

ESPECTROCOPIA DE TUNELAMENTO QUÂNTICO

Rudson Ribeiro Alves

Orientador: Prof. Paulo Motisuke

Tese apresentada no Instituto de Física "Gleb
Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, para
obtenção do título de Mestre em Física.

*Este exemplar corresponde a redação
final da Tese defendida pelo aluno
Rudson Ribeiro Alves e aprovada pela
Comissão Julgadora*

Paulo Motisuke

15/09/94

Campinas, SP
5 de setembro de 1994.

*A minha esposa Jeâne Daniela
e aos meus pais
João Walmiro e Maria José*

AGRADECIMENTOS

Dedico este trabalho a:

Meus pais João Walmiro Alves e Maria José Ribeiro Alves, os quais dedicaram suas vidas a minha e a de meus irmãos.

A minha esposa Jeâne Daniela Bortolini, por estar sempre ao meu lado e cujo o apoio e incentivos jamais me faltou.

Em memória de minha avó Nicoleta Alves.

A meu orientador Prof. Dr. Paulo Motisuke, pelo incentivo, apoio e dedicação durante este trabalho.

A minha professora e amiga Dr. Natacha Boboshko, quem muito me incentivou e orientou durante a graduação, e, que continua sendo uma grande amiga.

Ao Dr. Pierre Basmaji do IFQSC, São Carlos pelo crescimento das amostras utilizadas neste trabalho.

Ao Dr. Saito Meguni, LME, USP-SP, pelo processamento dos contatos elétricos.

Ao CPqD-TELEBRAS, pela preparação das amostra para as medidas de fotorelectância.

Aos professores José A. Brum, Pitter A. B. Schulz, Gilmar E. Marques, Fernando Iikawa e a Maria José Brasil, pela colaboração indispensável.

Ao CNPq e FAPESP pelo auxílio financeiro durante o período deste trabalho.

Aos meus colegas: Evaldo Ribeiro, Waldénio Gambi, Marcelo Abbade, Brás, Kazuo, Rogério, Pedro, Manoel Andrade e tantos outros cujo os nomes não sito aqui, pelo companheirismo que tornaram mais fáceis estes dias.

Dedico também a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

ABSTRACT

In this work we introduced experiments for tunneling current measurements on double barrier of $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ and single $GaAs$ layer with planar Si δ -doped samples.

For this purpose, we prepared two experimental system: a) "Wheatstone Bridge" system and b) "Current Source and Voltmeter" system.

The former, "Wheatstone Bridge" system, allow us to measure directly not only the I vs. V characteristic curve but also the first and second derivative. It is also possible to measure C vs. V curve on some particular conditions. However, this system is limited to the maximum current of $10mA$.

The "Current Source and Voltmeter" system allow us to measure only I vs. V curve, but for currents up to $1A$ and resolution better than one part in 10^3 . For these data, the first and second derivative are obtained numerically.

For analysis of the tunneling current structures, we present theoretical model calculated in the envelope function approximation and in the transfer-matrix method to electron tunneling, and in addition the Luttinger-Kohn effective-mass Hamiltonian formalism is used for hole tunneling. Based on this model we calculated: i) the position of peaks in the I vs. V curve for electron tunneling current and ii) the Transmission Probability Peaks Positions as function of the Applied Voltage for holes, that are to compared to the experiments.

The experimental of d^2I/dV^2 vs. V curve of δ -doped $GaAs$ sample shows us four well resolved structures that are assigned, tentatively, to the resonant electron tunneling through the cap layer where the carriers are injected from the emitter (Au contact) to the empty sub-bands into the δ -doping potential well.

In the double barrier $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ samples we measured I vs. V curves using the "Current Source and Voltmeter" system, and their derivatives were obtained numerically. The n-type sample, #204, presented two structures localized at $+200mV$ and $-170mV$, that are assigned as resonant tunneling structure to the first subband in the well. Other oscillatory structures are assigned as resonant transmission through the second subband and/or into continuum virtual states.

In p-type double-barrier samples used in this work, we observed great discrepancy between the predicted and the measured tunneling structure position values. This is probably due to the big contact resistance values that unfortunately

we couldn't remove, during the reprocessing of the samples. Therefore, these p-type double-barrier experiments are not considered in detail in this work.

RESUMO

Neste trabalho implementamos experimentos para a medida da corrente de tunelamento em amostras de Dupla Barreira de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ e de $GaAs$ com dopagem planar de Si (δ -doping).

Para isto preparamos dois sistemas experimentais: a) "Circuito Ponte de Wheatstone" e b) sistema "Fonte de Corrente e Voltímetro".

O primeiro sistema, "Circuito Ponte de Wheatstone", permite-nos medir diretamente, além da curva característica I vs. V , a primeira e segunda derivada. Sob algumas condições particulares, é também possível obter a curva C vs. V . Entretanto, este sistema está limitado a corrente máxima de $10mA$.

O sistema "Fonte de Corrente e Voltímetro" permite-nos medir apenas a curva I vs. V , mas com correntes de até $1A$ e com resolução melhor que de uma parte em 10^3 , o que nos possibilita obter a primeira e a segunda derivada numericamente.

Para a análise das estruturas na corrente de tunelamento apresentamos os modelos teóricos utilizados para o estudo de tunelamento de elétrons e de buracos em amostras de dupla barreira. Estes são calculados na aproximação da função envelope e no método da matriz de transferência (tunelamento de elétrons), e mais o Hamiltoniano da massa efetiva de Luttinger e Kohn (tunelamento de buracos). Baseado nestes modelos determinamos: i) as posições dos picos na curva I vs. V através do cálculo da corrente de tunelamento (no caso de elétrons) e ii) as curvas das Posições dos Picos da Probabilidade de Transmissão de buracos em função da Tensão Aplicada, o que nos permite comparar estes resultados com os experimentais.

Medida da curva d^2I/dV^2 vs. V para uma amostra de $GaAs$ com dopagem planar (δ -doping) mostrou quatro estruturas bem resolvidas. Estas estruturas podem ser associadas à tunelamento ressonante de elétrons através da camada de topo, onde os portadores são injetados do emissor (contato de Au), para as subbandas não populadas no poço de potencial delta.

Nas amostras de Dupla Barreira de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ foram medidas as curvas I vs. V utilizando o sistema "Fonte de Corrente e Voltímetro", e as suas derivadas foram obtidas numericamente. A amostra tipo n , N° 204, apresentou duas estruturas, uma em $+200mV$ e outra em $-170mV$, para as duas polarizações, as

quais associamos a tunelamento ressonante de elétrons com a primeira sub-banda no poço. Outras oscilações observadas foram associadas a transmissão com a segunda sub-banda e com estados virtuais do contínuo.

Já a amostra tipo *p*, N° 199, apresentou uma região de resistência diferencial negativa muito evidente próxima de 1,1V na curva *I vs. V*. Segundo o modelo utilizado é esperado um pico de ressonância na curva *I vs. V* em ~167mV. Esta grande discrepância entre o valor esperado e o valor medido se deve principalmente a resistência dos contatos que não nos foi possível eliminar nas amostras de Dupla Barreira tipo *p*.

ÍNDICE ANALÍTICO

AGRADECIMENTOS	ii
ABSTRACT	iii
RESUMO	v
ÍNDICE ANALÍTICO	vii
Capítulo 1. INTRODUÇÃO.....	1
Capítulo 2. MODELOS TEÓRICOS.....	3
2.1. Introdução	3
2.2. Tunelamento de Elétrons	3
2.2.1. Matriz Transferência para Elétrons.....	4
2.2.2. Discussões.....	8
2.3. Tunelamento de Buracos	12
2.3.1. Operador Densidade de Corrente	12
2.3.2. Solução da Equação da Massa Efetiva	17
2.3.3. Matriz Transferência.....	19
2.3.4. Discussões.....	23
2.4. Corrente de Tunelamento	35
2.4.1. Elétrons.....	36
2.4.2. Buracos	39
2.5. Região de Depleção e Região de Acumulação	41
Capítulo 3. MONTAGENS EXPERIMENTAIS	44
3.1. Introdução	44
3.2. Circuito Ponte de Wheatstone	44
3.2.1. Circuito de Realimentação	46
3.2.2. Método da Ponte de Wheatstone	47

3.2.3. Sistema de Medidas com a Ponte de Wheatstone	51
3.3. Sistema Fonte de Corrente e Voltímetro	53
3.4. Amostras	56
Capítulo 4. ANÁLISE DOS DADOS	61
4.1. Introdução	61
4.2. Amostra δ -doping.....	61
4.3. Dupla Barreira.....	65
4.3.1. Tunelamento de Elétrons	66
4.3.2. Tunelamento de Buracos.....	72
4.3.3. Análise da Estrutura de Dupla Barreira por Fotorelectância	74
Capítulo 5. CONCLUSÕES.....	80
Apêndice A. Matriz Transferência para Elétrons	82
Apêndice B. Operador Densidade de Corrente	85
Apêndice C. Autovalores e Autovetores do Hamiltoniano de Luttinger.....	87
Bibliografia	90

Capítulo 1.

INTRODUÇÃO

Desde o trabalho pioneiro de Tsu e Esaki [1-4], no início da década de 70, quando primeiro foi proposto pela primeira vez a construção de um potencial periódico unidimensional formado por semicondutores de diferentes *gaps*, heteroestruturas semicondutoras, tem sido estudadas intensivamente tanto experimentalmente como teoricamente.

Estudos teóricos de tunelamento coerente de elétrons em heteroestruturas encontrados na literatura utilizada: 1 - cálculos auto-consistentes os quais levam em conta as curvaturas das sub-bandas e o acúmulo de cargas na região do poço, Ohnishi [5]; 2 - soluções exatas da equação de Schroedinger, com potencial elétrico externo aplicado utilizando funções de Airy, Lui [6]; 3 - efeitos da não parabolicidade das sub-bandas do poço quântico, Ekenberg [7], Cury e Portal [8]; 4 - processos de tunelamento não ressonante utilizando o método da função de Green, Alam [9]; 5 - a aproximação da função envelope (assim como Tsu e Esaki [4]) Ando e Itoh [10], Vassell e outros [11] os quais trataram apropriadamente as condições de contorno nas interfaces.

Para tunelamento de buracos em heteroestruturas, existe igualmente uma vasta literatura, dentre as quais podemos citar os trabalhos de: 1 - Perng-fei e Wang [12], utilizando o formalismo de Kronig-Penney baseado na técnica da matriz de transferência, aplicando para uma, duas e três bandas; 2 - Wessel e Altarelli [13], Chuang [14] e Chao [15], Andreani [16], os quais utilizaram o modelo da função envelope derivada do Hamiltoniano da massa efetiva de Luttinger e Kohn [17], desprezando a banda de condução e a de interação *spin-orbita*.

Neste trabalho propomos investigar com o auxílio da medida de corrente de tunelamento, as energias das sub-bandas em amostras de *GaAs* com dopagem planar de *Si* (dopagem delta) e em amostras de dupla barreira de *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* tipo *n* (tunelamento de elétrons) e tipo *p* (tunelamento de buracos), crescidas por MBE.

Com este intuito, apresentamos também o desenvolvimento teórico dos modelos adotado para a análise das medidas de tunelamento nas amostras de dupla barreira de *GaAs/Al_xGa_{1-x}As*, onde utilizamos as aproximações da massa efetiva e função envelope

para tunelamento de elétrons [11], e mais o Hamiltoniano de Luttinger e Konh no estudo de tunelamento de buracos [14-15]

Para efetuarmos as medidas experimentais preparamos dois sistemas de medidas:

- Circuito Ponte - que nos permite fazer as medidas das curvas características **I vs.V** bem como das suas primeira e segunda derivadas [18], até um limite de corrente de **10mA** ;
- Sistema Fonte de Corrente e Voltímetro - o que nos permitia alcançar uma corrente de até **1A** com uma boa qualidade na relação sinal ruído, onde é possível obter a primeira e a segunda derivada numericamente com boa qualidade.

Durante a apresentação deste trabalho, para evidenciar letras relacionadas com uma grandeza física ou alguma constante no texto, utilizamos o caracter em negrito.

Capítulo 2.

MODELOS TEÓRICOS

2.1. Introdução

Neste capítulo faremos uma descrição teórica de um modelo de tunelamento de elétrons e buracos, através de uma heteroestrutura. Para tanto utilizamos a descrição baseada no método da função envelope aplicada ao extremo da banda de condução, para o estudo de tunelamento de elétrons (seção 2.2), e ao topo da banda de valência, para o estudo de tunelamento de buracos (seção 2.3). Em seguida passamos a definição da corrente de tunelamento (seção 2.4) e terminamos a seção fazendo uma breve descrição das aproximações das regiões de depleção e de acumulação, formadas a direita e a esquerda da dupla barreira de *GaAs/AlAs* (camadas de *GaAs* dopadas), quando aplicamos um potencial elétrico externo na amostra (seção 2.5).

2.2. Tunelamento de Elétrons

Para o estudo de tunelamento de elétrons através de uma heteroestrutura adotamos como ponto de partida o modelo da matriz transferência de Vassel [11] e Altarelli [16]. Este modelo utiliza a aproximação da massa efetiva e função envelope, onde as diferenças nas massas do elétron no poço e na barreira são apropriadamente levados em conta. Processos de espalhamento e relaxação (inclusive espalhamentos para o ponto X no *AlAs* ou no *GaAs*), bem como, efeitos de não parabolicidade dos estados no poço, não são considerados aqui. As funções de Bloch na barreira e no poço serão consideradas iguais, o que simplifica substancialmente as condições de contorno na interface barreira/poço, as quais passam a depender somente da função envelope e da massa efetiva do elétron. Esta última aproximação restringe o modelo da matriz transferência a heteroestruturas quimicamente semelhantes tal como em *GaAs/Al_xGa_{1-x}As*. Apesar destas aproximações, estes cálculos tem mostrado boa concordância com os resultados experimentais [10, 12]. Para estender este modelo a uma heteroestrutura com forma de potencial arbitrário, aproximamos a

forma do potencial real da heteroestrutura, $U(z)$, por uma sucessão de potenciais tipo degrau como ilustrado na figura 1.

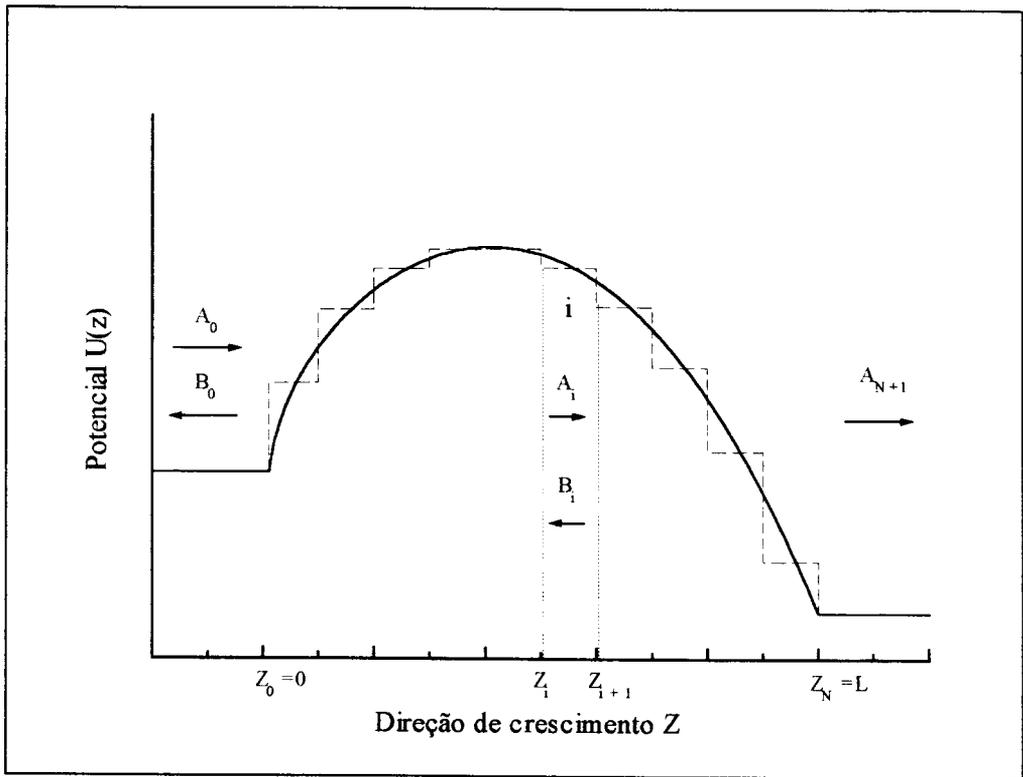


Figura 1. Potencial real (linha sólida) e potencial degrau aproximado (linha tracejada), para uma barreira de potencial arbitrária.

2.2.1. Matriz Transferência para Elétrons

Na aproximação da massa efetiva, o nosso problema se resume em resolver a equação de Schroedinger para função envelope dada por:

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} F(z) \right] - U(z) F(z) = E_1(z) F(z) \quad (1)$$

onde $F(z)$ é a função envelope, \hbar a constante de Planck dividida por 2π , $m(z)$ e $E_1(z)$ são respectivamente a massa efetiva e a energia longitudinal do elétron na posição z .

$$m(z) = \begin{cases} m_{\text{GaAs}} & \text{no poço;} \\ m_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} & \text{na barreira.} \end{cases}$$

Da conservação da energia total e do momento transversal sabemos que $E_t(\mathbf{z}) = E - E_t/\gamma(\mathbf{z})$, onde $E_t = \hbar^2 \mathbf{k}_t^2 / 2 m_{\text{GaAs}}$ é a energia transversa no *GaAs*, E a energia total do elétron e $\mathbf{k}_t^2 = \mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2$.

A equação 1, acima, pode ser reescrita na forma:

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\gamma(z)} \frac{d}{dz} F(z) \right] + \chi [E - E_t/\gamma(z) - U(z)] F(z) = 0 \quad (2)$$

onde

$$\gamma(z) = m(z) / m_{\text{GaAs}} \quad (3)$$

que descreve a variação da massa efetiva do elétron de camada a camada, e

$$\chi = \frac{2 m_{\text{GaAs}}}{\hbar^2} \quad (4)$$

é uma constante.

Aproximando $U(\mathbf{z})$ por um potencial degrau como descrito anteriormente, as soluções para a eq. 2 numa região i qualquer, figura 1, tornam-se uma combinação linear de duas ondas planas caminhantes ou evanescentes, uma para direita e outra para esquerda,

$$F_i(z) = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z} \quad , \text{ com } z_i < z \leq z_{i+1} \quad (5)$$

e

$$k_i^2 = \gamma(z_i) \chi [E - E_t/\gamma(z_i) - U(z_i)] \quad (6)$$

onde \mathbf{k}_i é o vetor de onda do elétron na região i . Observe que se a energia longitudinal do elétron, $E_t(\mathbf{z}) = [E - E_t/\gamma(\mathbf{z})]$, for menor que a energia potencial, $U(\mathbf{z})$, \mathbf{k} torna-se imaginário, e $F(\mathbf{z})$ torna-se uma combinação linear de duas ondas evanescentes.

Em cada interface devemos impor a continuidade da função envelope $F(\mathbf{z})$. Avaliando a integral da eq. 2 no intervalo de $[z + \varepsilon, z - \varepsilon]$ no limite de $\varepsilon \rightarrow 0$, eq. 7, vemos que, para a conservação do fluxo da probabilidade é necessário impormos que $F'(\mathbf{z})/\gamma(\mathbf{z})$ também seja contínua em todas as interfaces.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{z-\varepsilon}^{z+\varepsilon} [F'(\xi) / \gamma(\xi)]' d\xi = 0 \quad (7)$$

onde ' (linha) na equação acima denota a derivada em relação a ξ , ou seja, $F'(\xi) = dF(\xi)/d\xi$.

Diante destas condições de contorno em cada interface, vemos que para o estudo de tunelamento ressonante de elétrons em heteroestruturas, é conveniente trabalharmos com o vetor

$$\Gamma(z) = \begin{bmatrix} F(z) \\ F'(z)/\gamma(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Gamma_1(z) \\ \Gamma_2(z) \end{bmatrix} \quad (8)$$

cujos elementos satisfazem as equações

$$\begin{aligned} \Gamma_1' &= \gamma(z)\Gamma_2(z) \\ \Gamma_2' &= -\chi[E - E_i/\gamma(z) - U(z)]\Gamma_1 \end{aligned} \quad (9)$$

sendo a primeira uma equação identidade e a segunda a equação da massa efetiva dada pela eq. 2. Assim como Vassel [11], procuramos a matriz transferência para uma barreira (ou poço) na forma

$$S(z, z') = \begin{bmatrix} \Gamma_1^{(1)}(z) & \Gamma_1^{(2)}(z) \\ \Gamma_2^{(1)}(z) & \Gamma_2^{(2)}(z) \end{bmatrix} \quad (10)$$

onde $\Gamma^{(1)}$ e $\Gamma^{(2)}$ são duas soluções particulares da equação da massa efetiva, eq. 2, e $S(z, z')$ é a matriz que intercala as soluções de um lado e do outro de uma barreira (ou poço) como na equação abaixo:

$$\Gamma(z) = S(z, z')\Gamma(z') \quad (11)$$

e portanto, deve satisfazer as condições iniciais

$$S(z', z') = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \text{matriz identidade} \quad (12)$$

Utilizando como soluções da equação da massa efetiva as ondas planas da eq. 5, é fácil demonstrar que a matriz de transferência ¹, para k real, tem a forma:

¹ Veja desenvolvimento no Apêndice A.

$$S(z, z') = \begin{bmatrix} \cos[k(z - z')] & \frac{\gamma(z'^+)}{k} \text{sen}[k(z - z')] \\ -\frac{k}{\gamma(z^-)} \text{sen}[k(z - z')] & \cos[k(z - z')] \end{bmatrix} \quad (13)$$

onde os sinais + e - significam que $\gamma(z)$ está sendo avaliado respectivamente a direita e a esquerda do ponto z . Se k é imaginário, os elementos em $S(z, z')$ tornam-se senos e cosenos hiperbólicos, o que corresponde a uma combinação linear de ondas evanescentes crescentes e decrescentes no intervalo $[z, z']$.

Consideremos então uma estrutura no intervalo $[0, L]$, como mostrado na figura 1, através da qual pretendemos calcular a transmissão de elétrons. A direita e a esquerda da estrutura, as funções envelope são dadas pelas ondas planas:

$$\begin{aligned} F_0(z) &= A_0 e^{ikz} + B_0 e^{-ikz} \quad , \quad z \leq 0; \\ F_{n+1}(z) &= A_{n+1} e^{ik(z-L)} + B_{n+1} e^{-ik(z-L)} \quad , \quad z \geq L, \end{aligned} \quad (14)$$

com origens em $z = 0$ e $z = L$ respectivamente. Os índices 0 e $n + 1$ correspondem respectivamente as regiões à esquerda e à direita da estrutura. Os vetores de onda $k_0^2 = 2m(0^-)E/\hbar^2$ e $k^2 = 2m(L^+)(E - eV)/\hbar^2$ são, respectivamente, os vetores de onda dos elétrons à esquerda e à direita da estrutura, e, V é o potencial elétrico externo aplicado a estrutura. Como discutimos anteriormente, dividimos agora, esta estrutura em N intervalos, onde a cada intervalo aproximamos o potencial real por um degrau. Então, a matriz transferência total da estrutura será dada pelo produto das matrizes $S_i(z_i, z_{i+1})$ de cada região,

$$S(L, 0) = S_N S_{N-1} \cdots S_i \cdots S_2 S_1 \quad (15)$$

sendo S_i a matriz transferência na região i dada pela eq. 13. Utilizando as funções de onda dadas pela eq. 14, na equação da matriz transferência, eq. 11, chegamos ao sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} A_{n+1} + B_{n+1} \\ \frac{ik}{\gamma(L^+)} (A_{n+1} - B_{n+1}) \end{bmatrix} = S(L, 0) \begin{bmatrix} A_0 + B_0 \\ \frac{ik_0}{\gamma(0^-)} (A_0 - B_0) \end{bmatrix} \quad (16)$$

que pode ser reescrito na forma,

$$\begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

onde a matriz \mathbf{M} é dada por

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (S_{11} - \imath S_{21} / k) + \imath(S_{12} - \imath S_{22} / k)k_0 & (S_{11} - \imath S_{21} / k) - \imath(S_{12} - \imath S_{22} / k)k_0 \\ (S_{11} + \imath S_{21} / k) + \imath(S_{12} + \imath S_{22} / k)k_0 & (S_{11} + \imath S_{21} / k) - \imath(S_{12} + \imath S_{22} / k)k_0 \end{bmatrix} \quad (18)$$

onde fizemos $\gamma(\mathbf{L}^+) = \gamma(\mathbf{0}^-) = 1$, ou seja, consideramos que os materiais nos dois lados da estrutura são iguais (em nosso caso são duas "space layer" de *GaAs*), e, S_{11} , S_{12} , S_{21} e S_{22} são os elementos da matriz $\mathbf{S}(\mathbf{L}, \mathbf{0})$. Analisando a matriz \mathbf{M} , da eq. 19, vemos que esta possui características de uma matriz de espalhamento

$$M_{11} = M_{22}^*, \quad M_{12} = M_{21}^* \quad \text{e que } \det\{\mathbf{M}\} = k_0/k. \quad (19)$$

Definindo a probabilidade de transmissão e de reflexão como:

$$T = \frac{|A_{n+1}|^2}{|A_0|^2} \frac{k}{k_0} = \frac{k_0}{k} \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad \text{e} \quad R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} = \frac{|M_{12}|^2}{|M_{22}|^2} \quad (20)$$

para uma incidência da esquerda ($B_{n+1} = 0$) podemos garantir a conservação da probabilidade, ou seja,

$$T + R = \frac{1}{|M_{22}|^2} \left(\frac{k_0}{k} + |M_{12}|^2 \right) = \frac{1}{|M_{22}|^2} \left(|M_{22}|^2 - |M_{21}|^2 + |M_{12}|^2 \right) \equiv 1 \quad (21)$$

onde, fazemos uso das propriedades dos elementos da matriz \mathbf{M} , eq. 19.

2.2.2. Discussões

Nesta seção, apresentamos alguns resultados numéricos, que calculamos utilizando o modelo descrito na seção anterior, aplicado a uma dupla barreira de *GaAs/AlAs* com 100Å de poço e 30Å de barreira, como mostrado na figura 2. Para a descontinuidade na banda de condução adotamos $\Delta E_C = 957 \text{ meV}$, $\Delta E_C / \Delta E_g = 0,6$ e para as massas do elétron no poço $m_{\text{GaAs}} = 0,067m_0$ e na barreira $m_{\text{AlAs}} = 0,153m_0$, onde m_0 é a massa do elétron livre.

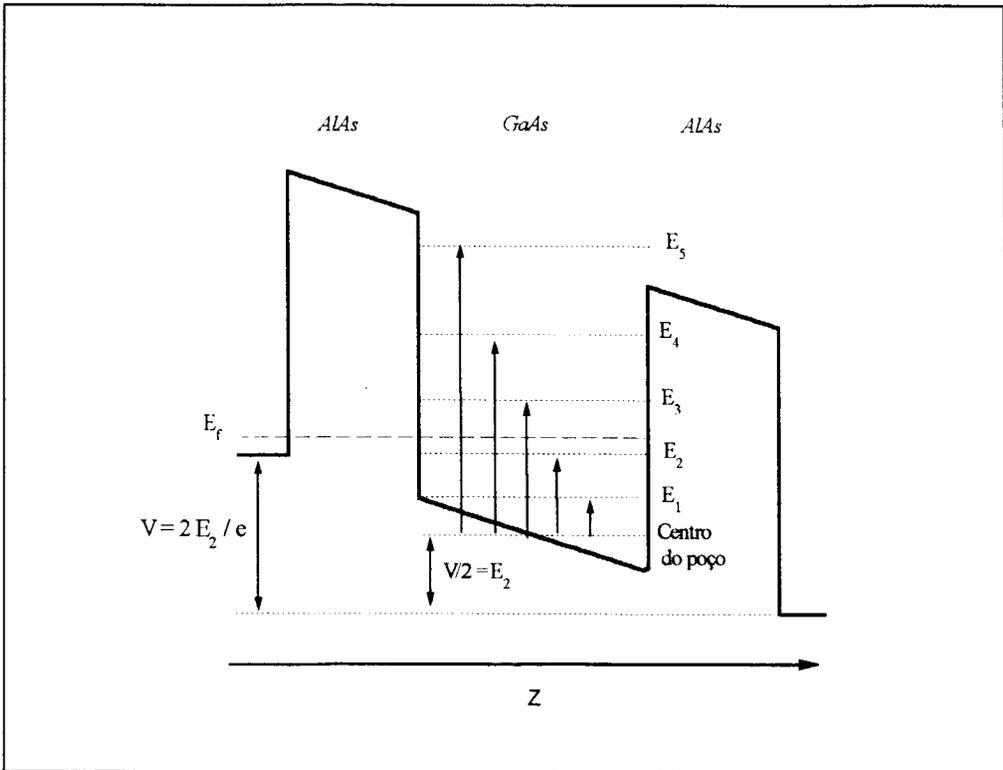


Figura 2. Estrutura de dupla barreira simétrica com potencial externo aplicado igual a $2E_2/e$, coincidindo o fundo da banda de condução do emissor (à esquerda da dupla barreira) com o estado ligado E_2 no poço.

Na figura 3 apresentamos a probabilidade de transmissão eletrônica em função da energia do elétron incidente, medida em relação ao fundo da banda de condução no emissor, para diferentes potenciais elétricos externos aplicados. A energia transversa foi fixada em $E_t = 0,367 \text{ meV}$, igual a energia térmica dos elétrons a temperatura de hélio líquido ($4,2\text{K}$). Uma vez que processos de espalhamentos não são considerados, é razoável tomarmos a energia transversa como sendo igual a energia térmica dos elétrons. Nesta figura 3 podemos observar diversos picos na probabilidade de transmissão correspondentes a ressonância aos estados eletrônicos confinados no poço.

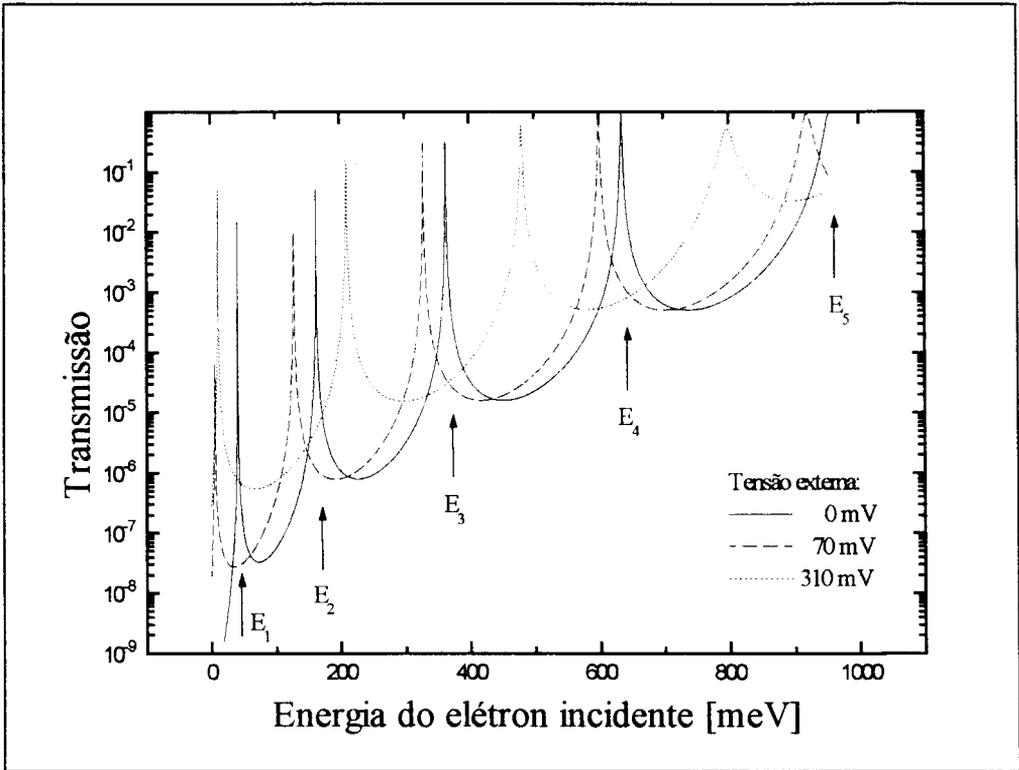


Figura 3. Probabilidade de transmissão de elétrons através de uma dupla barreira de *GaAs/AlAs* com 30\AA de barreira e 100\AA de poço para três diferentes potenciais externos aplicados: 0mV (linha contínua); 70mV (linha tracejada); e 310mV (linha pontilhada). As energias $E_1 = 41,2\text{meV}$; $E_2 = 163\text{meV}$; $E_3 = 363\text{meV}$; $E_4 = 635\text{meV}$ e $E_5 = 956\text{meV}$ são os estados ligados no poço medidos com relação ao fundo da banda de condução no centro do poço.

