"PROPRIEDADES ÓPTICAS DE CAMADAS EPITAXIAIS DE SEMICONDUTORES III-V COM GÁS BI-DIMENSIONAL DE ELÉTRONS"

AYRTON ANDRÉ BERNUSSI

ORIENTADOR

PROF. DR. PAULO MOTISUKE

Este exemplar corresponde a redação final da tese defendida pelo aluno Ayrton A. Bernussi e aprovada pela comissão julgadora. 03 de julho de 1990

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

Campinas - S.P.
1990

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

CLASSIF. .....

AUTOR .....

V. ..... EX. .....

TOMBO BC/ 1786

I. FÍSICA - UNICAMP

n.º TD

n.º B

n.º tombo TD1786

361114 3

A minha esposa Sonia,

ao meu filho Alexandre,

e aos meus Pais

José e Lolita.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a TELEBRÁS, FAPESP, CNpQ e FINEP pelo suporte financeiro. Agradeço a todas as pessoas que, de uma forma ou de outra, participaram deste trabalho: ao Prof. Paulo Motisuke, pela orientação e dedicação; ao Prof. Pierre Basmaji, pela preparação das amostras; ao Prof. José A. Brum, pelas frutíferas discussões e ajuda nos cálculos computacionais; aos amigos Fernando Iikawa e Maria José S.P. Brasil, pela valiosa ajuda e ao Prof. Carlos Vásquez, pela ajuda inicial na técnica de fotorefletância.

A todos,

Muito Obrigado.

Ayrton

ABSTRACT

In this work we present a detailed study of photoreflectance measurements on silicon δ-doped GaAs samples. These samples were grown by molecular-beam epitaxy technique, with different silicon concentration and cap layer thickness. The features, observed in the photoreflectance spectra above the GaAs fundamental energy gap, are attributed to transitions involving 3D continuous states at the valence band and 2D quantum-confined states at the conduction band. We performed a systematic self-consistent calculation, in the Hartree approximation of the subband energies and its occupancies, in the delta potential well, as a function of silicon concentration and residual acceptor concentration, spreading of dopants and temperature. The observed inter-band transitions, in the samples grown with different dopant concentration, are in qualitative agreement with the calculated ones. The temperature has a strong effect in the δ-doping system, modifying the electrostatic confinement potential well and, consequently, the subband energies. Photoreflectance spectra taken at increasing temperatures show an abrupt change in the position of the above band gap features. This can be well explained by a theoretical model, being associated with the shift of the absorption main peak to the lower subband, due to the crossing of the Fermi level. The photoreflectance spectra of several samples presented oscillatory structures in the above band gap region, due to the Franz-Keldysh effect. The period of these oscillations depends strongly on the cap layer thickness, where the built in

electric field depends on the conditions of the samples surface and on the δ-doping potential well. The temperature dependence of these oscillations, in some cases, are very different from that observed in bulk of GaAs, suggesting a possible relation between the observed Franz-Keldysh oscillations and the δ-doping structure. We also investigated the photoreflectance spectra of a periodically δ-doping GaAs sample. Differentely, with the single δ-doping, the observed transitions above the gap involve continuos states in the conduction band and quantum-confined states in the valence band.

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo detalhado, por fotorefletância, de camadas de GaAs com dopagem planar de silício. As amostras foram crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular com diferentes concentrações de Si e diferentes espessuras da camada de topo. As estruturas observadas nos espectros de fotorefletância, que estão localizadas acima do "gap" fundamental do GaAs, foram atribuídas às transições envolvendo estados contínuos 3D na banda-de-valência e estados quânticos confinados 2D na banda-de-condução. Realizamos um cálculo sistemático e auto-consistente , na aproximação de Hartree, para verificar os efeitos das concentrações de Si dopante, das impurezas residuais de aceitadores, da difusão de doadores e da temperatura na energia e na ocupação de elétrons nas diferentes sub-bandas. As energias das transições inter-bandas observadas nos espectros de fotorefletância, para amostras de GaAs crescidas com diferentes concentrações de Si, mostraram uma concordância qualitativa com as energias calculadas. A temperatura exerce uma forte influência no sistema "δ-doping", modificando o potencial de confinamento eletrostático e, consequentemente, as energias das sub-bandas. Espectros de fotorefletância, obtidos em função da temperatura, mostram uma variação abrupta na posição de energia das estruturas observadas acima do "gap" do GaAs. Isto pode ser explicado pelo modelo teórico e está associado ao deslocamento do pico principal da absorção, devido ao cruzamento do nível de Fermi com as sub-bandas, em k=0. Em várias amostras analisadas, foram

observadas estruturas oscilatórias que são atribuídas às oscilações de Franz-Keldysh. O período destas oscilações depende fortemente da espessura da camada de topo, onde o campo elétrico depende das condições da superfície da amostra e do perfil de potencial do "δ-doping". Em alguns casos, o comportamento destas oscilações com a temperatura é bastante diferente daquele observado em camadas simples de GaAs (sem dopagem delta), sugerindo uma possível relação entre as oscilações de Franz-Keldysh e a estrutura "δ-doping". Analisamos também neste trabalho, os espectros de fotorefletância de uma amostra de GaAs contendo uma estrutura periódica de dopagem planar. Analogamente ao caso do "δ-doping" simples, as estruturas observadas acima do "gap" do GaAs foram associados à transições do tipo 2D $\rightarrow$ 3D, porém neste caso os estados confinados estão localizados na banda-de-valência e os contínuos na banda-de-condução.

ÍNDICE

Agradecimentos.....Pag.III
Abstract.....IV
Resumo.....VI
Índice.....VIII

I. INTRODUÇÃO.....Pag.1

II. PREPARAÇÃO DAS AMOSTRAS.....5

III. ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO.....8

III.1. Aspectos gerais.....8
III.2. Medidas de fotorefletância e eletrorefletância.....9
III.3. Pontos críticos.....14
III.4. Efeito do campo elétrico constante.....18
III.5. Efeito do campo elétrico inomogêneo.....30

IV. CÁLCULO DA ESTRUTURA DE SUB-BANDAS EM "DELTA-DOPING".....34

IV.1. Introdução.....34
IV.2. Cálculo auto-consistente dos níveis de energia em "delta-doping".....38
IV.3. Transições ópticas no sistema "delta-doping".....59

V. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....63

V.1. Medidas de fotoluminescência em camadas de GaAs contendo dopagem planar de silício.....63

V.2. Medidas de fotorefletância em amostras de GaAs com dopagem delta.....65

V.3. Oscilações de Franz-Keldysh em amostras com dopagem delta.....75

V.4. Camadas de GaAs com dopagem multi-delta.....91

VI. CONCLUSÕES.....101

VII. REFERÊNCIAS.....105

I. INTRODUÇÃO:

O crescente interesse em materiais semicondutores, contendo gás bi-dimensional de elétrons para aplicação em dispositivos, tem motivado a utilização de estruturas empregando perfis de dopagem estreitos e abruptos para gerar poços de potencial em forma de "V", onde os portadores ficam confinados. Nestas estruturas, os átomos dopantes são introduzidos em uma monocamada atômica de um material hospedeiro, cuja concentração residual é do tipo oposto ao da dopagem, durante a interrupção do processo de crescimento. Isto resulta em uma placa de íons carregados cujo perfil de dopagem pode ser descrito, matematicamente, como uma função delta-de-Dirac ou, mais comumente, chamado de dopagem planar ou ainda "δ-doping". Assim, o "δ-doping" representa o último limite no controle de dopagem em materiais semicondutores. A atração eletrostática mantém os elétrons muito próximos das impurezas ionizadas do "δ-doping", formando um gás bi-dimensional de elétrons, distribuídos em várias sub-bandas bi-dimensionais. O fato de não existir diferentes materiais semicondutores nas estruturas "δ-doping" faz com que não se tenha que se preocupar com problemas de interface e nem com os problemas de descasamento do parâmetro de rede. Uma característica bastante peculiar deste sistema é a ocupação de várias sub-bandas mesmo para concentrações moderadas de dopagem . Ao contrário da hetero-junção com dopagem modulada, as estruturas "δ-doping" não exibem alta mobilidade eletrônica, devido à proximidade dos

elétrons aos íons que causam espalhamentos. Entretanto, a capacidade de se conseguir o confinamento dos íons dopantes em uma região espacial muito estreita abre perspectivas para a sua utilização como fonte de portadores em hetero-estruturas mais complexas.

O caráter bi-dimensional dos elétrons confinados no poço de potencial, devido ao "δ-doping", pode ser verificado através do estudo das propriedades ópticas e elétricas destes materiais. A primeira evidência da estrutura de sub-bandas em "δ-doping" foi obtida por Zrenner, *e outros* em 1985, através de medidas de magneto-resistividade. Desde então, outras técnicas como capacitância-voltagem (CV) (Chiu, *e outros*; 1988), ressonância ciclotrônica (Koenraad, *e outros*; 1990), tunelamento ressonante (Eisele, 1989) e espectroscopia de massa de íons secundários (SIMS) (Lanzilotto, *e outros*; 1989) têm sido utilizadas para estudar a distribuição espacial dos dopantes e a ocupação de elétrons nas diferentes sub-bandas. As propriedades ópticas destes materiais foram investigadas por fotoluminescência (Perry, *e outros*; 1988), espalhamento Raman ressonante (Maciel, *e outros*; 1990), absorção no infra-vermelho (Schuarz, *e outros*; 1989) e fotorefletância (Zhou, *e outros*; 1989 ,Bernussi, *e outros*; 1990.a, b e Basmaji, *e outros*; 1990). Dentre as técnicas de caracterização óptica, a fotorefletância tem demonstrado ser bastante conveniente no estudo de efeitos quânticos em micro-estruturas. A natureza derivativa desta técnica fornece boa sensibilidade para as transições eletrônicas inter-bandas e, consequentemente, para o

estudo da estrutura de bandas de energia do material. A fotorefletância (PR), que é facilmente utilizada mesmo à temperatura ambiente, pode ser considerada como uma forma sem contato de eletrorefletância, onde a modulação é produzida pela foto-injeção de portadores. Através de fotorefletância tem sido observada a presença de gás bi-dimensional em sistemas contendo dopagem delta e em hetero-estruturas com dopagem modulada.

Neste trabalho apresentamos um estudo detalhado, por fotorefletância, de amostras de GaAs com dopagem planar de silício, crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular, em função da concentração de dopantes, da espessura da camada de topo e da temperatura. As estruturas observadas nos espectros de PR do lado de maior energia do "gap" do GaAs são, tentativamente, atribuídas à transições envolvendo estados contínuos na banda-de-valência e estados quânticos confinados na banda-de-condução. As transições inter-bandas, observadas nos espectros de PR, são comparadas com aquelas calculadas auto-consistentemente, onde foi feito um estudo sistemático da energia e da ocupação eletrônica em cada sub-banda em função das concentrações de dopantes e de aceitadores residuais, da difusão dos dopantes e da temperatura. Os resultados obtidos mostram uma boa concordância entre o modelo teórico proposto para as transições inter-bandas e os valores observados experimentalmente. Em algumas das amostras analisadas, os espectros de PR exibiram estruturas com um comportamento periódico típico de oscilações de Franz-Keldysh. Objetivando informações sobre estas oscilações,

foram realizadas medidas de PR em função das intensidades do feixe de modulação e de um terceiro feixe não modulado. A origem do campo elétrico associado à estas oscilações é até o momento objeto de investigações. Além das amostras de GaAs contendo uma camada planar de dopagem, foram realizdas medidas de PR em uma amostra de GaAs contendo uma estrutura periódica de cinco planos de dopagem separados eqüidistantemente por 500 Å. Os espectros de PR mostram estruturas acima do "gap" fundamental do GaAs que associamos, tentativamente, aos estados confinados nos poços de potencial periódico.

