2)+C(3,2)		

C(1,1) = ((C(2,2)+2.D0*C(1,2))*C(2,3)*C(3,2)+C(2,2)**2*C(3,3))	ICAC0910
1/C(1,2)	ICAC0920
DO 15 M=2,NM2	ICAC0930
MP1=M+1	ICAC0940
MM1=M-1	ICAC0950
G = -C(MP1,2)/C(MM1,3)	ICAC0960
C(M,1) = G*C(MM1,1)+3.D0*C(M,2)*C(MP1,3)+3.D0*C(MP1,2)*C(M,3)	ICAC0970
C(M,3) = G*C(MM1,2)+2.D0*C(M,2)+2.D0*C(MP1,2)	ICAC0980
15 CONTINUE	ICAC0990
20 G = -CNX(2)/C(NM2,3)	ICAC1000
C(NM1,1) = G*C(NM2,1)+3.D0*C(NM1,2)*CNX(3)+3.D0*CNX(2)*C(NM1,3)	ICAC1010
C(NM1,3) = G*C(NM2,2)+2.D0*C(NM1,2)+2.D0*CNX(2)	ICAC1020
IF (NX.GT.3) GO TO 25	ICAC1030
CNX(1)=2.D0*CNX(3)	ICAC1040
CNX(3)=1.D0	ICAC1050
G=-1.D0/C(NM1,3)	ICAC1060
GO TO 30	ICAC1070
25 G = C(NM1,2)+CNX(2)	ICAC1080
CNX(1) = ((CNX(2)+2.D0*G)*CNX(3)*C(NM1,2)+CNX(2)**2*	ICAC1090
1(Y(NM1)-Y(NX-2))/C(NM1,2))/G	ICAC1100
G = -G/C(NM1,3)	ICAC1110
CNX(3) = C(NM1,2)	ICAC1120
30 CNX(3) = G*C(NM1,2)+CNX(3)	ICAC1130
CNX(1) = (G*C(NM1,1)+CNX(1))/CNX(3)	ICAC1140
C(NM1,1) = (C(NM1,1)-C(NM1,2)*CNX(1))/C(NM1,3)	ICAC1150
DO 35 JJ=1,NM2	ICAC1160
J = NM1-JJ	ICAC1170
C(J,1) = (C(J,1)-C(J,2)*C(J+1,1))/C(J,3)	ICAC1180
35 CONTINUE	ICAC1190
DO 40 I=2,NM1	ICAC1200
IM1 = I-1	ICAC1210
DTAU = C(I,2)	ICAC1220
DIVDF1 = (Y(I)-Y(IM1))/DTAU	ICAC1230
DIVDF3 = C(IM1,1)+C(I,1)-2.D0*DIVDF1	ICAC1240
C(IM1,2) = (DIVDF1-C(IM1,1)-DIVDF3)/DTAU	ICAC1250
C(IM1,3) = DIVDF3/DTAU**2	ICAC1260
40 CONTINUE	ICAC1270
DTAU = CNX(2)	ICAC1280
DIVDF1 = (Y(NX)-Y(NM1))/DTAU	ICAC1290
DIVDF3 = C(NM1,1)+CNX(1)-2.D0*DIVDF1	ICAC1300
C(NM1,2) = (DIVDF1-C(NM1,1)-DIVDF3)/DTAU	ICAC1310
C(NM1,3) = DIVDF3/DTAU**2	ICAC1320
GO TO 9005	ICAC1330
45 IF (X(1).GE.X(2)) GO TO 9000	ICAC1340
IER = 0	ICAC1350
C(1,1) = (Y(2)-Y(1))/(X(2)-X(1))	ICAC1360
C(1,2) = 0.0D0	ICAC1370
C(1,3) = 0.0D0	ICAC1380
GO TO 9005	ICAC1390
9000 CONTINUE	ICAC1400
CALL UERTST(IER,6HICSCCU)	ICAC1410
9005 RETURN	ICAC1420
END	ICAC1430
C IMSL ROUTINE NAME - ICSEVU	ICAE0010
C	ICAE0020
C-----	ICAE0030
C	ICAE0040
C COMPUTER - VAX/DOUBLE	ICAE0050
C	ICAE0060
C LATEST REVISION - JANUARY 1, 1978	ICAE0070
C	ICAE0080
C PURPOSE - EVALUATION OF A CUBIC SPLINE	ICAE0090
C	ICAE0100
C USAGE - CALL ICSEVU(X,Y,NX,C,IC,U,S,M,IER)	ICAE0110
C	ICAE0120
C ARGUMENTS X - VECTOR OF LENGTH NX CONTAINING THE ABSCISSAE	ICAE0130

	OF THE NX DATA POINTS (X(I),Y(I)) I=1,...,	ICAE0140
	NX (INPUT). X MUST BE ORDERED SO THAT	ICAE0150
	X(I) .LT. X(I+1).	ICAE0160
Y	- VECTOR OF LENGTH NX CONTAINING THE ORDINATES	ICAE0170
	(OR FUNCTION VALUES) OF THE NX DATA POINTS	ICAE0180
	(INPUT).	ICAE0190
NX	- NUMBER OF ELEMENTS IN X AND Y (INPUT).	ICAE0200
	NX MUST BE .GE. 2.	ICAE0210
C	- SPLINE COEFFICIENTS (INPUT). C IS AN NX-1 BY	ICAE0220
	3 MATRIX.	ICAE0230
IC	- ROW DIMENSION OF MATRIX C EXACTLY AS	ICAE0240
	SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT	ICAE0250
	IN THE CALLING PROGRAM (INPUT).	ICAE0260
	IC MUST BE .GE. NX-1.	ICAE0270
U	- VECTOR OF LENGTH M CONTAINING THE ABSCISSAE	ICAE0280
	OF THE M POINTS AT WHICH THE CUBIC SPLINE	ICAE0290
	IS TO BE EVALUATED (INPUT).	ICAE0300
S	- VECTOR OF LENGTH M (OUTPUT).	ICAE0310
	THE VALUE OF THE SPLINE APPROXIMATION AT	ICAE0320
	U(I) IS	ICAE0330
	$S(I) = ((C(J,3)*D+C(J,2))*D+C(J,1))*D+Y(J)$	ICAE0340
	WHERE X(J) .LE. U(I) .LT. X(J+1) AND	ICAE0350
	$D = U(I)-X(J)$.	ICAE0360
M	- NUMBER OF ELEMENTS IN U AND S (INPUT).	ICAE0370
IER	- ERROR PARAMETER (OUTPUT).	ICAE0380
	WARNING ERROR	ICAE0390
	IER = 33, U(I) IS LESS THAN X(1).	ICAE0400
	IER = 34, U(I) IS GREATER THAN X(NX).	ICAE0410
		ICAE0420
PRECISION/HARDWARE	- SINGLE AND DOUBLE/H32	ICAE0430
	- SINGLE/H36,H48,H60	ICAE0440
		ICAE0450
REQD. IMSL ROUTINES	- UERTST,UGETIO	ICAE0460
		ICAE0470
NOTATION	- INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND	ICAE0480
	CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL	ICAE0490
	INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP	ICAE0500
		ICAE0510
REMARKS	1. THE ROUTINE ASSUMES THAT THE ABSCISSAE OF THE NX	ICAE0520
	DATA POINTS ARE ORDERED SUCH THAT X(I) IS LESS THAN	ICAE0530
	X(I+1) FOR I=1,...,NX-1. NO CHECK OF THIS CONDITION	ICAE0540
	IS MADE IN THE ROUTINE. UNORDERED ABSCISSAE WILL CAUSE	ICAE0550
	THE ALGORITHM TO PRODUCE INCORRECT RESULTS.	ICAE0560
	2. THE ROUTINE GENERATES TWO WARNING ERRORS. ONE ERROR	ICAE0570
	OCCURS IF U(I) IS LESS THAN X(1), FOR SOME I IN THE	ICAE0580
	THE INTERVAL (1,M) INCLUSIVELY. THE OTHER ERROR OCCURS	ICAE0590
	IF U(I) IS GREATER THAN X(NX), FOR SOME I IN THE	ICAE0600
	INTERVAL (1,M) INCLUSIVELY.	ICAE0610
	3. THE ORDINATE Y(NX) IS NOT USED BY THE ROUTINE. FOR	ICAE0620
	U(K) .GT. X(NX-1), THE VALUE OF THE SPLINE, S(K), IS	ICAE0630
	GIVEN BY	ICAE0640
	$S(K) = ((C(NX-1,3)*D+C(NX-1,2))*D+C(NX-1,1))*D+Y(NX-1)$	ICAE0650
	WHERE $D=U(K)-X(NX-1)$.	ICAE0660
		ICAE0670
COPYRIGHT	- 1978 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.	ICAE0680
		ICAE0690
WARRANTY	- IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN	ICAE0700
	APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,	ICAE0710
	EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.	ICAE0720
		ICAE0730
		ICAE0740
		ICAE0750
SUBROUTINE ICSEVU	(X,Y,NX,C,IC,U,S,M,IER)	ICAE0760
	SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS	ICAE0770
INTEGER	NX,IC,M,IER	ICAE0780
DOUBLE PRECISION	X(NX),Y(NX),C(IC,3),U(M),S(M)	ICAE0790

	SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES	
C	INTEGER I, JER, KER, NXM1, K	ICAE0800
	DOUBLE PRECISION D, DD, ZERO	ICAE0810
	DATA I/1/, ZERO/0.0D0/	ICAE0820