Na figura 3, podemos notar também que, com o aumento do potencial externo aplicado à dupla barreira os picos de ressonância na probabilidade de transmissão, são deslocados para o lado de baixa energia. Como mostrado na figura 2, para uma dupla barreira simétrica, ou seja, as duas barreira de *AlAs* com a mesma espessura, quando o potencial elétrico externo V se aproxima de $2E_i/e$, onde e é a carga do elétron e E_i a energia de um estado i ligado no poço, observamos o alinhamento entre este estado e o fundo da banda de condução no emissor. Os picos da curva I vs. V nos dará uma boa indicação das posições das sub-bandas, como será discutido adiante.

A posição dos picos de ressonância e seus deslocamentos para o lado de baixa energia, são medidos em relação ao fundo da banda de condução no emissor (à esquerda da dupla barreira) como pode ser visto na figura 2. No caso de tunelamento de elétrons (e de buracos como será visto adiante), quando a largura do poço é pequena ($\sim 50\text{\AA}$), os níveis de energia ligados no poço (E_1 , E_2 , E_3 , E_4 e E_5) medidos em relação ao “centro

poço”, praticamente não se deslocam quando perturbados por um potencial elétrico externo constante.

Na figura 4 apresentamos um gráfico da posição do pico na curva de transmissão em função da tensão externa aplicada a estrutura de dupla barreira. Neste gráfico podemos observar que a posição dos picos de tunelamento ressonante variam linearmente com a tensão externa aplicada, na forma

$$E_i(V) \cong E_i - \frac{V e}{2} \quad (22)$$

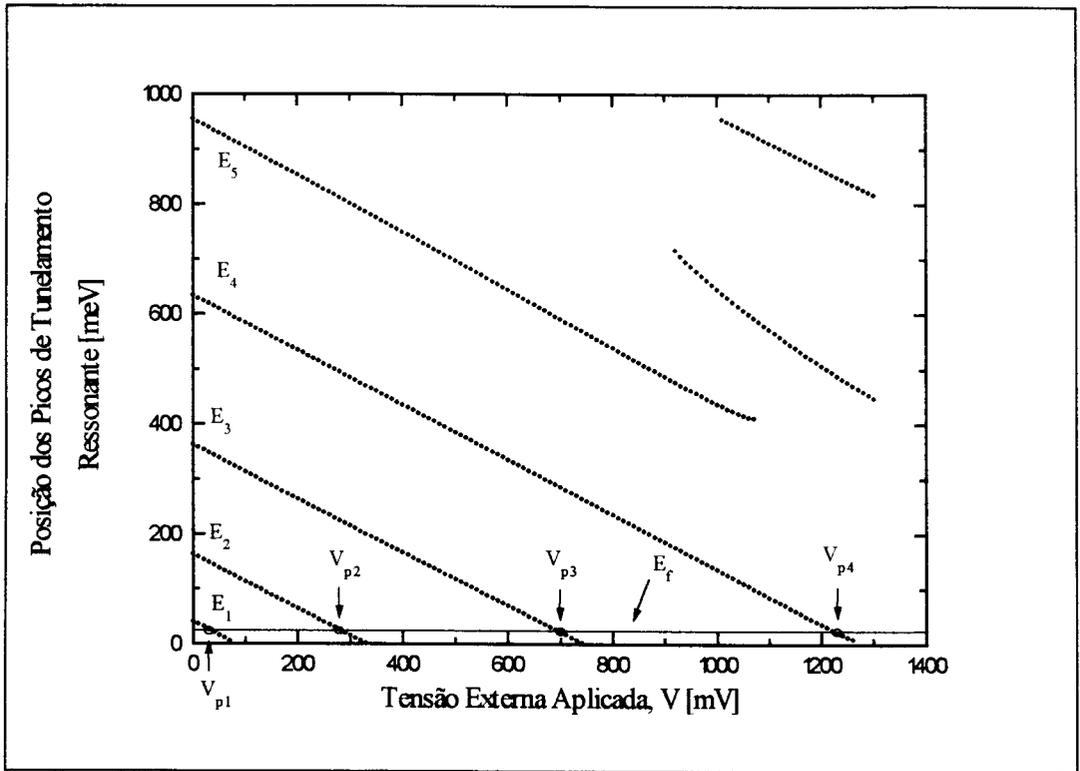


Figura 4. Posição dos picos na curva de transmissão em função da tensão externa aplicada para uma estrutura de dupla barreira com 100\AA de poço e 30\AA de barreira. E_1 , E_2 , E_3 , E_4 e E_5 denotam os estados ligados no poço para tensão externa aplicada igual a zero. As duas curvas à direita, mais acima, são estados do contínuo, não ligados, acima da barreira.

Portanto, quando a energia E_i alinhar com o nível de Fermi no emissor, haverá um pico na corrente de tunelamento, desta forma as posições dos picos na corrente devido ao tunelamento ressonante é dado aproximadamente por

$$eV_{p_i} \cong 2(E_i - E_f) \quad (23)$$

para uma amostra de dupla barreira simétrica. O mesmo está ilustrado na figura 4, onde o valor de tensão em que os estados E_i cruzam o nível de Fermi, E_f , são marcados como tensões V_{p_i} , para os quatro primeiros estados. Para esta amostra que estamos usando como exemplo, as posições na tensão em que deverão ocorrer os picos na corrente de tunelamento, para $E_f = 5\text{meV}$ e $T = 4,2\text{K}$, são: 70mV ; 320mV ; 730mV ; e $1,26\text{V}$, retirados do gráfico da figura 4.

2.3. Tunelamento de Buracos

Para o estudo de tunelamento de buracos em heteroestruturas adotamos o modelo apresentado nos trabalhos de Shuang [14] e Chao *et al.* [15], baseado no formalismo da matriz transferência.

Este modelo se baseia na teoria de multibandas da massa efetiva usando o Hamiltoniano de Luttinger e Kohn (4×4) [17] e a aproximação $\mathbf{k.p}$ em primeira ordem. Com o intuito de simplificar os cálculos não são considerados os efeitos de espalhamento e nem de relaxação, embora os mesmos sejam importantes nos processos de tunelamento.

O modelo será apresentado em três partes: na seção 2.3.1 será introduzido o operador densidade de corrente para a banda de valência; na seção 2.3.2 será apresentado uma breve discussão sobre as soluções do Hamiltoniano de Luttinger e Kohn para o material *bulk* e para uma heterojunção de *GaAs/AlAs* e na seção 2.3.3 apresentamos o método da matriz de transferência para a banda de valência. Na seção 2.3.4, faremos uma breve discussão sobre os cálculos e resultados obtidos com este modelo.

2.3.1. Operador Densidade de Corrente

Para definirmos o operador densidade de corrente no topo da banda de valência, Γ_8 , partimos diretamente das definições básicas da mecânica quântica para a densidade de probabilidade eq. 24 e a densidade de corrente de probabilidade eq. 25,

$$\rho = \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (24)$$

$$\bar{\mathbf{j}} = \frac{1}{m} \Re \langle \Psi | \bar{\mathbf{p}} | \Psi \rangle \quad (25)$$

as quais satisfazem a lei de conservação da probabilidade

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (26)$$

onde ψ , é a função de onda total da partícula, \mathbf{p} é o momento total, m a massa do elétron livre e \Re denota a parte real da expressão complexa na eq. 25.

Pretendemos, portanto, generalizar estas definições da densidade de probabilidade e da densidade de corrente de probabilidade, para a aproximação da função envelope aplicado ao topo da banda de valência Γ_8 . Para tal, tomaremos uma base de funções de Bloch as quais são construídas a partir de uma combinação linear das funções espaciais de Bloch X , Y e Z (correspondentes ao orbital P , momento angular orbital $L = 1$). Estas funções são tais que, o momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \sigma$ (sendo σ o *spin* da partícula), bem como a sua projeção ao longo do eixo z , J_z , são diagonais nesta nova base. Para o extremo da banda de valência temos $L = 1$ e $\sigma = 1/2$ o que implica nos valores para o momento angular total $\mathbf{J} = 3/2$ (quadrupletto correspondente a simetria Γ_8) e $\mathbf{J} = 1/2$ (dupletto correspondente a simetria Γ_7), como mostrado na figura 5. Estamos interessados somente no quadrupletto $\mathbf{J} = 3/2$ correspondente aos estados de buraco pesado, $m_j = 3/2$, e de buraco leve, $m_j = 1/2$, uma vez que interações *spin-orbita* é menos importante aqui. Neste caso, uma possível base de funções de Bloch no centro da zona de Brillouin, $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, é a apresentada nas equações eq. 27:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{3/2,0} &= |3/2, 3/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\ \mathbf{u}_{1/2,0} &= |3/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow\rangle \\ \mathbf{u}_{-1/2,0} &= |3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \uparrow + 2Z \downarrow\rangle \\ \mathbf{u}_{-3/2,0} &= |3/2, -3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \end{aligned} \quad (27)$$

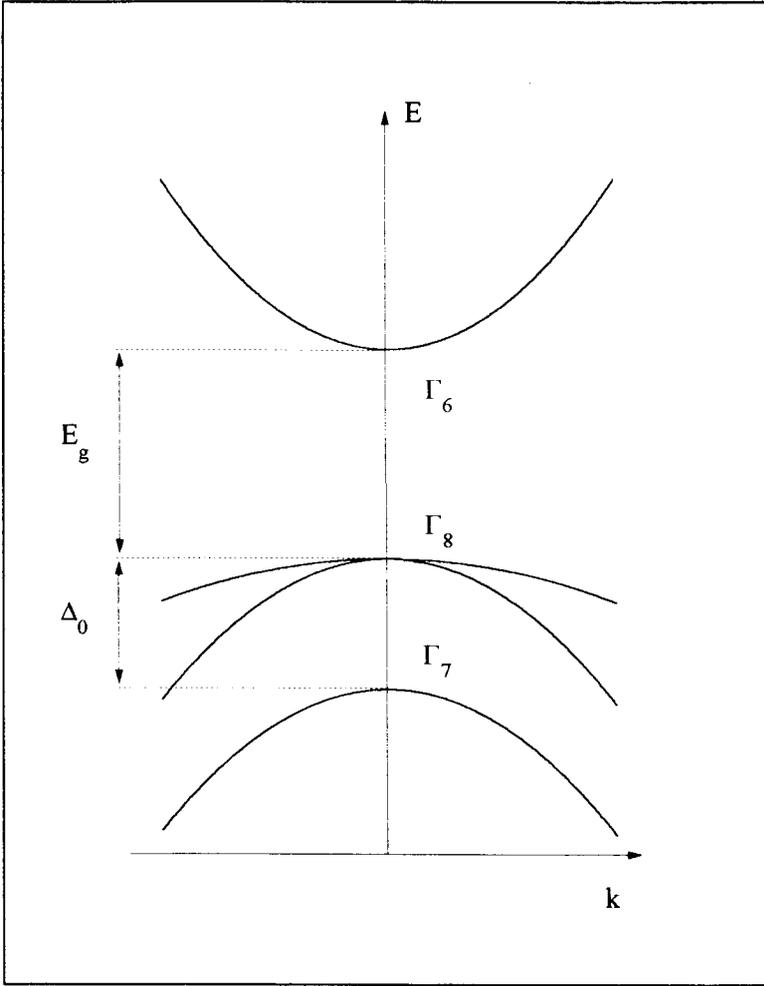


Figura 5. Estrutura de bandas do *GaAs* nas vizinhanças do centro da zona de Brillouin em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

Aqui fizemos uso da notação $\mathbf{u}_{\mathbf{m},\mathbf{j},\mathbf{k}}$ para as funções de Bloch. Na aproximação de multibandas da massa efetiva, quando o potencial da heteroestrutura $U(\mathbf{z})$ é fraco e varia suavemente quando comparado com o potencial cristalino U_c , ao invés de resolvermos a equação de Schroedinger do cristal,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + (U_c + U(\mathbf{z}))\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (28)$$

podemos aproximar resolvendo a equação de multibandas da massa efetiva dada por

$$-D_{ij}^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} F_j + U(\mathbf{z})F_j = i\hbar \frac{\partial F_j}{\partial t} \quad (29)$$

onde \mathbf{j} e \mathbf{j}' correspondem a um dos estados de Bloch no topo da banda de valência Γ_8 , pertencentes ao conjunto de estados $\eta = \{\mathbf{u}_{m\mathbf{j},0}\} = \{3/2, 1/2, -1/2, -3/2\}$, dados pela eq. 27; α e β representam as coordenadas cartesianas x , y e z ; e \hbar a constante de Planck dividida por 2π . Nas equações 29 e 30, os produtos e somas são tomados sobre todos os índices repetidos $\{\mathbf{j}, \mathbf{j}'\}$ e $\{\alpha, \beta\}$. Desta forma toda a informação sobre o potencial cristalino fica embutido no *gap* do material e no tensor massa efetiva dado por,

$$D_{j'j}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\delta_{\alpha\beta} \delta_{j'j} + \sum_{\xi \neq \eta} \frac{2P_{j\xi}^{\alpha} P_{\xi j'}^{\beta}}{m(\epsilon_{\eta} - \epsilon_{\xi})} \right] \quad (30)$$

O elemento de matriz, $P_{\xi j}^{\alpha} = \langle \mathbf{u}_{j0} | \bar{\mathbf{p}} | \mathbf{u}_{\xi j} \rangle_{uc}$ é calculado em uma célula unitária (uc). A energia ϵ_n corresponde ao extremo da banda n , e, o índice ξ , como escrito na somatória da eq. 30, corresponde ao extremo de todas as outras bandas exceto as bandas de buraco pesado e de buraco leve, η , ou seja $\xi \neq \eta$.

Utilizando teoria de perturbação $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ em primeira ordem, a função de onda total, escrita em termos das funções envelope F_j , é dada por

$$\Psi = F_j \mathbf{u}_{j0} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F_j}{\partial x_{\alpha}} \sum_{\xi \neq \eta} \frac{P_{\xi j}^{\alpha} \mathbf{u}_{\xi 0}}{m(\epsilon_{\eta} - \epsilon_{\xi})} \quad (31)$$

Para encontrarmos uma definição para a densidade de probabilidade e para a densidade de corrente de probabilidade com base nas funções envelope F_j , substituímos a função de onda acima, nas definições dadas pelas equações 24 e 25. Utilizamos ainda, o fato de que as funções envelope variam muito mais lentamente que as funções de Bloch e aproximamos esta rápida variação das funções de Bloch pela sua média sobre uma célula unitária. Juntamente com as propriedades de ortogonalidade das funções de Bloch encontramos para a densidade de probabilidade

$$\begin{aligned} \rho(\bar{\mathbf{r}}, t) &= \langle \Psi | \Psi \rangle \approx F_j^* F_j \langle \mathbf{u}_{j0} | \mathbf{u}_{j'0} \rangle_{uc} + \\ &+ \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F_j}{\partial x_{\alpha}} \right)^* F_{j'} \sum_{\xi \neq \eta} \frac{P_{\xi j'}^{\alpha*}}{m(\epsilon_{\eta} - \epsilon_{\xi})} \langle \mathbf{u}_{\xi 0} | \mathbf{u}_{j'0} \rangle_{uc} + \\ &+ \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F_{j'}}{\partial x_{\alpha}} \right) F_j^* \sum_{\xi \neq \eta} \frac{P_{\xi j}^{\alpha}}{m(\epsilon_{\eta} - \epsilon_{\xi})} \langle \mathbf{u}_{j0} | \mathbf{u}_{\xi 0} \rangle_{uc} \end{aligned}$$

$$\rho(\bar{\mathbf{r}}, t) \approx F_j^* F_j \quad (32)$$

A expressão para densidade de corrente de probabilidade pode ser encontrada, de forma similar, substituindo a função de onda dada na eq. 31 na equação da continuidade, eq. 26, e usando ainda a definição anterior para a densidade de probabilidade da eq. 32. De outra forma: podemos também substituindo a função de onda da eq. 31, na equação da densidade de corrente de probabilidade, eq. 25. Utilizamos, ainda, as propriedades de simetria do tensor massa efetiva:

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = D_{j'j}^{\beta\alpha} \quad (33)$$

Desta forma encontramos a definição para a densidade de corrente de probabilidade ² dada por,

$$j_\alpha \approx \Re \langle F | J_\alpha | F \rangle \quad (34)$$

onde

$$(J_\alpha)_{jj'} = \frac{1}{\hbar} (D_{jj'}^{\alpha\beta} + D_{j'j}^{\beta\alpha}) k_\beta \quad (35)$$

é o operador densidade de corrente.

Embora as definições para a densidade de probabilidade (eq. 32) e densidade de corrente de probabilidade (eq. 34) terem aproximações, elas satisfazem a equação da continuidade (eq. 26) exatamente. O operador densidade de corrente dado pela eq. 35, é muito útil no estudo de heteroestruturas, onde geralmente são encontradas condições de contorno abruptas. Sendo a direção z a direção de crescimento da estrutura, é suficiente para nossos propósitos, conhecermos o operador densidade de corrente nesta direção, ou seja, J_z , que é dado por

$$J_z = \frac{\hbar}{m} \begin{pmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z & -\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z & \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z \end{pmatrix} \quad (36)$$

As constantes γ_{1-3} são os parâmetros de Luttinger e k_{x-z} são as componentes do vetor de onda \mathbf{k} .

² Veja desenvolvimento no Apêndice B.

2.3.2. Solução da Equação da Massa Efetiva

A equação da massa efetiva (eq. 29), independente do tempo, para o semicondutor *bulk* ou para uma heteroestrutura, pode ser escrita na forma matricial

$$[\mathbf{H}_0 + U(z)]\mathbf{F}(\vec{r}) = E\mathbf{F}(\vec{r}) \quad (37)$$

onde $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ é a função envelope, e, \mathbf{H}_0 é o Hamiltoniano de Luttinger [16] dado por

$$\mathbf{H}_0 = - \begin{pmatrix} P+Q & L & M & 0 \\ L^* & P-Q & 0 & M \\ M^* & 0 & P-Q & -L \\ 0 & M^* & -L^* & P+Q \end{pmatrix} \quad (38)$$

Os elementos deste Hamiltoniano são

$$P(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$Q(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$L(\vec{k}) = -\frac{\hbar}{2m} 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y)k_z$$

$$M(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} (\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y) \quad (39)$$

Resolvendo inicialmente este Hamiltoniano para um cristal puro³ ($U(z) = U_0$, constante, em todo o cristal) encontramos da equação secular, $\det[\mathbf{I}(E - U_0) - \mathbf{H}_0] = 0$, as autoenergias correspondentes aos estados no semicondutor *bulk* para buraco pesado (sinal +) e para buraco leve (sinal -), dados pela eq. 40. Na expressão acima \det é o determinante da matriz entre colchetes e \mathbf{I} é a matriz identidade.

$$E_{\pm} = U_0 - P \pm \sqrt{Q^2 + |L|^2 + |M|^2} \quad (40)$$

³ Veja desenvolvimento dos autovalores e autovetores do Hamiltoniano de Luttinger e Kohn no Apêndice C.

Um bom conjunto de autovetores para o Hamiltoniano de Luttinger (mais o potencial constante, U_0) é dado abaixo

$$F_{b1} = \begin{pmatrix} -L \\ Q + P + (E - U_0) \\ 0 \\ -M^* \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (41)$$

$$F_{b2} = \begin{pmatrix} -M \\ 0 \\ Q + P + (E - U_0) \\ L^* \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (42)$$

$$F_{11} = \begin{pmatrix} Q - P - (E - U_0) \\ L^* \\ M^* \\ 0 \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (43)$$

$$F_{12} = \begin{pmatrix} 0 \\ M \\ -L \\ Q - P - (E - U_0) \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (44)$$

No caso de uma heteroestrutura, o potencial $U(z)$ quebra a simetria de translação ao longo do eixo z , porém, o buraco ainda permanece livre no plano xy , e, a função envelope total pode ser escrita como o produto de uma onda plana no plano xy e uma função em z , $f(z)$.

$$F(\vec{r}) = \exp[i(\vec{k}_\rho \cdot \vec{\rho})] f(z) \quad (45)$$

onde o índice ρ expressa um vetor no plano xy e $f(z)$ é dada por

$$f(z) = F_{hh/wh} \exp(ik_z z) \quad (46)$$

A função $F_{hb/h}$ é uma das funções envelope de buraco pesado ou leve as quais são dadas nas equações 41 a 44, a menos da onda plana (parte exponencial). Se considerarmos que as funções de Bloch são iguais no poço e na barreira, as condições de contorno, em cada interface, passam a ser expressas somente em termos da função envelope em z , $f(z)$, uma vez que o vetor de onda transversal, k_{xy} , é o mesmo na região do poço e da barreira. Assim, como no caso de tunelamento de elétrons, novamente, esta suposição restringe a validade do método da função envelope para heteroestruturas cujos materiais da barreira e do poço sejam quimicamente similares, tal como $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. As condições de contorno, em uma interface qualquer, são então dadas por:

- (a) continuidade de $f(z)$;
- (b) continuidade de $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) f(z)$.

onde \mathbf{n} é o vetor normal a interface, neste caso $\mathbf{n} \equiv z$, e $\mathbf{J}_z = (z \cdot \mathbf{J})$ é o operador densidade de corrente dado pela eq. 36. A condição de contorno (b), generaliza a condição usual da continuidade da derivada na interface, o que implica na conservação da densidade de corrente de probabilidade através da interface.

2.3.3. Matriz Transferência

A aplicação do método da matriz transferência na aproximação de multibandas da massa efetiva é uma extensão direta da aplicação do modelo de uma única banda.

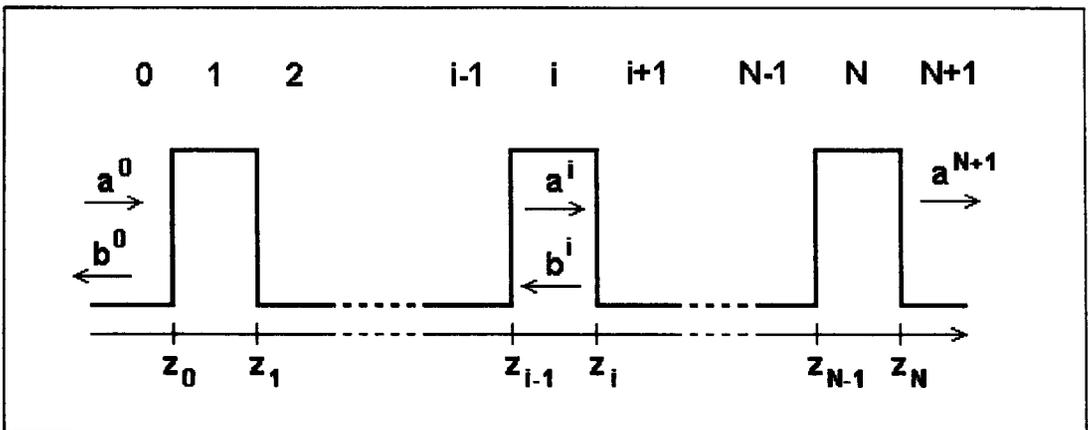


Figura 6. Super-rede com N camadas. Os números acima da super-rede numera as regiões 0, 1, 2, ..., i-1, i, i+1, ..., N-1, N, N+1 .

Como exemplo, suponhamos uma heteroestrutura com N camadas, por exemplo uma super-rede como mostrado na figura 6, crescida na direção z . Se o potencial $U(z)$ for constante em cada camada, a função envelope total, para cada camada, pode ser escri-

ta como uma combinação linear das quatro funções envelope dadas pelas equações 41 à 44, ou seja, a função envelope numa região i é dado por

$$F^i(z) = I^i(z) + R^i(z) \quad \text{com } z_{i-1} < z < z_i \quad (47)$$

onde

$$I^i(z) = a_{h1}^i F_{h1}(z, k_{zh}^i) + a_{h2}^i F_{h2}(z, k_{zh}^i) + a_{i1}^i F_{i1}(z, k_{zi}^i) + a_{i2}^i F_{i2}(z, k_{zi}^i)$$

$$R^i(z) = b_{h1}^i F_{h1}(z, -k_{zh}^i) + b_{h2}^i F_{h2}(z, -k_{zh}^i) + b_{i1}^i F_{i1}(z, -k_{zi}^i) + b_{i2}^i F_{i2}(z, -k_{zi}^i) \quad (48)$$

sendo: $I^i(z)$ e $R^i(z)$ as ondas incidente e refletida respectivamente na região i , sendo ambas uma combinação linear das funções envelope de buraco leve e de buraco pesado, dadas pelas equações 41 a 44; $\pm k_{zh}$ e $\pm k_{zi}$ as raízes de k_z , resolvidas da relação de dispersão dada na eq. 40, que são apresentadas adiante nos gráficos das figuras 8 e 10, para k_x , k_y e E fixados; e F_{h1} , F_{h2} , F_{i1} e F_{i2} as funções envelope dadas pelas equações 41 a 44. O índice i superior se refere a região i , figura 6. Observe que o sinal mais, nas raízes de k_z , se refere as ondas incidentes, $I^i(z)$, enquanto o sinal menos as ondas refletidas, $R^i(z)$.

Escrevemos, então, a função envelope total em cada interface (z_0 a z_N) e aplicamos as condições de contorno descritas na seção anterior, onde numa interface z_i temos

$$F^i(z_i) = F^{i+1}(z_i) \quad (49)$$

$$J_z^i F^i(z_i) = J_z^{i+1} F^{i+1}(z_i)$$

que, com o auxílio das equações 47 e 48, pode ser escrito na forma matricial

$$\begin{pmatrix} I^i(z_i) & R^i(z_i) \\ J_z^i I^i(z_i) & J_z^i R^i(z_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I^{i+1}(z_i) & R^{i+1}(z_i) \\ J_z^{i+1} I^{i+1}(z_i) & J_z^{i+1} R^{i+1}(z_i) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} F_{h1}^{+i} & F_{h2}^{+i} & \dots & F_{l1}^{-i} & F_{l2}^{-i} \\ J_{zh}^{+i} F_{h1}^{+i} & J_{zh}^{+i} F_{h2}^{+i} & \dots & J_{zl}^{-i} F_{l1}^{-i} & J_{zl}^{-i} F_{l2}^{-i} \end{pmatrix}_{z=z_i} \begin{pmatrix} a_{h1}^i \\ a_{h2}^i \\ \vdots \\ b_{l1}^i \\ b_{l2}^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{h1}^{+i+1} & F_{h2}^{+i+1} & \dots & F_{l1}^{-i+1} & F_{l2}^{-i+1} \\ J_{zh}^{+i+1} F_{h1}^{+i+1} & J_{zh}^{+i+1} F_{h2}^{+i+1} & \dots & J_{zl}^{-i+1} F_{l1}^{-i+1} & J_{zl}^{-i+1} F_{l2}^{-i+1} \end{pmatrix}_{z=z_i} \begin{pmatrix} a_{h1}^{i+1} \\ a_{h2}^{i+1} \\ \vdots \\ b_{l1}^{i+1} \\ b_{l2}^{i+1} \end{pmatrix}$$

ou

$$M^i(z_i) \begin{pmatrix} a_{h1}^i \\ a_{h2}^i \\ \vdots \\ b_{l1}^i \\ b_{l2}^i \end{pmatrix} = M^{i+1}(z_i) \begin{pmatrix} a_{h1}^{i+1} \\ a_{h2}^{i+1} \\ \vdots \\ b_{l1}^{i+1} \\ b_{l2}^{i+1} \end{pmatrix} \quad (50)$$

Nas equações acima foi usado uma notação simplificada: o sobre-índice \pm da função envelope e do operador densidade de corrente, indicam as raízes positivas e negativas de k_z ; os sub-índices zl e zh correspondem as raízes de k_z de buraco leve e de buraco pesado respectivamente, como segue abaixo

$$F_{h1}^{\pm i} = F_{h1}(z, \pm k_{zh}^i);$$

$$J_{zh}^{\pm i} = J_{zh}(\pm k_{zh}^i); \quad \text{onde a raiz } k_{zh}^i \text{ é resolvida na região } i.$$

⋮

Desta forma construímos a matriz M^i em cada interface $z = z_i$,

$$M^i(z_i) = \begin{bmatrix} F_{h1}^{+i} & F_{h2}^{+i} & F_{l1}^{+i} & F_{l2}^{+i} & F_{h1}^{-i} & F_{h2}^{-i} & F_{l1}^{-i} & F_{l2}^{-i} \\ J_{zh}^{+i} F_{h1}^{+i} & J_{zh}^{+i} F_{h2}^{+i} & J_{zl}^{+i} F_{l1}^{+i} & J_{zl}^{+i} F_{l2}^{+i} & J_{zh}^{-i} F_{h1}^{-i} & J_{zh}^{-i} F_{h2}^{-i} & J_{zl}^{-i} F_{l1}^{-i} & J_{zl}^{-i} F_{l2}^{-i} \end{bmatrix}_{z=z_i} \quad (51)$$

Todas as funções envelope, na eq. 51, são calculadas na interface z_i , bem como suas respectivas derivadas. Desta forma, a matriz transferência total da heteroestrutura será portanto, o produto das matrizes $[\mathbf{M}^i(z_{i-1})]^{-1}$ e $\mathbf{M}^i(z_i)$ da interface z_0 até a interface z_N , ou seja,

$$\mathbf{T} = [\mathbf{M}^N(z_N)]^{-1} \mathbf{M}^{N-1}(z_{N-1}) [\mathbf{M}^{N-1}(z_{N-2})]^{-1} \dots \dots \mathbf{M}^2(z_2) [\mathbf{M}^2(z_1)]^{-1} \mathbf{M}^1(z_1) [\mathbf{M}^1(z_0)]^{-1} \mathbf{M}^0(z_0) \quad (52)$$

Considerando que exista incidência de partículas somente pela interface à esquerda da heteroestrutura, ou seja os coeficientes $\mathbf{b}_i^{N+1} = \mathbf{0}$, escolhemos neste instante a função envelope incidente a qual é descrita pelos coeficientes \mathbf{a}_i^0 . Desta forma as funções envelope refletida, coeficientes \mathbf{b}^0 , e a transmitida, coeficientes \mathbf{a}^{N+1} , são determinados resolvendo-se o sistema de equações abaixo:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_{h1}^{N+1} \\ \mathbf{a}_{h2}^{N+1} \\ \mathbf{a}_{l1}^{N+1} \\ \mathbf{a}_{l2}^{N+1} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{h1}^0 \\ \mathbf{a}_{h2}^0 \\ \mathbf{a}_{l1}^0 \\ \mathbf{a}_{l2}^0 \\ \mathbf{b}_{h1}^0 \\ \mathbf{b}_{h2}^0 \\ \mathbf{b}_{l1}^0 \\ \mathbf{b}_{l2}^0 \end{bmatrix} \quad (53)$$

Os coeficientes de transmissão e de reflexão são convenientemente definidos observando-se a definição da corrente de probabilidade dada pela eq. 34. Tomamos, assim, uma combinação linear das duas funções envelope \mathbf{F}_{h1} e \mathbf{F}_{h2} , para buraco pesado ou \mathbf{F}_{l1} e \mathbf{F}_{l2} , para buraco leve. A forma geral para as probabilidades de transmissão e de reflexão será, portanto, dada pelas equações:

$$\mathbf{T}_h = \frac{\Re \left[\left\langle \mathbf{a}_{h1}^{N+1} \mathbf{F}_{h1}^+ + \mathbf{a}_{h2}^{N+1} \mathbf{F}_{h2}^+ \middle| \mathbf{J}_{zh} \middle| \mathbf{a}_{h1}^{N+1} \mathbf{F}_{h1}^+ + \mathbf{a}_{h2}^{N+1} \mathbf{F}_{h2}^+ \right\rangle \right]_{\mathbf{N}}}{\mathbf{J}_{inc}} \quad (54)$$

$$T_1 = \frac{\Re\left[\left\langle a_{11}^{N+1} F_{11}^+ + a_{12}^{N+1} F_{12}^+ \middle| J_{z1}^+ \middle| a_{11}^{N+1} F_{11}^+ + a_{12}^{N+1} F_{12}^+ \right\rangle\right]_N}{J_{inc}} \quad (55)$$

$$R_h = \frac{\Re\left[\left\langle b_{h1}^0 F_{h1}^- + b_{h2}^0 F_{h2}^- \middle| J_{zh}^- \middle| b_{h1}^0 F_{h1}^- + b_{h2}^0 F_{h2}^- \right\rangle\right]_0}{J_{inc}} \quad (56)$$

$$R_l = \frac{\Re\left[\left\langle b_{l1}^0 F_{l1}^- + b_{l2}^0 F_{l2}^- \middle| J_{zl}^- \middle| b_{l1}^0 F_{l1}^- + b_{l2}^0 F_{l2}^- \right\rangle\right]_0}{J_{inc}} \quad (57)$$

com

$$J_{inc} = \Re\left[\left\langle a_{h1}^0 F_{h1}^+ + a_{h2}^0 F_{h2}^+ \middle| J_{zh}^+ \middle| a_{h1}^0 F_{h1}^+ + a_{h2}^0 F_{h2}^+ \right\rangle\right]_0 + \Re\left[\left\langle a_{l1}^0 F_{l1}^+ + a_{l2}^0 F_{l2}^+ \middle| J_{zl}^+ \middle| a_{l1}^0 F_{l1}^+ + a_{l2}^0 F_{l2}^+ \right\rangle\right]_0 \quad (58)$$

o fluxo total de buraco pesado e leve incidente na interface $z = z_0$. Desta equação podemos garantir sempre a conservação da densidade de probabilidade,

$$T_h + T_l + R_h + R_l \equiv 1 \quad (59)$$

independente da escolha das funções envelope para buraco pesado e para buraco leve.