II. PREPARAÇÃO DAS AMOSTRAS:

As amostras analisadas neste trabalho foram crescidas pelo método de epitaxia por feixe molecular (MBE), no Instituto de Física e Química de São Carlos - USP.

O processo de crescimento ocorre em uma câmara de ultra-alto-vácuo, onde feixes de átomos (ou moléculas), gerados termicamente, incidem sobre o substrato aquecido. Os elementos a serem depositados são colocados em células térmicas de efusão que estão direcionadas para o substrato. A abertura das células é controlada por obturadores mecânicos, que permitem iniciar ou cessar o fluxo destes elementos. As amostras crescidas por MBE exibem alta qualidade e interfaces bem abruptas. As camadas de GaAs obtidas sem dopagem intencional exibem um comportamento tipicamente do tipo-p, com concentração de portadores livres em torno de $1x10^{15}$ cm^{-3}. A temperatura ideal para o crescimento de GaAs neste sistema está entre 500 a 550°C. Inicialmente, uma camada de GaAs, não intencionalmente dopada, com espessura de 0,4 μm é crescida sobre o substrato. Em seguida, fecha-se o obturador da célula do elemento Ga (mantendo o de As aberto) abrindo o obturador da célula do elemento dopante, que em nosso caso é o Si. A seguir, interrompe-se o fluxo de Si e o obturador da célula de Ga é aberto novamente, crescendo-se então uma camada de topo com espessura (d_c) variando desde 33 nm até 270 nm. A figura abaixo ilustra a estrutura destas amostras:

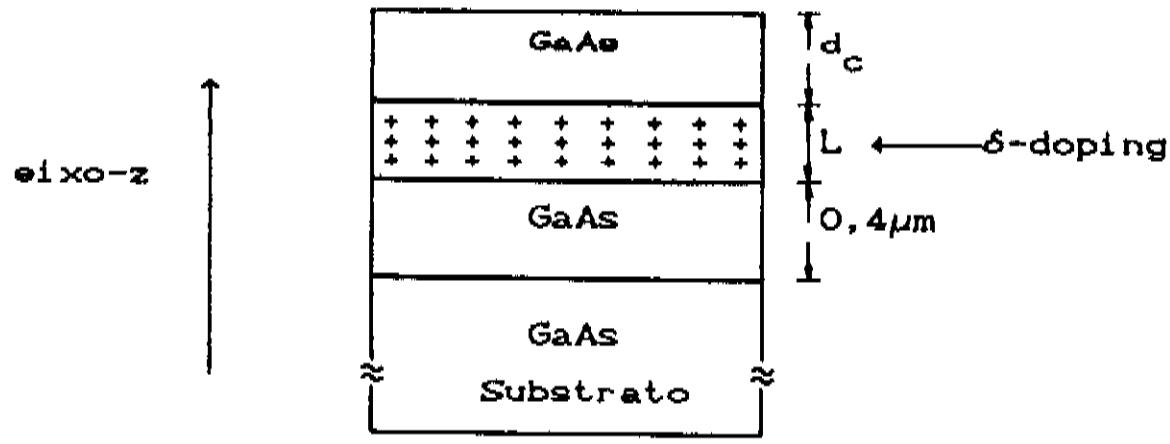


Fig.II.1: Estrutura das amostras "δ-doping".

A interrupção abrupta do crescimento e a subsequente introdução do fluxo de Si, resulta na incorporação de alta concentração de impurezas doadoras (Si_{Ga}). Os átomos de Si ficam localizados em algumas monocamadas atômicas que, quando ionizadas, dão origem a uma região de cargas positivas, cuja distribuição espacial pode ser descrita aproximadamente por:

$$N_{Si}^{3D} = N_{Si}^{2D} L \qquad (II.1)$$

onde L é a espessura da placa que contém todos os átomos de Si ionizados e N_{Si}^{3D} e N_{Si}^{2D} são, respectivamente, a concentração tri-dimensional e bi-dimensional de silício. Devido à atração eletrostática, os elétrons permanecem próximos aos doadores ionizados formando um gás bi-dimensional em um potencial do tipo "V", produzido pela placa de cargas positivas. A concentração N_{Si}^{2D} depende da temperatura da célula de silício (T_{Si}) e do tempo de abertura da célula (t_{Si}). A variação de t_{Si} e T_{Si} foi realizada

nos seguintes intervalos: $10 \leq t_{Si} \leq 210$ seg. e $1050 \leq T_{Si} \leq 1350$ ^{o}C. A concentração N_{Si}^{2D} resultante varia de 1×10^{10} a 3×10^{13} cm^{-2}.

Além das amostras de GaAs com uma única camada de dopagem "delta", foi crescida uma estrutura contendo cinco planos de dopagem com a mesma concentração N_{Si}^{2D} em cada um, espaçados igualmente de 500 Å.

III. ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO:

III.1. Aspectos gerais:

Nas técnicas de modulação óptica, a modificação relativa da refletividade ($\Delta R/R$), resultante da perturbação periódica de algum parâmetro físico como o campo elétrico, a pressão, a temperatura, etc., é medida em relação a energia do fóton. Os espectros observados mostram linhas bem resolvidas com larguras espectrais bem menores do que em outras medidas, obtidas por métodos convencionais. Eletrorefletância (ER) e fotorefletância (PR) são atualmente, duas das técnicas de modulação mais utilizadas no estudo da estrutura de bandas em semicondutores. Em ambos os casos, o parâmetro físico modulado é o campo elétrico ($\vec{E}$), que na eletrorefletância é aplicado, por exemplo, através de uma barreira Schottky na superfície do semicondutor. No caso da fotorefletância, que é uma forma de ER sem contato, o campo elétrico superficial é modulado, periodicamente, pela foto-injeção de pares elétron-buraco. Os portadores minoritários fotogerados se recombinam com as cargas superficiais, reduzindo assim o campo elétrico superficial.

Para analisar os espectros de modulação, é necessário conhecer a resposta de um sólido a uma onda eletromagnética incidente, que pode ser descrita pela função dielétrica complexa ε:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \qquad \text{(III.1.1)}$$

onde, ε_1 e ε_2 são as partes real e imaginária, respectivamente. No caso da incidência normal de uma onda plana se propagando no vácuo, a refletividade de um material pode ser escrita como (Aspnes, 1980):

$$R = \frac{(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2) - [2\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2}]^{1/2}+1}{(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2) + [2\varepsilon_1 + (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2}]^{1/2}+1} \qquad \text{(III.1.2)}$$

A modulação induz variações nas constantes ópticas ε_1 e ε_2, designadas por $\Delta\varepsilon_1$ e $\Delta\varepsilon_2$, respectivamente. Estas variações podem ser obtidas, explicitamente, diferenciando-se a eq. III.1.2:

$$\Delta R/R = \left(\frac{\partial \ln R}{\partial \varepsilon_1}\right) \Delta\varepsilon_1 + \left(\frac{\partial \ln R}{\partial \varepsilon_2}\right) \Delta\varepsilon_2 =$$

$$= \alpha\, \Delta\varepsilon_1 + \beta\, \Delta\varepsilon_2 \qquad \text{(III.1.3)}$$

onde, α e β são coeficientes que dependem de ε_1 e ε_2 e são conhecidos como coeficientes de Seraphin (Aspnes *e outros*,1972). Assim, a variação relativa da refletividade está relacionada com a variação da constante dielétrica do material.

III.2. Medidas de eletrorefletância e fotorefletância:

A fig. III.2.1 ilustra o aparato experimental utilizado nas medidas de fotorefletânia (PR) e eletrorefletância (ER). A luz de uma lâmpada de tungstênio (150 W) é filtrada por um

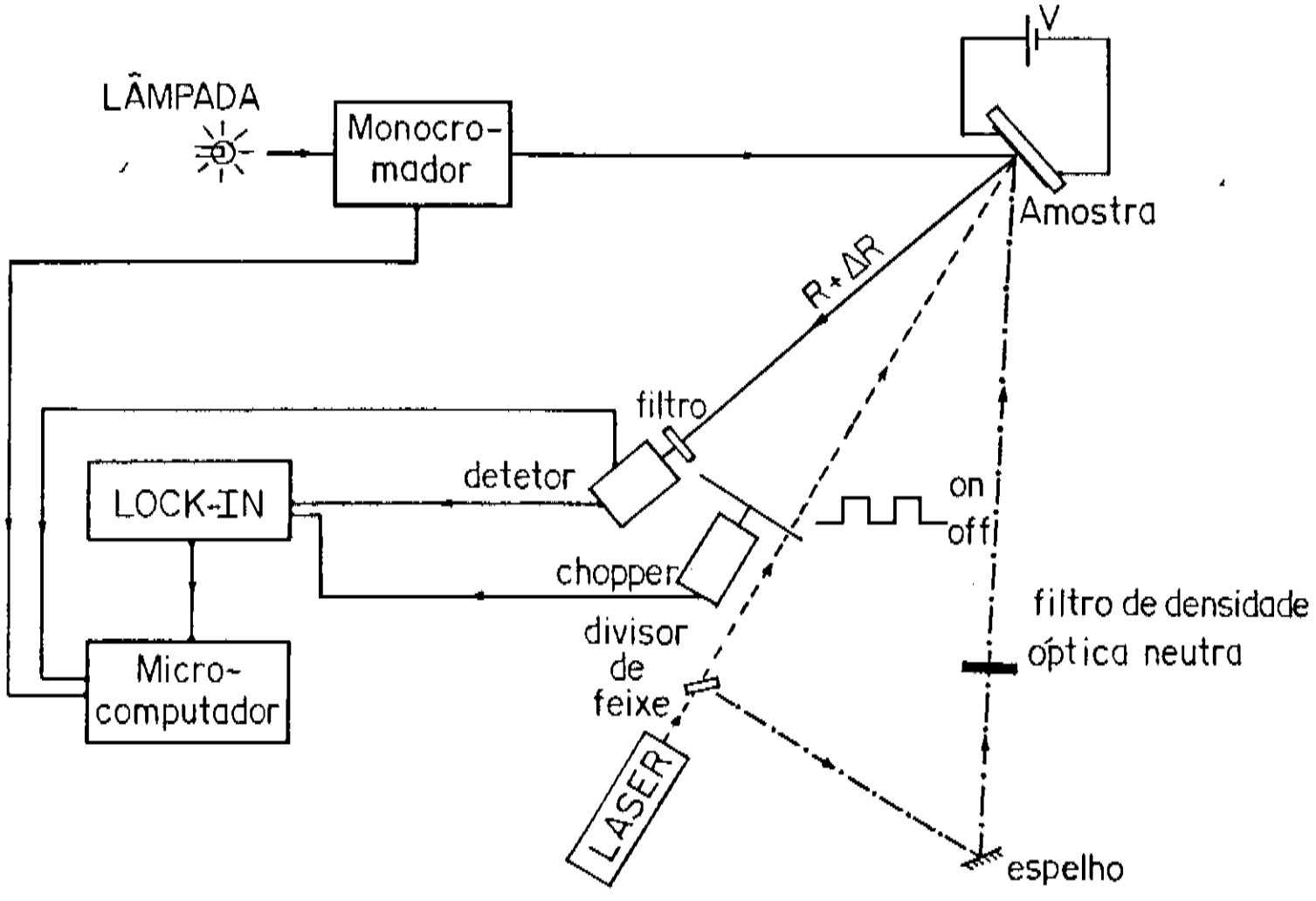


Fig.III.2.1: Esquema experimental para as medidas de fotorefletância e eletrorefletância.

monocromador de 0,5 m (*Spex - 1870*), cujo fluxo de saída de intensidade I_o é focalizado na amostra. A amostra é modulada, externamente por um campo elétrico (ER) ou através de um laser com intensidade modulada (PR) com uma dada frequência f. A intensidade da luz refletida é focalizada sobre um fotodiodo de Si, cuja saída conterá uma componente de sinal DC médio proporcional a I_oR e uma componente de sinal AC proporcional a $I_o\Delta R$, que varia em fase com f. A saída AC é detectada com um amplificador síncrono LOCK-IN (*PAR - 124*). Os dois sinais são divididos, eliminando assim o fator comum I_o, resultando em um espectro de refletividade modulada $\Delta R/R$ em função da energia do fóton. No caso de PR, a modulação do laser de Ar^+ (*Spectra Physics - 166*) foi feita utilizando-se um modulador de intensidade ("chopper") (*Stanford - SR - 540*) sintonizado na frequência de 200 Hz. Em algumas medidas, foi utilizado um segundo feixe de laser não modulado com o objetivo de fornecer informações adicionais relativas às estruturas observadas nos espectros de fotorefletância. As medidas de ER foram realizadas na configuração de barreira Schottky, onde um metal semi-transparente (Ni) foi depositado na superfície do filme semicondutor e a liga Au-Ge-Ni foi depositada na parte do substrato. A modulação é feita aplicando-se uma tensão AC, fornecida pelo próprio lock-in, entre estes dois contatos. Além desta voltagem AC é possível, simultaneamente, aplicar na amostra uma voltagem DC. O filme semi-transparente possibilita a realização das medidas de PR com voltagem DC aplicada, permitindo uma comparação direta entre as duas técnicas de modulação. O

monitoramento do sinal de PR (ou ER) e o controle do espectrômetro foi feito com um microcomputador do tipo PC-XT (*Itautec - I-7000*).