C	FIRST EXECUTABLE STATEMENT	ICAE0830
	JER = 0	ICAE0840
	KER = 0	ICAE0850
	IF (M .LE. 0) GO TO 9005	ICAE0860
	NXM1 = NX-1	ICAE0870
	IF (I .GT. NXM1) 1 = 1	ICAE0880
C	EVALUATE SPLINE AT M POINTS	ICAE0890
	DO 40 K=1,M	ICAE0900
C	FIND THE PROPER INTERVAL	ICAE0910
	D = U(K)-X(I)	ICAE0920
	IF (D) 5,25,15	ICAE0930
5	IF (I .EQ. 1) GO TO 30	ICAE0940
	I = I-1	ICAE0950
	D = U(K)-X(I)	ICAE0960
	IF (D) 5,25,20	ICAE0970
10	I = I+1	ICAE0980
	D = DD	ICAE0990
15	IF (I .GE. NX) GO TO 35	ICAE1000
	DD = U(K)-X(I+1)	ICAE1010
	IF (DD .GE. ZERO) GO TO 10	ICAE1020
	IF (D .EQ. ZERO) GO TO 25	ICAE1030
C	PERFORM EVALUATION	ICAE1040
20	S(K) = ((C(I,3)*D+C(I,2))*D+C(I,1))*D+Y(I)	ICAE1050
	GO TO 40	ICAE1060
25	S(K) = Y(I)	ICAE1070
	GO TO 40	ICAE1080
C	WARNING = U(I) .LT. X(1)	ICAE1090
30	JER = 33	ICAE1100
	GO TO 20	ICAE1110
C	IF U(I) .GT. X(NX) - WARNING	ICAE1120
35	IF (DD .GT. ZERO) KER = 34	ICAE1130
	D = U(K)-X(NXM1)	ICAE1140
	I = NXM1	ICAE1150
	GO TO 20	ICAE1160
40	CONTINUE	ICAE1170
	IER = MAX0(JER, KER)	ICAE1180
9000	CONTINUE	ICAE1190
	IF (JER .GT. 0) CALL UERTST(JER, 6HICSEVU)	ICAE1200
	IF (KER .GT. 0) CALL UERTST(KER, 6HICSEVU)	ICAE1210
9005	RETURN	ICAE1220
	END	ICAE1230
		ICAE1240
C	IMSL ROUTINE NAME - UGETIO	UGET0010
C		UGET0020
C	-----	UGET0030
C		UGET0040
C	COMPUTER - VAX/SINGLE	UGET0050
C		UGET0060
C	LATEST REVISION - JUNE 1, 1981	UGET0070
C		UGET0080
C	PURPOSE - TO RETRIEVE CURRENT VALUES AND TO SET NEW	UGET0090
C	VALUES FOR INPUT AND OUTPUT UNIT	UGET0100
C	IDENTIFIERS.	UGET0110
C		UGET0120
C	USAGE - CALL UGETIO(IOPT, NIN, NOUT)	UGET0130
C		UGET0140
C	ARGUMENTS IOPT - OPTION PARAMETER. (INPUT)	UGET0150
C	IF IOPT=1, THE CURRENT INPUT AND OUTPUT	UGET0160
C	UNIT IDENTIFIER VALUES ARE RETURNED IN NIN	UGET0170
C	AND NOUT, RESPECTIVELY.	UGET0180
C	IF IOPT=2, THE INTERNAL VALUE OF NIN IS	UGET0190
C	RESET FOR SUBSEQUENT USE.	UGET0200

	IF IOPT=3, THE INTERNAL VALUE OF NOUT IS	UGET0210
	RESET FOR SUBSEQUENT USE.	UGET0220
NIN	- INPUT UNIT IDENTIFIER.	UGET0230
	OUTPUT IF IOPT=1, INPUT IF IOPT=2.	UGET0240
NOUT	- OUTPUT UNIT IDENTIFIER.	UGET0250
	OUTPUT IF IOPT=1, INPUT IF IOPT=3.	UGET0260
		UGET0270
PRECISION/HARDWARE	- SINGLE/ALL	UGET0280
		UGET0290
REQD. IMSL ROUTINES	- NONE REQUIRED	UGET0300
		UGET0310
NOTATION	- INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND	UGET0320
	CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL	UGET0330
	INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP	UGET0340
		UGET0350
REMARKS	EACH IMSL ROUTINE THAT PERFORMS INPUT AND/OR OUTPUT	UGET0360
	OPERATIONS CALLS UGETIO TO OBTAIN THE CURRENT UNIT	UGET0370
	IDENTIFIER VALUES. IF UGETIO IS CALLED WITH IOPT=2 OR	UGET0380