2.3.4. Discussões:

Para o estudo de transmissão e reflexão de buracos em um potencial arbitrário é necessário, antes, conhecermos melhor a relação de dispersão dada pela eq. 40. Observe-mos inicialmente as raízes de k_z no plano k_{x-z} na região do poço ou na região da barreira, obtidas da relação de dispersão, para um buraco incidente com energia fixa, por exemplo $E = 100\text{meV}$. Tomemos como exemplo uma barreira de *GaAs/AlAs*, com uma descontinuidade da banda de valência de $\Delta E_v = 550\text{meV}$, como mostrado na figura 7. Os parâmetros de Luttinger do material utilizados são apresentados na tabela abaixo.

	γ_1	γ_2	γ_3
<i>GaAs</i>	6,85	2,1	2,9
<i>AlAs</i>	3,45	0,68	1,29

Tabela 1. Constantes de Luttinger para as ligas binárias *GaAs* e *AlAs*, referência [14].

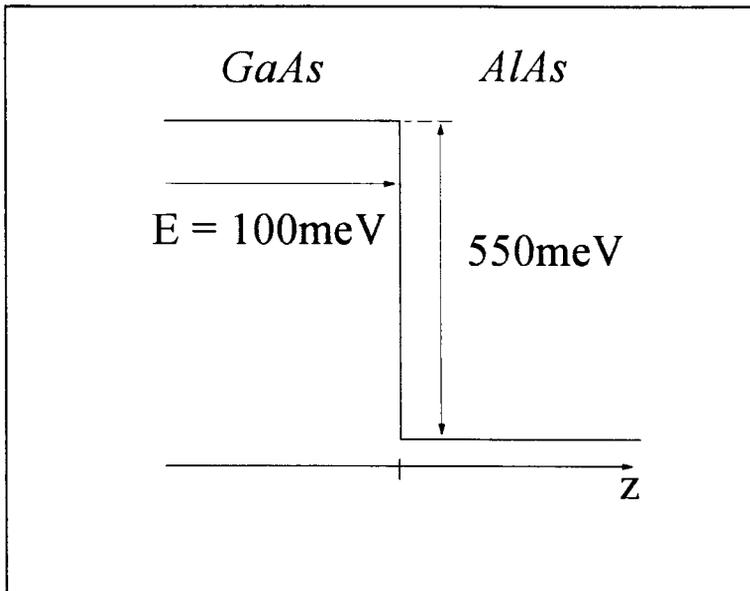


Figura 7. Heterojunção de *GaAs/AlAs*

Por conveniência faremos $k_y = 0$, sem perda de generalidade. Com uma análise cuidadosa da relação de dispersão dada pela eq. 40, obtemos alguns pontos críticos para k_x (k_L , k_H e k_M) na região do *GaAs* dados por:

$$k_L = \pm \sqrt{\frac{-C + \sqrt{C^2 - 4AD}}{2A}} \quad (60)$$

$$k_H = \pm \sqrt{\frac{-C - \sqrt{C^2 - 4AD}}{2A}} \quad (61)$$

$$k_M = \pm \sqrt{\frac{4C(A - B) - \sqrt{16C^2(B - A)^2 - 16(B^2 - A^2)(C^2 - 4AD)}}{8(B^2 - A^2)}} \quad (62)$$

onde

$$A = 4\gamma_2^2 - \gamma_1^2$$

$$B = 2(3\gamma_3^2 - \gamma_2^2) - \gamma_1^2$$

$$C = \frac{2\gamma_1 E}{\hbar^2 / 2m_0}$$

$$D = \frac{-E^2}{(\hbar^2 / 2m_0)^2} \quad (63)$$

Isto pode ser observado nas figuras 8(a) e 8(b) onde k_M corresponde ao valor de k_x , tal que para $k_x < k_M$, k_z^h é puramente real e para $k_x > k_M$, k_z^h e k_z^l tornam-se complexos com parte real diferente de zero⁴. Nesta região as partes imaginárias são escolhidas positivas para garantir que as funções envelope decaiam exponencialmente ao longo da direção z positiva. O mesmo é feito para k_z^l no intervalo $k_L < k_x < k_H$.

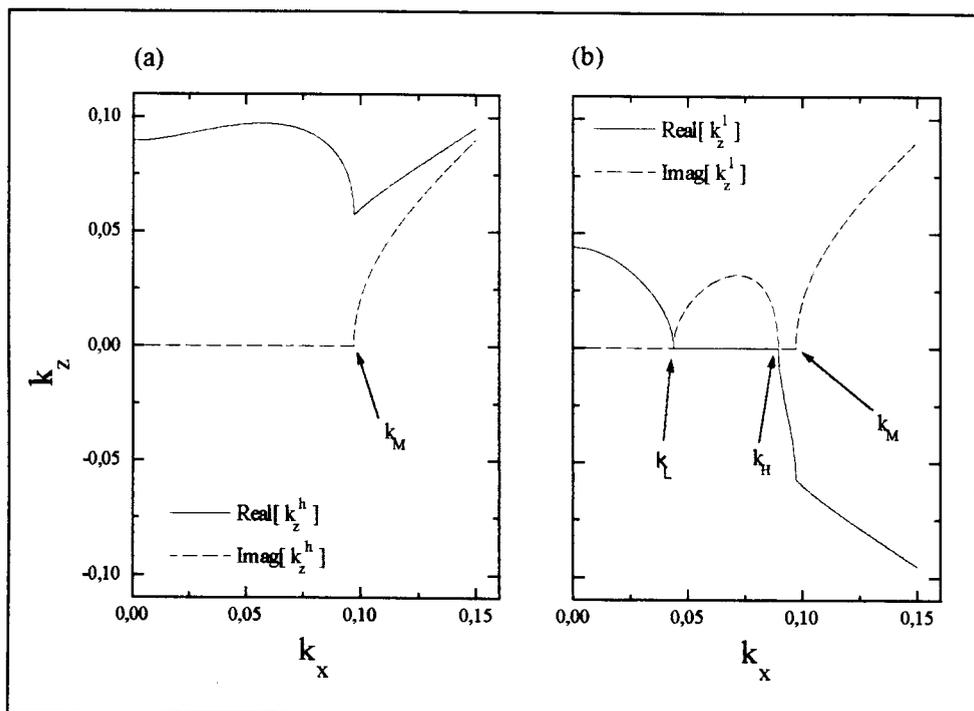


Figura 8. Parte real (linha contínua) e parte imaginária (linha tracejada) de k_z vs. k_x para o buraco pesado (a) e buraco leve (b) na região do poço da estrutura mostrada na figura 7, normalizados por $2\pi/a$, com $a = 5,6533\text{\AA}$ a constante de rede do *GaAs* a 300K . A energia do buraco é 100meV e $U_0 = 0\text{meV}$.

No intervalo $k_H < k_x < k_M$, é escolhido k_z^l negativo para que a curva $\Re[k_z^l]$ permaneça contínua, figura 8(b). Observe que neste último intervalo as raízes de k_z^l estão sobre a superfície de energia constante para o buraco pesado, e portanto, não se trata mais

⁴ Os índices l e h sobre-escritos correspondem as raízes de buraco leve (*light*) e buraco pesado (*heavy*), respectivamente.

de buraco leve. Isto pode ser melhor visualizado na figura 9, onde é graficado as superfícies de energia constante no plano $k_x k_z$.

Quando $k_x < k_L$ observamos quatro raízes para k_z , as quais são claramente distinguidas como buraco leve e buraco pesado. Para $k_H < k_x < k_M$, figura 9, devido a curvatura da superfície de energia constante de buraco pesado, há quatro interseções para um dado valor de k_x fixo, neste intervalo. Estas raízes são claramente de natureza de buraco pesado. As raízes internas, aqui, são chamadas de buraco leve apenas por conveniência de modo que a curva $\Re[k_z^l]$ permaneça sempre constante.

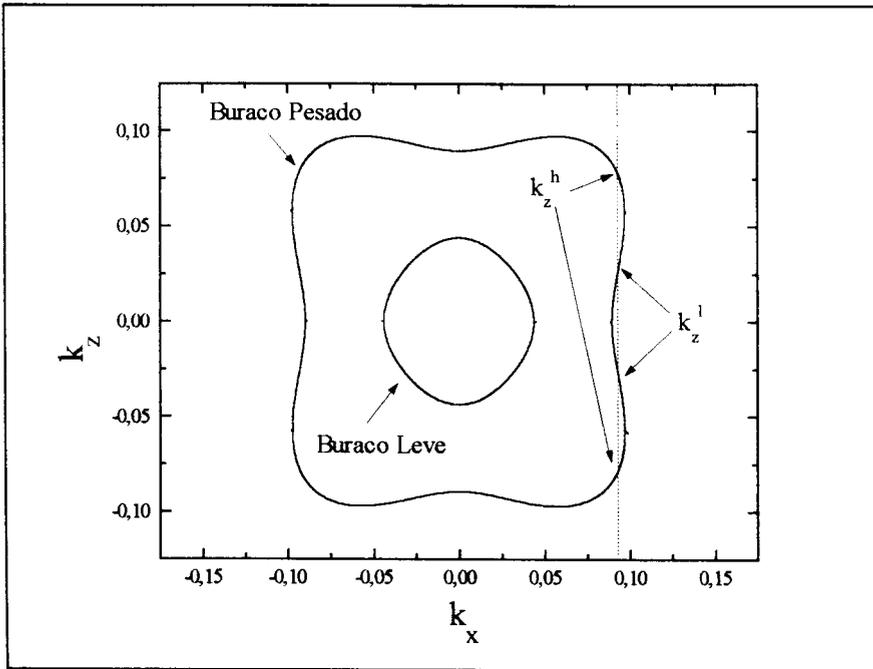


Figura 9. Superfícies de energia constante para buraco leve e buraco pesado (parte real das soluções de k_z apresentados na figura 8), com $E = 100\text{meV}$ e $U_0 = 0\text{meV}$, para a estrutura da figura 7.

Observamos agora a região da barreira com $U_0 = 550\text{meV}$ e novamente $E = 100\text{meV}$. Substituímos então E por $E - U_0$ nas definições de C e D da eq. 63, e usando as constantes de Luttinger para o $AlAs$ da barreira, listados na tabela 1, verificamos facilmente que agora k_x possui apenas um ponto crítico k_M , já que os pontos k_L e k_H tornam-se imaginários. Na figura 10 ilustramos as raízes de k_z vs. k_x para buraco pesado (a) e para buraco leve (b) sobre as circunstâncias descritas acima.

Novamente, aqui, as partes imaginárias de k_z^l e k_z^h são escolhidas positivas de forma a garantir que as ondas decaiam exponencialmente na região da barreira.

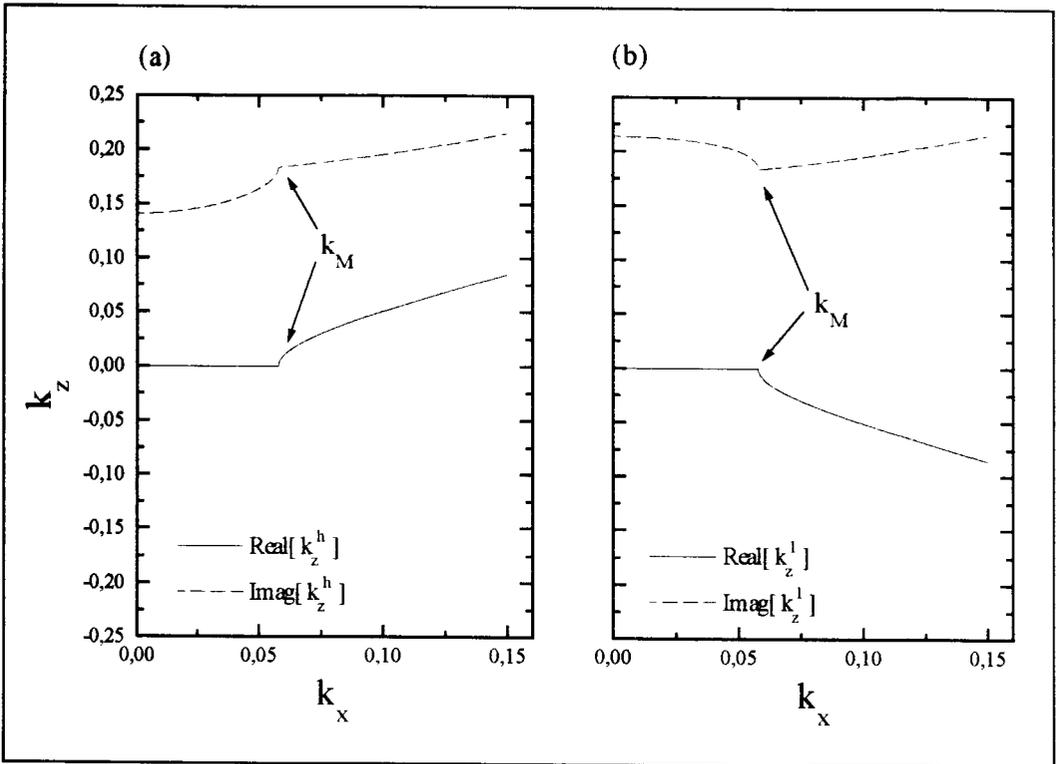


Figura 10. Parte real (linha contínua) e parte imaginária (linha tracejada) de k_z vs. k_x para o buraco pesado (a) e buraco leve (b) na região da barreira da estrutura mostrada na figura 7, normalizados por $2\pi/a$, com $a = 5,653\text{\AA}$ a constante de rede do *GaAs* a 300K . A energia do buraco é 100meV e $U_0 = 550\text{meV}$.

Na figura 11 são apresentadas todas as raízes de k_z para a região da barreira. Quando estamos na região da barreira com $E < U_0$ é importante salientar que não estamos mais sobre as superfícies de energia constante de buraco pesado ou de buraco leve. Estas soluções estão dentro do *gap* do *ALAs* e não sobre as bandas de energia de buraco pesado ou de buraco leve.

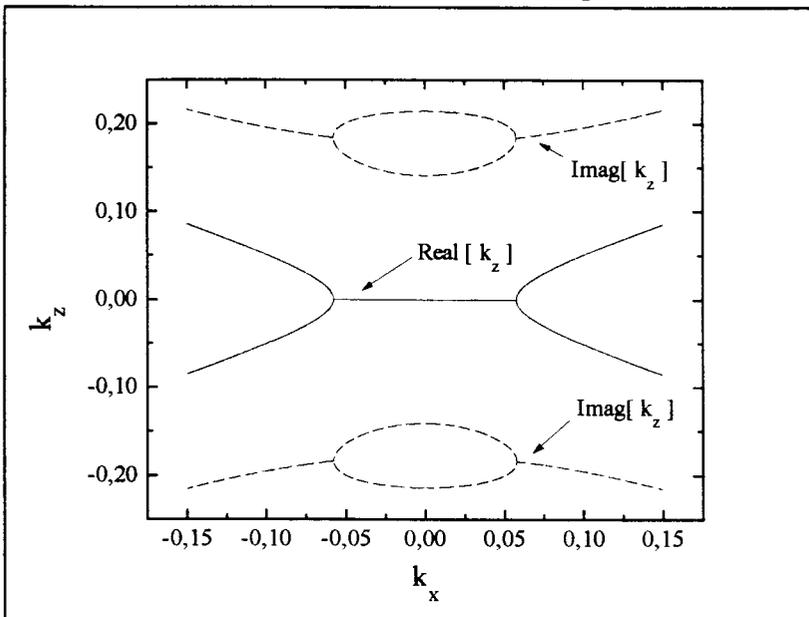


Figura 11. Superfícies de energia constante para buraco leve e pesado na região da barreira da estrutura da figura 7, com $E = 100\text{meV}$ e $U_0 = 550\text{meV}$.

Tendo encontrado e classificado as raízes de k_z nas regiões do poço e da barreira, passamos a seguir ao estudo de tunelamento de buracos em uma Dupla Barreira simétrica de *GaAs/AlAs* com 30\AA de barreira e 50\AA de poço.

Assim como fizemos para elétrons, façamos incidir agora sobre a barreira, no lado emissor, buracos pesado e buracos leve e então analisamos a transmissão deste portadores através desta dupla barreira como mostrado na figura 12.

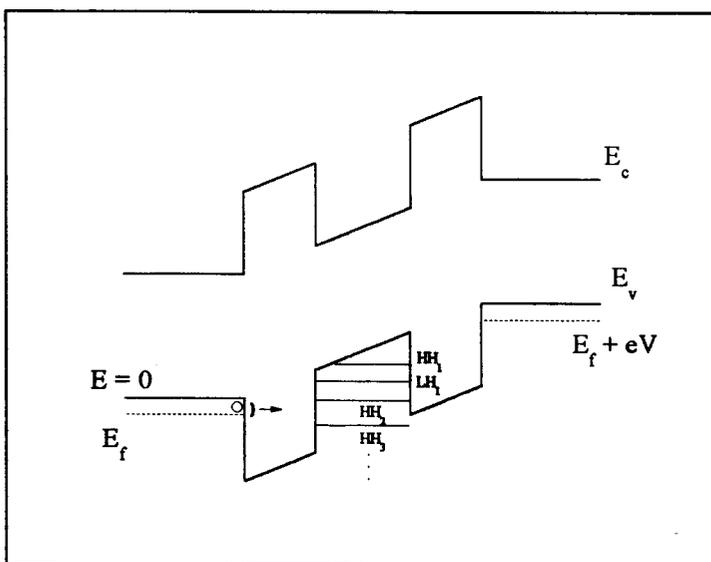


Figura 12. Diagrama da banda de valência da dupla barreira de *GaAs/AlAs* sob um campo elétrico externo aplicado.

Na figura 13 estão apresentados os resultados dos cálculos de probabilidade de transmissão de buraco pesado (linha contínua) e de buraco leve (linha tracejada) numa estrutura simétrica de dupla barreira, para uma incidência de buraco pesado, utilizando as equações 54 a 58. O mesmo cálculo para incidência de buraco leve está apresentado na figura 14. Nestes gráficos o campo elétrico externo foi feito igual a zero e k_p , vetor de onda no plano xy , fixado em $0,03\text{\AA}^{-1}$. Em ambos os gráficos, os picos devido a tunelamento ressonante com os estados de buraco pesado e de buraco leve emergem nas curvas de transmissão indicando um forte acoplamento entre os estados de buraco leve e de buraco pesado. Observa-se também, que a probabilidade de transmissão de buraco leve é, geralmente, superior à probabilidade de transmissão de buraco pesado tanto na incidência de buraco pesado como de buraco leve, o que era esperado uma vez que a massa do buraco leve é menor que a massa do buraco pesado.

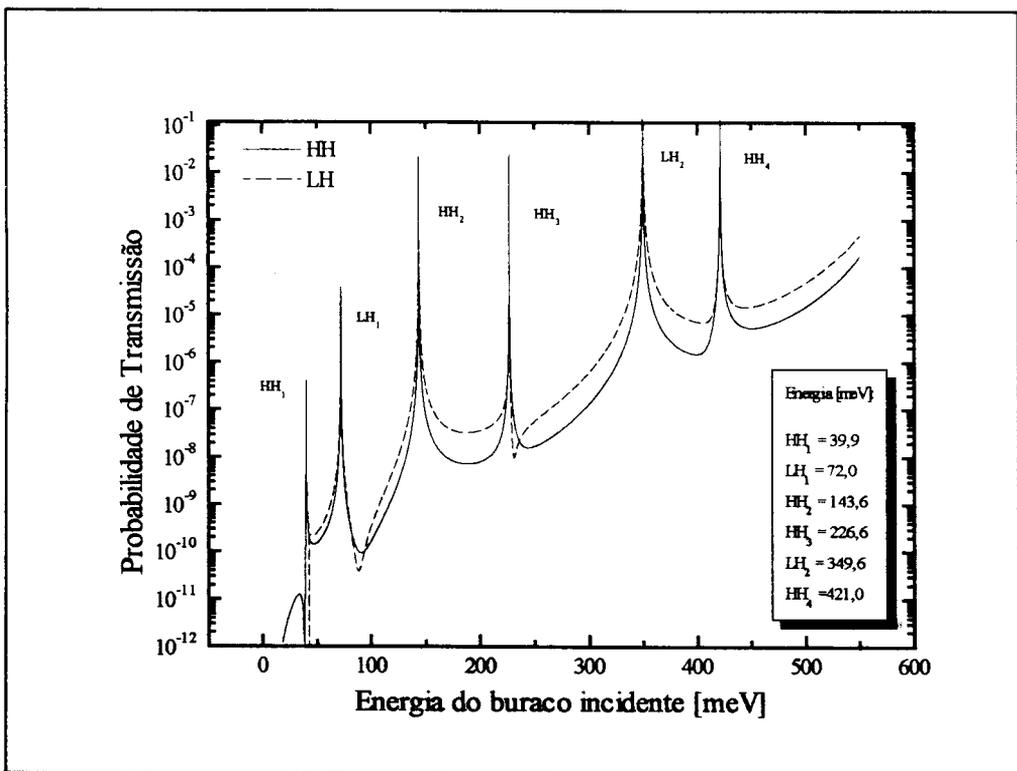


Figura 13. Probabilidade de Transmissão de buraco pesado (linha sólida) e de buraco leve (linha tracejada) em função da energia do buraco pesado incidente em uma dupla barreira simétrica de 30\AA de barreira e 50\AA de poço, com $k_p = 0,03\text{\AA}^{-1}$.

Ressonâncias de Fano [19] são claramente observadas nos gráficos das figuras 13 e 14, próximo aos picos de tunelamento ressonante correspondentes as sub-bandas do poço LH_1 , HH_3 e HH_4 . Estas anti-ressonâncias são devido a uma interferência destrutiva dos estados confinados no poço com os estados do contínuo, fora do poço.

Na presença de campo elétrico externo os picos ressonantes se desdobram em dois devido a quebra da simetria de inversão com respeito ao centro do poço ($z = 0$) como ilustrado na figura 12. Na figura 15 apresentamos as curvas de transmissão para os estados HH_2 e HH_3 com campo externo de 100kV/cm e $k_p = 0,03 \text{ \AA}^{-1}$ (a); $0,04 \text{ \AA}^{-1}$ (b) e $0,05 \text{ \AA}^{-1}$ (c). Nesta figura podemos observar tanto o desdobramento dos picos ressonantes devido a quebra da simetria de inversão, como também, o deslocamento da posição dos picos de tunelamento ressonante com k_p mapeando a estrutura de sub-bandas no poço. Esta separação depende tanto da magnitude do campo elétrico externo aplicado, como é observado na figura 18, como da magnitude do vetor de onda k_p , o que nos permite mapear a estrutura das sub-bandas no poço.

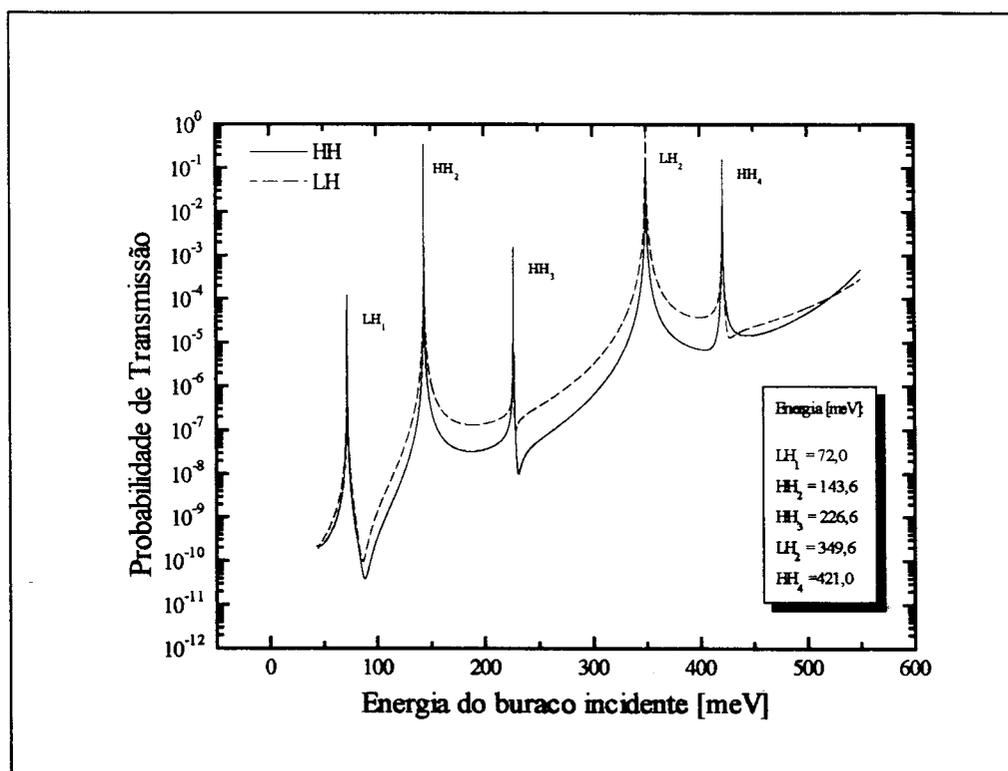


Figura 14. Probabilidade de Transmissão de buraco pesado (linha sólida) e de buraco leve (linha tracejada) em função da energia do buraco leve incidente em uma dupla barreira simétrica de 30 \AA de barreira e 50 \AA de poço, com $k_p = 0,03 \text{ \AA}^{-1}$.

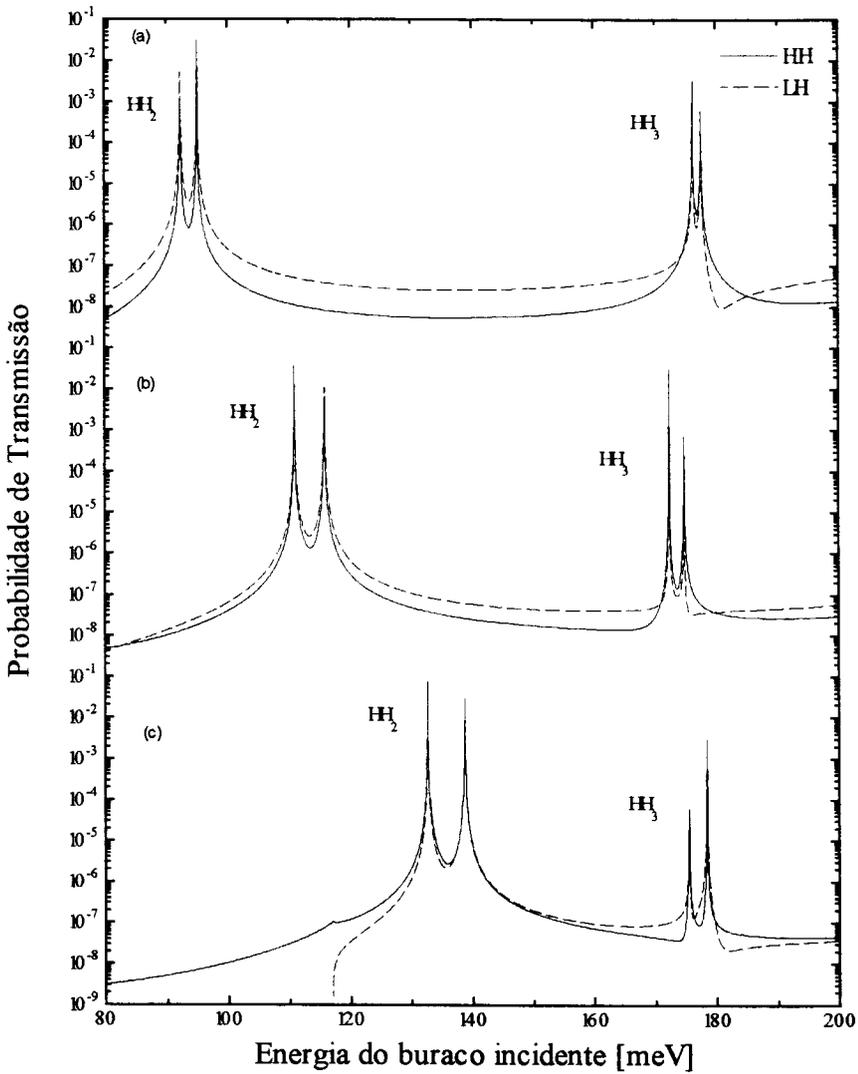


Figura 15. Picos de transmissão ressonante com os estados ligados no poço HH_2 e HH_3 com os diferentes valores de k_p : (a) $0,03\text{\AA}^{-1}$; (b) $0,04\text{\AA}^{-1}$ e (c) $0,05\text{\AA}^{-1}$. Em todos os gráficos acima o campo externo é igual a 100KV/cm .

Na figura 16 mostramos a curva de dispersão para as sub-bandas de buraco pesado e de buraco leve no poço sem campo elétrico externo e na figura 17 com campo elétrico externo de 100KV/cm . Comparando estas figuras podemos observar claramente os des-

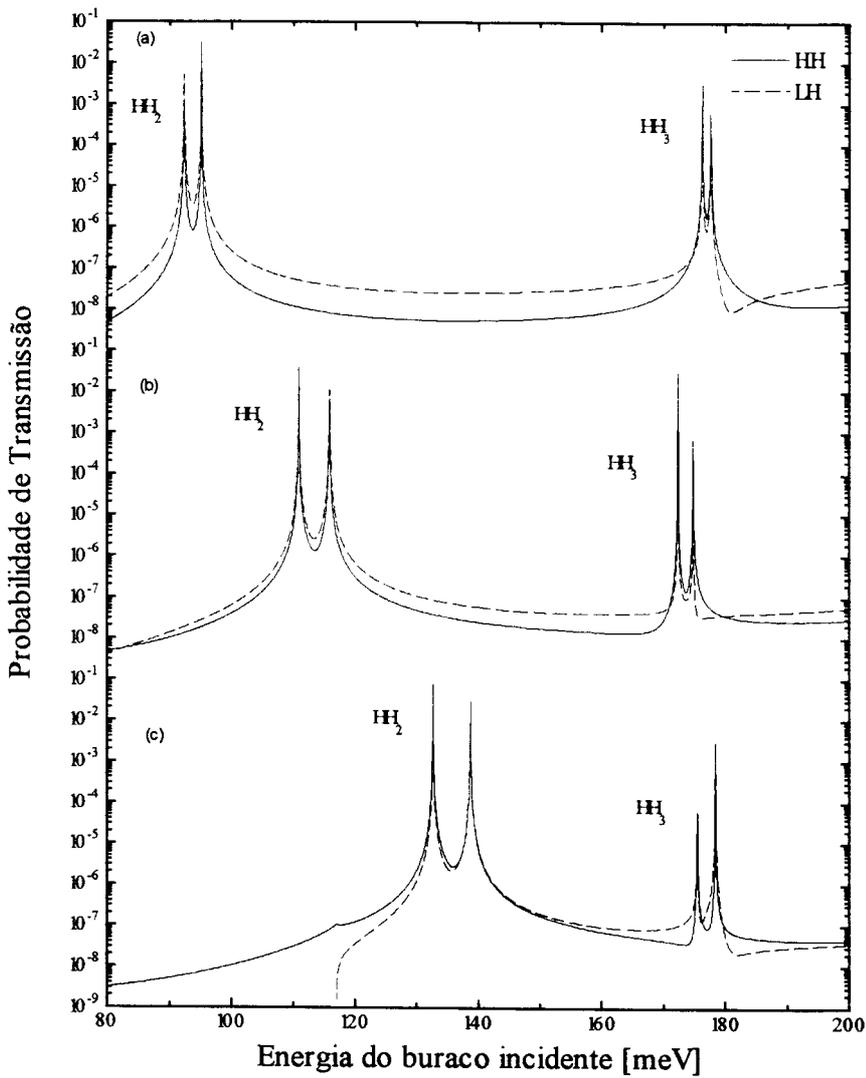


Figura 15. Picos de transmissão ressonante com os estados ligados no poço HH_2 e HH_3 com os diferentes valores de k_p : (a) $0,03\text{\AA}^{-1}$; (b) $0,04\text{\AA}^{-1}$ e (c) $0,05\text{\AA}^{-1}$. Em todos os gráficos acima o campo externo é igual a 100KV/cm .

Na figura 16 mostramos a curva de dispersão para as sub-bandas de buraco pesado e de buraco leve no poço sem campo elétrico externo e na figura 17 com campo elétrico externo de 100KV/cm . Comparando estas figuras podemos observar claramente os des-

dobramentos das curvas de dispersão devido a quebra de simetria de inversão com a aplicação do campo elétrico externo.