Em ambas as técnicas (ER ou PR), a modulação é feita através de uma perturbação periódica na região espacial de cargas do semicondutor. Na técnica de ER a modulação é feita, por exemplo, através da aplicação de uma voltagem periódica (vide fig. III.2.1). No caso de PR, que pode ser considerada como uma forma de ER sem contato, a modulação é feita através da foto-injeção periódica de pares elétron-buraco. Os portadores minoritários fotogerados se recombinam com as cargas dos estados de superfície, reduzindo assim o campo elétrico superficial. Este efeito está ilustrado na fig. III.2.2 para semicondutores do tipo p e n. Na ausência do feixe secundário (modulado), o campo elétrico superficial é máximo. Com a iluminação secundária, os buracos (ou elétrons) foto-excitados se recombinam com os elétrons (ou buracos) dos estados superficiais, reduzindo o campo elétrico da superfície. Assim, a irradiação com o feixe de luz modulado pode ser considerada como uma aplicação de fotovoltagem modulada. O aumento da intensidade de modulação reduz o campo elétrico superficial, tendendo à condição de bandas planas. Para altos valores da intensidade do feixe de modulação, pode ocorrer a saturação, ou seja, um nível de potência acima do qual nenhuma geração adicional de pares elétron-buraco poderá produzir um decréscimo no valor do campo superficial.

Para mostrar a equivalência entre as técnicas de PR e de ER, foram realizadas medidas de ER e PR em uma camada de GaAs/GaAs

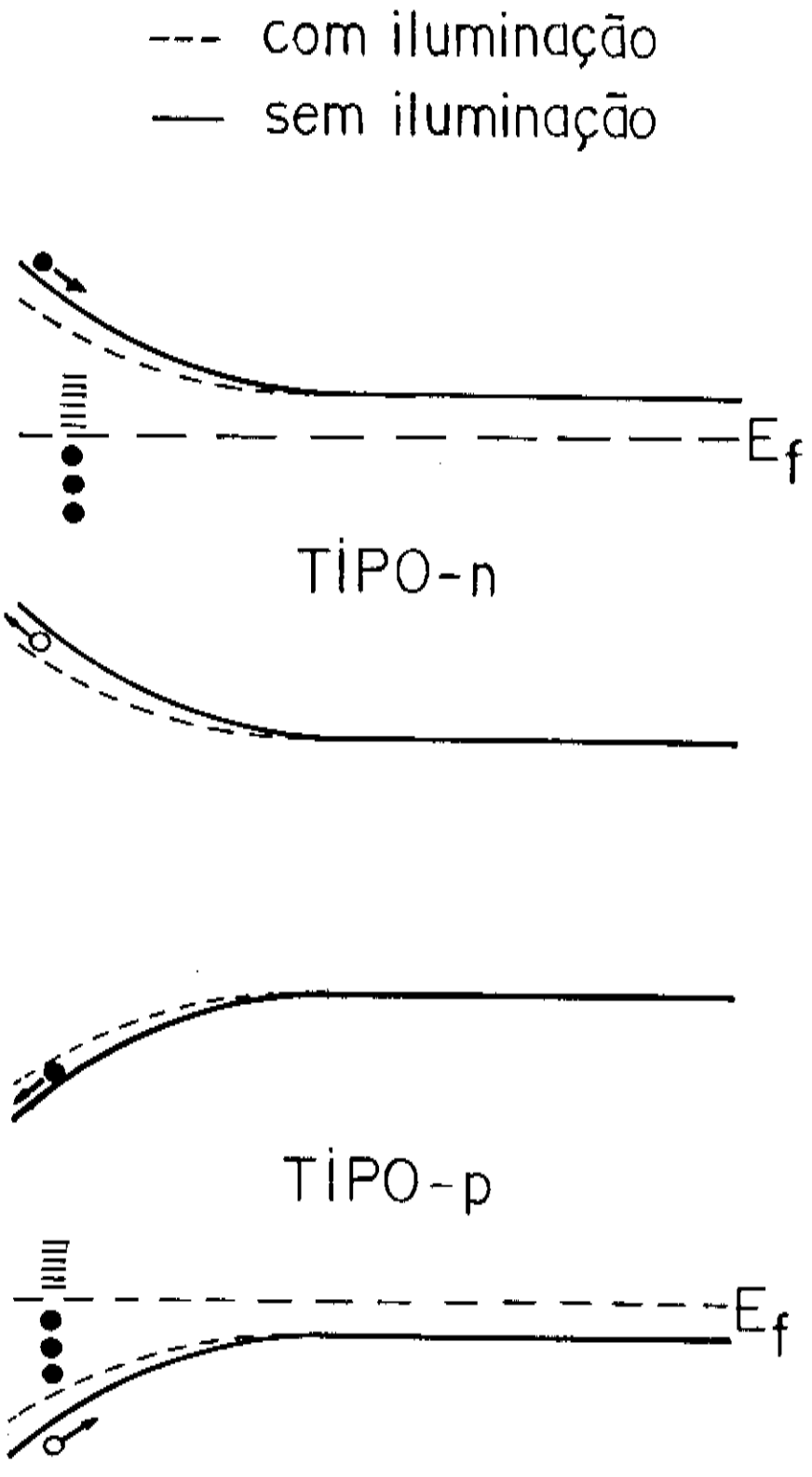


Fig.III.2.2: Esquema das bandas de valência e de condução com ou sem iluminação, mostrando os processos de modulação do campo elétrico superficial, devido à captura de buracos (elétrons) no material tipo n (tipo p) pelos estados de superfície.

($n \cong 1 \times 10^{16}$ cm^{-3}), na configuração de barreira Schottky (Bottka, *e outros*; 1988 e Bernussi, *e outros*; 1989). A fig. III.2.3 mostra os espectros de PR a 77K (V_{DC}=-0,2V) e ER (V_{AC}=0,3V) para esta amostra. Podemos observar que as formas de linha em ambos os espectros são, praticamente, as mesmas demonstrando assim a equivalência entre ambas as técnicas de modulação. A interpretação das estruturas observadas nestes espectros de modulação serão discutidas na seção III.4.

III.3. Pontos críticos:

A expressão geral para a constante dielétrica na aproximação mono-eletrônica de massa efetiva e de bandas parabólicas, para um semicondutor descrito por estados de Block $\psi_n(\vec{k},\vec{r})$ com energia $E_n(\vec{k})$ de índice de banda n e vetor-de-onda $\vec{k}$, é dada por (Petroff, 1980):

$$\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma) = 1 + \frac{e^2\hbar^2}{\pi^2 m^2(\hbar\omega)^2}\int d^3k \; |\hat{e} \cdot \vec{P}_{cv}(\vec{k})|^2 \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{E_{cv}(\vec{k}) - \hbar\omega - i\Gamma} + \frac{1}{E_{cv}(\vec{k}) + \hbar\omega + i\Gamma} \right\} \qquad \text{(III.3.1)}$$

onde, c e v denotam as bandas de condução e de valência, $\hat{e}$ é o versor de polarização na direção do campo elétrico, $\hbar\omega$ é a energia do fóton, $\vec{P}_{cv}(\vec{k})$ é o elemento de matriz momentum, $E_{cv}(\vec{k})$ é a energia interbanda definida por:

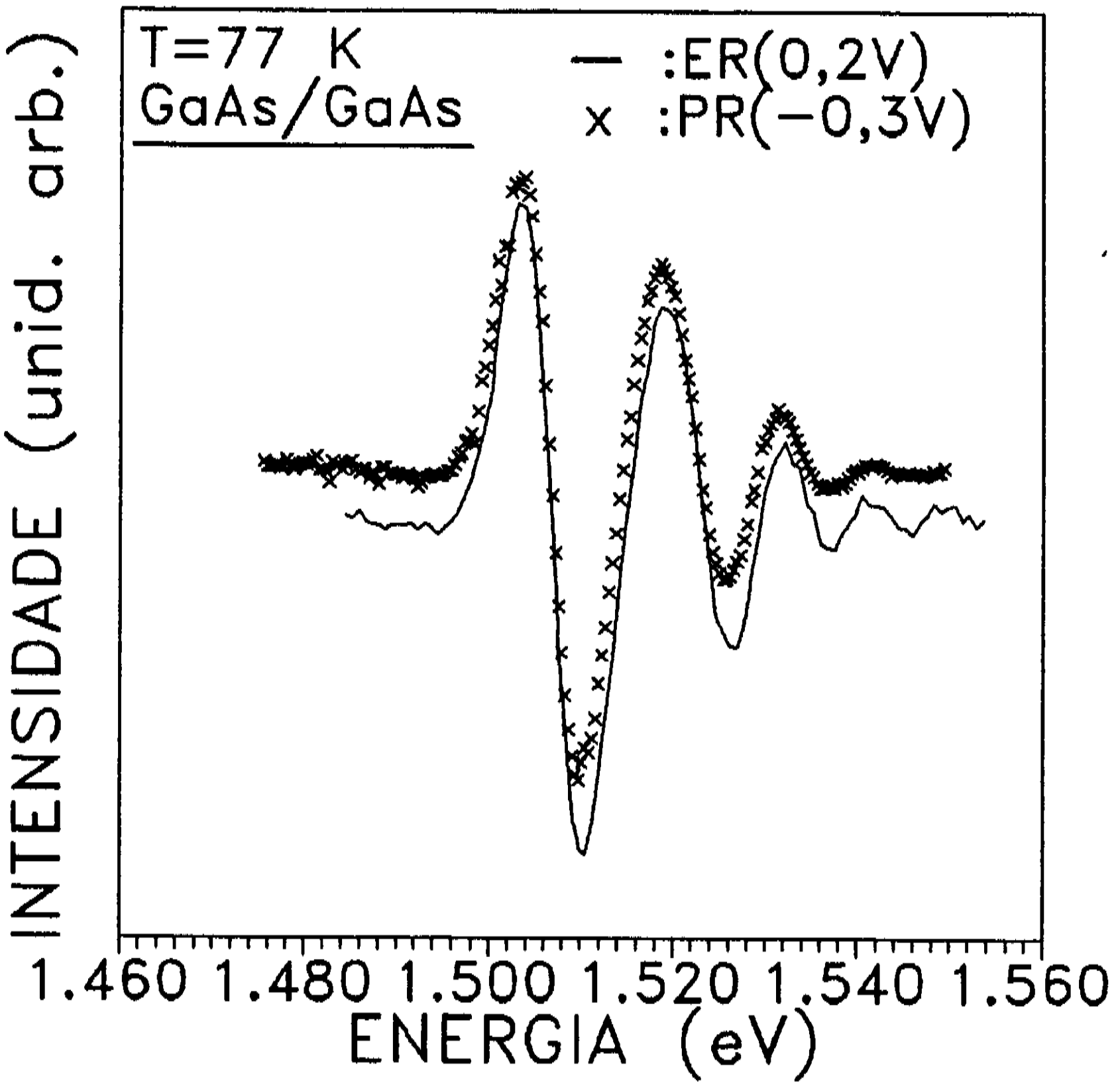


Fig.III.2.3: Espectros de PR e ER a 77K de uma mesma amostra de GaAs. O espectro de ER foi obtido com V_{AC}= 0,2V e o de PR com V_{DC}= - 0,3 V.

$$E_{cv}(\vec{k}) = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) \qquad \text{(III.3.2)}$$

e, Γ é o paramêtro de alargamento, introduzido fenomenologicamente. O vetor de onda $\vec{k}$ é somado sobre a primeira zona de Brillouin. O elemento de matriz momentum e o versor de polarização definem as regras de seleção da transição.