	IOPT=3, NEW UNIT IDENTIFIER VALUES ARE ESTABLISHED.	UGET0390
	SUBSEQUENT INPUT/OUTPUT IS PERFORMED ON THE NEW UNITS.	UGET0400
		UGET0410
COPYRIGHT	- 1978 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.	UGET0420
		UGET0430
WARRANTY	- IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN	UGET0440
	APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,	UGET0450
	EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.	UGET0460
		UGET0470
-----		UGET0480
		UGET0490
	SUBROUTINE UGETIO(IOPT,NIN,NOUT)	UGET0500
		UGET0510
INTEGER	IOPT,NIN,NOUT	UGET0520
		UGET0530
INTEGER	NIND,NOUTD	UGET0540
DATA	NIND/1/,NOUTD/2/	UGET0550
		UGET0560
	FIRST EXECUTABLE STATEMENT	UGET0570
	IF (IOPT.EQ.3) GO TO 10	UGET0580
	IF (IOPT.EQ.2) GO TO 5	UGET0590
	IF (IOPT.NE.1) GO TO 9005	UGET0600
	NIN = NIND	UGET0610
	NOUT = NOUTD	UGET0620
	GO TO 9005	UGET0630
5	NIND = NIN	UGET0640
	GO TO 9005	UGET0650
10	NOUTD = NOUT	UGET0660
9005	RETURN	UGET0670
	END	UGET0680
IMSL ROUTINE NAME	- UERTST	UERT0010
		UERT0020
-----		UERT0030
		UERT0040
COMPUTER	- VAX/SINGLE	UERT0050
		UERT0060
LATEST REVISION	- JUNE 1, 1982	UERT0070
		UERT0080
PURPOSE	- PRINT A MESSAGE REFLECTING AN ERROR CONDITION	UERT0090
		UERT0100
USAGE	- CALL UERTST (IER,NAME)	UERT0110
		UERT0120
ARGUMENTS	IER - ERROR PARAMETER. (INPUT)	UERT0130
	IER = I+J WHERE	UERT0140
	I = 128 IMPLIES TERMINAL ERROR MESSAGE,	UERT0150
	I = 64 IMPLIES WARNING WITH FIX MESSAGE,	UERT0160
	I = 32 IMPLIES WARNING MESSAGE.	UERT0170
	J = ERROR CODE RELEVANT TO CALLING	UERT0180
	ROUTINE.	UERT0190

C		NAME	- A CHARACTER STRING OF LENGTH SIX PROVIDING	UERT0200
C			THE NAME OF THE CALLING ROUTINE. (INPUT)	UERT0210
C				UERT0220
C	PRECISION/HARDWARE	-	SINGLE/ALL	UERT0230
C				UERT0240
C	REQD. IMSL ROUTINES	-	UGETIO,USPKD	UERT0250
C				UERT0260
C	NOTATION	-	INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND	UERT0270
C			CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL	UERT0280
C			INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP	UERT0290
C				UERT0300
C	REMARKS		THE ERROR MESSAGE PRODUCED BY UERTST IS WRITTEN	UERT0310
C			TO THE STANDARD OUTPUT UNIT. THE OUTPUT UNIT	UERT0320
C			NUMBER CAN BE DETERMINED BY CALLING UGETIO AS	UERT0330
C			FOLLOWS.. CALL UGETIO(1,NIN,NOUT).	UERT0340
C			THE OUTPUT UNIT NUMBER CAN BE CHANGED BY CALLING	UERT0350
C			UGETIO AS FOLLOWS..	UERT0360
C			NIN = 0	UERT0370
C			NOUT = NEW OUTPUT UNIT NUMBER	UERT0380
C			CALL UGETIO(3,NIN,NOUT)	UERT0390
C			SEE THE UGETIO DOCUMENT FOR MORE DETAILS.	UERT0400
C				UERT0410
C	COPYRIGHT	-	1982 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.	UERT0420
C				UERT0430
C	WARRANTY	-	IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN	UERT0440