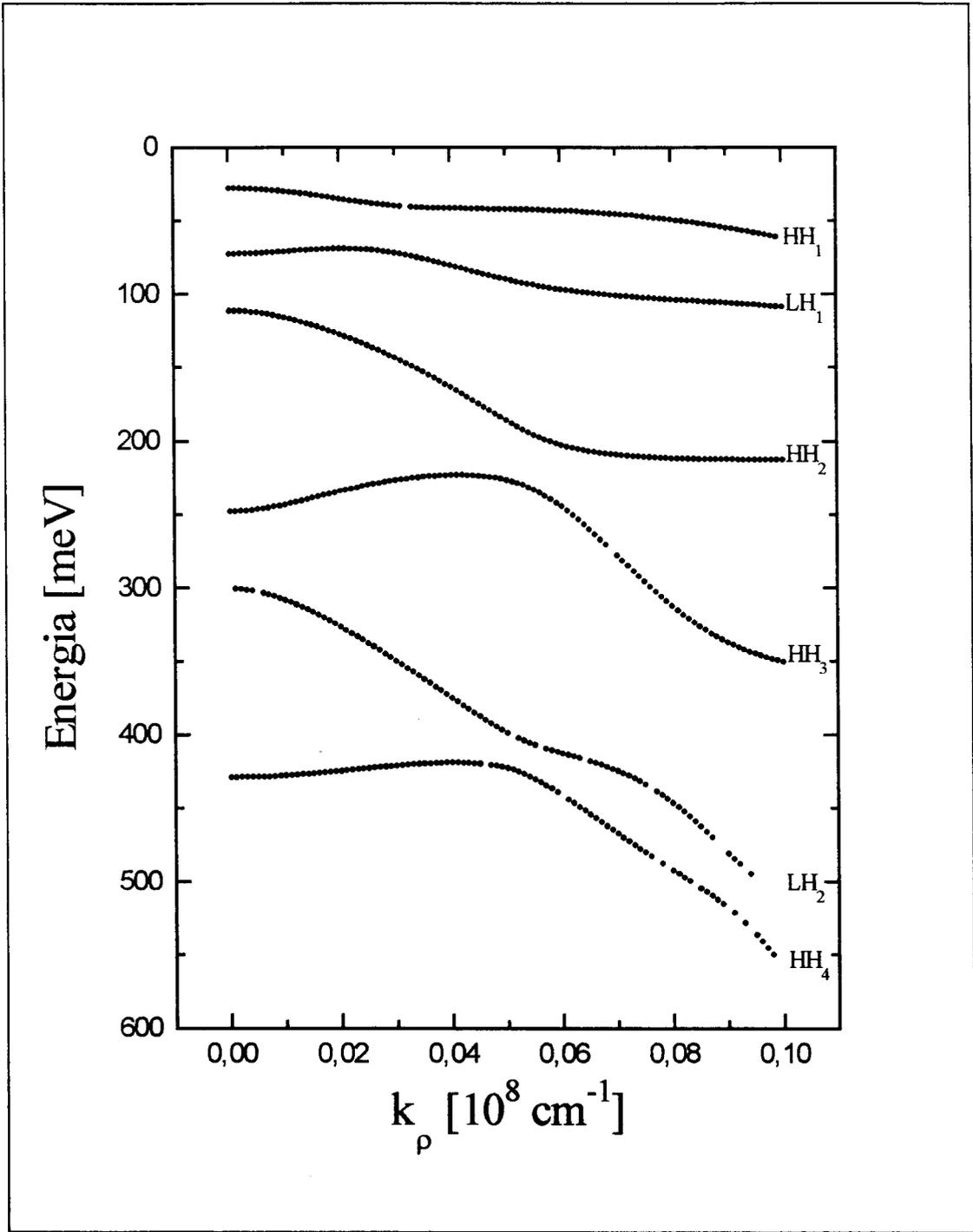


Figura 16. Dispersão dos estados confinados no poço sem campo elétrico externo.

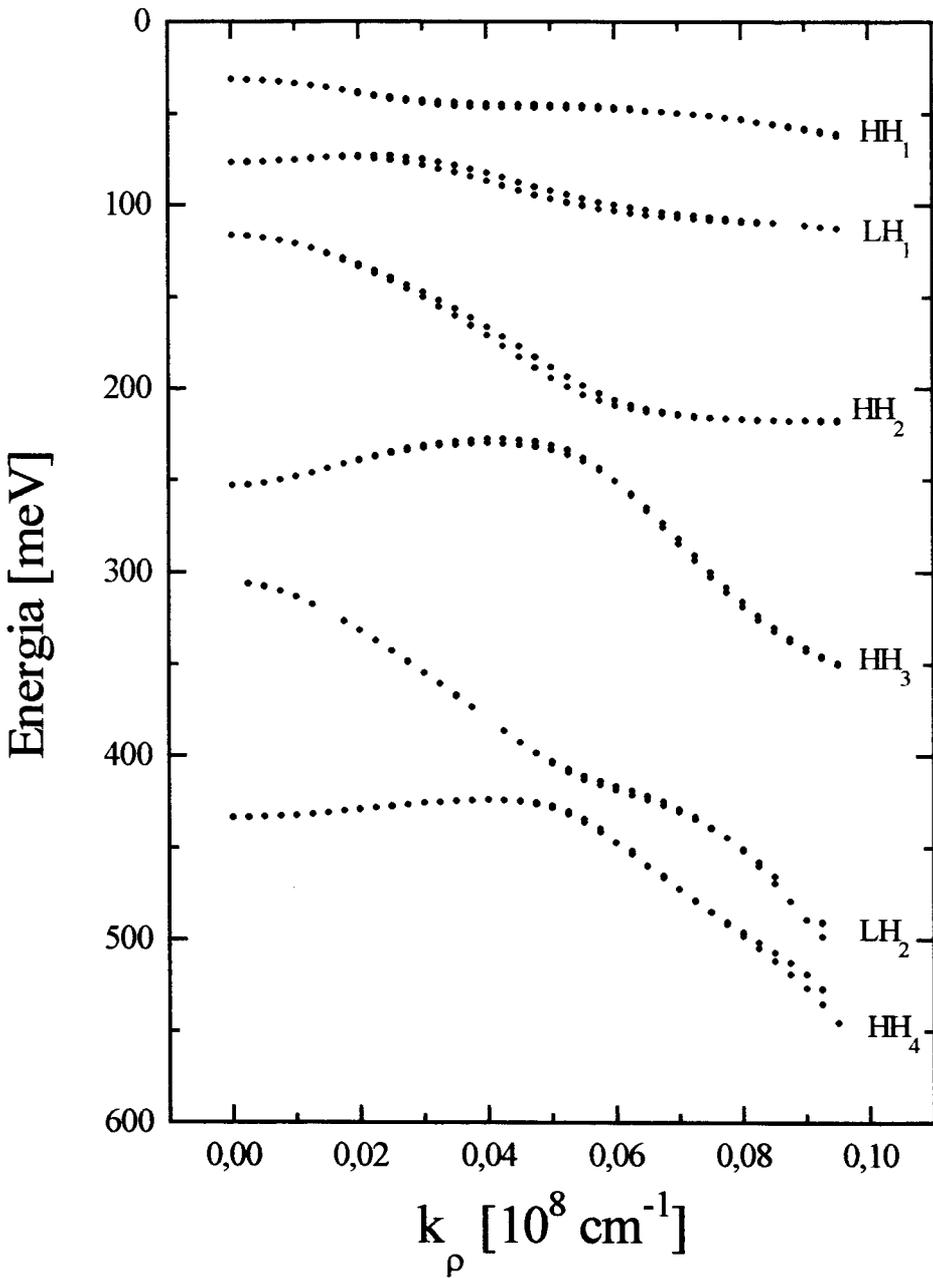


Figura 17. Dispersão dos estados confinados no poço com campo elétrico externo de 100KV/cm .

Assim como na transmissão de elétrons, com o aumento do campo elétrico externo aplicado, os picos de tunelamento ressonante de buracos se deslocam para o lado de baixa

energia segundo a eq. 22, para de uma dupla barreira simétrica. Isso nos leva a concluir que a posição das sub-bandas de buracos no poço, assim como dos elétrons, são pouco perturbados pelo potencial externo aplicado.

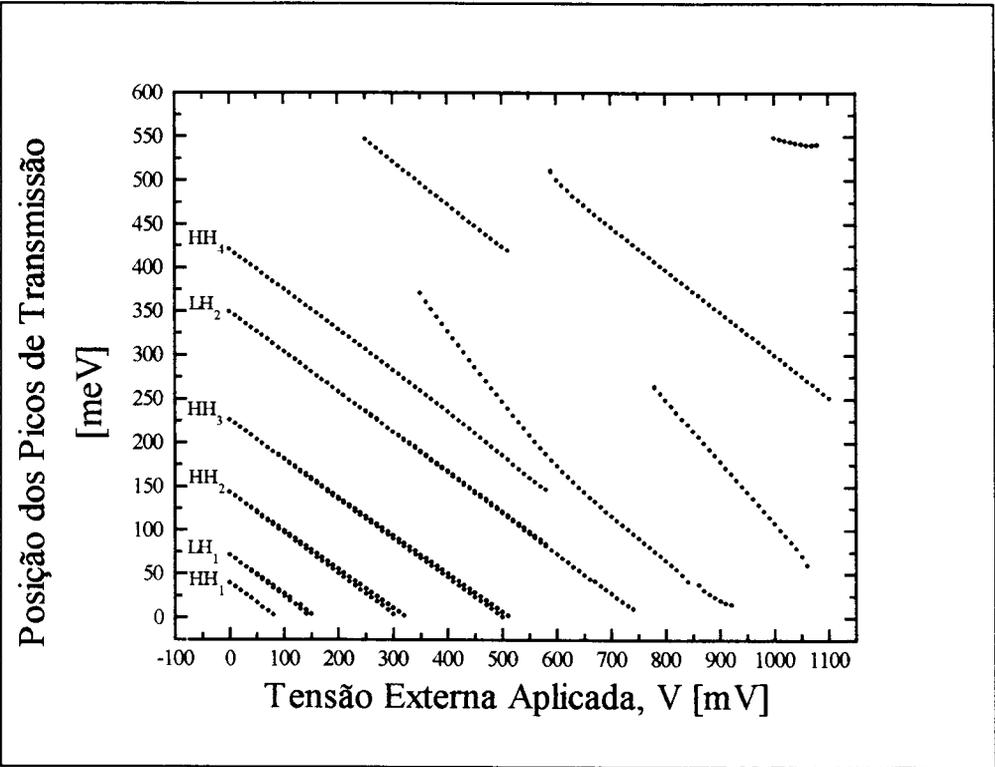


Figura 18. Posição dos picos nas curvas da probabilidade de transmissão em função da tensão externa aplicada para $k_p = 0,03\text{\AA}^{-1}$. As curvas $HH_1 - HH_4$, LH_1 e LH_2 correspondem aos estados ligados no poço de buracos pesado e de buracos leve respectivamente. As cinco curvas a direita (mais acima) são estados no contínuo (não ligados) acima da barreira. O desdobramento dos estados devido a quebra de simetria de inversão com o aumento de tensão externa, são bem visíveis nos picos de transmissão para os estados de buracos LH_1 , HH_2 , e HH_3 .

Assim como fizemos para o tunelamento de elétrons, podemos aqui, determinar as posições dos picos na corrente de tunelamento de buracos através da posição dos picos na probabilidade tunelamento medidos com relação topo da banda de valência no emissor como mostrado na figura 18.

2.4. Corrente de Tunelamento

A densidade de corrente incidente à esquerda da estrutura, \mathbf{J}_{ED} , no espaço \mathbf{k} num intervalo $d\mathbf{k}$, é dado por

$$\mathbf{J}_{ED} = -\frac{q(2s+1)}{(2\pi)^3} f(E) \mathbf{v}_z(\mathbf{k}_z) \quad (64)$$

onde $f(E)$ é a função de distribuição de Fermi, para os portadores no contato à esquerda da heteroestrutura (eq. 67), $\mathbf{v}_z(\mathbf{k}_z)$ é a componente normal à interface da velocidade de grupo dos portadores (eq. 66), s o *spin* do portador, o fator $1/(2\pi)^3$ é a densidade de estados em um volume unitário do espaço \mathbf{k} e q é a carga do portador ($-e$ para elétrons e $+e$ para buracos).

Para contribuir na corrente de tunelamento a onda incidente deve ser transmitida, com probabilidade de transmissão $T(E, \mathbf{k})$, através da heteroestrutura para um estado disponível no coletor (à direita da heteroestrutura). Desta forma a densidade de corrente transmitida de um volume unitário no espaço \mathbf{k} é dado por

$$\mathbf{J}_{ED} = -\frac{q(2s+1)}{(2\pi)^3} \mathbf{v}_z(\bar{\mathbf{k}}) T_{ED}(E, \bar{\mathbf{k}}) f(E) [1 - f(E - eV)] \quad (65)$$

$$\mathbf{v}_z(\bar{\mathbf{k}}) = \frac{\nabla_{\mathbf{k}_z} E}{\hbar} \quad (66)$$

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{[(E - E_f)/k_B T]}} \quad (67)$$

onde $[1 - f(E)]$ é a função de distribuição de Fermi, dos estados disponíveis (desocupados) para os portadores tunelarem, no contato à direita da heteroestrutura (eq. 67). Na função de distribuição de Fermi, k_B é a constante do Boltzman, E_f a energia de Fermi, E a energia do portador e T a temperatura.

A probabilidade de transmissão dos portadores, $T(E, \mathbf{k})$, é dado pela eq. 10 para tunelamento de elétrons e eq. 52 para tunelamento de buracos. Na probabilidade de transmissão estão embutidas todas as informações sobre a estrutura de banda da heteroestrutura por onde os portadores tunelam.

Somamos a seguir as densidades de correntes da direita para esquerda (DE), eq. 68, e da esquerda para direita (ED), eq. 69, para obtermos a densidades total de corrente, dada por:

$$\mathbf{J}_{ED} = -\frac{2q}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \mathbf{v}_z(\bar{\mathbf{k}}) T_{ED}(E, \bar{\mathbf{k}}) f(E) [1 - f(E + eV)] \quad (68)$$

$$J_{DE} = -\frac{2q}{(2\pi)^3} \int d^3k v_z(\bar{k}) T_{DE}(E, \bar{k}) [1 - f(E)] f(E + eV) \quad (69)$$

Devido a invariância à reversão temporal das equações da massa efetiva de elétrons, eq. 2, e de buracos, eq. 29, podemos afirmar que $T_{ED}(E, \mathbf{k}) = T_{DE}(E, \mathbf{k})$. A corrente de tunelamento total é dada pela diferença entre o fluxo de partículas da esquerda para direita e da direita para esquerda, ou seja

$$J = J_{ED} - J_{DE} \quad (70)$$

o qual, com um pouco de álgebra encontramos que a corrente total de tunelamento através de uma heteroestrutura qualquer, tanto para elétrons como para buracos, é dada por

$$J = -\frac{2q}{(2\pi)^3} \int d^3k v_z(\bar{k}) T(E, \bar{k}) [f(E) - f(E + eV)] \quad (71)$$

2.4.1. Elétrons

Para corrente de tunelamento de elétrons, dentro das aproximações que estamos considerando (aproximação de bandas parabólicas), a relação de dispersão⁵ $E_e(\mathbf{k})$ é quadrática em \mathbf{k} , eq. 72, o que nos permite transformar a integração em \mathbf{k} em uma integração em energia.

$$E_e(\bar{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_{GaAs}} (k_z^2 / \gamma(z) + k_t^2 / \gamma(z)) = E_z(z) + E_t / \gamma(z) \quad (72)$$

Utilizando esta relação de dispersão para energia e fazendo as transformações de variáveis necessárias, passamos da integração no espaço \mathbf{k} para uma integração em energia. Assim, a corrente de tunelamento pode ser escrita como:

$$J = \frac{2e}{(2\pi)^2} \frac{m_{GaAs}}{\hbar^3} \int_0^\infty dE_z \int_0^\infty dE_t T(E, \bar{k}) [f(E) - f(E + eV)] \quad (73)$$

Como $T(E, \mathbf{k})$ independe da temperatura então $T(E, \mathbf{k}) \equiv T(E_z, k_t)$. Desta forma a integral na energia transversa, E_t , pode ser resolvida analiticamente,

⁵ Veja seção 2.2.1.

$$J = \frac{2e}{(2\pi)^2} \frac{m_{\text{GaAs}}}{\hbar^3} \int_0^{\infty} dE_z T(E_z, k_z) \int_0^{\infty} dE_t [f(E) - f(E + eV)]$$

$$J = \frac{2e}{(2\pi)^2} \frac{m_{\text{GaAs}}}{\hbar^3} (K_B T) \int_0^{\infty} dE_z T(E_z, k_z) [F(E_z) - F(E_z + eV)] \quad (74)$$

onde

$$F(E_z) = \ln \left\{ 1 + e^{-[(E_z - E_f)/K_B T]} \right\} \quad (75)$$

é a integral da função de Fermi em E_t , no intervalo $[\infty, 0]$, o qual passamos chamar de Integral de Fermi.

A integração em E_z é resolvida numericamente, uma vez que não existe uma forma explícita para a probabilidade de transmissão $T(E_z, k_z)$. Observando a expressão para corrente de tunelamento, eq. 74, vemos que, com o aumento da temperatura a corrente de tunelamento aumenta proporcionalmente a $K_B T$, e, os picos de tunelamento vão se alargando devido a cauda exponencial das Integrais de Fermi (eq. 75).

Na figura 19 apresentamos a curva da diferença entre as Integrais de Fermi, $[F(E_z) - F(E_z + eV)]$, para diferentes potenciais externos aplicados a estrutura, com temperatura de **4,2K** e $E_f = 5\text{meV}$. Como podemos observar nesta figura, a diferença entre as Integrais de Fermi tende rapidamente para zero, quando E_z se torna maior que a energia de Fermi E_f . Com isso concluímos que, somente os elétrons no intervalo de energia entre 0 e E_f contribuem significativamente para a corrente de tunelamento.

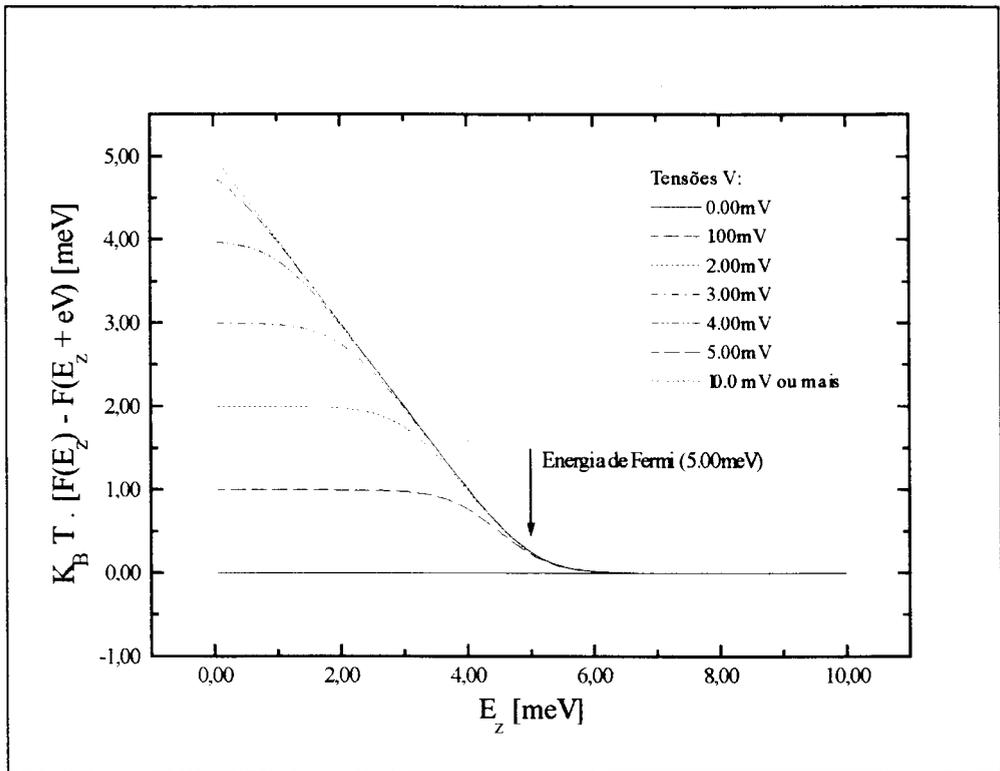


Figura 19. Diferença entre as Integrais de Fermi, $[F(E_z) - F(E_z + eV)]$, para diferentes valores do potencial externo V . A energia de Fermi é fixada em 5meV e a temperatura em $4,2\text{K}$.

Na figura 20 apresentamos o cálculo da curva I vs. V para uma dupla barreira de $GaAs/AlAs$ com 30\AA de barreira de 100\AA de poço. Se compararmos as posições dos picos de tunelamento ressonante no gráfico da figura 20 com os resultados descritos anteriormente na seção 2.2.2 (figura 4), observamos que estes estão em boa concordância. Entretanto, quando aumentamos a energia de Fermi dos elétrons no emissor, vemos que os elétrons com energia entre o nível de Fermi e o fundo da banda de condução, contribuem igualmente na corrente de tunelamento, o que contraria o que havíamos dito anteriormente. Isto se deve ao fato de que, em nosso modelo, não estamos considerando o acúmulo de cargas dentro do poço. Desta forma, todos os elétrons entre o nível de Fermi e o fundo da banda de condução, encontram sempre estados disponíveis dentro do poço, uma vez que as sub-bandas no poço não são preenchidas.

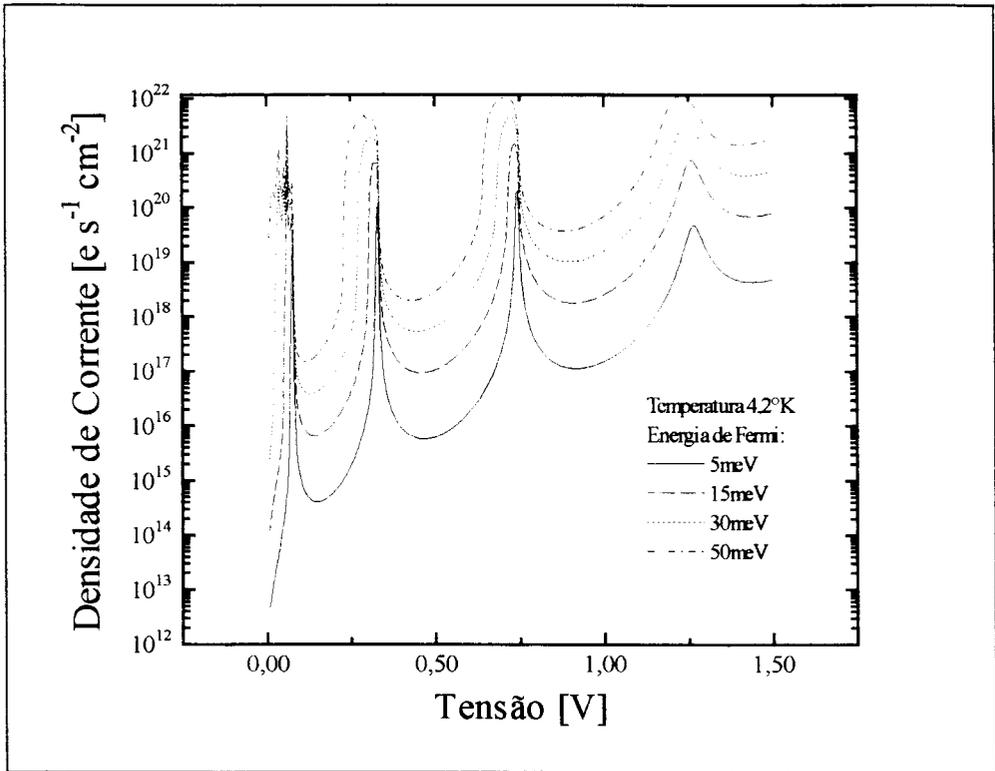


Figura 20. Curva I vs. V para uma Dupla Barreira de *GaAs/AlAs* com 30\AA de barreira e 100\AA de poço.

2.4.2. Buracos

No caso de transmissão de buracos, devido a forte interação entre as sub-bandas de buraco leve e buraco pesado, a relação de dispersão, eq. 76, possui uma forma mais complexa, o que nos obriga a fazer uma integração no espaço \mathbf{k} .

$$E_b(\bar{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\gamma_1 k_i^2 \pm \sqrt{4\gamma_2^2 k_i^4 + 2(3\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(1 - \delta_{ij}) k_i^2 k_j^2} \right) - V_0 \quad (76)$$

Se observamos as curvas de energia constante para buraco leve e buraco pesado apresentadas nas figura 8 e 9, e considerando as discussões sobre os pontos críticos de \mathbf{k}_x feitas na seção 2.3.4, percebemos que a integração sobre o espaço \mathbf{k} da eq. 71 deve ser dividida em três integrais: duas contribuindo para a corrente de tunelamento de buraco pesado, J_{HH} ; e uma para buraco leve, J_{LH} .

$$J = J_{HH} + J_{LH} \quad (77)$$

onde

$$J_{HH} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{h1}} d^3k v_{zHH}(\bar{k}) [T_{HH \rightarrow HH}(\bar{k}) + T_{HH \rightarrow LH}(\bar{k})] [f(E) - f(E + eV)]$$

$$+ \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{h2}} d^3k v_{zLH}(\bar{k}) [T_{LH \rightarrow HH}(\bar{k}) + T_{LH \rightarrow LH}(\bar{k})] [f(E) - f(E + eV)]$$
(78)

e

$$J_{LH} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_1} d^3k v_{zLH}(\bar{k}) [T_{LH \rightarrow HH}(\bar{k}) + T_{LH \rightarrow LH}(\bar{k})] [f(E) - f(E + eV)]$$
(79)

Os domínios de integração Ω_{h1} , Ω_{h2} e Ω_1 estão ilustrados na figura 21. No domínio Ω_{h1} , k_p está entre os pontos críticos $\pm k_M$ e k_z sobre a superfície de energia constante de buraco pesado. Em Ω_{h2} , k_p está entre os pontos críticos $\pm k_H$ e $\pm k_M$, e k_z sobre a superfície de energia constante de buraco pesado (a qual foi definida como sendo raiz de buraco leve, como foi descrito na seção 2.3.4). E por fim, no domínio Ω_1 , k_p está entre os pontos críticos $-k_L$ e $+k_L$ e as raízes de k_z sobre a superfície de energia constante de buraco leve.

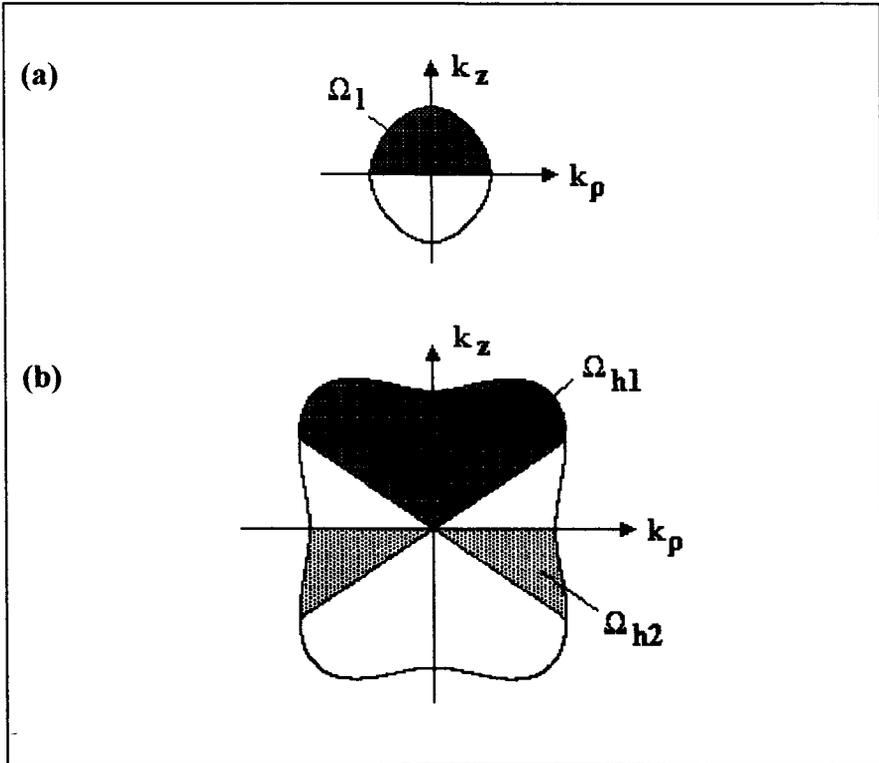


Figura 21. Domínios de integração no espaço k (áreas sombreadas) para o cálculo da corrente de tunelamento para buracos. (a) superfície de energia constante de buraco leve e (b) superfície de energia constante de buraco pesado.

Devido as complexidades na execução destes cálculos, optamos pela simples determinação da posição dos picos da corrente de tunelamento ressonante de buracos como mostrado no gráfico da figura 18, verificando a tensão necessária para que os picos de tunelamento ressonante cruzem a energia de Fermi no emissor.

Supondo que a energia de Fermi no emissor é de **10meV** então os picos de tunelamento ressonante são esperados nas tensões externas aplicadas como mostrado na tabela 2 abaixo:

	HH ₁ [mV]	LH ₁ [mV]	HH ₂ [mV]	HH ₃ [mV]	LH ₂ [mV]	HH ₄ [mV]
Este Trabalho	64	130	291	484	736	918
Chuang	60	130	290	450	700	825

Tabela 2. Posição dos picos na corrente de tunelamento de buracos através de uma dupla barreira simétrica de *GaAs/AlAs* com **30Å** de barreira e **50Å** de poço ($k = 0$) calculados neste trabalho e os calculados por Chuang [15].

2.5. Região de Depleção e Região de Acumulação

Na análise das curvas características I vs. V com V a tensão aplicada externamente é necessário levar em conta a presença das regiões de acumulação e de depleção ao redor da estrutura de tunelamento ressonante⁶. Ou seja, o potencial ΔV_{ext} aplicado sobre a amostra real, está distribuído sobre as regiões de acumulação (*acc, accumulation*) e de depleção (*dep, depletion*) além da estrutura de tunelamento ressonante (*rts, resonant tunneling structure*), como mostrado esquematicamente na figura 22. A voltagem externa total (ΔV_{ext}) está, portanto, dividida sobre estas três regiões,

$$\Delta V_{ext} = \Delta V_{acc} + \Delta V_{rts} + \Delta V_{dep} \quad (80)$$

⁶ Neste modelo estamos considerando que os contatos sejam ôhmicos, onde para contatos ôhmicos adotamos como definição que a resistência dos contatos, ainda que varie com uma tensão externa aplicada, seja muito menor que a resistência da heteroestrutura em estudo.

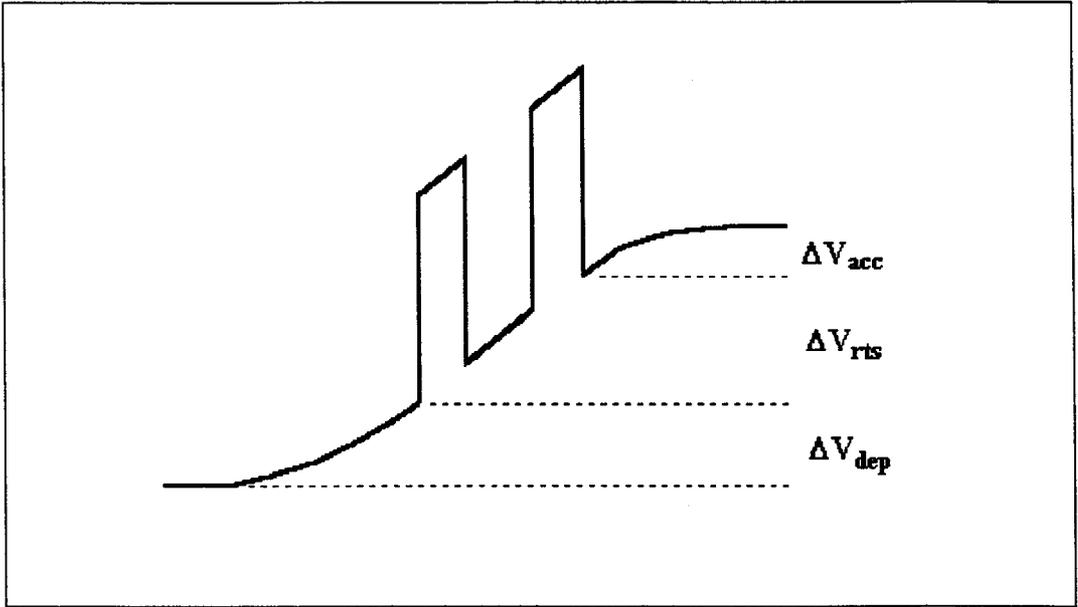


Figura 22. A tensão externa total ΔV_{ext} é dividida sobre a região de depleção, região de acumulação e da estrutura de tunelamento ressonante.