Substituindo as variáveis de integração k_x, k_y e k_z na eq. III.3.1 pela energia $\hbar\omega$ e duas variáveis k_1 e k_2, que localizam um ponto em uma superfície S de energia constante $E_{cv}(\vec{k}) = \hbar\omega$, obtém-se (Aspnes; 1980):

$$\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma) = 1 + \frac{e^2\hbar^2}{\pi^2 m^2(\hbar\omega)^2}\int d(\hbar\omega)\int_S dk_1\, dk_2\, \frac{|\hat{e}.P_{cv}(\vec{k})|^2}{|\nabla E_{cv}(\vec{k})|} \times$$

$$\times \left\{\frac{1}{E_{cv}(\vec{k}) - \hbar\omega - i\Gamma} + \frac{1}{E_{cv}(\vec{k}) + \hbar\omega + i\Gamma}\right\} \qquad \text{(III.3.3.)}$$

A eq. III.3.3 mostra que $\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma)$ tem singularidades em cada $\vec{k}$, para um dado par <u>c</u> e <u>v</u>, em :

$$\nabla E_{cv}(\vec{k}) = \nabla E_c(\vec{k}) - \nabla E_v(\vec{k}) = 0 \qquad \text{(III.3.4)}$$

Estes pontos críticos do espaço recíproco, também conhecidos como singularidades de van Hove, são responsáveis pelas estruturas observadas nos espectros de absorção óptica e de refletividade modulada de materiais semicondutores. Expandindo $E_{cv}(\vec{k})$ em uma

série de Taylor em torno de um ponto crítico $\vec{k}_o$ e utilizando um sistema de coordenadas que diagonalize o tensor de massa, obtém-se (Aspnes, *e outros*;1972):

$$E_{cv}(\vec{k}) \approx E_{cv}(\vec{k}_o) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{(k_i - k_{io})^2}{\mu_i} \quad , \; i=x,y,z \qquad \text{(III.3.5)}$$

onde, μ_i é a massa reduzida definida por:

$$\frac{1}{\mu_i} = \frac{1}{m^*_{e_i}} + \frac{1}{m^*_{h_i}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_c}{\partial k_i^2} - \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_v}{\partial k_i^2} \quad , \; i=x,y,z \qquad \text{(III.3.6)}$$

onde, m^*_e e m^*_h são, respectivamente, as massas efetivas do elétron e do buraco. Da eq. III.3.6 pode-se verificar que um sinal positivo da massa reduzida corresponde a um mínimo em energia, enquanto que um valor negativo corresponde a um máximo. Os tipos de singularidade dependem do sinal da massa efetiva e estes são classificados de acordo com a tabela abaixo, ou seja, para uma, duas e três dimensões:

Tabela III.3.1: Classificação dos tipos de singularidades, para uma, duas ou três dimensões.

Dimensão	Tipo de Singularidade	Sinal da massa reduzida μ_x	μ_y	μ_z
1D	mínimo	+		
	máximo	-		
2D	mínimo	+	+	
	sela	+	-	
	máximo	-	-	
3D	mínimo M_o	+	+	+
	sela M_1	+	+	-
	sela M_2	-	-	+
	máximo M_3	-	-	-

III.4 Efeito do campo elétrico constante:

A aplicação de um campo elétrico ($\vec{E}$) a um cristal quebra a simetria do Hamiltoniano na direção do campo, pela adição do termo de energia potencial $e\vec{E}.\vec{r}$ (onde $\vec{r}$ é o vetor posição), que varia linearmente com a posição. Além disto, o campo elétrico acelera os elétrons e buracos (para estados não localizados) através da rede cristalina. Esta perturbação dá origem a uma absorção dependente do campo na região do "gap" (E_g) do semicondutor. Para $\hbar\omega < E_g$, observa-se uma cauda exponencial e para $\hbar\omega > E_g$, observa-se uma série de oscilações, conhecidas como oscilações de Franz-Keldysh (OFK) (Aspnes, 1966 e 1967). O período

e a posição em energia dos máximos e mínimos destas oscilações dependem do campo elétrico e da massa reduzida inter-bandas na direção de $\vec{E}$.

Para calcular a variação da constante dielétrica do material, devido à perturbação por um campo elétrico, se faz necessário calcular as funções-de-onda do sistema submetido a esta perturbação. Assim, o Hamiltoniano na presença de <u>campo eletrico constante</u> pode ser escrito na forma:

$$(H_o - e\vec{E}.\vec{r})\ \Psi_i(\vec{r},t) = E_i\ \Psi_i(\vec{r},t) \qquad \text{(III.4.1)}$$

onde, $\Psi_i(\vec{r},t)$ é a função de onda do sistema, E_i são os autovalores de energia e H_o é o Hamiltoniano do sistema não perturbado definido por:

$$H_o = -\frac{\hbar^2}{2\mu_i}\nabla^2 + V(\vec{r}) \qquad \text{(III.4.2)}$$

onde, $V(\vec{r})$ é o potencial cristalino periódico. Escrevendo a eq. III.4.1 nas coordenadas do centro-de-massa obtém-se (Aspnes, *e outros*; 1972):

$$\frac{\hbar^2}{2}\left[\sum_j \frac{1}{\mu_j}\frac{\partial^2}{\partial u_j} + e\,\vec{E}\,\vec{\rho} + E_i\right]\phi_i(\vec{k},\vec{\rho}) = 0 \qquad \text{(III.4.3)}$$

onde, u_j = x, y e z, ϕ_i são as soluções da eq. III.4.3 com autovalores E_i, e $\vec{\rho}$ é a coordenada relativa. Esta equação pode ser separada em três equações independentes no sistema de coordenadas

cartesianas com $\vec{\rho}=(x,y,z)$. Dadas as componentes do vetor $\vec{\mathbb{E}} = (\mathbb{E}_x, \mathbb{E}_y, \mathbb{E}_z)$, a solução analítica da eq. III.4.2 pode ser obtida na forma (Aspnes, 1986):

$$\phi_i(\vec{\rho}) = C_x\ C_y\ C_z\ Ai(\eta_x)\ Ai(\eta_y)\ Ai(\eta_z) \qquad \text{(III.4.4)}$$

onde, os coeficientes C_i são constantes de normalização e as funções de Airy, $Ai(\eta_i)$, são definidas por (Antosievicz, 1984):

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty ds\ \cos\left(\frac{1}{3}\ s^3 + sx\right) \qquad \text{(III.4.5)}$$

que é solução convergente da equação (Antosievicz, 1984):

$$\frac{d^2Ai(x)}{dx^2} = x\ Ai(x) \qquad \text{(III.4.6)}$$

e as quantidades η_i são definidas por:

$$\eta_i(u_i) = \left[- \frac{e\ \mathbb{E}_i . u_i + E_i}{\hbar\theta_i} \right],\ u_i=x,y,z \qquad \text{(III.4.7)}$$

onde,

$$\hbar\theta_i = \left[\frac{e^2\mathbb{E}_i^2\ \hbar^2}{2\ \mu_i} \right]^{1/3} \qquad \text{(III.4.8)}$$

a quantidade $(\hbar\theta_i)$ tem dimensão de energia e é conhecida como energia eletro-óptica do sistema. Uma vez conhecida a solução

$\phi_i(\vec{r})$ a parte imaginária da constante dielétrica pode ser escrita na forma (Petroff, 1980):

$$\varepsilon_2(\hbar\omega,\vec{E}) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2\omega^2} \sum_i \sum_{\vec{k}} |\hat{e}.\vec{P}_{cv}(\vec{k})|^2 |\phi_i(\vec{k},0)|^2 \, \delta\left[E_{cv}(\vec{k}) + E_i - \hbar\omega\right] \tag{III.4.9}$$

transformando a somatória acima em uma integral em $\vec{k}$ e substituindo III.4.4 em III.4.9, no caso de um ponto crítico M_o, temos:

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2\omega^2} |\hat{e}.\vec{P}_{cv}(\vec{k})|^2 \frac{e^2}{\hbar^6} \frac{|E_x E_y E_z|}{\theta_x^2 \, \theta_y^2 \, \theta_z^2} \times$$

$$\times \int dE_x \int dE_y \int dE_z \; Ai^2\left(\frac{-E_x}{\hbar\theta_x}\right) Ai^2\left(\frac{-E_y}{\hbar\theta_y}\right) Ai^2\left(\frac{-E_z}{\hbar\theta_z}\right) \times$$

$$\times \, \delta\left(E_{cv} + E_x + E_y + E_z - \hbar\omega\right) \tag{III.4.10}$$

a integração acima foi obtida explicitamente por Aspnes (1967):

$$\varepsilon_2(\hbar\omega,\vec{E}) = \frac{B\,\theta^{1/2}}{\pi\omega^2} \left[Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta)\right] \tag{III.4.11.a}$$

onde,

$$\eta = (E_g - \hbar\omega)/\hbar\theta \tag{III.4.11.b}$$

$$\theta^3 = e^2 \vec{E}^2 / 2\,\mu_{\parallel}\,\hbar \tag{III.4.11.c}$$

$$\frac{1}{\mu_{\parallel}} = \frac{1}{\mathbb{E}^2} \sum_i \mathbb{E}_i^2 / \mu_i \qquad \text{(III.4.11.d)}$$

$$B = \frac{2e^2}{m^2 c\hbar} \left(\frac{8\mu_x \mu_y \mu_z}{\hbar^3} \right)^{1/2} \qquad \text{(III.4.11.e)}$$

A variação da parte imaginária da constante dielétrica, devido à perturbação do campo elétrico, é simplesmente dada por (Aspnes, *e outros*; 1972):

$$\Delta\varepsilon_2(\hbar\omega,\vec{\mathbb{E}}) = \varepsilon_2(\hbar\omega,\vec{\mathbb{E}}) - \varepsilon_2(\hbar\omega,0) \qquad \text{(III.4.12)}$$

A parte real da constante dielétrica (ε_1) está relacionada com a parte imaginária através das relações de Kramers-Kronig. A variação da função dielétrica, na vizinhança de um ponto crítico, devido à perturbação de um campo elétrico uniforme, para as três dimensões, pode ser resumida na Tabela III.4.1 abaixo (Grover, *e outros*;1971):

Tabela III.4.1: Variação das partes real e imaginária da constante dielétrica, para os vários pontos críticos:

Dimensão	Tipo de Singularidade	Sinal de $\mu_{\parallel}$	$\Delta\varepsilon_1$	$\Delta\varepsilon_2$
1D	mínimo	+	$A_1 G_1(-\eta)$	$A_1 F_1(-\eta)$
	máximo	−	$-A_1 G_1(\eta)$	$A_1 F_1(\eta)$
2D	mínimo	+	$A_2 G_2(-\eta)$	$A_2 F_2(-\eta)$
	sela	−	$-A_2 F_2(\eta)$	$A_2 G_2(\eta)$
		+	$A_2 F_2(-\eta)$	$A_2 G_2(-\eta)$
	máximo	−	$-A_2 G_2(\eta)$	$A_2 F_2(\eta)$
3D	mínimo (M_0)	+	$A_3 G_3(-\eta)$	$A_3 F_3(-\eta)$
	sela (M_1)	−	$A_3 G_3(\eta)$	$-A_3 F_3(\eta)$
	sela (M_1)	+	$-A_3 F_3(-\eta)$	$A_3 G_3(-\eta)$
	sela (M_2)	+	$-A_3 G_3(-\eta)$	$-A_3 F_3(-\eta)$
	sela (M_2)	−	$A_3 F_3(\eta)$	$A_3 G_3(\eta)$
	máximo (M_3)	−	$-A_3 G_3(\eta)$	$A_3 F_3(\eta)$

onde,

$$\eta = (E_g - \hbar\omega)/\hbar\theta \qquad \text{(III.4.13.a)}$$

$$A_1 = \frac{4\pi e^2 |\hat{e}.\vec{P}_{cv}(\vec{k})|^2}{m^2\omega^2}\left(\frac{2\mu_x}{\hbar^2}\right)^{1/2}(\hbar\theta)^{-1/2} \qquad \text{(III.4.13.b)}$$

$$A_2 = \frac{2\pi e^2 |\hat{e}.\vec{P}_{cv}(\vec{k})|^2}{m^2\omega^2}\left(\frac{4\mu_x\mu_y}{\hbar^4}\right)^{1/2} \qquad \text{(III.4.13.c)}$$

$$A_3 = \frac{2e^2 |\hat{e}.\vec{P}_{cv}(\vec{k})|^2}{m^2\omega^2}\left(\frac{8\mu_x\mu_y\mu_z}{\hbar^6}\right)^{1/2}(\hbar\theta)^{1/2} \qquad \text{(III.4.13.d)}$$

$$F_1(\eta) = 2\pi\, Ai^2(\eta) - u(-\eta)/\sqrt{-\eta} \qquad \text{(III.4.13.e)}$$

$$G_1(\eta) = 2\pi\, Ai(\eta)\, Bi(\eta) - u(\eta)/\sqrt{\eta} \qquad \text{(III.4.13.f)}$$

$$F_2(\eta) = Ai_1(2^{2/3}\eta) - u(-\eta) \qquad \text{(III.4.13.g)}$$

$$G_2(\eta) = Gi_1(2^{2/3}\eta) + \pi^{-1} \ln|\eta| + C_o \qquad \text{(III.4.13.h)}$$

$$F_3(\eta) = \pi\, [Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta)] - \sqrt{-\eta}\, u(-\eta) \qquad \text{(III.4.13.i)}$$

$$G_3(\eta) = \pi\, [Ai'(\eta)Bi'(\eta) - \eta Ai(\eta)Bi(\eta)] + \sqrt{\eta}\, u(\eta) \qquad \text{(III.4.13.j)}$$

$$Ai_1(\eta) = \int_\eta^\infty dt\; Ai(t) \qquad \text{(III.4.13.k)}$$

$$Gi_1(\eta) = -\int_0^\eta dt\; Gi(t) \qquad \text{(III.4.13.l)}$$

$$C_o = \int dt\; Gi(t)\big|_o - \pi^{-1} \ln(2^{2/3}) \qquad \text{(III.4.13.m)}$$

onde, $u(\eta)$ é a função de Heaviside e $Bi(\eta)$ é a solução divergente da equação III.2.3.6. As funções eletroópticas $F(\eta)$ e $G(\eta)$, ilustradas na fig.III.4.1, descrevem completamente a variação das partes real e imaginária da constante dielétrica. As funções F e G têm uma forte singularidade em $\hbar\omega = E_g$, que é a energia do ponto crítico. Para argumentos negativos ($\hbar\omega > E_g$) estas funções exibem um comportamento oscilatório e para argumentos positivos ($\hbar\omega < E_g$) estas decaem rapidamente (vide fig. III.4.1). A cauda exponencial

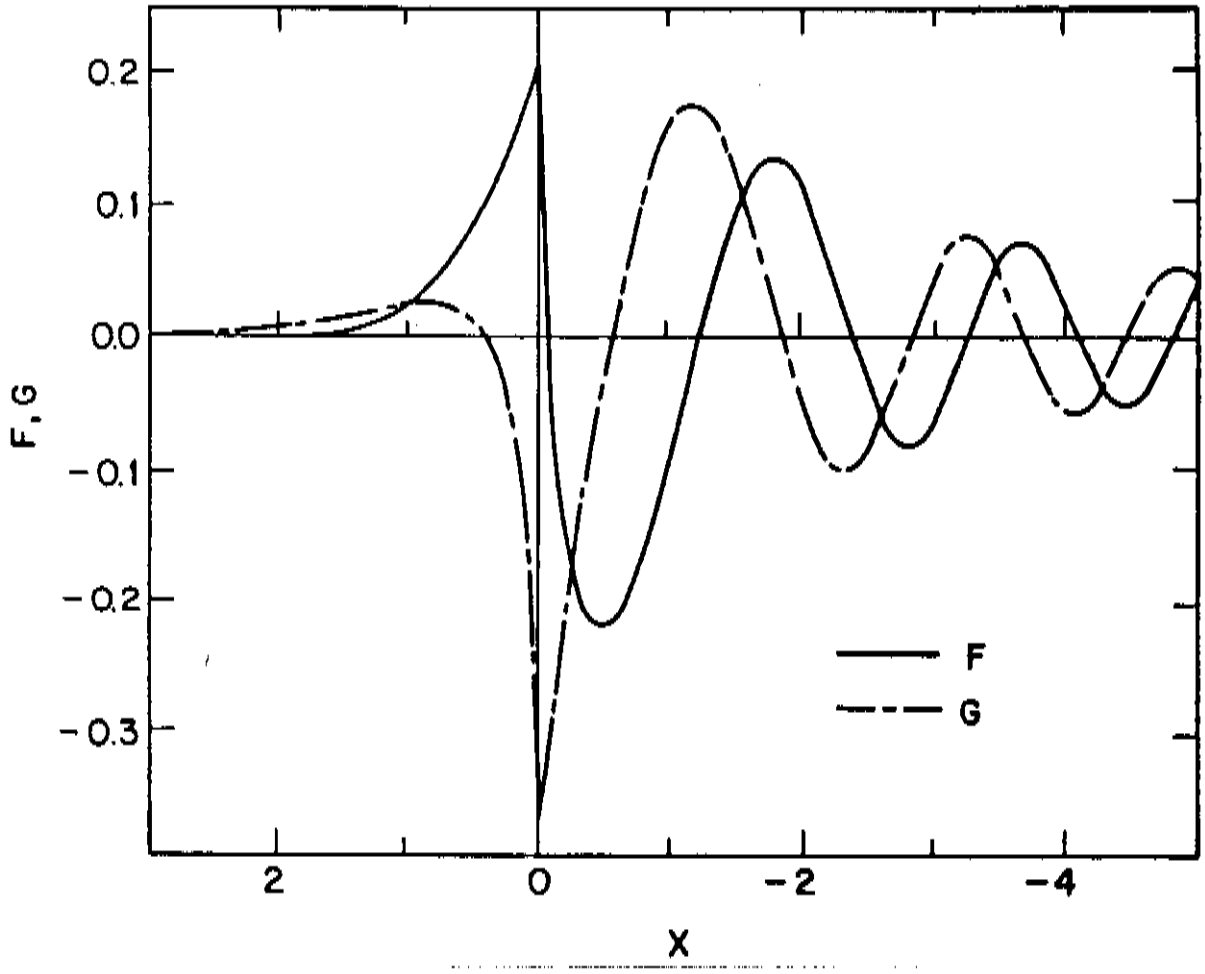


Fig.III.4.1: Funções eletro-ópticas F e G, que representam, respectivamente, as variações induzidas pelo campo elétrico constante nas partes real e imaginária da constante dielétrica, para um ponto crítico M_o tri-dimensional (Aspnes, *e outros*; 1972).

da função F da fig. III.4.1, que descreve essencialmente a absorção de um ponto crítico M_o, resulta da penetração das funções de onda dos elétrons e dos buracos na região do "gap" de energia do material. Este efeito faz com que exista a probabilidade de transições para energias menores do que o "gap", que é nula na ausência de campo elétrico. As oscilações para energias maiores do que a do ponto crítico representam a interferência construtiva das funções de onda dos elétrons e dos buracos. As estruturas observadas na região dos pontos críticos possibilitam a determinação das energias de transição interbandas, mostrando a importância do efeito do campo elétrico no estudo da estrutura de bandas em materiais semicondutores. As expressões que descrevem as variações $\Delta\varepsilon_1$ e $\Delta\varepsilon_2$ não levam em consideração o parâmetro de alargameno Γ. Em alguns casos limites é possível se obter expressões simplificadas para a forma de linha espectral em ER (ou PR) para a variação relativa da refletividade. Dois casos em particular são de grande interesse:

(i) limite de campo intermediário:

No caso de oscilações de Franz-Keldysh, incluindo o efeito do parâmetro de alargamento Γ, uma relação para as oscilações subsidiárias pode ser obtida analiticamente através das expressões assintóticas das funções de Airy. O limite de campo intermediário ocorre para $\hbar\Omega \simeq \Gamma$ e, no caso de um ponto crítico M_o tri-dimensional, a expressão assintótica tem a forma (Aspnes, e

outros;1973.a):

$$\Delta R/R = C \frac{1}{(\hbar\omega - E_g)} \exp\left[- \frac{\Gamma(\hbar\omega - E_g)^{1/2}}{(\hbar\Omega)^{3/2}} \right] \times$$

$$\cos\left[\pi (d-1)/4 + \frac{2}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\Omega} \right)^{3/2} \right] \qquad \text{(III.4.14.a)}$$

com,

$$(\hbar\Omega)^3 = \frac{1}{4} (\hbar\theta)^3 \qquad \text{(III.4.14.b)}$$

e C é um fator de normalização. Seja $\left[(\Delta R/R)_j, (\hbar\omega)_j\right]$ a amplitude e a posição, respectivamente, do j-ésimo extremo das oscilações subsidiárias. Uma vez que os extremos sucessivos representam uma variação em π no argumento da função cosseno na eq. III.4.14, pode-se escrever para o índice j da oscilação na forma:

$$(\hbar\omega)_j = (\hbar\Omega) F_j + E_g \quad , \; j=1,2,3... \qquad \text{(III.4.15.a)}$$

onde,

$$F_j = \left[\frac{3}{2} \pi \left(j - \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3} \qquad \text{(III.4.15.b)}$$

Assim, a relação linear entre $(\hbar\omega)_j$ e F_j permite determinar a energia eletro-óptica e a energia de transição inter-bandas no ponto crítico, através de um ajuste de curvas. Uma vez conhecidos o "gap" do material em estudo e sua respectiva massa reduzida interbandas, pode-se calcular a energia eletro-óptica e, consequentemente, determinar a magnitude do campo elétrico.

(ii) limite de baixo campo:

Para valores muito baixos do campo elétrico, a energia eletro-óptica é bem menor do que o parâmetro de alargamento, ou seja, $\hbar\Omega \leq \Gamma/3$. Neste limite as funções eletro-ópticas tomam a forma assintótica (Aspnes,1973a e b):

$$F(x) \approx 0 \qquad \text{(III.4.16.a)}$$

$$G(x) \approx \frac{1}{\pi x}\left[1 - \frac{2}{x^2} + \ldots\right] \qquad \text{(III.4.16.b)}$$

Substituindo III.4.16 em III.4.13 obtém-se:

$$\Delta\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,\vec{E}) = \frac{2e^2\,|\hat{e}.\vec{P}_{cv}|^2}{\omega^2\ m^2\ \pi^2}\int d^3k\ \frac{(\hbar\Omega)^3}{[\hbar\omega - E_{cv}(\vec{k}) + i\Gamma\ ]^4}$$

(III.4.17)

A relação acima pode ser escrita em termos da constante dielétrica não perturbada $\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,0)$, definida em III.3.3, obtendo-se:

$$\Delta\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,\vec{E}) = \frac{(\hbar\Omega)^3}{3(\hbar\omega)^2}\ \frac{\partial^3}{\partial(\hbar\omega)^3}\left[\ (\hbar\omega)^2\ \varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,0)\ \right] \qquad \text{(III.4.18)}$$

A equação III.4.18 mostra claramente a relação entre a variação induzida $\Delta\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,\vec{E})$ e a terceira derivada da constante dielétrica não perturbada $\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,0)$. Além disto, esta equação mostra que no limite de baixo campo a variação relativa da refletividade está relacionada com o quadrado do campo elétrico $\vec{E}$, o que pode ser

utilizado como fator determinante quanto ao regime de baixo campo.