C			APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,	UERT0450
C			EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.	UERT0460
C				UERT0470
C				UERT0480
C				UERT0490
C		SUBROUTINE UERTST (IER,NAME)		UERT0500
C			SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS	UERT0510
C	INTEGER	IER		UERT0520
C	INTEGER	NAME(1)		UERT0530
C			SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES	UERT0540
C	INTEGER	I, IEQ, IEQDF, IOUNIT, LEVEL, LEVOLD, NAMEQ(6),		UERT0550
C	*	NAMSET(6), NAMUPK(6), NIN, NMTB		UERT0560
C	DATA	NAMSET/1HU, 1HE, 1HR, 1HS, 1HE, 1HT/		UERT0570
C	DATA	NAMEQ/6*1H /		UERT0580
C	DATA	LEVEL/4/, IEQDF/0/, IEQ/1H= /		UERT0590
C			UNPACK NAME INTO NAMUPK	UERT0600
C			FIRST EXECUTABLE STATEMENT	UERT0610
C		CALL USPKD (NAME, 6, NAMUPK, NMTB)		UERT0620
C			GET OUTPUT UNIT NUMBER	UERT0630
C		CALL UGETIO(1,NIN, IOUNIT)		UERT0640
C			CHECK IER	UERT0650
C		IF (IER.GT.999) GO TO 25		UERT0660
C		IF (IER.LT.-32) GO TO 55		UERT0670
C		IF (IER.LE.128) GO TO 5		UERT0680
C		IF (LEVEL.LT.1) GO TO 30		UERT0690
C			PRINT TERMINAL MESSAGE	UERT0700
C		IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT, 35) IER, NAMEQ, IEQ, NAMUPK		UERT0710
C		IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT, 35) IER, NAMUPK		UERT0720
C		GO TO 30		UERT0730
C	5	IF (IER.LE.64) GO TO 10		UERT0740
C		IF (LEVEL.LT.2) GO TO 30		UERT0750
C			PRINT WARNING WITH FIX MESSAGE	UERT0760
C		IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT, 40) IER, NAMEQ, IEQ, NAMUPK		UERT0770
C		IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT, 40) IER, NAMUPK		UERT0780
C		GO TO 30		UERT0790
C	10	IF (IER.LE.32) GO TO 15		UERT0800
C			PRINT WARNING MESSAGE	UERT0810
C		IF (LEVEL.LT.3) GO TO 30		UERT0820
C		IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT, 45) IER, NAMEQ, IEQ, NAMUPK		UERT0830
C		IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT, 45) IER, NAMUPK		UERT0840
C		GO TO 30		UERT0850

15	CONTINUE		UERT0860
C		CHECK FOR UERSET CALL	UERT0870
	DO 20 I=1,6		UERT0880
	IF (NAMUPK(I).NE.NAMSET(I)) GO TO 25		UERT0890
20	CONTINUE		UERT0900
	LEVOLD = LEVEL		UERT0910
	LEVEL = IER		UERT0920
	IER = LEVOLD		UERT0930
	IF (LEVEL.LT.0) LEVEL = 4		UERT0940
	IF (LEVEL.GT.4) LEVEL = 4		UERT0950
	GO TO 30		UERT0960
25	CONTINUE		UERT0970
	IF (LEVEL.LT.4) GO TO 30		UERT0980
C		PRINT NON-DEFINED MESSAGE	UERT0990
	IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IUNIT,50) IER,NAMEQ,IEQ,NAMUPK		UERT1000
	IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IUNIT,50) IER,NAMUPK		UERT1010
30	IEQDF = 0		UERT1020
	RETURN		UERT1030
35	FORMAT(19H *** TERMINAL ERROR,10X,7H(IER = , I3,		UERT1040