Para determinar as quedas de tensão ΔV_{dep} , ΔV_{rts} e ΔV_{acc} nós fazemos uso das aproximações da região de depleção e da região de acumulação [20]. Negligenciando o transporte de cargas através da dupla barreira e o acúmulo de cargas dentro do poço, a forma do potencial pode ser encontrado resolvendo a equação de Poisson nas regiões de depleção, acumulação e heteroestrutura, com as condições de contorno apropriadas em cada interface. Desta forma, estas quedas de tensão podem ser expressas em termos da densidade de cargas deslocadas da região de depleção, N_s , que é igual a densidade de cargas acumulada na região de acumulação, ou seja

$$\Delta V_{dep} = \frac{eN_s^2}{2\epsilon_{GaAs} N_d} \quad (81)$$

$$\Delta V_{rts} = \frac{eN_s L_{rts}}{\epsilon_{rts}} \quad (82)$$

$$\frac{q^2 N_s^2}{2\epsilon_{GaAs} K_B T N_d} = \exp(e\Delta V_{acc} / K_B T) - (e\Delta V_{acc} / K_B T) - 1 \quad (83)$$

onde L_{rts} é a largura total da heteroestrutura, N_d a densidade de doadores nas regiões de depleção e de acumulação, e , ϵ_{GaAs} e ϵ_{rts} são as constantes dielétrica do GaAs e da heteroestrutura respectivamente.

Escolhendo-se uma das tensões acima, por exemplo ΔV_{rts} , as demais tensões e a densidade de cargas N_s são encontradas resolvendo as equações 81, 82 e 83. Embora

não tenhamos levado em conta a acumulação de cargas no poço e a corrente através da heteroestrutura, esta aproximação tem sido geralmente aceita [10], [21-22].

Portanto, tendo as curvas I vs. V ou mesmo as posições dos picos na corrente de tunelamento, podemos agora adicionar e estes as correções devido as quedas de tensões nas regiões de depleção e regiões de acumulação, como ilustrado na figura 23. Desta forma poderemos comparar os resultados experimentais com os resultados predito pelos modelos teóricos descritos nas seções anteriores.

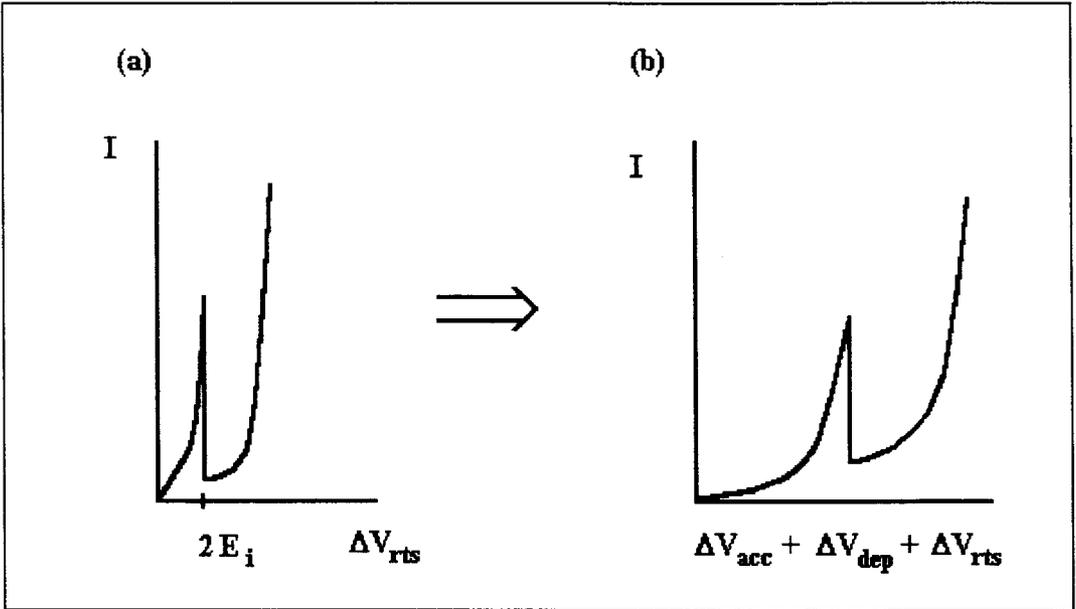


Figura 23. Adicionando-se as quedas de tensão sobre as regiões de depleção e de acumulação a curva I vs. ΔV_{rts} , calculada (a), obtemos a curva I vs. ΔV_{ext} correspondente a curva experimental de tunelamento através da dupla barreira (b).

Capítulo 3.

MONTAGENS EXPERIMENTAIS

3.1. Introdução

Muitas técnicas de medida da curva I vs. V [23-27] tem sido empregadas para o estudo de tunelamento ressonante com níveis confinados em diversos sistemas. Adler e Jackson [23] foram os primeiros a utilizarem uma ponte de Wheatstone combinada com modulação AC (corrente alternada) para medida das curvas dI/dV vs. V e d^2I/dV^2 vs. V em junções túnel de supercondutores, num intervalo de resistência de alguns ohms a milhares de ohms. Colley e Hansma [24] utilizaram um circuito ponte, com realimentação (*feedback*), para medir o espectro de tunelamento diferencial de vibrações moleculares, das moléculas localizadas no isolante de uma junção metal-isolante-metal, medindo a diferença entre os espectros de tunelamento de uma junção dopada e uma não dopada.

Smoliner e outros, apresentaram trabalhos [18, 28] sobre o estudo de estados confinados em estruturas de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ e transistores de efeito de campo, utilizando para isto uma ponte de Wheatstone juntamente com um circuito de realimentação (Christanell e Smoliner [27]).

Para o estudo de tunelamento ressonante em nossas estruturas de dupla barreira e de camadas com dopagem delta, utilizamos dois sistemas de medidas diferentes:

- Sistema Circuito Ponte como aquele apresentado por Christanell e Smoliner [27] ;
- Sistema Fonte de Corrente/Tensão e Voltímetro digital,

de acordo com as características de cada amostra. A seguir passamos a descrever estas duas técnicas de medidas.

3.2. Circuito Ponte de Wheatstone

O circuito ponte apresentado por Christanell e Smoliner [27], tem algumas facilidades sobre os demais sistemas que tivemos a oportunidade de conhecer [23-26]. Este sistema de medidas é bem mais simples de ser operado e de custo reduzido quando comparado aos demais sistemas. Uma grande vantagem deste circuito é que ele nos permite fazer

uma medida analógica da primeira e da segunda derivada da curva I vs. V . Isto nos motivou a adota-lo para nossas medidas de corrente de tunelamento, cujo circuito mostrado na figura 24, consiste basicamente de uma ponte de Wheatstone e de um circuito de realimentação (composto pelos amplificadores operacionais **OP1** a **OP4**), o qual tem por objetivo controlar a tensão sobre a amostra, mantendo-a constante independentemente da impedância desta.

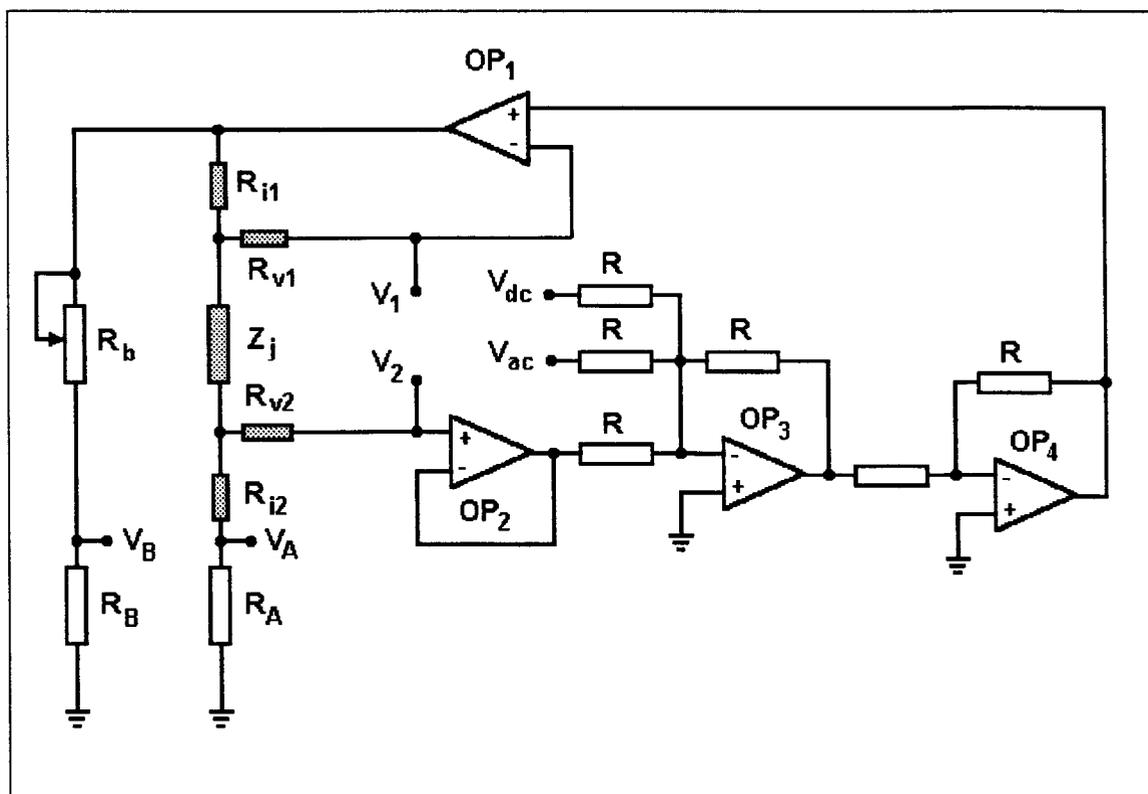


Figura 24. Diagrama do circuito ponte utilizado neste trabalho conforme descrição de Christanell e Smoliner [27]. A amostra está representada pela impedância Z_j .

Os amplificadores operacionais **OP₁** a **OP₄** são todos do tipo LF356, cujas principais características são apresentadas na tabela 3:

Descrição:	Típico:
Baixa dependência de <i>offset</i> com a temperatura	5 $\mu\text{V}/^\circ\text{C}$
Alta impedância de entrada	$10^{12} \Omega / 3\text{pF}$
Corrente de <i>offset</i>	3 pA
Baixo ruído	15 $\text{nV}/\sqrt{\text{Hz}}$
Grande largura de banda passante	até 4,5 MHz

Tabela 3. Principais características do Amplificador Operacional LF356.

No circuito da figura 24, Z_j representa a impedância da amostra, a qual poder ser considerada um resistor R_j em paralelo com um capacitor C_j [29] ⁷. Os resistores R são todos de $10\text{K}\Omega$ nominais por $1/8\text{ W}$ de potência e R_A e R_B são escolhido de forma a serem sempre menores que a resistência intrínseca da amostra $R_j(V)$, no intervalo de tensão da medida, o que garante um bom funcionamento do circuito de realimentação. Os resistores R_{v1} , R_{v2} , R_{i1} e R_{i2} são escolhidos de forma a serem sempre muito menores que os demais resistores da ponte de Wheatstone. A tensão V_{dc} é a tensão de polarização DC (corrente contínua) aplicada sobre a amostra e V_{ac} a tensão de modulação (tipicamente da ordem de 5mV). As tensões sobre os resistores R_A e R_B são respectivamente V_A e V_B , e, $V_1 - V_2$ é a tensão aplicada sobre a amostra. O resistor R_b é escolhido como sendo da ordem da resistência da amostra no intervalo de medida.

A seguir, na seção 2.2.1, fazemos uma descrição do funcionamento do circuito de realimentação, e, na seção 2.2.2 apresentamos a técnica de medida com a ponte de Wheatstone e modulação AC.

3.2.1. Circuito de Realimentação

O circuito de realimentação é composto pelos amplificadores operacionais OP_1 a OP_4 , e, pelos seis resistores R . O funcionamento deste circuito é bastante simples. Todos os amplificadores operacionais (OP_1 a OP_4) estão configurados com ganho unitário, de forma que não há amplificação de sinal ao longo do circuito.

O amplificador operacional OP_2 funciona apenas como um amplificador de corrente, isolando a ponte de Wheatstone da tensão externa V_{dc} e da tensão de modulação

⁷ Medidas de tunelamento em altas frequências (18 GHz) realizadas por T. Wei e S. Stapleton [26] mostram que uma amostra de dupla barreira pode ser representada por um circuito R-C paralelo. Indutâncias observadas foram atribuídas aos fios aéreos que ligam os contatos das amostras. Neste trabalho iremos adotar que nossas amostras de dupla barreira, tanto para tunelamento de elétrons como para tunelamento de buracos, possam ser apresentadas por um circuito R-C paralelo.

V_{ac} . O amplificador OP_3 adiciona ao potencial V_2 (saída de OP_2) às tensões V_{dc} e V_{ac} . O amplificador OP_4 retira a fase de 180° imposta pelo amplificador OP_3 . O amplificador OP_1 funciona como fonte de corrente fornecendo a tensão $V_{dc} + V_{ac} + V_2$ ao circuito ponte, figura 25.

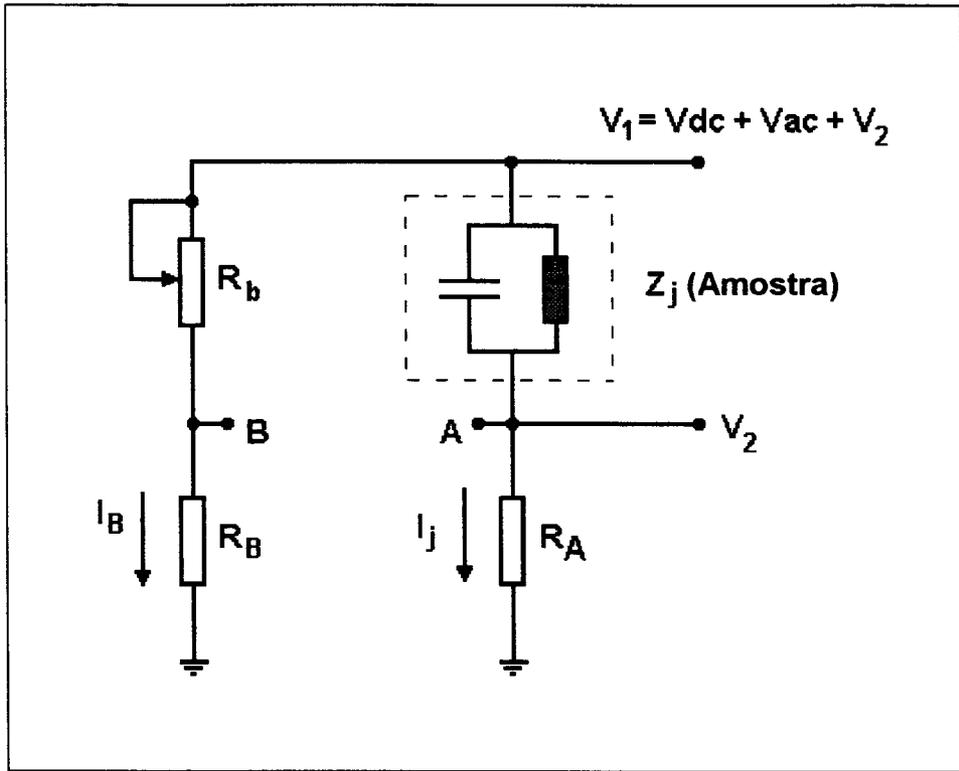


Figura 25. Diagrama da ponte da Wheatstone. Os resistores R_{v1} , R_{v2} , R_{i1} e R_{i2} são desprezados, uma vez que estes são muito menores que as demais resistências do circuito.

O circuito de realimentação lê a tensão V_2 sobre a amostra e a adiciona a esta a tensão de modulação $V_{ac} = V_0 \cos(\omega t)$ (com $V_0 \ll V_{dc}$) e a tensão externa V_{dc} . Esta soma é então aplicada a ponte de Wheatstone, $V_1 = V_{dc} + V_{ac} + V_2$. Desta forma, como mostrado na figura 25, a tensão sobre a amostra ($V_1 - V_2 = V_{ac} + V_{dc}$) é controlada, independentemente da impedância interna da amostra e das demais resistências da ponte, uma vez que controlamos V_{ac} e V_{dc} .

3.2.2. Método da Ponte de Wheatstone

Esta técnica de medida utilizando uma ponte de Wheatstone com modulação AC é muito empregada para a medida das derivadas das curvas características I vs. V em dispositivos elétricos.

Para os cálculos que seguem, as resistências R_{v1} , R_{v2} , R_{i1} e R_{i2} são desprezadas, já que estas são escolhidas de forma a serem muito menores que as demais resistências da ponte, figura 25. Desta forma, a diferença de tensão entre os terminais A e B será,

$$\begin{cases} V_i = V_j + V_A \\ V_i = V_b + V_B \end{cases} \quad (84)$$

$$\Rightarrow V_{AB} = V_A - V_B = V_b - V_j \quad (85)$$

onde V_A e V_B são as quedas de tensões nos resistores R_A e R_B , e, V_b e V_j são as quedas de tensões no potenciômetro R_b e na amostra Z_j , respectivamente. Nosso objetivo aqui é expressar V_{AB} em função V_j , I_j e das demais resistências conhecidas do circuito ponte.

Utilizando a lei de Ohm juntamente com a eq. 84, podemos mostrar que

$$\left. \begin{array}{l} V_b = I_b R_b \\ I_b = V_i / (R_b + R_A) \end{array} \right\} \Rightarrow I_b = \frac{V_j + V_A}{R_b + R_A} \Rightarrow V_b = (V_j + V_A) \frac{R_b}{(R_b + R_A)} \quad (86)$$

onde impomos que $R_A = R_B$, e V_A é dado por

$$V_A = V_j \frac{R_A}{Z_j} \quad (87)$$

Substituindo esta expressão na eq. 86, teremos

$$V_b = V_j \frac{R_b}{(R_A + R_b)} (1 + R_A/Z_j) \quad (88)$$

e desta forma encontramos a definição para V_{AB} que desejávamos,

$$V_{AB} = \frac{V_j R_A}{(R_A + R_b)} \left[\frac{R_b}{Z_j} - 1 \right] \quad (89)$$

Representando a impedância da amostra por um circuito R-C em paralelo, a impedância total da amostra será,

$$\frac{1}{Z_j} = \frac{1}{R_j} + \frac{1}{X_j} \quad \text{com} \quad X_j = \frac{1}{\omega C_j} \quad (90)$$

onde ω é a frequência da modulação AC e X_j a reatância capacitiva da amostra. Então, teremos

$$V_{AB} = \frac{V_j R_A}{(R_A + R_b)} \left(\frac{R_b}{R_j} - 1 + i\omega C_j R_b \right) \quad (91)$$

Se a reatância capacitiva da amostra, X_j , for muito grande de modo que $Z_j \cong R_j$, a parte imaginária de V_{AB} pode ser desprezada e a condutância da amostra é avaliada como sendo

$$G_j = \frac{1}{R_j} = \frac{\Re[V_{AB}](R_A + R_b) / V_j R_A + 1}{R_b} \quad (92)$$

Agora, se a reatância capacitiva da amostra, C_j , for muito pequena de modo que $Z_j \cong X_j$, então a parte real de V_{AB} pode ser desprezada, e a reatância capacitiva da amostra é avaliada como

$$\frac{1}{X_j} = \omega C_j = \frac{\Im[V_{AB}](R_A + R_b)}{V_j R_b R_A} \quad (93)$$

onde nas equações 92 e 93 adotamos \Re e \Im para expressar as partes real e imaginária das expressões entre colchetes.

Usando a expressão para a corrente na amostra $I_j = V_j/R_j$ e em seguida expandindo as partes real e imaginária da corrente entre os terminais A-B, dada por $I_{AB} = V_{AB}/R_A$, em séries de Taylor até segunda ordem em torno de V_{dc} , teremos

$$\Re[I_{AB}] = \frac{V_j}{(R_A + R_b)} \left(\frac{R_b}{R_j} - 1 \right) , \quad \text{com } V_j = V_{dc} + \delta V_j \quad \begin{cases} \delta V_j = V_0 \cos(\omega t) \\ V_0 \ll V_{dc} \end{cases}$$

$$\cong \frac{1}{(R_A + R_b)} \left[V_j (V_{dc}) \left(\frac{R_b}{R_j} - 1 \right) + \frac{\partial}{\partial V_j} (I_j R_b - V_j) \delta V_j \right.$$

$$\left. + \frac{\partial^2}{\partial V_j^2} (I_j R_b - V_j) \delta V_j^2 + \dots \right]$$

$$\Re[I_{AB}] = \frac{1}{R_A + R_b} \left[V_{dc} \left(\frac{R_b}{R_j} - 1 \right) + \frac{dI_j}{dV_j} R_b V_0 \cos(\omega t) + \frac{d^2 I_j}{dV_j^2} \frac{R_b V_0}{2} \cos(2\omega t) + \dots \right]$$

(94)

Da mesma forma avaliamos a parte imaginária de I_{AB} , expandindo até primeira ordem, obtemos

$$\Im[I_{AB}] = V_j \omega C_j \frac{R_b}{R_A + R_b}$$

$$\cong \frac{R_b}{R_A + R_b} \left[\omega C_j V_{dc} + \omega C_j V_0 \cos(\omega t) + \omega \frac{dC_j}{dV_j} [V_{dc} + V_0 \cos(\omega t)] V_0 \cos(\omega t) \right]$$

$$\Im[I_{AB}] \cong \frac{R_b}{(R_A + R_b)} \left[\omega \frac{dC_j}{dV_j} \frac{V_0^2}{2} + \omega C_j V_{dc} + \left(\omega \frac{dC_j}{dV_j} V_{dc} V_0 + \omega C_j V_0 \right) \cos(\omega t) + \right.$$

$$\left. \omega \frac{dC_j}{dV_j} \frac{V_0^2}{2} \cos(2\omega t) + \dots \right]$$

(95)

Desta forma vemos que para as medidas de dI/dV vs. V e d^2I/dV^2 vs. V , devemos medir o sinal em fase com a tensão de modulação, V_{ac} , nas frequências ω e 2ω , eq. 94, respectivamente. Se a parte capacitiva da amostra, C_j , variar muito lentamente de forma que

$$\omega \frac{dC_j}{dV_j} V_{dc} V_0 \ll \omega C_j V_0$$

da eq. 95, vemos que isto torna possível medir também a curva C vs. V , tomando o sinal à 90° em relação a tensão de modulação, V_{ac} , na frequência ω .

Na prática pudemos observar que é bastante complicado definir o que está ou não em fase com a tensão de modulação, V_{ac} , de forma que é mais conveniente, quando se deseja medir as derivadas das curvas características I vs. V , utilizar uma frequência de modulação baixa ($\sim 50\text{Hz}$), de modo a garantir que a mudança de fase introduzida pela capacitância da amostra seja mínima. Assim podemos considerar que todo o sinal medido vem, de fato, da parte real de V_{AB} , ou seja $\Im[V_{AB}] \ll \Re[V_{AB}] \cong V_{AB}$.

3.2.3. Sistema de Medidas com a Ponte de Wheatstone

A montagem experimental utilizada em nossas medidas está ilustrado na figura 26, o qual descrevemos abaixo.

O Gerador de Função (modelo HP3312A) fornece uma onda quadrada com amplitude 1V como referência AC para o Lock-in e sinal senoidal de 100mV , ao transformador Tr . A relação de espiras no transformador Tr é de 50:1 de forma que o sinal V_{ac} fornecido ao circuito ponte é da ordem de 2mV .

Este transformador Tr , foi adicionado ao sistema por dois motivos: (a) como está esquematizado na figura 26, o transformador Tr elimina uma conexão do fio terra do Gerador de Função ao fio terra do Circuito Ponte, evitando assim um *loop* de terra entre estes equipamentos, uma vez que as entradas do Lock-in (A e B) e do Eletrômetro (*inp*) possuem terra suspenso; (b) o sinal AC fornecido pelo Gerador de Função com amplitude inferior a 10mVp é de baixa qualidade e auto ruído, o que introduz bastante ruído no Amplificador Lock-in, uma vez que este equipamento é bastante sensível.

As tensões V_A e V_B são medidas pelo Amplificador Lock-in (modelo SR530) no modo diferencial ($V_A - V_B$), na frequência selecionada ω ou 2ω , de acordo com o que se deseja medir. A comunicação entre o Lock-in e o microcomputador é feita via RS232.

O Eletrômetro Keithley modelo 610C, funciona apenas como um amplificador de corrente na medida de V_2 , já que este possui alta impedância de entrada, $10^9\Omega$, no modo de leitura de tensão.

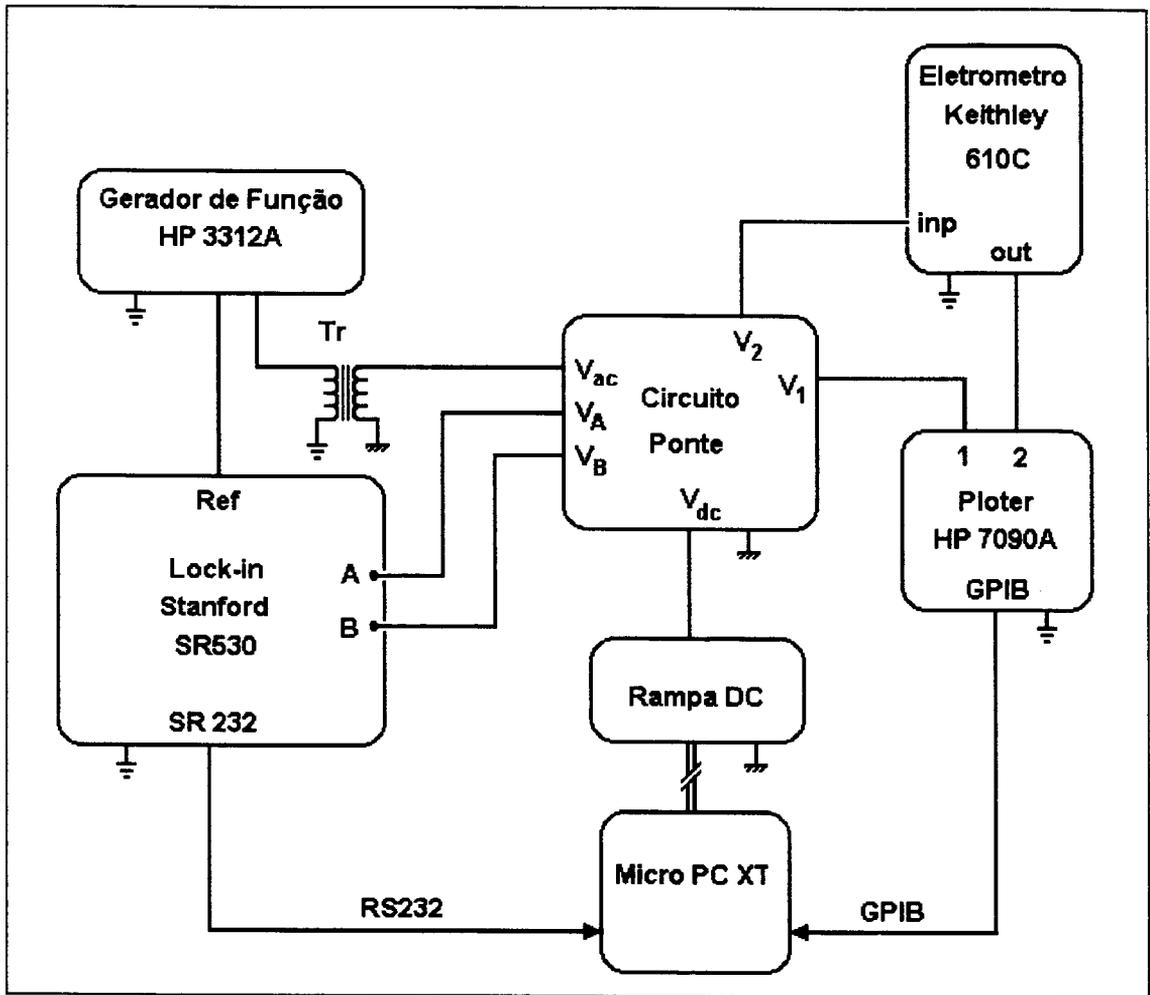


Figura 26. Sistema de medidas com o Circuito Ponte.

O Ploter HP 7090A, faz a leitura das tensões V_1 e V_2 , cujos valores são transferidos para o microcomputador via GPIB. As conexões via GPIB e RS232 além de facilitar a aquisição de dados, também funcionam como uma boa isolamento do sistema de medidas para as altas frequências providas do *clock* interno do microcomputador (\sim MHz).

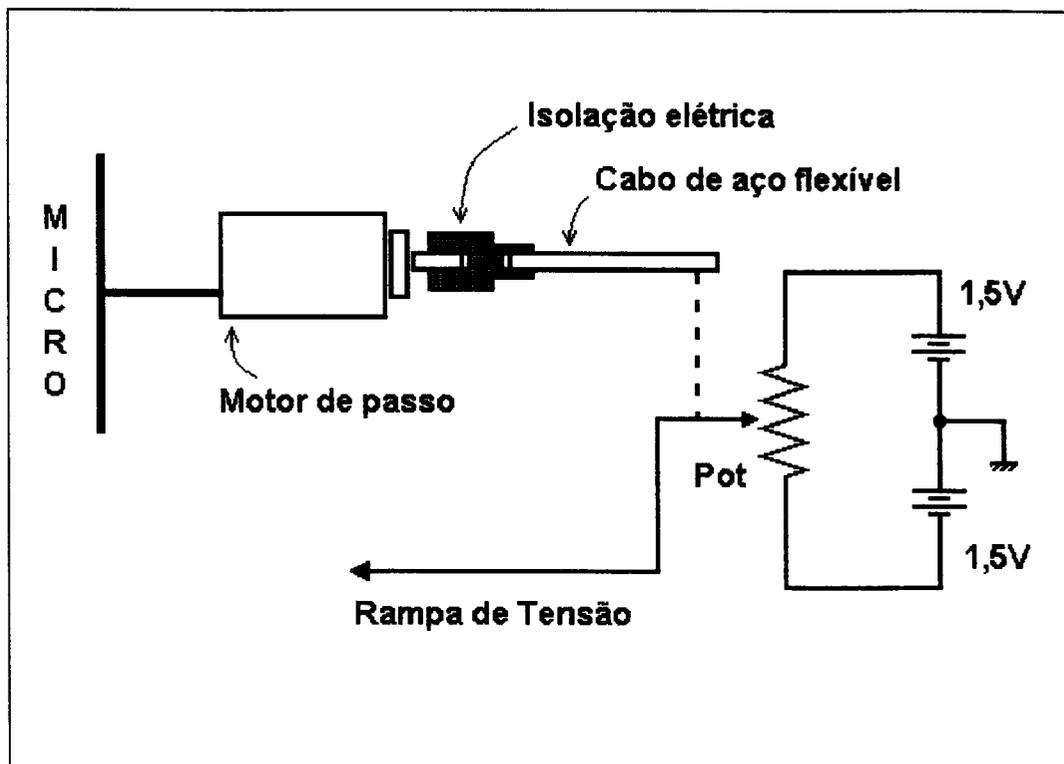


Figura 27. Gerador de rampa DC controlada com um motor de passo.

A tensão DC aplicada na amostra é dada por uma rampa de tensão como mostrado na figura 27 onde o potenciômetro de $10K\Omega$ com $1K\Omega$ por volta, está acoplado a um motor de passo controlado pelo microcomputador. Com duas baterias de $1,5V$ temos uma rampa de $-1,5$ a $+1,5V$ com uma resolução de $1,5mV$ por passo.

3.3. Sistema Fonte de Corrente e Voltímetro

Todo o nosso sistema de medida das curvas I vs. V e suas derivadas, descritos na seção 3.2, foi projetado utilizando amplificadores operacionais LF356 cujas principais características estão listadas na tabela 3. Estas características (tais como baixo ruído, alta impedância de entrada) é um dos méritos do sistema, entretanto estes amplificadores operacionais (LF356) estão limitados a corrente DC máxima de $10mA$.

A limitação de corrente do LF356 poderia ser facilmente resolvido colocando-se um estágio de potência na saída do amplificador operacional OP4 (ver circuito da figura 24) ou utilizando-se amostras com um diâmetro de contato da ordem de $40\mu m$, o que resultaria em aumento da resistência dinâmica das amostras e densidade de corrente da ordem de $10^3 A/cm^2$.

Tanto uma opção quanto a outra, apesar de ser possível, requer um tempo considerável para a sua execução. Portanto, neste instante, optamos por montar um outro sistema I vs. V , com uma fonte de tensão/corrente programável (Keithley 228A) e um voltímetro digital (Keithley 199). Estes equipamentos foram adquiridos recentemente com a intenção de se montar um sistema de medidas elétricas de rotina.