A integral em III.4.17 pode ser resolvida explicitamente para uma, duas ou três dimensões e como $\Delta R/R$ é proporcional à parte real de $\Delta\varepsilon(\hbar\omega,\Gamma,\vec{E})$ obtém-se (Aspnes;1973.b e 1980):

$$\Delta R/R = \mathrm{Re}\left[C\, e^{i\theta} (\hbar\omega - E_g + i\Gamma)^{-n} \right] \qquad \text{(III.4.19)}$$

onde, C e θ são, respectivamente, os fatores de amplitude e de fase. O fator n determina o tipo de ponto crítico e sua respectiva dimensionalidade, que no caso de uma singularidade do tipo M_o é dada por:

n=2,5.....3D (III.4.20.a)

n=3,0.....2D (III.4.20.b)

n=3,5.....1D (III.4.20.c)

n=2,0.....éxciton (III.4.20.d)

Decrescendo a dimensionalidade por 1, n aumenta por um fator 1/2. Para um dado ponto crítico, a diferenciação da eq. III.4.19 por E_g (ou Γ) decresce o valor de n por 1. Assim, a primeira derivada da constante dielétrica para um ponto crítico bi-dimensional seria n=1.

A forma simples da eq. III.4.19 possibilita a sua utilização de uma forma rotineira no limite de baixo campo, para a determinação de E_g , Γ, θ e C, através de um programa de ajuste de curvas. De uma forma geral, o espectro de modulação é o resultado da soma de várias transições do tipo da eq. III.4.19, com quatro

parâmetros a serem ajustados. Em termos práticos, o ajuste da forma de linha com os dados experimentais no limite de baixo campo é escrita na forma:

$$\Delta R/R = \sum_{j=1}^{p} \left\{ \frac{C_j}{\Gamma_j^2 + (\hbar\omega - E_{g,j})^{n_j/2}} \cos\left[\theta_j - n_j \arctan\left(\frac{\Gamma_j}{\hbar\omega - E_{g,j}}\right)\right] \right\}$$

(III.4.21)

onde, p é o número de estruturas a serem ajustadas. Na equação acima o fator C determina a amplitude da transição, enquanto que o fator θ determina a assimetria da forma de linha. Os parâmetros E_g e Γ determinam, respectivamente, a localização em energia do ponto crítico e a largura da estrutura. Assim, o limite de baixo campo (ou espectroscopia de terceira derivada) é de grande utilidade na determinação da energia inter-bandas em estruturas semicondutoras e a validade desta aproximação pode ser verificada medindo-se $\Delta R/R$ em função de $\vec{E}^2$.

III.5. Efeito do campo elétrico inomogêneo:

Na maioria dos casos práticos, a modulação do campo elétrico ocorre na região espacial de cargas do semicondutor, onde o campo é inomogêneo. Assim, o modelo desenvolvido na seção anterior deve ser adaptado. Aspnes e Frova (1969) mostraram que na presença de um campo não uniforme, a variação da constante dielétrica média $\langle\Delta\varepsilon\rangle$ está relacionada com a variação $\Delta\varepsilon$ do caso de campo uniforme através da relação:

$$\langle \Delta\epsilon \rangle = -2ik \int dz\ \Delta\epsilon[\mathbb{E}(z)]\ e^{i2kz} \qquad \text{(III.5.1)}$$

onde, k é o módulo do vetor complexo de propagação da luz no semicondutor. Como um exemplo simples consideremos uma região espacial de carga, onde o campo elétrico tem uma dependência linear em z:

$$\mathbb{E}(z) = \mathbb{E}_{bi}\ (1 + z/W) \qquad \text{(III.5.1)}$$

onde, $\mathbb{E}_{bi}$ é o campo elétrico da superfície e W a largura da região de depleção. O efeito da inomogeneidade do campo elétrico pode ser visto nos gráficos das funções eletro-ópticas médias $\bar{F}$ e $\bar{G}$, que estão mostrados na fig. III.5.1 (para um ponto crítico M_o e Γ=0). Pode-se verificar que a amplitude das oscilações subsidiárias diminuem mais rapidamente do que no caso da fig. III.4.1 e que, com o aumento da inomogeneidade do campo, as oscilações de Franz-Keldysh são amortecidas mais rapidamente até desaparecerem para altos campos elétricos (Aspnes e Frova, 1969). Assim, dependendo do "grau" de inomogeneidade do campo, poderão ou não existir as oscilações de Franz-Keldysh.

Recentemente, Bhattacharya, *e outros* (1988) e Shen, *e outros* (1990), demonstraram que o campo elétrico, que dá origem às oscilações de Franz-Keldysh, está diretamente relacionado com o campo superficial máximo na aproximação de campo de modulação ($\mathbb{E}_{AC}$) muito menor do que o superficial ($\mathbb{E}_{bi}$). A generalização do

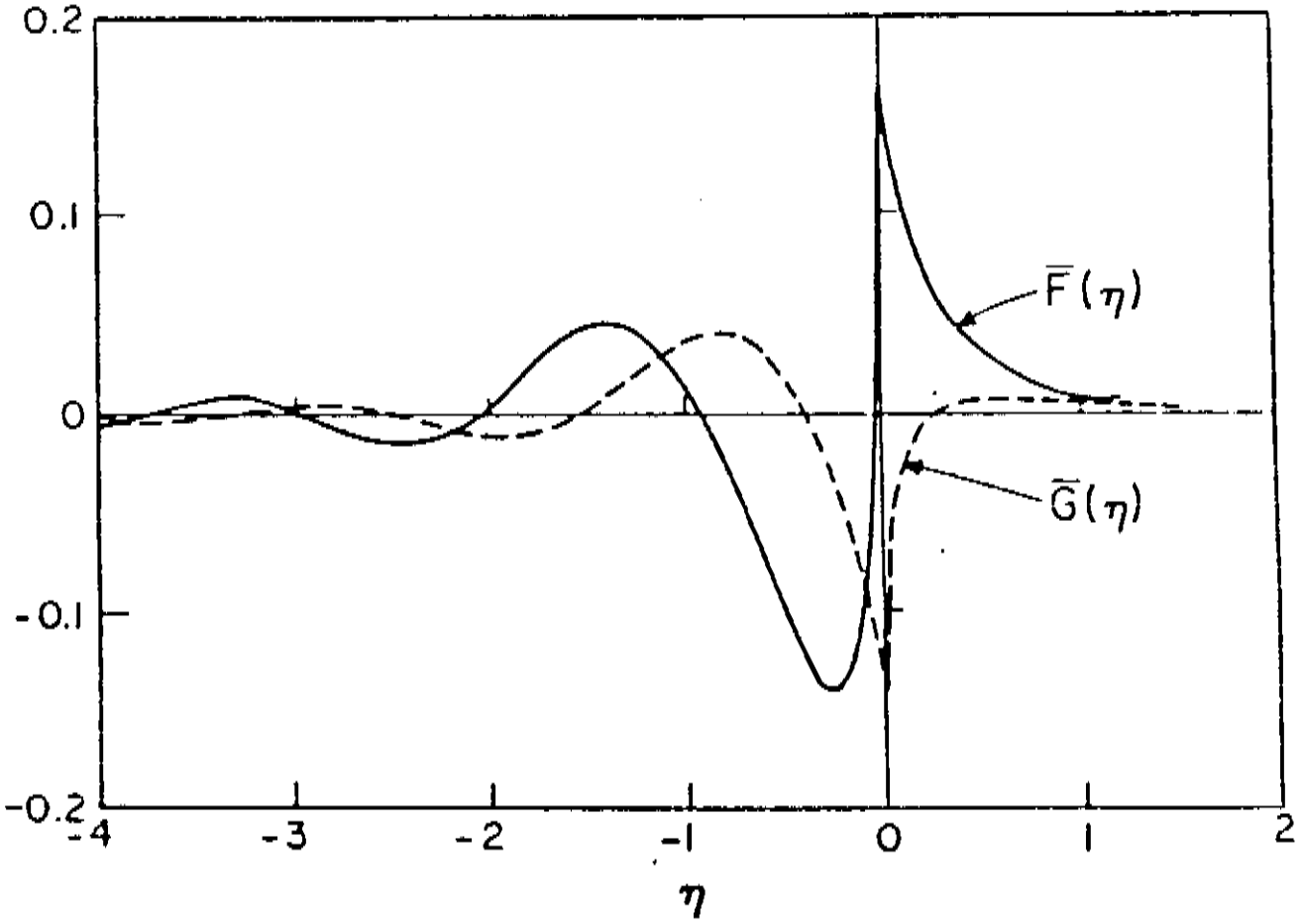


Fig.III.5.1: Funções eletro-ópticas médias $\bar{F}$ e $\bar{G}$ para o caso de um campo elétrico inomogêneo (Aspens, *e outros*; 1969).

efeito Franz-Keldysh para a eletromodulação (Shen, *e outros*; 1990), mostra que na presença de um campo $\mathbb{E}_{bi}$ a equação III.V.1 dá origem a dois termos: (i) um devido ao campo superfcial e (ii) outro devido ao valor médio na região espacial de carga. Entretanto, estes autores demonstraram matematicamente que a contribuição do campo médio para as oscilações de Franz-Keldysh, também tem sua origem no campo de superfície e não em um valor médio como fora obtido por Aspnes e Frova (1969). Assim, pode-se verificar que, dentro de determinados limites, estas oscilações podem existir mesmo para campos inomogêneos. É interessante ressaltar que os períodos das OFK variam muito pouco com a inomogeneidade do campo, o que permite fazer uma análise dos dados experimentais utilizando as eqs. III.4.14 e III.4.15.