1	20H) FROM IMSL ROUTINE , 6A1,A1,6A1)		UERT1050
40	FORMAT(27H *** WARNING WITH FIX ERROR,2X,7H(IER = , I3,		UERT1060
1	20H) FROM IMSL ROUTINE , 6A1,A1,6A1)		UERT1070
45	FORMAT(18H *** WARNING ERROR,11X,7H(IER = , I3,		UERT1080
1	20H) FROM IMSL ROUTINE , 6A1,A1,6A1)		UERT1090
50	FORMAT(20H *** UNDEFINED ERROR,9X,7H(IER = , I5,		UERT1100
1	20H) FROM IMSL ROUTINE , 6A1,A1,6A1)		UERT1110
C			UERT1120
C		SAVE P FOR P = R CASE	UERT1130
C		P IS THE PAGE NAMUPK	UERT1140
C		R IS THE ROUTINE NAMUPK	UERT1150
55	IEQDF = 1		UERT1160
	DO 60 I=1,6		UERT1170
60	NAMEQ(I) = NAMUPK(I)		UERT1180
65	RETURN		UERT1190
	END		UERT1200
C	IMSL ROUTINE NAME	- USPDK	USPK0010
C			USPK0020
C			USPK0030
C	COMPUTER	- VAX/SINGLE	USPK0040
C			USPK0050
C	LATEST REVISION	- JUNE 1, 1982	USPK0060
C			USPK0070
C	PURPOSE	- NUCLEUS CALLED BY IMSL ROUTINES THAT HAVE	USPK0080
C		CHARACTER STRING ARGUMENTS	USPK0090
C			USPK0100
C	USAGE	- CALL USPDK (PACKED,NCHARS,UNPAKD,NCHMTB)	USPK0110
C			USPK0120
C	ARGUMENTS	PACKED - CHARACTER STRING TO BE UNPACKED. (INPUT)	USPK0130
C		NCHARS - LENGTH OF PACKED. (INPUT) SEE REMARKS.	USPK0140
C		UNPAKD - INTEGER ARRAY TO RECEIVE THE UNPACKED	USPK0150
C		REPRESENTATION OF THE STRING. (OUTPUT)	USPK0160
C		NCHMTB - NCHARS MINUS TRAILING BLANKS. (OUTPUT)	USPK0170
C			USPK0180
C	PRECISION/HARDWARE	- SINGLE/ALL	USPK0190
C			USPK0200
C	REQD. IMSL ROUTINES	- NONE	USPK0210
C			USPK0220
C	REMARKS	1. USPDK UNPACKS A CHARACTER STRING INTO AN INTEGER ARRAY	USPK0230
C		IN (A1) FORMAT.	USPK0240
C		2. UP TO 129 CHARACTERS MAY BE USED. ANY IN EXCESS OF	USPK0250
C		THAT ARE IGNORED.	USPK0260
C			USPK0270
C	COPYRIGHT	- 1982 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.	USPK0280
C			USPK0290
C	WARRANTY	- IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN	USPK0300
C			USPK0310

C		APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,	USPK0320
C		EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.	USPK0330
C			USPK0340
C	-----		USPK0350
	SUBROUTINE USPKD	(PACKED,NCHARS,UNPAKD,NCHMTB)	USPK0360
C		SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS	USPK0370
C	INTEGER	NC,NCHARS,NCHMTB	USPK0380
C	INTEGER	UNPAKD(1),IBLANK	USPK0390
	INTEGER	PACKED(1)	USPK0400
	DATA	IBLANK /1H /	USPK0410
C		INITIALIZE NCHMTB	USPK0420
	NCHMTB = 0		USPK0430
C		RETURN IF NCHARS IS LE ZERO	USPK0440
C	IF(NCHARS.LE.0) RETURN		USPK0450
C		SET NC=NUMBER OF CHARS TO BE DECODED	USPK0460
	NC = MIN0 (129,NCHARS)		USPK0470
	DECODE (NC,150,PACKED) (UNPAKD(I),I=1,NC)		USPK0480
150	FORMAT (129A1)		USPK0490
C		CHECK UNPAKD ARRAY AND SET NCHMTB	USPK0500
C		BASED ON TRAILING BLANKS FOUND	USPK0510
	DO 200 N = 1,NC		USPK0520
	NN = NC - N + 1		USPK0530