Com uma adaptação do programa de aquisição de dados, montamos este outro sistema utilizando os equipamentos Keithley mencionados acima. O esquema desta montagem está ilustrado na figura 28.

O resistor R_b é escolhido de acordo com o valor da resistência da amostra no intervalo da tensão onde será feita a medida. Em geral escolhemos $R_b \ll R_{Amostra}$, de forma que $V_2 \approx 0$, ou seja, de tal maneira que a maior parte da tensão aplicada pela fonte esteja sobre a amostra. Esta tensão aplicada sobre a amostra é obtida através da leitura no voltímetro Keithley 199, como sendo igual à

$$V_{Amostra} = V_1 - V_2 \quad (96)$$

Como a resistência R_b pode ser conhecida com grande precisão (medindo antes da montagem), a corrente sobre a amostra pode ser calculada utilizando a lei de Ohm, eq. 97. Embora a fonte de tensão/corrente Keithley 228A nos permitisse uma leitura direta da tensão e da corrente fornecida ao sistema, não pudemos utiliza-la pois ela está limitada pela resolução de $1mV$ e $1mA$, o que é insuficiente para nossas medidas, visto que pretendemos calcular as derivadas da curva I vs. V numericamente.

Felizmente, a estabilidade da corrente fornecida pela fonte é muito melhor que $1mA$ na escala de $1A$, e, também podemos fazer uma média sobre várias leituras de V_1 e V_2 , obtidas com o voltímetro digital Keithley 199, num mesmo ponto da curva. Com isto conseguimos obter uma relação sinal ruído muito boa, o que permitiu-nos fazer as derivadas numericamente. Isto pode ser observado no gráfico I vs. V e de suas derivadas nas figuras 36 e 37.

$$I_{Amostra} = \frac{V_{Amostra}}{R_b} \quad (97)$$

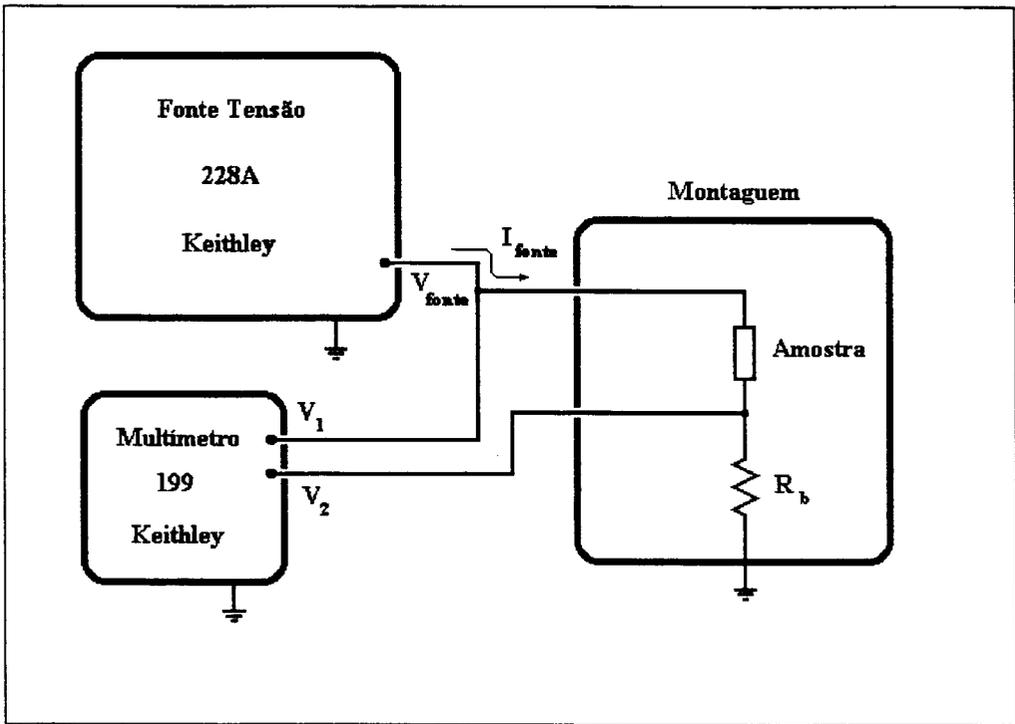


Figura 28. Sistema de medidas I vs. V com Fonte de Tensão e Corrente e Voltímetro da Keithley.

Em alguns casos R_{Amostra} era da ordem de uma dezena de ohms. Nestes casos a queda de tensão nos fios e contatos das chaves, que interligam o sistema, se tornam significativa. Como a corrente na amostra, nestes casos, facilmente excediam a 100mA, utilizamos o valor da corrente fornecida pela fonte para calcular a resistência efetiva do sistema (sem a amostra), e subtraí-la dos valores medidos (com a amostra).

Na figura 29 está ilustrado o circuito equivalente com as resistências mais significativas dos cabos representados por R_{11} , R_{12} , R_{13} e R_{14} . A resistência dos fios que ligam o sistema de medidas ao voltímetro foram desprezadas, já que a resistência de entrada do voltímetro (de aproximadamente $11\text{M}\Omega$), na escala utilizada, era muito maior do que as demais resistências do circuito.

Desta forma, as expressões para a tensão e para a corrente na amostra ficam,

$$I_{\text{Amostra}} = \frac{V_2}{R_b + R_{14}} \quad (98)$$

$$V_{\text{Amostra}} = (V_1 - V_2) - (I_{\text{Amostra}} R_{12} + I_{\text{Amostra}} R_{13}) \quad (99)$$

Os resistores R_{11} , R_{12} , R_{13} e R_{14} são medidas colocando-se um curto no lugar da amostra e fazendo uma curva I vs. V , até atingir uma corrente de aproximadamente 200mA. Desta forma o valor de resistor R_{11} é obtida fazendo-se um ajuste linear na

curva $(V_{\text{fonte}} - V_1)$ vs. I_{fonte} ; A resistência $(R_{12} + R_{13})$ é obtido através do ajuste linear na curva $(V_1 - V_2)$ vs. I_{fonte} . Para R_{14} é feito um ajuste linear à curva V_2 vs. I_{fonte} para cada medida, já que nesta resistência esta embutida a resistência de contato das chaves que selecionam os resistores de base R_b .

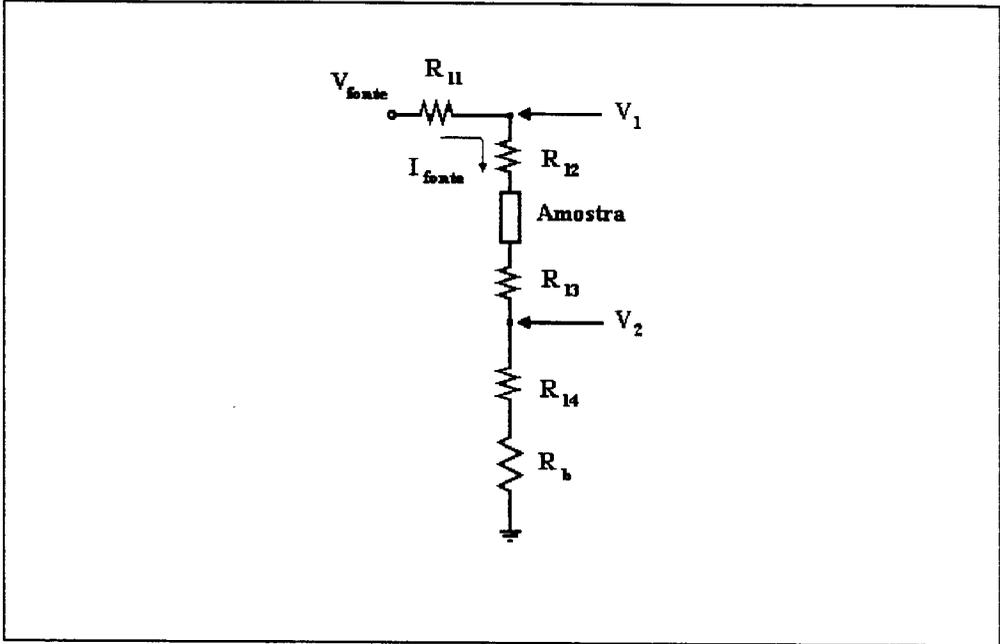


Figura 29. Resistências internas do sistema de medidas

3.4. Amostras

δ -doping:

As amostras com dopagem delta foram crescidas por MBE no IFSC e possuem a estrutura mostrada na figura 30(a): substrato de *GaAs* semi-isolante ($\rho = 10^8 \Omega \text{cm}$); camada *buffer* com $0,4 \mu$ de *GaAs* sem dopagem intencional; dopagem planar com *Si* ($N_{\text{Si}} = 1,8 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ para a amostra 76); e finalmente uma camada de *GaAs* no topo também sem dopagem intencional com espessuras da ordem de 330\AA (amostra 76) e 2000\AA (amostra 73). Todas estas amostras foram crescidas mantendo a temperatura do substrato entre 500 e 550°C , e, fazendo uma interrupção abrupta no crescimento do *GaAs* para a introdução de *Si*, resultando na incorporação de uma alta concentração de impurezas de *Si* em praticamente uma monocamada.

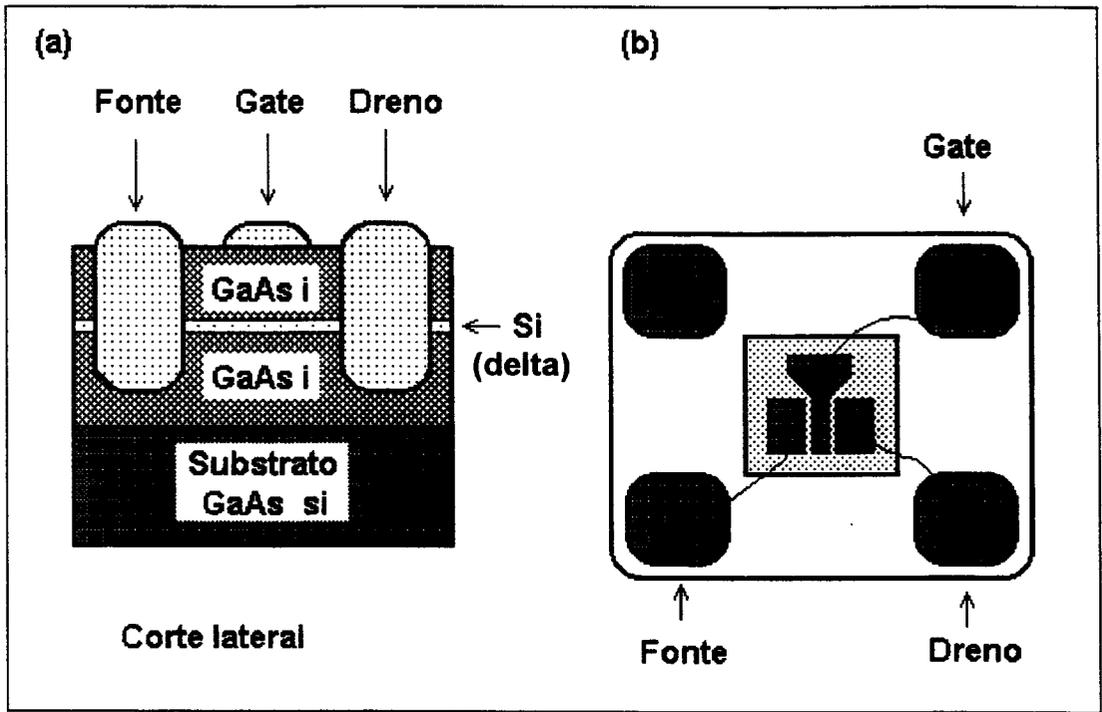


Figura 30. Estrutura das amostras de δ -doping com contatos: (a) vista lateral; (b) vista superior.

Devido a difusão térmica, os átomos de *Si* ficam distribuídos em algumas monocamadas. Estas impurezas rasas de *Si* quando ionizadas, dão origem a uma região de cargas positivas e gás de elétrons nas suas proximidades, distribuídos em várias sub-bandas (como mostrado na figura 32, seção 4.2).

Estas amostras de *GaAs* com dopagem planar foram processadas produzindo as estruturas tipo FET (*Field Effect Transistor*) como mostrado na fig. 30(b). Dois contatos ôhmicos de *Au/Ge/Ni* foram difundidos até a região do gás de elétrons bi-dimensional para formar a *fonte* e o *dreno*, e entre estes dois contatos ôhmicos foi depositado uma camada de *Au* para formar o *gate* do FET. A corrente de tunelamento é então medida entre um dos contatos ôhmicos (*fonte* ou *dreno*) e o *gate*.

Estes FET's foram colados a um suporte de porcelana, conforme mostrado na figura 30-b, com quatro contatos de ouro nos cantos. Os contatos do FET (*gate*, *dreno* e *fonte*) são ligados a estes contatos de ouro do suporte por meio de fios de ouro. O objetivo deste suporte de porcelana é o de evitar um contato direto com as amostras, tornando-as mais duráveis.

Dupla Barreira:

As amostras de dupla barreira para o estudo de tunelamento de elétrons e buracos, foram crescidas por MBE sobre um substrato n^+ e p^+ respectivamente, ambos com uma concentração de doadores e aceitadores da ordem de $10^{18} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Sobre o substrato são crescidas três camadas de *GaAs*, cuja dopagem decresce gradualmente até a estrutura da dupla barreira, como mostrado nos quadros 1 e 2. Em seguida é crescida uma camada de *GaAs* sem dopagem intencional (pi) com 33Å para as amostras tipo n e 51Å para as amostras tipo p . Sobre esta camada, então, é crescida a dupla barreira *AlAs/GaAs/AlAs* também sem dopagem intencional ($p \sim 10^{14}\text{cm}^{-3}$). Sobre a estrutura de dupla barreira são crescidas novamente as três camadas de *GaAs*, agora em ordem inversa de dopagem, terminando com *GaAs* n^+ (p^+) = $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ para as amostras tipo n (tipo p). Nas tabelas 4 e 5 estão apresentadas as espessuras das amostras de dupla barreira para estudo de tunelamento de elétrons e de buracos respectivamente.

ESTRUTURA TIPO P			
0,3 μm	<i>GaAs</i>	p^+	$2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
0,1 μm	<i>GaAs</i>	p	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
0,1 μm	<i>GaAs</i>	p	$5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
51 Å	<i>GaAs</i>	pi	residual $p \sim 10^{14}\text{cm}^{-3}$
L_a	<i>AlAs</i>	pi	
W	<i>GaAs</i>	pi	
L_b	<i>AlAs</i>	pi	
51 Å	<i>GaAs</i>	pi	
0,1 μm	<i>GaAs</i>	p	$5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0,1 μm	<i>GaAs</i>	p	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
0,3 μm	<i>GaAs</i>	p^+	$2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Substrato $p^+ \approx 10^{18} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$			

Quadro 1. Estrutura das amostras de dupla barreira tipo p .

ESTRUTURA TIPO N			
0,3 μm	<i>GaAs</i>	n^+	$2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
500 \AA	<i>GaAs</i>	n	$2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
500 \AA	<i>GaAs</i>	n	$3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
33 \AA	<i>GaAs</i>	pi	residual $p \sim 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
L_a	<i>Al₄Ga₆As</i>	pi	
W	<i>GaAs</i>	pi	
L_b	<i>Al₄Ga₆As</i>	pi	
33 \AA	<i>GaAs</i>	pi	
500 \AA	<i>GaAs</i>	n	$3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
500 \AA	<i>GaAs</i>	n	$2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0,2 μm	<i>GaAs</i>	n^+	$2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Substrato $n^+ \approx 10^{18} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$			

Quadro 2. Estruturas das amostras de dupla barreira tipo n .

Amostras tipo p	L_a (\AA)	W (\AA)	L_b (\AA)
196	50	50	50
197	50	30	50
198	20	40	50
199	15	40	50
200	50	40	50
201	65	40	50

Tabela 4. Amostras tipo p .

Amostras tipo n	L_a (\AA)	W (\AA)	L_b (\AA)
202	80	50	100
204	80	50	80

Tabela 5. Amostras tipo n .

Estas amostras de dupla barreira foram processadas em estruturas mesa com diâmetro de 250μ , para evitar as correntes de superfície. Os contatos ôhmicos tanto no topo

da estrutura mesa como no lado do substrato foram feitas por evaporação de $Au/Ge/Ni$ com posterior recozimento a 440°C , durante um minuto, numa atmosfera de N_2 .

Na figura 31-a apresentamos um corte transversal da estrutura tipo mesa, e, na figura 31-b um típico conjunto de amostras em estrutura mesa montados sobre um suporte de porcelana com quatro contatos de ouro nos cantos, tal como nas amostras de δ -doping. Sobre um destes contatos, a amostra com as estruturas mesa é colado com cola prata fazendo o contato do substrato (n^+ ou p^+). Nos outros três contatos de ouro do suporte são soldados fios de ouro que ligam a parte superior da estrutura mesa.

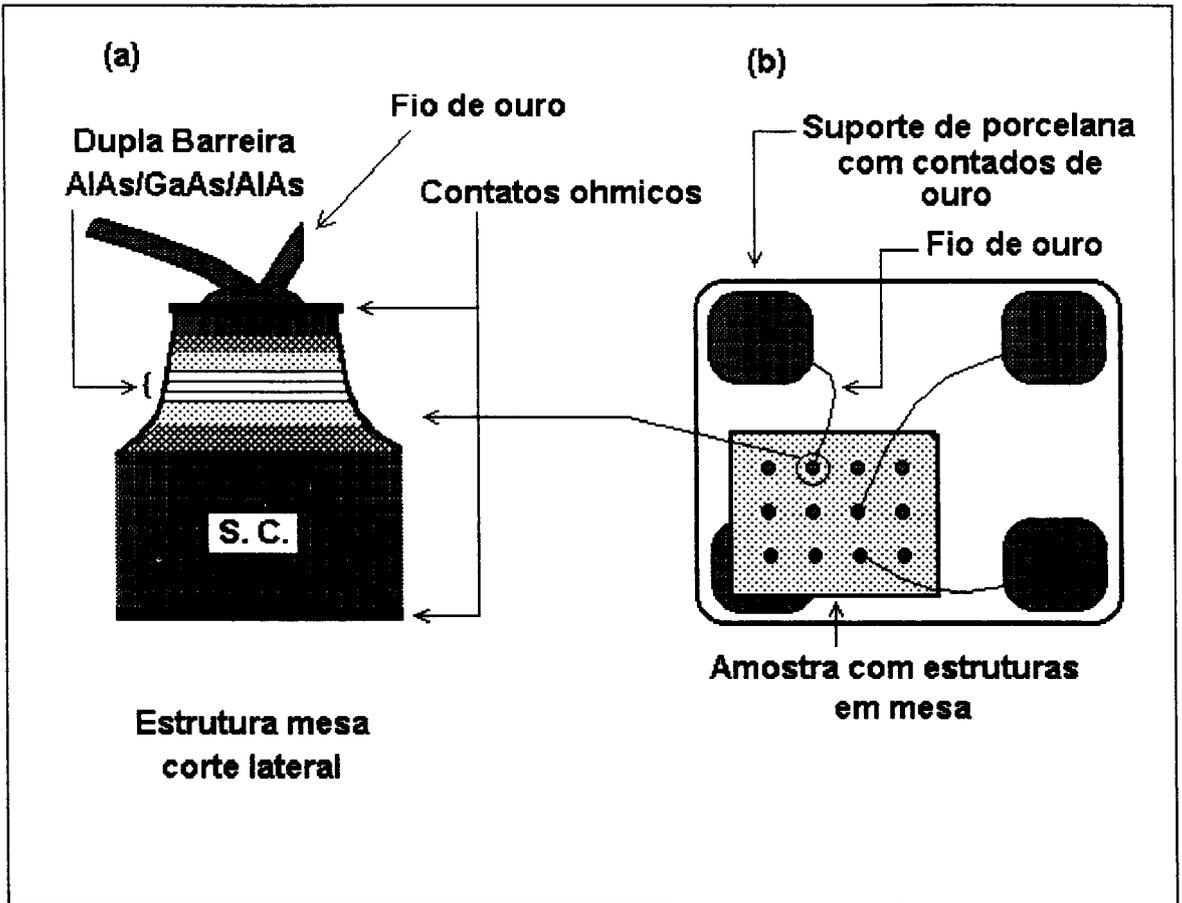


Figura 31. Estrutura das amostras de dupla barreira tipo n e tipo p com os contatos para a medida de corrente de tunelamento. (a) vista lateral; (b) vista superior.

Capítulo 4.

ANÁLISE DOS DADOS

4.1. Introdução

Apresentamos a seguir as medidas experimentais das curvas I vs. V realizadas com as amostras de δ -doping e de dupla barreira.

Medidas nas amostras de δ -doping foram feitas utilizando o sistema de medidas "Circuito Ponte" (conforme foi descrito na seção 3.2), onde foi possível medir diretamente também as curvas dI/dV vs. V e d^2I/dV^2 vs. V . A amostra 73 apresentou uma resistência de *gate - fonte* (ou *gate - dreno*) muito alta, provavelmente devido a espessura na camada de topo de 2000\AA , produzindo correntes muito inferiores a sensibilidade do nosso sistema de medida. Assim apresentamos apenas os dados experimentais da amostra 76 (com 330\AA de camada de topo).

Para as amostras de dupla barreira utilizamos o sistema de medidas "Fonte de Corrente e Voltímetro" (descrito na seção 3.3) onde é possível trabalharmos com correntes de até 1A com uma precisão melhor que 1mA , atingindo densidades de corrente acima de 10^3A/cm^2 nas nossas amostras.

4.2. Amostra δ -doping

Levando em consideração as impurezas aceitadoras residuais do *GaAs* e também a altura da barreira Schottky de $\sim 900\text{meV}$ entre o contato de *Au* e *GaAs*, os elétrons provenientes dos N_{Si} átomos de silício introduzidos durante o crescimento ficam distribuídos entre a superfície, com densidade superficial n_s , na região de depleção com densidade n_{AS} e na região do poço de potencial do δ propriamente dito com densidade N_s , tal que $n_s + n_{AS} + N_s = N_{Si}$.

Para uma espessura da camada de topo de 330\AA e altura da barreira de $\sim 900\text{meV}$, estabelece-se um campo elétrico da ordem de 270KV/cm causado pela transferência de carga da região do δ para a superfície, n_s , da ordem de $\sim 1,9 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ [30-

31]. Por outro lado, para uma concentração de impurezas aceitadoras residuais de $N_A \cong 10^{15} \text{cm}^{-3}$ a largura, W , da região de depleção imediatamente abaixo da região do δ -doping é de $\sim 1,02 \mu\text{m}$, o que leva a $n_{AS} = 10^{11} \text{cm}^{-2}$ [32].

Assim, a concentração de elétrons N_S no poço de potencial do δ é de $\sim 1,6 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ se considerarmos que cada átomo de Si contribui com um elétron, os quais estão distribuídos em várias sub-bandas.

Na figura 32, mostramos esquematicamente a estrutura de banda para a amostra de δ -doping com o contato de Au na superfície, em $z = 0$.

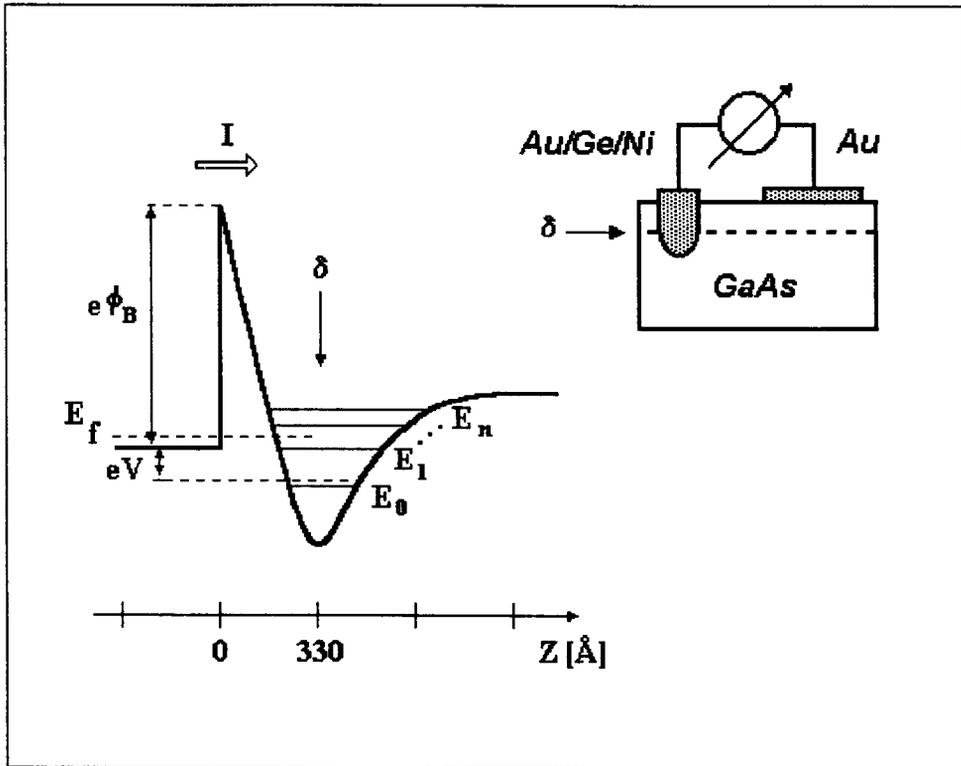


Figura 32. Esquema da estrutura de banda de condução de uma amostra de δ -doping sob um potencial elétrico externo aplicado, V , (à esquerda) e esquema elétrico (à direita). Onde: E_f é a energia de Fermi no emissor; $e\phi_B$ a altura da barreira Schottky; δ indica a posição da dopagem de Si ; E_0, E_1, \dots são as sub-bandas no poço δ ; e I a corrente eletrônica.

Na figura 33, apresentamos as curvas características I vs. V , dI/dV vs. V e d^2I/dV^2 vs. V medidas com o Circuito Ponte para uma estrutura de δ -doping, amostra 76 com 330Å de camada de topo, à temperatura de hélio líquido ($4,2\text{K}$). Na curva d^2I/dV^2 vs. V observamos três picos bastante nítidos em 458mV ; 503mV ; 543mV e um quarto menos intenso em 560mV . A polarização utilizada nestas medidas é tal que o

tunelamento dos elétrons é realizado do *gate* para o gás bi-dimensional de elétrons no poço, como indicado na figura 32. A distância entre os picos A, B e C na curva d^2I/dV^2 vs. V são respectivamente: A - B = 45mV ; B - C = 40mV ; C - D = 17mV .

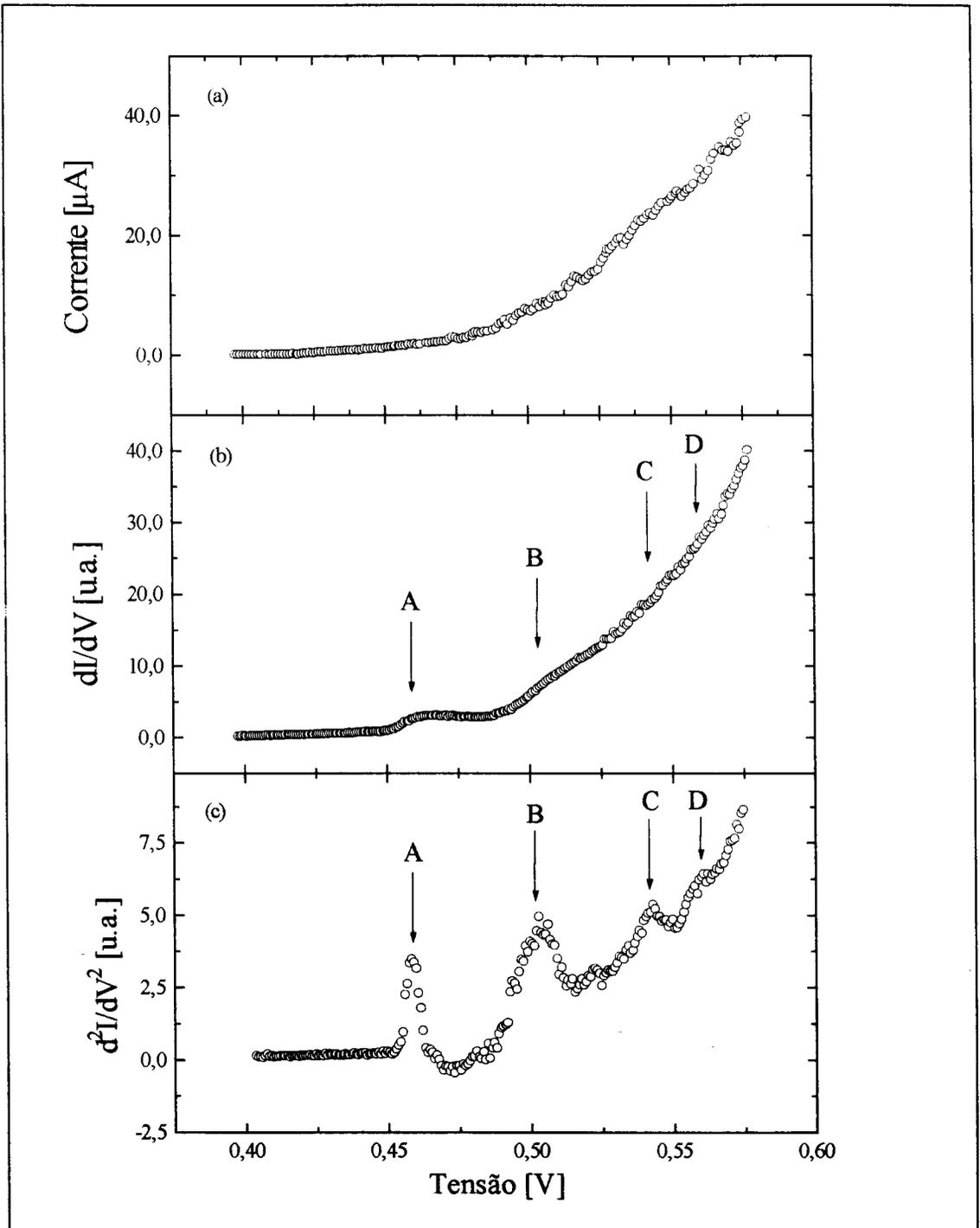


Figura 33. Curvas (a) I vs. V , (b) dI/dV vs. V , (c) d^2I/dV^2 vs. V para amostra de δ -doping de GaAs(Si), com concentrações $N_{Si} \cong 1,8 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ e $N_A \cong 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$, doadores e aceitadores respectivamente, e camada de topo de 330Å .

De acordo com os cálculos auto-consistentes apresentados por Schubert, Fischer e Ploog [30], para uma concentração de $\sim 1,6 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ elétrons no poço de potencial δ é esperado que os sete primeiros estados E_0 a E_6 estejam populados. Desta forma estas primeiras sete sub-bandas não contribuem com as estruturas na corrente de tunelamento na polarização utilizada, uma vez que o mínimo destas sub-bandas se encontram abaixo do nível de Fermi. Assim, as estruturas observadas devem corresponder a tunelamento ressonante para as sub-bandas de energia mais elevado: E_7 , E_8 , ...

Nas figura 34-a e 34-b mostramos o gráfico da variação da posição dos níveis de energia no poço de potencial do δ em função da concentração de elétrons para duas concentrações de impurezas residuais $N_A = 10^{14} \text{cm}^{-3}$ e 10^{16}cm^{-3} respectivamente, calculados por Schubert, Fischer e Ploog [30]. A concentração de aceitadores para as nossas amostras é de $\sim 10^{15} \text{cm}^{-3}$, o que nos deixa entre os dois gráficos mostrados nestas figuras.

As setas verticais no interior destes gráficos indicam os valores de N_s em que as respectivas sub-bandas começam a ser populadas, ou seja, a posição do nível de Fermi no interior do poço. Para $N_A = 10^{16} \text{cm}^{-3}$, figura 34-b, a segunda sub-banda começa a ser populada com $N_s = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, a terceira sub-banda com $N_s = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e assim por diante. A nossa amostra, com $N_s = 1,6 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, segundo estes resultados, deve estar com a sétima sub-banda, E_6 , já populada.