IV. CÁLCULO DA ESTRUTURA DE SUB-BANDAS EM "δ-DOPING":

IV.1. Introdução:

O termo "δ-doping" baseia-se no confinamento de átomos dopantes em um plano atômico bi-dimensional (2D) e foi proposto, originalmente, por Wood, *e outros* (1980) para melhorar o perfil de dopagem com Ge em camadas de GaAs. A localização espacial destas impurezas em apenas uma monocamada representa o último limite no controle da distribuição de dopantes e só foi possível com o desenvolvimento de sistemas de crescimento como o de MBE, onde o filme semicondutor é crescido com controle de monocamadas atômicas. A fig.IV.1.1 abaixo ilustra uma dopagem "δ" em GaAs:

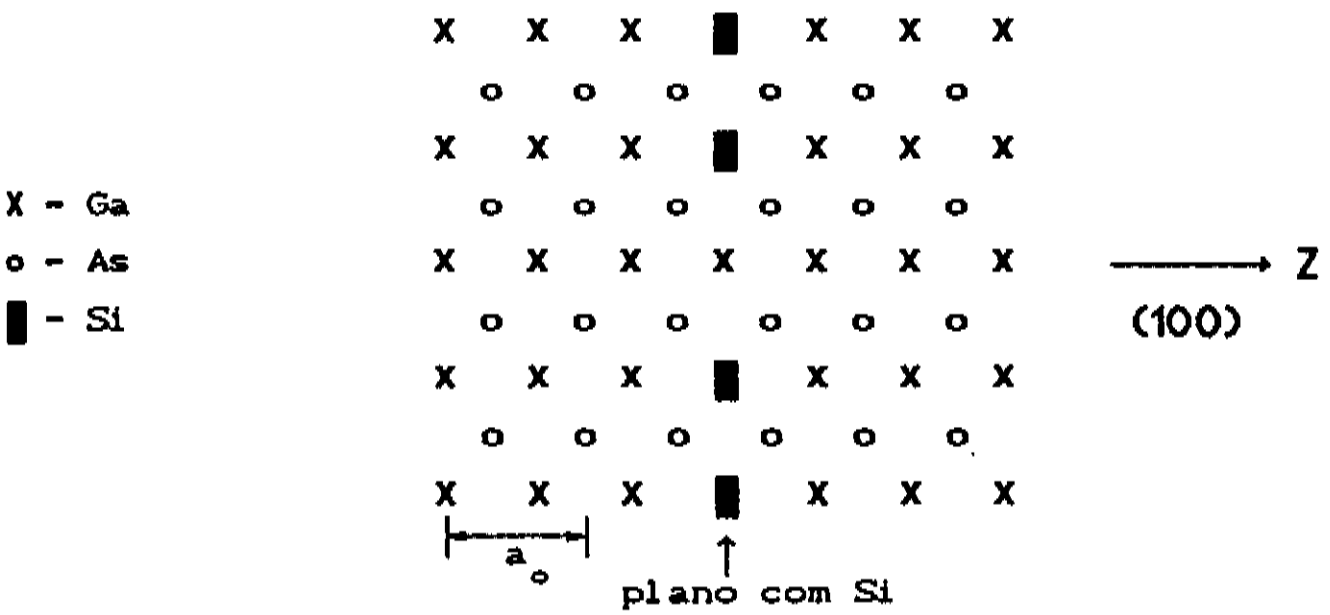


Fig.IV.1.1: Ilustração do sistema "δ-doping" em GaAs. Os átomos de Si são introduzidos em uma monocamada atômica do cristal, substituindo os átomos de Ga. O eixo Z representa a direção de crescimento.

Os átomos de Si, ocupando os sítios de Ga, são introduzidos em uma monocamada atômica do material hospedeiro GaAs, orientado na direção (100) mas, devido a alta temperatura de crescimento, eles podem difundir até várias camadas atômicas adjacentes, formando uma placa de largura L com alta concentração de doadores. Quando estes doadores são ionizados dão origem a uma placa de cargas positivas. Devido à atração coulombiana, os elétrons permanecem próximos aos doadores ionizados formando um gás quase bi-dimensional de elétrons em um potencial em forma de "V", produzido pela placa de cargas positivas. Este potencial é "arredondado" pela blindagem eletrônica. A fig.IV.1.2 mostra uma estrutura esquemática das bandas de condução (BC) e de valência (BV) para um sistema com região altamente dopada n^+, de largura L, em uma amostra com concentração residual de aceitadores N_A. Nesta figura, fica claro a consideração de que o número de doadores na camada n^+ é muito maior do que a de aceitadores, contidos nas duas regiões de depleção localizados em ambos os lados da camada com dopagem delta. O movimento dos elétrons no plano paralelo à placa de dopagem permanece livre, mas o potencial atrativo confina o movimento na direção z, formando sub-bandas quase bi-dimensionais. Na aproximação de massa efetiva, os elétrons podem ser descritos como partículas 2D quase-livres com massa efetiva m^* e *momentum* $k_{\parallel}=(k_x,k_y)$. Os estados eletrônicos são caracterizados por um índice da sub-banda i=1,2,... com energia ,E_i, e *momentum* $k_{\parallel}$ paralelo à camada de dopagem. A energia total na aproximação de bandas parabólicas é, então, dada por:

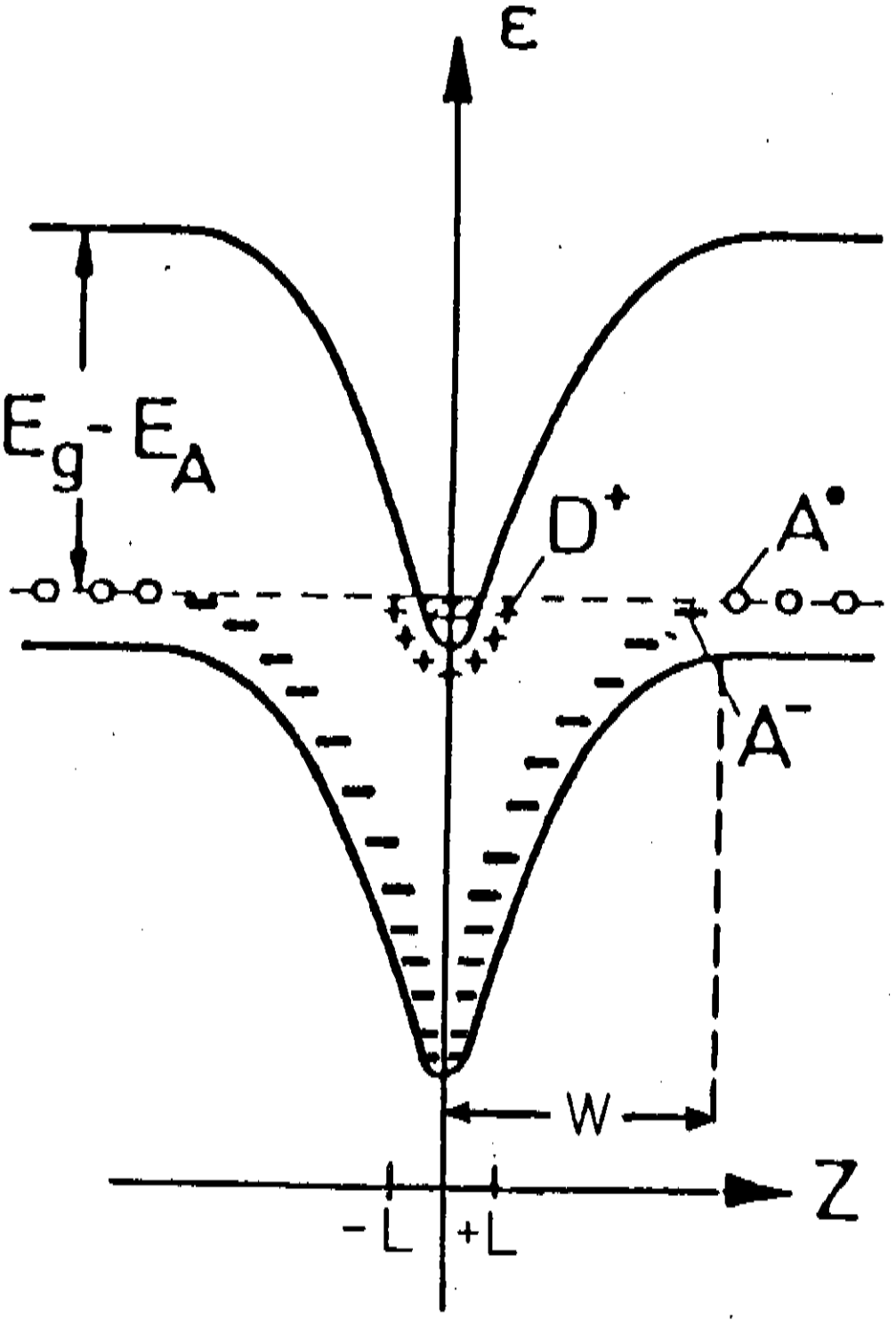


Fig.IV.1.2: Ilustração esquemática da estrutura de bandas de um sistema "δ-doping" com concentração de doadores (n^+) distribuídos, uniformemente, em uma região de largura L (Dölher, 1976).

$$\varepsilon_i(k_\parallel) = E_i + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m^*} \qquad \text{(IV.1.1)}$$

O sistema "δ-doping" apresenta características bastante distintas às dos outros sistemas 2D: i) mesmo para concentrações moderadas de Si, os elétrons ocupam várias sub-bandas. Por exemplo, para $N_{Si}^{2D} = 2\times10^{12}$ cm^{-2} e 5×10^{13} cm^{-2}, tem-se, respectivamente, três e oito sub-bandas ocupadas (para T=0K); ii) há apenas um material hospedeiro e, portanto, não se tem preocupação com diferenças nos parâmetros efetivos de diferentes materiais, iii) pela mesma razão, não há interfaces de diferentes tipos de semicondutor, não havendo então problemas de descasamento de parâmetro de rede e nem defeitos de interface e iv) ao contrário das hetero-estruturas com dopagem modulada, as amostras "δ-doping" exibem uma menor mobilidade. Isto se deve à proximidade dos doadores ionizados que agem como centros espalhadores. No entanto, o confinamento destas impurezas em uma região de algumas monocamadas abre perspectivas para a sua utilização como "fonte" de portadores para outros tipos de micro-estruturas. Uma outra estrutura similar são as dopagem multi-delta e as super-redes NIPI, onde também a modulação do potencial é basicamente de origem eletrostática (Ploog, *e outros*, 1983).

IV.2. Cálculo auto-consistente dos níveis de energia em "δ-doping":

Para calcular os níveis de energia e as funções de onda dos estados ligados no poço de potencial criado no "δ-doping", utiliza-se as seguintes aproximações e considerações:

i) a estrutura "δ-doping" é considerada simétrica, com uma concentração homogênea de impurezas residuais aceitadoras N_A em toda a extensão da camada epitaxial. Os átomos de silício, introduzidos em uma única monocamada atômica, com concentração $N_{Si}^{2D} \leq 2x10^{13}$ cm^{-2}, ficam homogeneamente distribuídos em uma camada de espessura L, devido à difusão térmica;

ii) parte dos átomos de Si irão compensar os aceitadores residuais, formando uma região de depleção com largura W, nos dois lados da camada com dopagem delta. Esquematicamente, a densidade volumétrica de cargas dos aceitadores $\rho_A(z)$ e dos doadores $\rho_D(z)$, levando em conta a difusão de Si, estão ilustradas na fig.IV.2.1 abaixo:

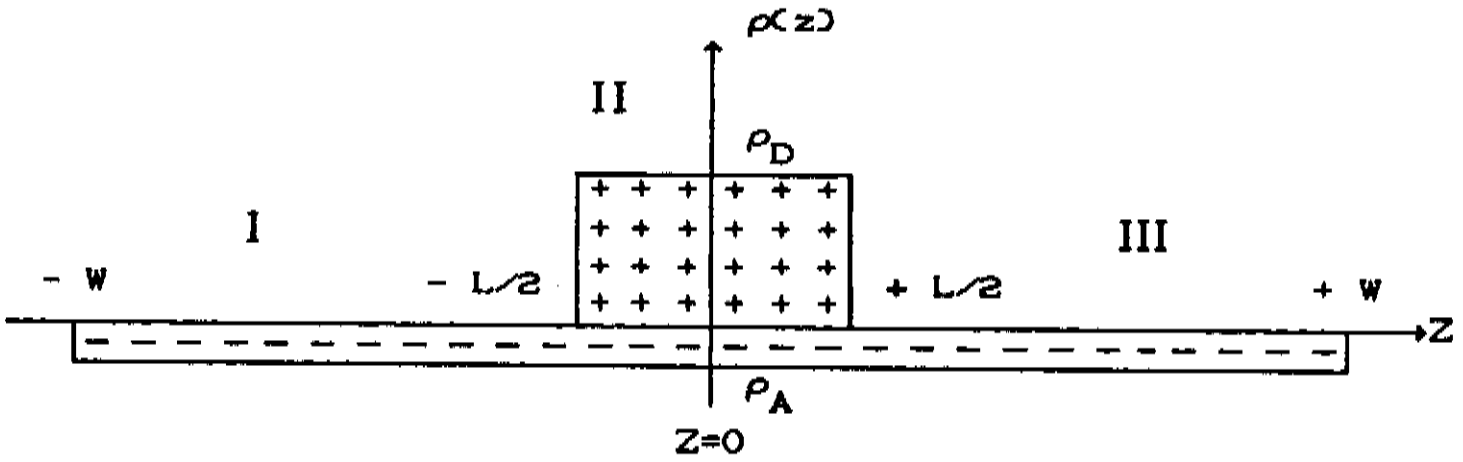


Fig.IV.2.1: Densidade volumétrica de carga dos doadores e aceitadores, levando em consideração a difusão de silício.

iii) fora da região depletada ($|z|>W$) o nível de Fermi E_F coincide com o nível aceitador e, dentro da região do poço de potencial ($|z|<W$), o nível de Fermi é determinado pela ocupação das várias sub-bandas. Em equilíbrio termodinâmico estes níveis de Fermi são iguais;

iv) a aproximação de função envelope, onde os efeitos do potencial cristalino estão refletidos nos parâmetros efetivos do material, como a energia do "gap" e a massa efetiva (Bastard, 1988);

v) aproximação de Hartree, onde o potencial devido a todos os elétrons é substituído por um potencial médio único. Cada elétron se move em um potencial auto-consistente ϕ_{sc}, que depende apenas da coordenada perpendicular à camada delta;

vi) o cálculo é feito na aproximação de bandas parabólicas, pois como mostrou Zrenner, *e outros* (1988.a), esta aproximação é justificada.

vii) o efeito da curvatura das bandas, devido aos estados superficiais da amostra não é levado em consideração.

viii) os efeitos de troca e correlação, não considerados na aproximação de Hartree, resultam em uma renormalização do "gap" (Meynadier, *e outros*; 1986). Estes efeitos podem ser incluídos como parâmetros de correção no resultado final do cálculo.