	IF(UNPAKD(NN) .NE. IBLANK) GO TO 210		USPK0540
200	CONTINUE		USPK0550
210	NCHMTB = NN		USPK0560
	RETURN		USPK0570
	END		USPK0580
			USPK0590

C	IMSL ROUTINE NAME	- DCSQDU	DCSQ0010
C			DCSQ0020
C	-----		DCSQ0030
C	COMPUTER	- VAX/DOUBLE	DCSQ0040
C			DCSQ0050
C	LATEST REVISION	- JUNE 1, 1982	DCSQ0060
C			DCSQ0070
C	PURPOSE	- CUBIC SPLINE QUADRATURE	DCSQ0080
C			DCSQ0090
C	USAGE	- CALL DCSQDU (X,Y,NX,C,IC,A,B,Q,IER)	DCSQ0100
C			DCSQ0110
C	ARGUMENTS	X - VECTOR OF LENGTH NX CONTAINING THE ABSCISSAE	DCSQ0120
C		OF THE NX DATA POINTS (X(I),Y(I)) I=1,...,	DCSQ0130
C		NX. (INPUT) X MUST BE ORDERED SO THAT	DCSQ0140
C		X(I) .LT. X(I+1).	DCSQ0150
C			DCSQ0160
C		Y - VECTOR OF LENGTH NX CONTAINING THE ORDINATES	DCSQ0170
C		(OR FUNCTION VALUES) OF THE NX DATA POINTS.	DCSQ0180
C		(INPUT)	DCSQ0190
C		NX - NUMBER OF ELEMENTS IN X AND Y. (INPUT)	DCSQ0200
C		NX MUST BE .GE. 2.	DCSQ0210
C		C - SPLINE COEFFICIENTS. (INPUT) C IS AN NX-1 BY	DCSQ0220
C		3 MATRIX. THE VALUE OF THE SPLINE	DCSQ0230
C		APPROXIMATION AT A POINT Z IS GIVEN BY	DCSQ0240
C		$S(Z) = ((C(I,3)*D+C(I,2))*D+C(I,1))*D+Y(I)$	DCSQ0250
C		WHERE X(I) .LE. Z .LT. X(I+1) AND	DCSQ0260
C		D = Z-X(I).	DCSQ0270
C		IC - ROW DIMENSION OF MATRIX C EXACTLY AS	DCSQ0280
C		SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT	DCSQ0290
C		IN THE CALLING PROGRAM. (INPUT)	DCSQ0300
C	A,B	- LIMITS OF INTEGRATION. (INPUT)	DCSQ0310
C	Q	- INTEGRAL FROM A TO B. (OUTPUT)	DCSQ0320
C	IER	- ERROR PARAMETER. (OUTPUT)	DCSQ0330
C		WARNING ERROR	DCSQ0340
C		IER = 33, A AND/OR B IS LESS THAN X(1).	DCSQ0350

```

C IER = 34, A AND/OR B IS GREATER THAN X(NX). DCSQ0360
C DCSQ0370
C PRECISION/HARDWARE - SINGLE AND DOUBLE/H32 DCSQ0380
C - SINGLE/H36,H48,H60 DCSQ0390
C DCSQ0400
C REQD. IMSL ROUTINES - UERTST,UGETIO DCSQ0410
C DCSQ0420
C NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND DCSQ0430
C CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL DCSQ0440
C INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP DCSQ0450
C DCSQ0460
C REMARKS 1. THE CONDITIONS REQUIRED FOR INPUT ARGUMENTS X AND NX DCSQ0470
C ARE NOT CHECKED IN THE ROUTINE. IF ANY OF THOSE DCSQ0480
C CONDITIONS ARE NOT MET THE ROUTINE WILL NOT PERFORM DCSQ0490
C CORRECTLY. DCSQ0500
C 2. WHEN THE LIMITS OF INTEGRATION ARE OUTSIDE OF THE DCSQ0510
C INTERVAL (X(1),X(NX)), THE INTEGRATION IS PERFORMED DCSQ0520
C ON THE EXTENDED SPLINE FUNCTION. THE SPLINE IS DCSQ0530
C EXTENDED ON THE LEFT BY THE FOLLOWING FORMULA- DCSQ0540
C  $S(Z) = ((C(1,3)*D+C(1,2))*D+C(1,1))*D+Y(1)$  DCSQ0550
C WHERE Z IS LESS THAN X(1) AND D = Z-X(1). DCSQ0560
C THE SPLINE IS EXTENDED ON THE RIGHT BY THE DCSQ0570
C FOLLOWING FORMULA- DCSQ0580