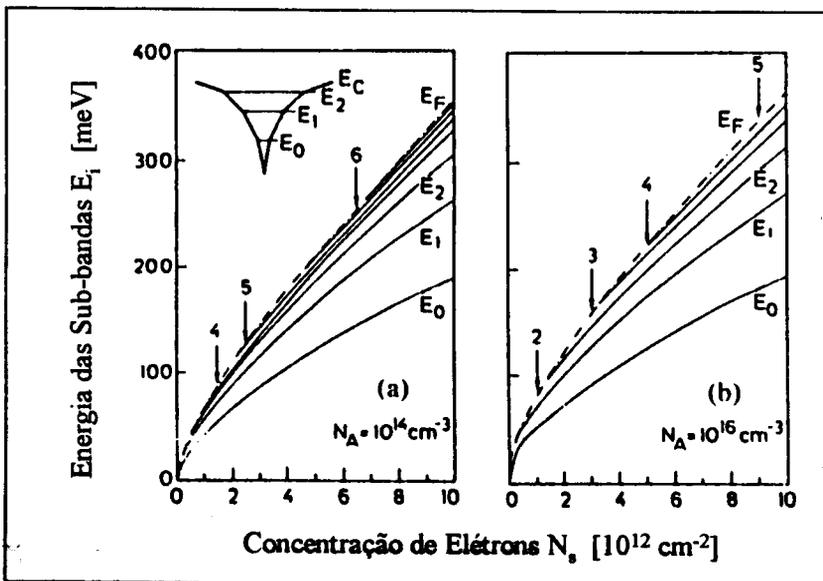


Figura 34. Energia das sub-bandas E_i e energia de Fermi E_F contra a concentração N_s , em um concentração residual de aceitadores (a) $N_A = 1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$ e (b) $N_A = 1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$. As setas verticais marcam as posições em que as sub-bandas vão sendo populadas [30].

É importante salientar, que para concentrações altas de N_s , ocorre uma saturação na medida da concentração Hall de portadores, como mostrado na figura 35 [30]. Para concentrações de $8,5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ vemos que a energia de Fermi, figura 34a e 34b, é maior que 310meV , ou seja, $E_f \geq (E_L - E_\Gamma) = 310 \text{meV}$, onde E_Γ e E_L são os mínimos da banda de condução no ponto Γ e no ponto L do $GaAs$, respectivamente. Desta forma, nós estamos começando a popular os estados no ponto L , o qual fica a 310meV acima do fundo da banda de condução em $k = 0$, ponto Γ .

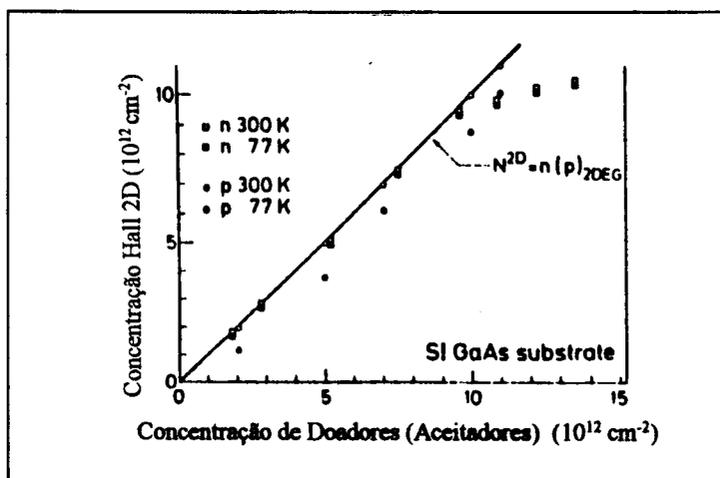


Figura 35. Concentração de portadores e mobilidade Hall de amostras de δ -doping tipo n e p em 300K e 77K como função da concentração N_s [30].

Assim, da polarização utilizada durante as nossas medidas podemos concluir que as ressonâncias observadas, se devem ao cruzamento do nível de Fermi no *gate* com o mínimo das sub-bandas vazias (E_7 , E_8 , ...) no ponto Γ (ou ponto L) no poço de potencial do δ -doping. Certamente as distâncias entre os picos observados na figura 33-c, não correspondem a separação entre as sub-bandas E_7 , E_8 , ..., uma vez que não foi possível fazer as correções devido a queda de tensão nas resistências dos contatos.

4.3. Dupla Barreira

Medidas da curva I vs V , com Fonte de Corrente e Voltímetro, foram feitas em todas as amostras de dupla barreira 197, 198, 199 e 204 à temperatura ambiente (300K), nitrogênio líquido (77K) e hélio líquido (4,2K). A temperatura de hélio líquido as amostras 204 (tipo n) e 199 (tipo p) apresentam estruturas características de tunelamento ressonante, as quais passamos a apresentar.

4.3.1. Tunelamento de Elétrons

Nas figuras 36 e 37 apresentamos as curvas experimentais **I vs. V** da amostra 204, com as duas polarizações bem como as suas respectivas derivadas, obtidas numericamente.

Na curva da segunda derivada para polarização positiva, figura 36-c, marcamos com as letras A, B e C as posições dos mínimos os quais correspondem aos "máximos" na curva **I vs. V**. O mesmo é feito na curva da segunda derivada para polarização negativa, figura 37-c, no entanto aqui marcamos os máximos, uma vez que as ressonâncias nas curvas **I vs. V** agora correspondem a mínimos. Estes valores são apresentados na tabela 6, abaixo.

	Máximos	Mínimos
A	200mV	-170mV
B	490mV	-620mV
C	acima de 1V	-910mV

Tabela 6. Mínimos da curva **I vs. V**, figura 36, e máximos, figura 37.

É interessante notar que na curva **I vs. V**, praticamente não é possível observar nenhuma estrutura, mas devido a relação sinal/ruído das nossas medidas ser muito alta (maior que 10^3) foi possível obter a primeira e a segunda derivada numericamente.

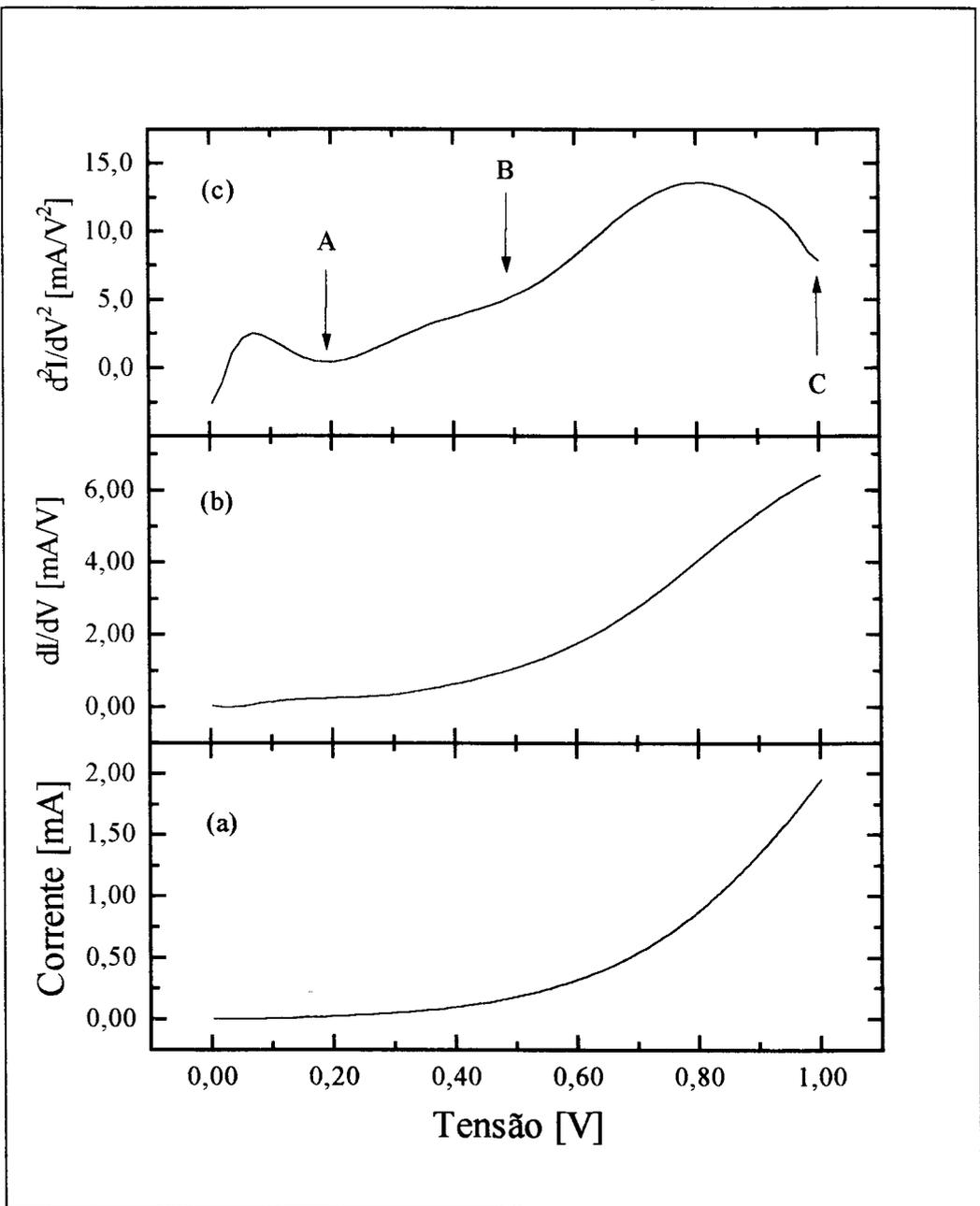


Figura 36. Curva I vs. V (a), dI/dV (b) e d^2I/dV^2 (c) com polarização positiva para amostra 204 a 4,2K . Derivadas feitas numericamente.

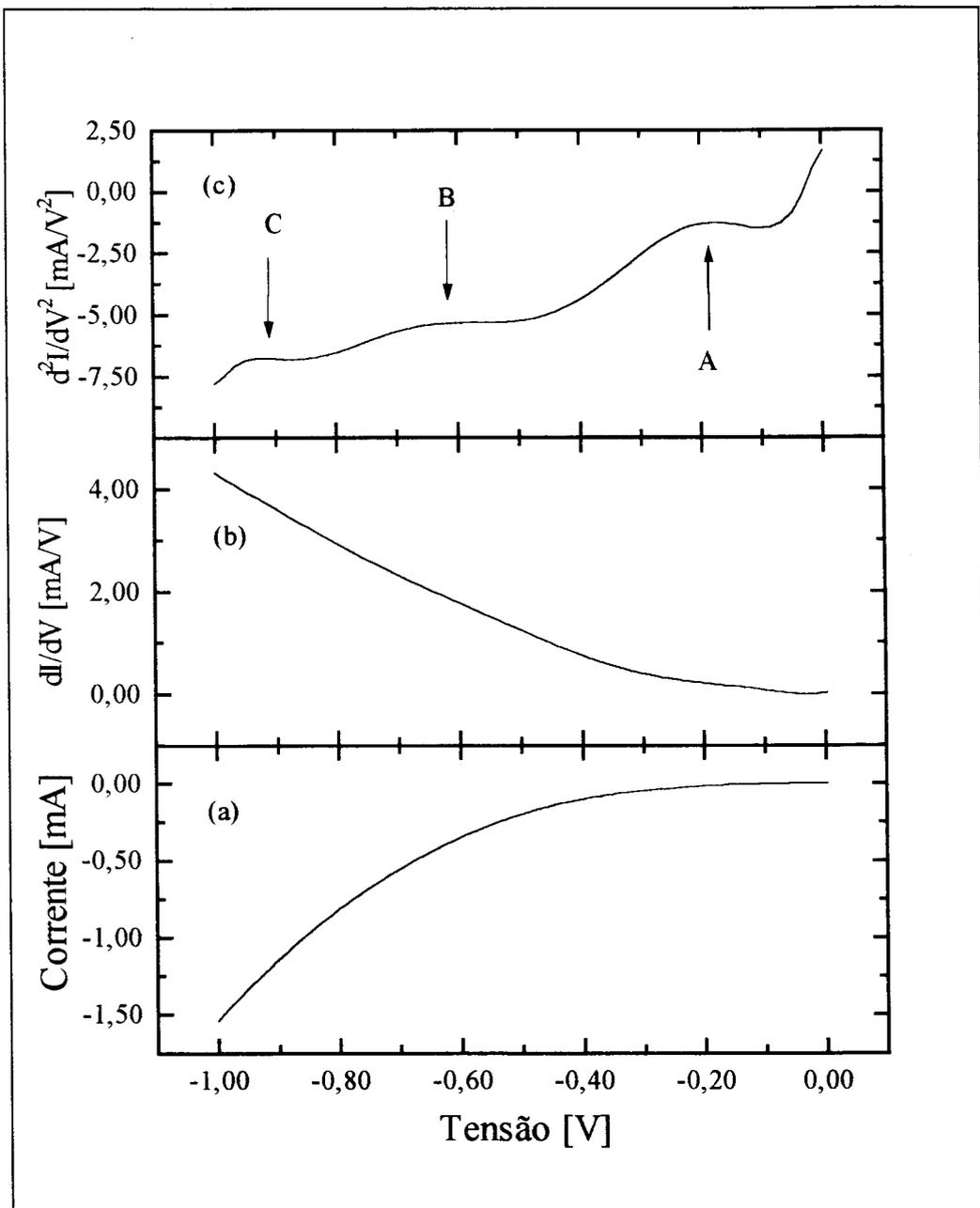


Figura 37. Curva I vs. V (a), dI/dV (b) e d^2I/dV^2 (c) com polarização negativa para amostra 204 a 4,2K . Derivadas feitas numericamente.

Na figura 38-a apresentamos o resultado dos cálculos da curva I vs. V para uma amostra de dupla barreira com estrutura semelhante a da amostra 204, a temperatura de 4,2K e energia de Fermi de 5meV , calculado como descrito na seção 2.2. Na figura 38-b, adicionamos a estes cálculos as correções devido as regiões de acumulação e de depleção a qual desloca de 16mV o primeiro pico de tunelamento ressonante. A posição do pico na corrente de tunelamento devido a ressonância com o primeira sub-banda é de 243mV , e a energia de ligação é de $E_1 = 117\text{meV}$. Existe ainda um segundo estado liga-

do no poço, $E_2 = 360\text{meV}$, entretanto este está muito próximo da borda do poço (tomamos a descontinuidade da banda de condução como sendo igual a 386meV , para um *Band-off-set* $\Delta E_c/\Delta E_g$ de $0,6$) e basta aplicarmos uma pequena tensão que logo ele transborda a barreira no lado do coletor (assim como ocorre com o estado E_5 na figura 2 da seção 2.2.2). Assim, é esperado apenas um pico na corrente de tunelamento com a sub-banda E_1 , confinada no poço.

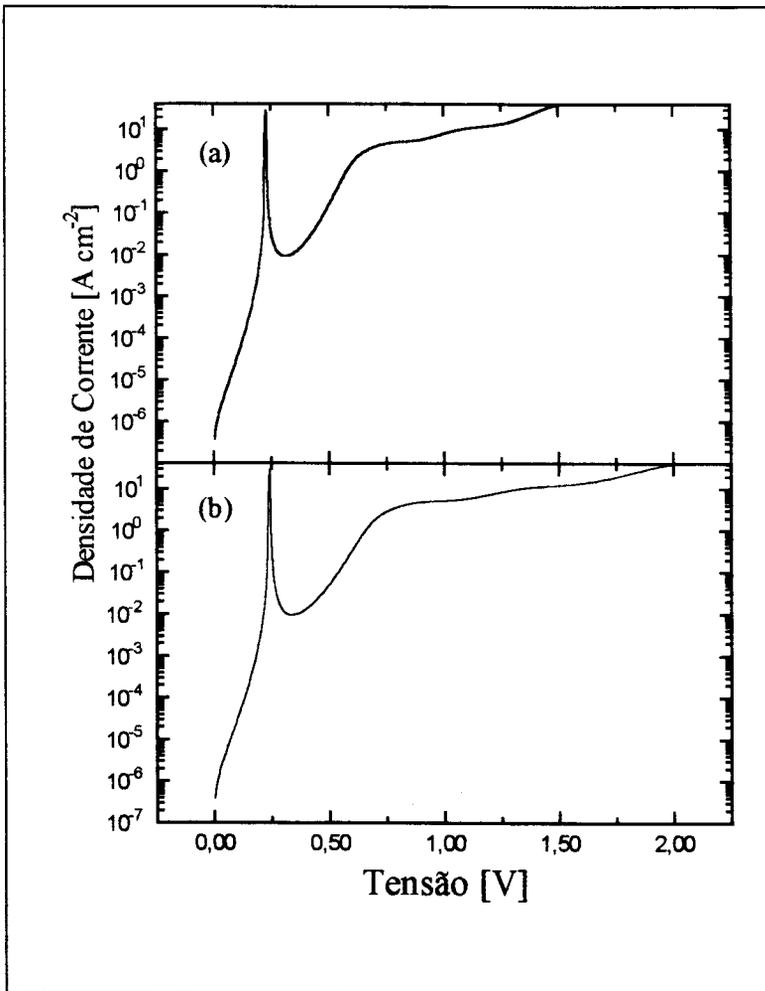


Figura 38. Curva característica I vs. V para uma estrutura de dupla barreira de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, uma descontinuidade da banda de condução de 386meV , com 80\AA de barreira e 50\AA de poço a $4,2\text{K}$, calculada a partir do modelo descrito na seção 2.2. Figura (a) sem correção das regiões de depleção e acumulação, e, figura (b) com estas correções.

Experimentalmente observamos três mínimos (e máximos) na segunda derivada da curva I vs. V com polarização positiva (e negativa). O primeiro mínimo (máximo) em aproximadamente 200mV observado na curva I vs. V para polarização positiva (e

$\sim 170\text{mV}$ com polarização negativa) corresponde a primeira sub-banda E_1 , como discutido anteriormente. Nas nossas curvas experimentais, figuras 36 e 37, as curvas I vs. V não apresentam um pico estreito correspondente a primeira sub-banda E_1 , como esperado no gráfico da figura 38. Isto se deve provavelmente a grande largura das duas barreiras de $\sim 80\text{\AA}$, onde os elétrons perdem a coerência devido a espalhamentos e conseqüentemente alargando a o pico na corrente de tunelamento.

As estruturas na curva calculada I vs. V da figura 38, observada acima da primeira ressonância, em $\sim 243\text{mV}$, correspondem a ressonâncias com estados virtuais no contínuo [33-34], os quais já foram também observados nas figuras 4 e 18 (acima das sub-bandas E_5 e HH_4), para tunelamento de elétrons e de buracos respectivamente. Na figura 39 apresentamos a primeira e a segunda derivada da curva I vs. V da curva da figura 38. Marcamos por α , β e γ as posições dos três primeiros mínimos na segunda derivada, os quais correspondem as tensões: 740mV ; 885mV ; e $1,35\text{V}$.

A ressonância α ($\sim 740\text{mV}$) deve portanto corresponder a segunda sub-banda E_2 já no contínuo quando ocorre o tunelamento. As ressonâncias β e γ também são devidas aos estados virtuais do contínuo [33-34].

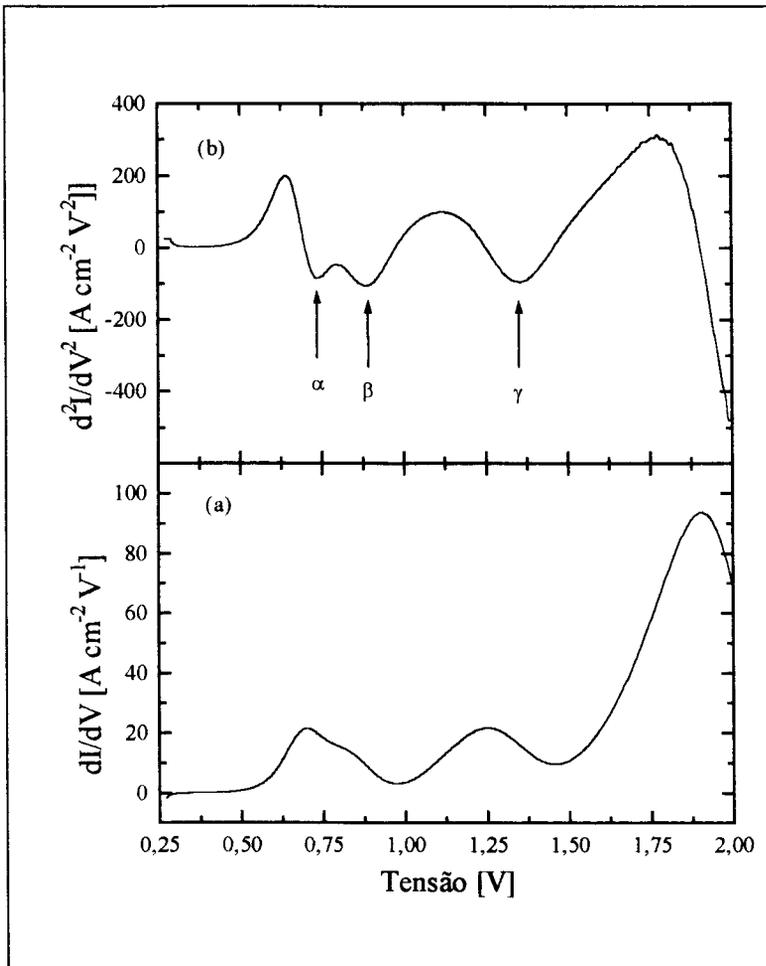


Figura 39. (a) primeira e (b) segunda derivada da curva I vs. V , figura 38. As letras gregas (α , β e γ) marcam as posições dos mínimos na segunda derivada.

Estes estados virtuais no contínuo se deslocam de forma diferente do que as sub-bandas do poço, quando aplicamos um campo elétrico externo, como é observado na figura 4 (estados acima do nível E_5). Desta forma é de se esperar que a ressonância β seja um estado virtual que tenha se deslocado para as proximidades da sub-banda E_2 . Devido a esta proximidade destes dois estados ocorre um alargamento na ressonância, como é observado em nossas medidas, nas ressonâncias marcadas como **B** nos gráficos das figuras 36 e 37, para polarização positiva e negativa respectivamente. As ressonâncias marcadas como **A** nos gráficos das figuras 36 e 37 corresponderiam portanto ao estado virtual γ ($\sim 1,35V$).

4.3.2. Tunelamento de Buracos

Na figura 40 é mostrada a curva I vs. V experimental da amostra 199, onde podemos observar uma região de resistência diferencial negativa em torno de $1,25V$. Resolvida em detalhe, esta região apresenta diversas descontinuidades. Estas descontinuidades são devidas a instabilidade no circuito elétrico durante a medida devido a baixa resistência de base utilizada, $R_b \approx 1,0\Omega$. Devido a este baixo valor da resistência de base, R_b , quando aumentamos a tensão sobre a amostra, a redistribuição da tensão entre a amostra e a resistência de base, produz estas instabilidades, uma vez que a variação na resistência dinâmica da amostra chega a ser 41 vezes maior que a resistência de base [35]. Na figura 41 mostramos a curva I vs. V da mesma amostra mas agora com $R_b \approx 10\Omega$. Como podemos notar as instabilidades na curva I vs. V desaparecem quando aumentamos o valor da resistência R_b .

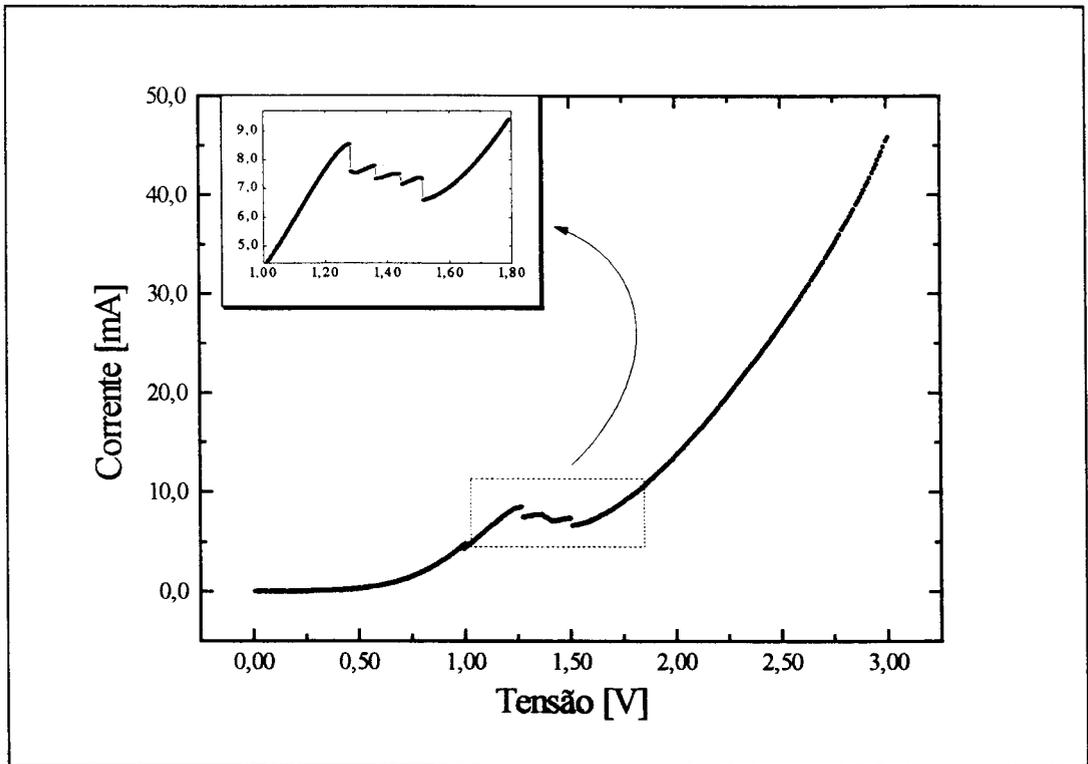


Figura 40. Curva I vs. V para amostra 199 a $4,2K$, com $R_b \approx 1,0\Omega$. No quadro (acima) detalhe das instabilidades ocorridas próximo ao pico de tunelamento.

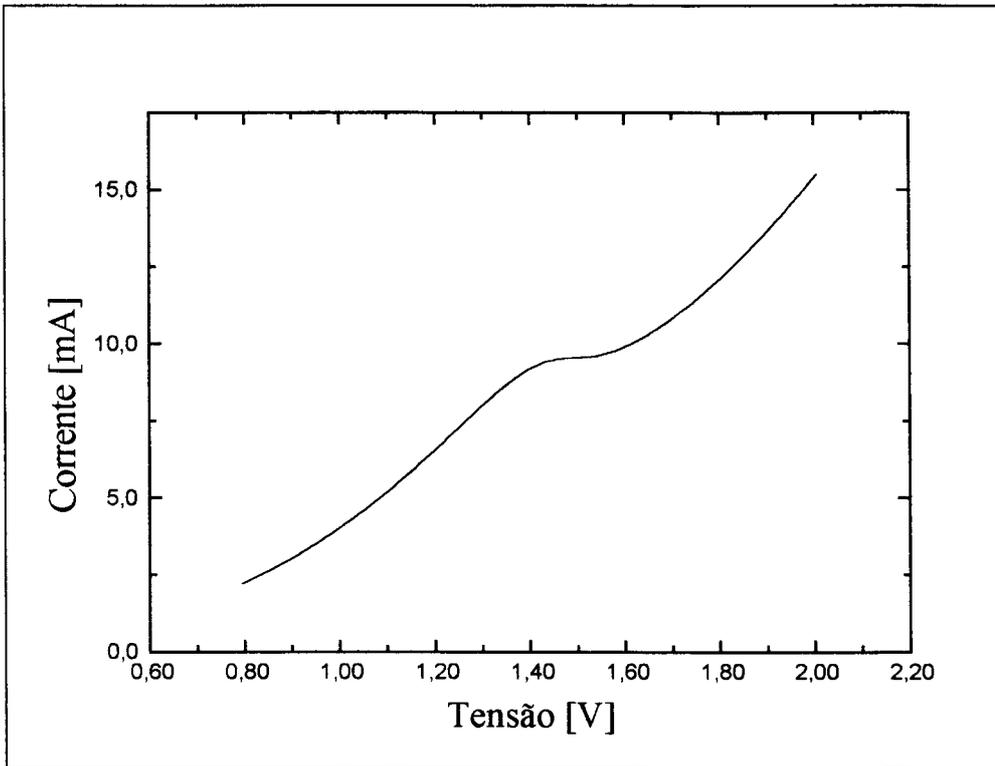


Figura 41. Curva I vs. V para amostra 199 a 4,2K, com $R_b \approx 10\Omega$.

Na figura 42 apresentamos o gráfico da variação da posição calculada dos picos de tunelamento com a tensão elétrica externa aplicada. Deste gráfico obtemos os respectivos valores da tensão para os picos na corrente de tunelamento apresentados na tabela 7. Na amostra 199 é esperado tunelamento ressonante apenas com as três primeiras sub-bandas: HH_1 ; LH_1 ; e HH_2 . Com as correções devido as quedas de tensão nas regiões de depleção e acumulação (tabela 7, terceira linha 3) vemos que a posição esperada para o primeiro pico na corrente de tunelamento é em 167meV , que está muito distante do valor de $1,2\text{V}$ observado na curva I vs. V da figura 40. Isto nos leva a crer que existe uma queda de tensão muito grande nos contatos elétricos, que não pode ser desconsiderada, o que teria trasladado o pico de tunelamento para altos valores de tensão. Transmissão com os demais estados não foram observados até uma tensão de 3V aplicada a amostra.

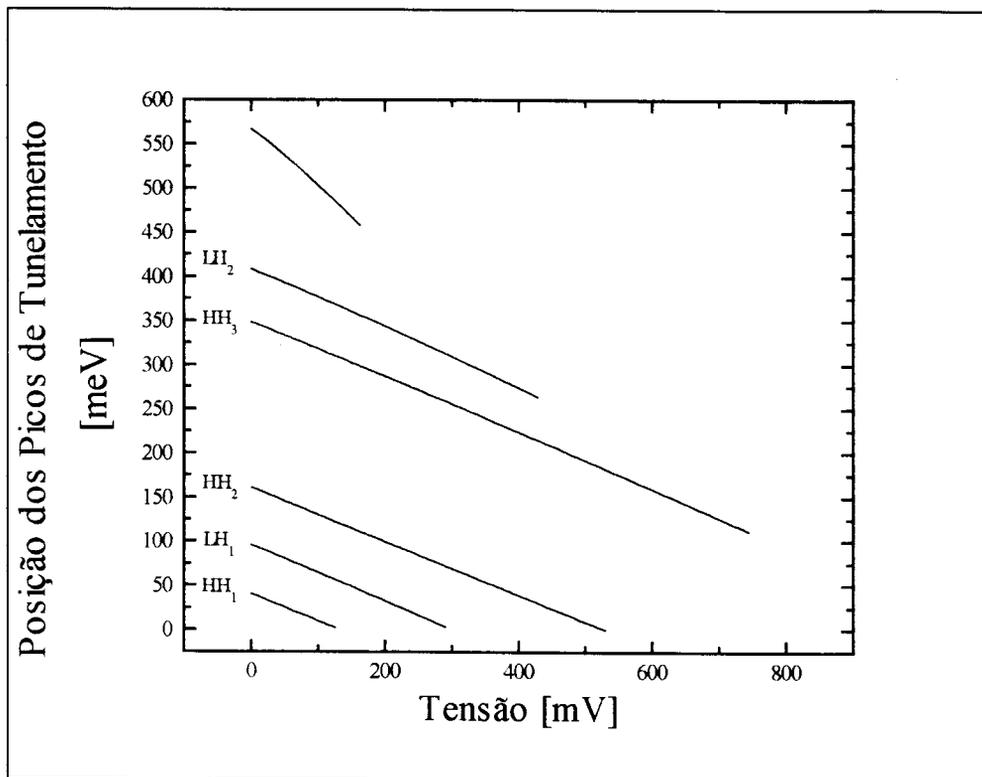


Figura 42. Posição dos picos de tunelamento ressonante em função da tensão externa aplicada, medidas em relação ao topo da banda de valência no emissor.

	HH ₁	HH ₂	HH ₃	LH ₁	LH ₂
E_l [meV]	41	161	349	96	409
V_n [mV]	101	493	–	265	–
$V_n + V_{ad}$ [mV]	167	2020	–	708	–

Tabela 7. Energia de ligação das sub-bandas no poço (E_l); posição dos picos na corrente de tunelamento através das sub-bandas no poço (V_n); e posição dos picos na corrente de tunelamento mais a correção devido a região de depleção e a região de acumulação (V_{ad}), para a amostra 199, tipo p.

4.3.3. Análise da Estrutura de Dupla Barreira por Fotorelectância

Para complementar a análise das medidas de tunelamento, foram feitas medidas de fotorelectância nas amostras de dupla barreira para determinar as posições das sub-bandas ligadas no poço e compara-las com os resultados experimentais obtidos por tunelamento e os calculados segundo os modelos por nós adotados. Para isto, as camadas superiores altamente dopadas foram cuidadosamente removidas por ataque químico seletivo para permitir a fotomodulação. Esta remoção foi realizada no CPqD - TELEBRAS. A amostra 204 (tipo n) foi, desta forma, processada, onde a espessura total da camada removida foi

de 3600\AA (medido com um perfilômetro *alpha step*) restando ainda 400\AA da camada com $N_D = 3 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ no topo da amostra. Amostras tipo **p** (196 - 200) apresentaram dificuldades no controle da espessura de ataque tendo por duas vezes ultrapassado a estrutura da dupla barreira, por isso não foi possível fazer as medidas de fotorelectância nestas amostras.

Os valores dos níveis de energia das sub-bandas calculados no centro da zona de Brillouin ($k = 0$), num poço quântico de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ com 50\AA de largura à temperatura de 300K estão apresentados na tabela 8. Estas energias das sub-bandas eletrônicas são medidas em relação ao fundo da banda de condução e as energias das sub-bandas de buraco pesado e buraco leve são medidas em relação ao topo da banda de valência. Na tabela 9 apresentamos as transições (ou pontos críticos) permitidos e não permitidos possíveis de serem observados por fotorelectância.

	EE ₁	EE ₂	HH ₁	HH ₂	HH ₃	LH ₁	LH ₂
meV	81	291	23	90	189	62	204

Tabela 8. Energias das sub-bandas de elétrons (EE) e buracos (HH e LH) calculados para um poço quântico simples de 50\AA com barreira de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, a temperatura de 300K , e $\Delta E_c/\Delta E_g = 0,6$.

	EHH(1,1)	ELH(1,1)	ELH(2,1)	ELH(2,2)	EHH(1,2)	EHH(2,2)
eV	1,529	1,568	1,778	1,920	1,596	1,806

Tabela 9. Energia de transições (ou pontos críticos) possíveis de serem observados por fotorelectância a 300K e $E_g(GaAs) = 1,425\text{eV}$.

Devido a compensação dos estados superficiais forma-se uma região de depleção cuja largura pode ser estimada pela expressão abaixo [32]:

$$t_s = \left[\frac{2 \epsilon_0 \epsilon_r}{q(N_D - N_A)} \right]^{1/2} \left(V_{BS} - \frac{K_B T}{q} \right)^{1/2} \quad (100)$$

onde ϵ_0 e ϵ_r são respectivamente a permissividade do vácuo e a constante dielétrica relativa. $(N_D - N_A)$ é a densidade efetiva da dopagem tipo **n** e V_{BS} é a posição do nível de Fermi na superfície da amostra medida em relação a banda de condução. Para $T = 300\text{K}$, $V_{BS} = 0,8\text{V}$ e levando em consideração as dopagem das camadas conforme apresentadas no quadro 02 temos que toda a camada com $N_D = 3 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ de 500\AA

de largura mais uma fração de 6\AA da próxima camada com $N_D = 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ sob a estrutura de dupla barreira formam a região de depleção. O campo elétrico médio nesta região de depleção é da ordem de 30kV/cm e a estrutura de dupla barreira fica localizada dentro desta região de depleção.

Um espectro típico de fotoreflectância, $\Delta R/R$, para a amostra 204 é apresentado na figura 43 onde podemos observar diversas estruturas.

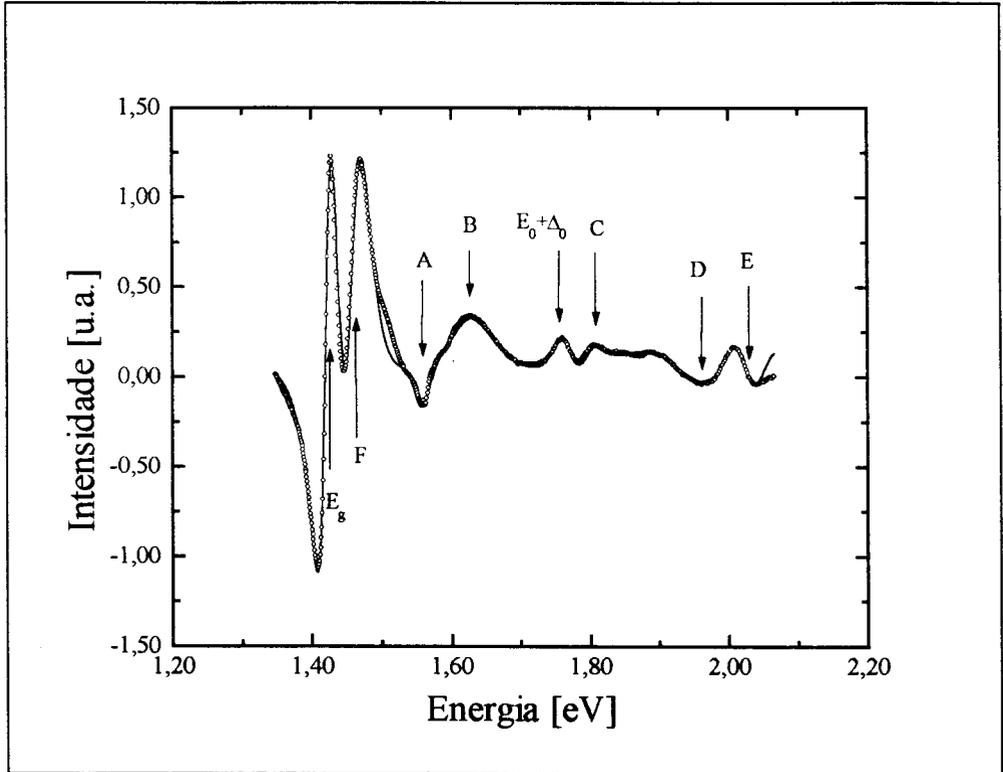


Figura 43. Medida de fotoreflectância na amostra tipo n , amostra 204.

A estruturas espectrais denotadas por A, B, C, D e E foram ajustadas com a forma funcional da terceira derivada de Aspnes [36-37] para um ponto crítico bi-dimensional (transição entre as sub-bandas de elétrons e de buracos ligadas no poço). Esta forma funcional de terceira derivada de Aspnes é válida na aproximação de campo elétrico fraco e é dada pela equação:

$$\Delta R/R = \Re \left[C_j \exp(i\theta_j) (\hbar\omega - E_j + i\Gamma_j)^{-n} \right] \quad (101)$$

onde C_j , θ_j e Γ_j são respectivamente a amplitude, o fator de fase e o parâmetro de alargamento associados ao ponto crítico E_j . O índice n se refere ao tipo do ponto crítico em questão: $n = 2$ para exciton; $n = 2,5$ para transição banda a banda tridimensional; e

$n = 3$ para transição banda a banda bi-dimensional. Os valores dos pontos críticos e dos correspondentes parâmetros de alargamento ajustados com a eq. 101 estão apresentados na tabela 10. A utilização de outras formas de linha não apresentaram mudanças significativas na posição dos pontos críticos encontrados.

	A	B	C	E_g	$E_0 + \Delta_0$
E_i [eV] (exp.)	1,557	1,618	1,798	1,426 †	1,762
Γ_i (exp.)	0,030	0,085	0,100	0,020	0,040

† ref. S. Adachi [38]

‡ ajuste forma do exciton

Tabela 10. Transições inter-subbandas calculados e medidos para a amostra de dupla barreira 204 (tipo n), $Al_{0,4}Ga_{0,6}As/GaAs$ com 50\AA de poço, e parâmetro de alargamento ajustados com a forma funcional da terceira derivada de Aspnes.

A região de mais baixa energia, também, foi ajustada com a eq. 101 para transição excitônica ($n = 2$), resultando num ponto crítico em $1,422\text{eV}$, o que está muito próximo ao *gap* E_g do $GaAs$ a 300K [38]. A transição banda a banda ($E_0 + \Delta_0$) foi ajustada por uma forma funcional de terceira derivada de Aspnes resultando num ponto crítico em $1,762\text{eV}$ o que corresponde a uma transição entre a banda de condução e a banda de valência *spin-orbita*. A estrutura F da figura 43 pode ser ajustada razoavelmente pela forma funcional dada pela eq. 101 o que resulta num ponto crítico em $1,458\text{eV}$, ou seja 36meV acima do *gap* do $GaAs$. Entretanto não é possível identificar nenhuma transição correspondente a esta energia no poço da estrutura de dupla barreira. Na tentativa de identificar esta estrutura F à associamos a uma oscilação de Franz Keldysh (FKO) fortemente amortecida devida a densidade relativamente elevada de defeitos $3 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ correspondente à impurezas intencionalmente dopadas (as duas camadas de 500\AA adjacentes a dupla barreira) pois exatamente esta é a região de depleção que apresenta um campo elétrico e poderia dar origem a uma estrutura de oscilações de Frans-Keldysh (FKO). Uma estrutura típica de FKO, na aproximação de campo intermediário, o sinal de $\Delta R/R$ é proporcional ao produto de funções de Airy e suas derivadas, os quais tem a forma assintótica dada por [37]:

$$\Delta R / R \propto \cos \left\{ \frac{2}{3} \left[\left(\hbar\omega - E_s \right) / \hbar\Omega \right]^{\frac{3}{2}} + \pi(d-1)/4 \right\} \quad (102)$$

cujos extremos ficam localizados em:

$$(\hbar\omega)_j = \hbar\Omega(F_j) + E_g \quad (103)$$

onde o parâmetro F_j é dado por:

$$F_j = \left[\frac{3}{2} \pi \left(j - \frac{1}{2} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \quad (104)$$

e

$$\hbar\Omega = \left(e^2 E_s^2 \hbar^2 / 8\mu \right)^{\frac{1}{3}} \quad (105)$$

é a energia eletro-óptica característica associada ao ponto crítico E_g , E_s é o campo elétrico superficial e μ é a massa reduzida inter-banda. Assim, existe uma relação linear entre os extremos de FKO e o parâmetro F_j cujo coeficiente angular é a energia eletro-óptica e o coeficiente linear é o *gap* do material. A análise dos extremos da estrutura **F** (apenas os dois visíveis: **1,4465eV** e **1,4685eV**) como FKO segundo a eq. 103 mostra a existência de um campo elétrico superficial de **30KV/cm** o qual pode ser associado à região de depleção superficial da camada de *GaAs* acima da estrutura de dupla barreira e um ponto crítico em **1,426eV** o que está bem próximo do *gap* do *GaAs*.

Comparando, os dados da tabela 9 com aqueles da tabela 10 podemos fazer algumas associações tais como: a estrutura **A** com a transição **EHH(1,1)**, a estrutura **B** com a transição **EHH(1,2)** e a estrutura **C** com a transição **ELH(2,1)**. Estas comparações são apenas semi-quantitativas uma vez que não foi feito nenhum ajuste detalhado dos parâmetros do modelo utilizado.

Capítulo 5.

CONCLUSÕES

Apresentamos, neste trabalho, duas das montagens experimentais as quais foram utilizadas para o estudo de tunelamento de elétrons e de buracos em amostra de *GaAs* com dopagem delta e dupla barreira de *GaAs/Al_xGa_{1-x}As*.

O primeiro sistema, nos permitiu fazer as medidas da corrente de tunelamento nas amostras de δ -doping, bem como as suas derivadas analógicas. Entretanto, o sistema Circuito Ponte apresentou limitações na corrente máxima fornecida de **10mA** devido aos amplificadores operacionais LF356 utilizados.

Com o segundo sistema, a limitação de corrente é de **1A** e com uma resolução melhor que **1mA**, o que nos permitiu obter uma densidade de corrente da ordem de **1KA/cm²** e ainda foi possível obter numericamente os espectros **dI/dV vs. V** e **d²I/dV² vs. V** nas amostras de dupla barreira.

Para análise dos resultados obtidos, apresentamos os cálculos do espectro das probabilidades de transmissão e reflexão de elétrons e buracos através de uma heteroestrutura de *GaAs/Al_xGa_{1-x}As* genérica, baseados nos trabalhos de Vassel [11], Altarelli [16] (tunelamento de elétrons) e Chao [15] (tunelamento de buracos). Efeitos de acúmulo de cargas nas sub-bandas dentro do poço, bem como efeitos de espalhamento, não são considerados nestes modelos teóricos.

Para tunelamento de elétrons foi feito o cálculo da curva característica **I vs. V**. Foi também discutido outro método para a determinação das posições dos picos nas curvas **I vs. V** baseados no comportamento das posições dos picos nos espectros de probabilidade de transmissão em função do campo elétrico externo aplicado a heteroestrutura. Este método foi utilizado para determinar as posições dos picos na corrente de tunelamento de buracos para as amostras de dupla barreira de *GaAs/AlAs*. O programa computacional utilizado para o cálculo de transmissão de buracos através da dupla barreira também nos permite determinar as curvas de dispersão das sub-bandas de buraco pesado e de buraco leve no poço.

Medidas da corrente de tunelamento em uma amostra de δ -doping com o sistema de medidas Circuito Ponte, apresentaram quatro ressonâncias bem resolvidas na segunda derivada da curva I vs. V . Estes picos foram associados a tunelamento ressonante às sub-bandas no potencial δ acima do nível de Fermi: E_7 , E_8 , Devido a alta concentração de doadores de Si na região de dopagem planar da amostra 76, as sub-bandas E_0 , ..., E_6 estão populadas [30].

Medidas da corrente de tunelamento nas amostras de dupla barreira 204 (tipo n) e 199 (tipo p) foram feitas com o sistema de medidas Fonte de Corrente e Voltímetro.

Na amostra 204 (80\AA de barreira e 50\AA de poço), a segunda derivada da curva I vs. V apresentou três estruturas. Às duas primeiras estruturas associamos ao tunelamento ressonante à duas sub-bandas de elétron no poço: E_1 ; E_2 , sendo a última já no contínuo. À terceira estrutura associamos ao tunelamento para de um estado virtual do contínuo [33].

Medidas da corrente de tunelamento na amostra 199 (tipo p), mostraram uma região de resistência diferencial negativa que apresentou uma grande instabilidade na medida da curva I vs. V . Esta instabilidade desaparece quando aumentamos o valor da resistência de base, R_b . Esta ressonância se deve ao tunelamento ressonante com a primeira sub-banda no poço, HH_1 . As demais sub-bandas não puderam ser observadas devido a grande resistência de contato apresentada nestas amostras. Devido a esta resistência de contato, acreditamos que os picos de tunelamento foram deslocados para regiões de alta tensão externa aplicada.

Medidas de fotorefletância na amostra de dupla barreira (amostra 204) mostraram uma estrutura de sub-bandas coerente com um poço de potencial de 50\AA de largura e altura da barreira condizente com $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ com *band off set* $\Delta E_c/\Delta E_g = 0,6$.

Apêndice A.

Matriz Transferência para Elétron

Suponhamos que um elétron incida em uma barreira como ilustrado na figura 44, com energia E maior que a altura da barreira U_0 . Utilizando ondas planas como soluções para a equação da função envelope, eq. 2, procuramos então a matriz de transferência que liga a função de onda da região 1 com a função de onda da região 3 através da barreira, região 2.

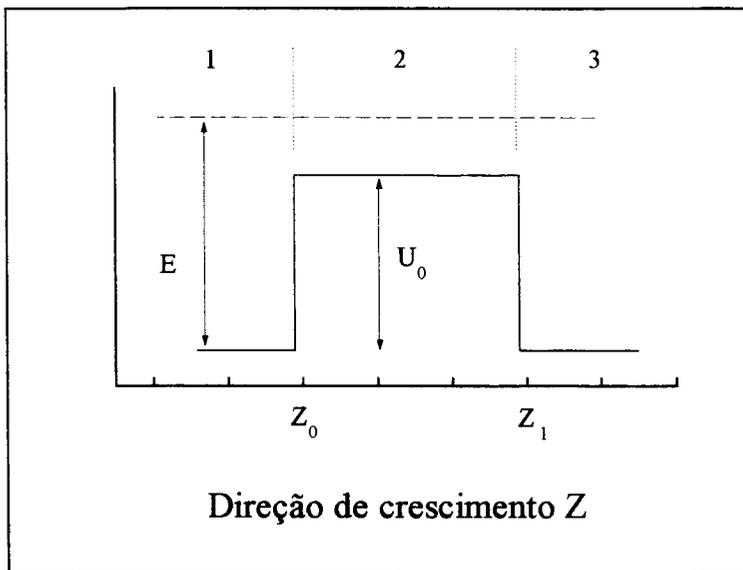


Figura 44. Barreira Simples em tunelamento de elétrons

As funções de onda nas respectivas regiões são portanto:

$$\begin{aligned} F_1(z) & \quad , z < z_0; \\ F_2(z) & = A e^{ik(z-z_0)} + B e^{-ik(z-z_0)} \quad , z_0 \leq z \leq z_1; \\ F_3(z) & \quad , z > z_1. \end{aligned} \tag{A.1}$$

onde k é o vetor de onda dado pela eq. 6. Aplicando as condições de contorno, continuidade de $F(z)$ e de $F(z)/\gamma(z)$, na interface $z = z_0$ temos

$$\begin{cases} F_1(z_0^-) = A + B \\ \frac{F_1'(z_0^-)}{\gamma(z_0^-)} = \frac{i\mathbf{k}}{\gamma(z_0^+)}(A - B) \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

onde os índices $-$ e $+$ sobre z_0 indicam que estas funções são avaliadas a direita e a esquerda do ponto z_0 respectivamente. Na interface $z = z_1$ teremos

$$\begin{cases} F_3(z_1^+) = A e^{i\mathbf{k}(z_1-z_0)} + B e^{-i\mathbf{k}(z_1-z_0)} \\ \frac{F_3'(z_1^+)}{\gamma(z_1^+)} = \frac{i\mathbf{k}}{\gamma(z_1^-)} [A e^{i\mathbf{k}(z_1-z_0)} - B e^{-i\mathbf{k}(z_1-z_0)}] \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Resolvendo a eq. A.2 para A e B , e em seguida substituindo na eq. A.3, encontramos

$$F_3(z_1) = F_1(z_0) \left[\frac{e^{i\mathbf{k}(z_1-z_0)} + e^{-i\mathbf{k}(z_1-z_0)}}{2} \right] + \frac{F_1'(z_0)}{\gamma(z_0^-)} \frac{\gamma(z_0^+)}{\mathbf{k}} \left[\frac{e^{i\mathbf{k}(z_1-z_0)} - e^{-i\mathbf{k}(z_1-z_0)}}{2i} \right] \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{F_3'(z_1)}{\gamma(z_1^+)} = F_1(z_0) \frac{\mathbf{k}}{\gamma(z_1^-)} \left[\frac{e^{i\mathbf{k}(z_1-z_0)} - e^{-i\mathbf{k}(z_1-z_0)}}{2i} \right] + \frac{F_1'(z_0)}{\gamma(z_0^-)} \frac{\gamma(z_0^+)}{\gamma(z_1^-)} \left[\frac{e^{i\mathbf{k}(z_1-z_0)} + e^{-i\mathbf{k}(z_1-z_0)}}{2} \right] \quad (\text{A.1})$$

Observe que $\gamma(z_1^-) = \gamma(z_0^+)$, uma vez que z_1^- e z_0^+ estão ambos sobre a região da barreira, região 2. Reescrevemos então as equações acima na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} F_3(z_1) \\ F_3'(z_1) \\ \gamma(z_1^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] & \frac{\gamma(z_0^+)}{\mathbf{k}} \text{sen}[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] \\ -\frac{\mathbf{k}}{\gamma(z_1^-)} \text{sen}[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] & \cos[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1(z_0) \\ F_1'(z_0) \\ \gamma(z_0^-) \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Compararmos esta equação com a eq. 11 vemos que a matriz de transferência para a barreira, com $E > U_0$, é dada por

$$S(z_0, z_1) = \begin{bmatrix} \cos[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] & \frac{\gamma}{\mathbf{k}} \text{sen}[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] \\ -\frac{\mathbf{k}}{\gamma} \text{sen}[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] & \cos[\mathbf{k}(z_1 - z_0)] \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Como a matriz de transferência acima é computada na região da barreira ou na região do poço fizemos $\gamma(z_0^+) = \gamma(z_1^-) = \gamma$, onde γ é igual a 1 na região do poço, e igual a razão entre as massas do elétron na região da barreira e na região do poço, para a região da barreira, eq. 3.

Apêndice B.

Operador Densidade de Corrente

Para encontrarmos uma definição para o operador densidade de corrente partimos, inicialmente, da definição da densidade de probabilidade, eq. 32,

$$\rho(\bar{r}, t) \approx F_j^* F_j \quad (\text{B.1})$$

tomamos agora a derivada parcial no tempo da equação acima

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (F_j^* F_j) = \frac{\partial F_j^*}{\partial t} F_j + F_j^* \frac{\partial F_j}{\partial t} \quad (\text{B.2})$$

a seguir aplicamos esta equação a equação da massa efetiva eq. 29 e a seu complexo conjugado, multiplicadas por F_j^* e F_j respectivamente:

$$\begin{aligned} -K_{jj'}^{\alpha\beta} F_{j'} F_j^* + V_0 F_j F_j^* &= i\hbar \frac{\partial F_j}{\partial t} F_j^* \\ -K_{jj'}^{\alpha\beta*} F_{j'}^* F_j + V_0 F_j^* F_j &= -i\hbar \frac{\partial F_j^*}{\partial t} F_j \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

onde usamos a definição para o tensor energia cinética

$$K_{jj'}^{\alpha\beta} = D_{jj'}^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} = D_{jj'}^{\alpha\beta} \nabla^2 \quad (\text{B.4})$$

Subtraindo uma equação pela outra na eq. B.3 e reagrupando os termos, temos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left\{ K_{jj'}^{\alpha\beta*} F_{j'}^* F_j - K_{jj'}^{\alpha\beta} F_{j'} F_j^* \right\} \quad (\text{B.5})$$

que é a equação da continuidade. Fazemos uso, agora, das propriedades de simetria do tensor massa efetiva (\Rightarrow tensor energia cinética):

$$\begin{aligned} D_{j'j}^{\alpha\beta} = D_{jj'}^{\beta\alpha} &\Rightarrow K_{j'j}^{\alpha\beta} = K_{jj'}^{\beta\alpha} \\ D_{j'j}^{\alpha\beta*} = D_{jj'}^{\beta\alpha} &\Rightarrow K_{j'j}^{\alpha\beta} = K_{jj'}^{\beta\alpha}, \text{ já que } [p_\alpha, p_\beta] = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

uma vez que $[p_\alpha, p_\beta] = 0$ e que $[p_\alpha, p_\beta]^* \equiv p_\alpha p_\beta$, e

$$(\nabla^2 F_j^*) F_j = \nabla(F_j \nabla F_j^*) - \nabla F_j \cdot \nabla F_j^* \quad (\text{B.7})$$

Desta forma teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{1}{\hbar} \left\{ D_{j'j}^{\beta\alpha} [\nabla(F_j \nabla F_j^*) - \nabla F_j \cdot \nabla F_j^*] - D_{j'j}^{\alpha\beta} [\nabla(F_j^* \nabla F_j) - \nabla F_j^* \cdot \nabla F_j] \right\} \\ &= -\frac{1}{\hbar} \left\{ D_{j'j}^{\beta\alpha} \nabla(F_j \nabla F_j^*) - D_{j'j}^{\alpha\beta} \nabla(F_j^* \nabla F_j) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Utilizando as propriedades do tensor massa efetiva, eq. B.6, e a definição para o vetor de onda $\mathbf{k} = \imath \nabla$ na equação acima

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{2\hbar} \nabla \left\{ (D_{j'j}^{\alpha\beta} + D_{j'j}^{\beta\alpha}) F_j \bar{\mathbf{k}}^* F_j^* + (D_{j'j}^{\alpha\beta} + D_{j'j}^{\beta\alpha}) F_j^* \bar{\mathbf{k}} F_j \right\} \quad (\text{B.9})$$

onde observamos que o primeiro termo é o complexo conjugado do segundo, e portanto

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \nabla \Re \left\{ F_j^* (D_{j'j}^{\alpha\beta} + D_{j'j}^{\beta\alpha}) \bar{\mathbf{k}} F_j \right\} \quad \text{ou} \quad (\text{B.10})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \Re \left\{ F_j^* (D_{j'j}^{\alpha\beta} + D_{j'j}^{\beta\alpha}) \mathbf{k}_\beta F_j \right\}$$

Comparando esta equação com a equação da continuidade, eq. 26, encontramos a definição para a densidade de corrente de probabilidade:

$$\mathbf{j}_\alpha = -\frac{1}{\hbar} \Re \left\{ F_j^* (D_{j'j}^{\alpha\beta} + D_{j'j}^{\beta\alpha}) \mathbf{k}_\beta F_j \right\} \quad (\text{B.2})$$

como está descrito nas equações 34 e 35.

Apêndice C.

Autovalores e Autovetores do Hamiltoniano de Luttinger

Os autovalores do Hamiltoniano de Luttinger, eq. 38, para um semicondutor *bulk*, são encontrados resolvendo a equação da massa efetiva para a banda de valência,

$$[\mathbf{H}_0 + \mathbf{U}_0]F(\mathbf{z}) = E F(\mathbf{z}) \quad , \text{ com } F(\mathbf{z}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{z}) \quad (\text{C.1})$$

$$\therefore [\mathbf{H}_0 - I(E - U_0)]f(\mathbf{z}) = 0$$

onde E é a autovalor de $F(\mathbf{z})$ (ou $f(\mathbf{z})$) sobre a aplicação do operador $\mathbf{H}_0 + \mathbf{U}_0$, I é a matriz unitária e \mathbf{U}_0 um potencial constante. Para que $f(\mathbf{z})$ possua soluções diferentes da solução trivial (vetor nulo), devemos impor que a equação secular (ou equação característica de $\mathbf{H}_0 + \mathbf{U}_0$) seja nula, ou seja

$$\det[\mathbf{H}_0 - I(E - U_0)] = 0 \quad (\text{C.2})$$

Utilizando o Hamiltoniano de Luttinger dado pela eq. 38, os autovalores de E podem se avaliados resolvendo o polinômio de ordem 4 em E dado pelo determinante abaixo,

$$\begin{vmatrix} P + E - U_0 + Q & L & M & 0 \\ L^* & P + E - U_0 - Q & 0 & M \\ M^* & 0 & P + E - U_0 - Q & -L \\ 0 & M^* & -L^* & P + E - U_0 - Q \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{C.3})$$

cujo as raízes são

$$E_{\pm} = U_0 - P \pm \sqrt{LL^* + MM^* + Q^2} \quad (\text{C.4})$$

onde o sinal mais se refere a banda de buraco pesado e o sinal menos a banda de buraco leve. Como vemos, existem dois autovalores para \mathbf{E} os quais são duplamente degenerados (lembre-se que o polinômio originado do determinante dado pela eq. C.3 é de ordem quatro em \mathbf{E}). Isto reflete a invariância sobre as operações de inversão e reversão temporal do Hamiltoniano de Luttinger.

Para encontrarmos os autovetores do Hamiltoniano de Luttinger resolvemos agora o sistema de equações C.1, que, utilizando o Hamiltoniano de Luttinger pode ser escrito como

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_+ & L & M & 0 \\ L^* & \varepsilon_- & 0 & M \\ M^* & 0 & \varepsilon_- & -L \\ 0 & M^* & -L^* & \varepsilon_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

onde $\varepsilon_{\pm} = \mathbf{P} - (\mathbf{E} - \mathbf{V}_0) \pm \mathbf{Q}$. Resolvendo o sistema acima para $f_1 = s$ e $f_2 = t$, onde $\{s, t\} \in \mathbf{C}$ (conjunto de números complexos), obtemos como solução

$$\mathbf{f} = \frac{s}{M} \begin{pmatrix} M \\ 0 \\ -\varepsilon_+ \\ -L^* \end{pmatrix} + \frac{t}{M} \begin{pmatrix} 0 \\ M \\ -L \\ -\varepsilon_- \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

onde, tanto o primeiro como o segundo vetor na eq. C.6 são soluções da eq. C.1 para todos $\{s, t\} \in \mathbf{C}$. Por conveniência escolhemos $s = -M$ e $t = M$, desta forma as nossas duas primeiras soluções são:

$$\mathbf{f}_a = \begin{pmatrix} -M \\ 0 \\ \varepsilon_+ \\ L^* \end{pmatrix}, \mathbf{f}_b = \begin{pmatrix} 0 \\ M \\ -L \\ -\varepsilon_- \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

Como anteriormente, façamos agora $f_3 = \mathbf{u}$ e $f_4 = \mathbf{v}$ onde, novamente $\{\mathbf{u}, \mathbf{v}\} \in \mathbf{C}$. Encontramos então

$$\mathbf{f} = \frac{u}{M^*} \begin{pmatrix} \varepsilon_- \\ L^* \\ M^* \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{t}{M^*} \begin{pmatrix} L \\ -\varepsilon_+ \\ 0 \\ M^* \end{pmatrix} \quad (\text{C.8})$$

Façamos agora $\mathbf{u} = M^*$ e $\mathbf{v} = -M^*$, e como antes, nossas duas últimas soluções são:

$$\mathbf{f}_C = \begin{pmatrix} -\varepsilon_- \\ L^* \\ M^* \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{f}_D = \begin{pmatrix} -L \\ \varepsilon_+ \\ 0 \\ -M^* \end{pmatrix} \quad (\text{C.9})$$

As soluções \mathbf{f}_A , \mathbf{f}_B , \mathbf{f}_C e \mathbf{f}_D formam um conjunto completo de autovetores do Hamiltoniano de Luttinger.

Observe que qualquer uma das soluções \mathbf{f}_A , \mathbf{f}_B , \mathbf{f}_C ou \mathbf{f}_D satisfazem o Hamiltoniano de Luttinger independentemente do autovalor E_{\pm} , eq. C.4. Portanto qualquer escolha de duas destas soluções podem ser tratadas como sendo funções de buraco pesado ou de buraco leve com os respectivos estados de *spin*.

O que diferencia os estados de buraco leve ou de buraco pesado são as raízes de k_z resolvidas da relação de dispersão, eq. C.4.

Bibliografia

- [1] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
- [2] P. A. Lebowitz and R. Tsu, *J. Appl. Phys.* **41**, 2664 (1970).
- [3] R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **19**, 246 (1971).
- [4] R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
- [5] H. Ohnishi, T. Inata, S. Muto, N. Yokoyama, and A. Shibatomi, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1248 (1986).
- [6] W. W. Lui and M. Fukuma, *J. Appl. Phys.* **60**, 1555 (1986).
- [7] U. Ekenberg, *Phys. Rev. B* **40**, 7714 (1989).
- [8] L. A. Cury and J. C. Portal, *Phys. Rev. B* **44**, 6224 (1991).
- [9] M. A. Alam, R. A. Morrissey, and A. N. Khondker, *J. Appl. Phys.* **71**, 3077 (1992).
- [10] Y. Ando and T. Itoh, *J. Appl. Phys.* **61**, 1497 (1987).
- [11] M. O. Vassel, Johnson Lee, and H. F. Lockwood, *J. Appl. Phys.* **54**, 5206 (1983).
- [12] Perng-fei Yuh and K. L. Wang, *Phys. Rev. B* **38**, 13307 (1988).
- [13] R. Wessel and Altarelli, *Phys. Rev. B* **39**, 12802 (1989).
- [14] S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **43**, 10379 (1989).
- [15] C. Yi-Ping Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **43**, 7027 (1991).
- [16] L. C. Andreani, A. Pasquerello, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **36**, 5887 (1987).
- [17] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [18] J. Smoliner and E. Gornik, *Appl. Phys. Lett.* **52**, 2136 (1988).
- [19] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [20] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1981), p. 366.
- [21] C. V. Hoof, tese de doutorado, Universidade Católica de Leuven, cidade de Leuven, Bélgica (abril de 1992).
- [22] I. Hase, H. Kawai, K. Kaneko, and N. Watanabe, *J. Appl. Phys.* **59**, 3792 (1986).
- [23] J. G. Adler and J. E. Jackson, *Rev. Sci. Instrum.* **37**, 1049 (1966).
- [24] S. Colley and P. Hansma, *Rev. Sci. Instrum.* **48**, 1192 (1977).
- [25] M. V. Moody, J. L. Paterson, and R. L. Ciali, *Rev. Sci. Instrum.* **50**, 903 (1979).
- [26] C. Kidner, I. Mehdi, J. R. East and G. I. Haddad, *Solid State Eletr.* **34**, 149 (1991).
- [27] R. Christanell and J. Smoliner, *Rev. Sci. Instrum.* **59**, 1290 (1988).
- [28] J. Smoliner, M. Hauser, and E. Gornik, *Appl. Phys. Lett.* **52**, 33 (1988).
- [29] T. Wei and S. Stapleton, *J. Appl. Phys.* **73**, 829 (1993).

- [30] E. F. Schubert, A. Fischer and K. Ploog, IEEE Transactions on Electron Devices **ED-33**, 625 (1986).
- [31] M. Zachau, F. Koch, K. Ploog, P. Roentgen and H. Beneking, Solid State Commun. **59**, 591 (1986).
- [32] T. R. Lepkowski, R. Y. DeJule, M. H. Kim, and G. E. Stillman, J. Appl. Phys. **61**, 4808 (1987).
- [33] T. W. Hickmott and P. M. Solomon, Appl. Phys. Lett. **44**, 90 (1984).
- [34] T. W. Hickmott, Phys. Rev. B **40**, 11683 (1989).
- [35] V. A. Chitta, tese de doutorado , MPI, França (1992).
- [36] D. E. Aspnes, Surface Science **31**, 419 (1973).
- [37] M. Sydor, J. Angelo, and J. J. Wilson, Phys. Rev. B **40**, 8473 (1989).
- [38] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).