C  $S(U) = ((C(NX-1,3)*D+C(NX-1,2))*D+C(NX-1,1))*D+Y(NX-1)$  DCSQ0590
C WHERE U IS GREATER THAN X(NX) AND D = U-X(NX-1). DCSQ0600
C 3. THE ORDINATE Y(NX) IS NOT USED BY THE ROUTINE. DCSQ0610
C DCSQ0620
C COPYRIGHT - 1978 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED. DCSQ0630
C DCSQ0640
C WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN DCSQ0650
C APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY, DCSQ0660
C EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE. DCSQ0670
C DCSQ0680
C-----DCSQ0690
C SUBROUTINE DCSQDU (X,Y,NX,C,IC,A,B,Q,IER) DCSQ0700
C SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS DCSQ0710
C INTEGER NX,IC,IER DCSQ0730
C DOUBLE PRECISION X(NX),Y(NX),C(IC,3),A,B,Q DCSQ0740
C SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES DCSQ0750
C INTEGER I,IA,IB,IBM1,IPT,IV,JER,KER,NXM1 DCSQ0760
C DOUBLE PRECISION D,DA,DB,DD,DX,FOURTH,HALF,QA,QAB,QB, DCSQ0770
C 1 SIXTH,THIRD,V,ZERO DCSQ0780
C DATA SIXTH/.1666666666666667D0/, DCSQ0790
C 1 THIRD/.3333333333333333D0/ DCSQ0800
C DATA ZERO/0.0D0/,FOURTH/.25D0/,HALF/.5D0/ DCSQ0810
C FIRST EXECUTABLE STATEMENT DCSQ0820
C JER = 0 DCSQ0830
C KER = 0 DCSQ0840
C FIND THE INTERVAL FOR A AND B DCSQ0850
C NXM1 = NX-1 DCSQ0860
C IPT = 1 DCSQ0870
C IA = 1 DCSQ0880
C V = DMIN1(A,B) DCSQ0890
C 5 D = V-X(IA) DCSQ0900
C DO 10 I=IA,NXM1 DCSQ0910
C IV = I DCSQ0920
C DD = V-X(I+1) DCSQ0930
C IF (DD .LT. ZERO) GO TO 15 DCSQ0940
C IF (I .LT. NXM1) D = DD DCSQ0950
C 10 CONTINUE DCSQ0960
C IV = NXM1 DCSQ0970
C IF V .GT. X(NX) - WARNING DCSQ0980
C IF (DD .GT. ZERO) KER = 34 DCSQ0990
C 15 CONTINUE DCSQ1000
C CHECK FOR V .LT. X(1) DCSQ1010

```

	IF (D .LT. ZERO) JER = 33	DCSQ1020
	IF (IPT .EQ. 2) GO TO 20	DCSQ1030
	IPT = 2	DCSQ1040
	IA = IV	DCSQ1050
	DA = D	DCSQ1060
	V = DMAX1(A,B)	DCSQ1070
	GO TO 5	DCSQ1080
20	IB = IV	DCSQ1090
	DB = D	DCSQ1100
C		DCSQ1110
C	INTEGRATE FROM X(IA) TO MIN(A,B)	DCSQ1120
	QA = (((FOURTH*C(IA,3)*DA+THIRD*C(IA,2))*DA+HALF*C(IA,1))*DA	DCSQ1130
	* +Y(IA))*DA	DCSQ1140
	QAB = ZERO	DCSQ1150
	IBM1 = IB-1	DCSQ1160
	IF (IBM1 .LT. IA) GO TO 30	DCSQ1170
C		DCSQ1180
	INTEGRATE FROM X(IA) TO X(IB)	DCSQ1190
	DO 25 I=IA,IBM1	DCSQ1200
	DX = X(I+1)-X(I)	DCSQ1210
	QAB = QAB+HALF*DX*(Y(I+1)+Y(I)-(C(I+1,2)+C(I,2))*DX*DX*SIXTH)	DCSQ1220
25	CONTINUE	DCSQ1230
C		DCSQ1240
C	INTEGRATE FROM X(IB) TO MAX(A,B)	DCSQ1250
	30 QB = (((FOURTH*C(IB,3)*DB+THIRD*C(IB,2))*DB+HALF*C(IB,1))*DB	DCSQ1260
	* +Y(IB))*DB	DCSQ1270
C		DCSQ1280
	Q = QB+QAB-QA	DCSQ1290
C		DCSQ1300
	IF (B .LT. A) Q = -Q	DCSQ1310
	IER = MAX0(JER,KER)	DCSQ1320
9000	CONTINUE	DCSQ1330
	IF (JER .GT. 0) CALL UERTST(JER,6HDCSQDU)	DCSQ1340
	IF (KER .GT. 0) CALL UERTST(KER,6HDCSQDU)	DCSQ1350
9005	RETURN	DCSQ1360
	END	