Uma vez que o potencial depende apenas da componente z e, considerando a aproximação de banda parabólica, a função de onda pode ser escrita como um produto das funções de Bloch (devido à periodicidade da rede), uma onda plana $\exp(ik_x x + ik_y y)$ para o movimento dos elétrons no plano xy e a função envelope $\chi_i(z)$ que

descreve os efeitos do potencial na direção z. Nestas condições a função envelope satisfaz a equação de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} - e\phi_{sc}(z) \right] \chi_i(z) = E_i \; \chi_i(z) \qquad \text{(IV.2.1.a)}$$

onde, as funções $\chi_i(z)$ satizfazem a condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz \; \chi_i(z) \; \chi_i^*(z) = 1 \qquad \text{(IV.2.1.b)}$$

e, E_i representa os autovalores de energia. O potencial $\phi_{sc}(z)$ na eq. IV.2.1.a é obtido através da solução da equação de Poisson unidimensional:

$$\frac{d^2\phi_{sc}(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi\rho(z)}{\varepsilon} \qquad \text{(IV.2.2)}$$

A densidade de carga $\rho(z)$, na relação acima representa a soma da distribuição de doadores $\rho_D(z)$, de aceitadores $\rho_A(z)$ e de elétrons $\rho_e(z)$, definidas por:

$$\rho_e(z) = -e \sum_i n_i \; |\chi_i(z)|^2 \qquad \text{(IV.2.3.a)}$$

$$\rho_A(z) = \begin{cases} -eN_A, & |z| \le W \\ 0 & , |z| > W \end{cases} \qquad \text{(IV.2.3.b)}$$

$$\rho_D(z) = \begin{cases} +eN_D, & |z| \leq L/2 \\ 0 & , |z| > L/2 \end{cases} \qquad \text{(IV.2.3.c)}$$

onde, n_i é a concentração de elétrons por unidade de área que ocupam a i-ésima sub-banda. À temperatura finita T, o nível de Fermi dos elétrons e a ocupação n_i estão relacionados através da expressão (Stern, *e outros*; 1984):

$$n_i = \frac{m\, K_B\, T}{\pi\, \hbar^2} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{E_f - E_i}{K_B T} \right) \right] \qquad \text{(IV.2.4)}$$

Para T=0, a energia de Fermi é dada por:

$$E_F = \frac{1}{N} \left[\frac{\pi\, \hbar^2 n_s}{m} + \sum_{i=1}^{N} E_i \right] \qquad \text{(IV.2.5)}$$

onde, N é o número de sub-bandas ocupadas. Em condições de equilíbrio o balanceamento das cargas fornece a relação :

$$n_s - N_{Si}^{2D} + 2\, W\, N_A = 0 \qquad \text{(IV.2.6.a)}$$

onde,

$$n_s = \sum_i n_i \qquad \text{(IV.2.6.b)}$$

A largura da região de depleção W é calculada considerando-se todos os aceitadores ionizados entre z=-W e z=W e para $|z| > W$ os aceitadores estão neutros. Nestas condições o equilíbrio termodinâmico determina a largura da região de depleção

que é dada por:

$$W = \sqrt{\frac{\varepsilon(E_g - E_A)}{2\Pi e^2 N_A}} \qquad (IV.2.7)$$

onde, E_g e E_A são a energia do "gap" do GaAs e a energia de ligação dos aceitadores, respectivamente. A largura da região de depleção varia com $N_A^{-1/2}$ e para uma amostra de GaAs contendo 1×10^{14} cm^{-3} de átomos aceitadores obtém-se $W \cong 4,6$ μm. Uma vez conhecido N_{Si}^{2D} e W, pode-se determinar n_s através da eq. IV.2.6.a.

O potencial $\phi_{sc}(z)$ na eq. IV.2.2, contém o termo de blindagem eletrônica, que depende da concentração dos elétrons e está relacionado com a função envelope $\chi_i(z)$ (eq. IV.2.1.a). É este termo no potencial que torna a equação de Schrödinger um problema de auto-valor não linear. Esta interdependência é que leva a resolver auto-consistentemente as equações de Schrödinger e de Poisson para a obtenção dos níveis de energia e as funções de onda para as sub-bandas na estrutura "δ-doping". Para resolver as eqs. IV.2.1 e IV.2.2. precisa-se das condições de contorno do problema. Na equação de Schrödinger a função envelope do estado ligado $\chi_i(z)$ deve tender a zero quando $z \rightarrow \pm\infty$ e a sua derivada deve ser contínua em todo o espaço. Na equação de Poisson, as condições de contorno do problema são: (i) campo elétrico auto-consistente nulo para $|z|>W$ (observa-se que o potencial é constante para $|z| \geq W$) e (ii) o zero do potencial em $z \rightarrow \pm\infty$. Nestas condições, a energia potencial total resultante $\varphi_{sc}(z)$, para a distribuição de cargas definida em IV.2.6, para as três

regiões da fig. IV.2.1 é dada por:

$$\varphi_{sc}(z) = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon}\begin{cases} \varphi_e(z) + \frac{N_A}{2}(z+W)^2 & ; -W \leq -z \leq -L/2 \\ \varphi_e(z) + \frac{N_A}{2}(z+W)^2 - \frac{N_{Si}^{2D}}{2L}(z+L/2)^2 & ; |z| \leq L/2 \\ \varphi_e(z) + \frac{N_A}{2}(z+W)^2 - N_{Si}^{2D}\, z & ; L/2 < z \leq W \\ 0 & ; |z| > W \end{cases} \qquad (IV.2.8)$$

onde o potencial devido aos elétrons $\varphi_e(z)$ é dada por:

$$\varphi_e(z) = \sum_i n_i \int_{-\infty}^{z} dz' \int_{-\infty}^{z'} dz'' \; |\chi_i(z'')|^2 \qquad (IV.2.9)$$

O cálculo auto-consistente dos níveis de energia está esquematizado no fluxograma da fig.IV.2.2. abaixo:

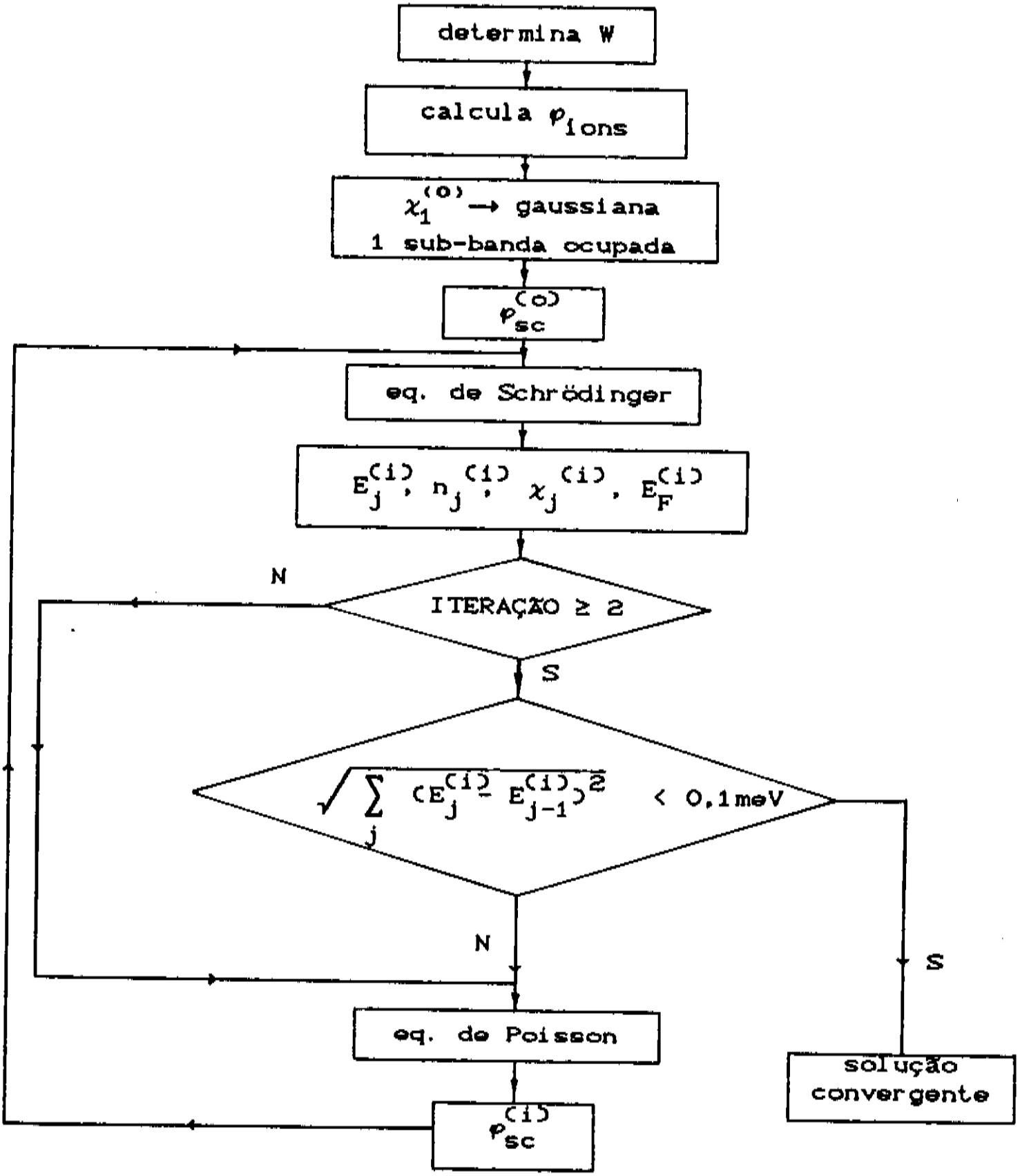


Fig.IV.2.2. Fluxograma para o cálculo auto-consistente dos níveis de energia em "δ-doping".

Inicialmente, considera-se uma única sub-banda ocupada e utiliza-se como função de onda tentativa, uma gaussiana $\chi_1^{(o)}$ centrada em z=0. Em seguida, calcula-se $\varphi_{sc}^{(o)}$ e resolve-se a equação de Schrödinger obtendo-se os primeiros valores para $E_j^{(0)}$, $n_j^{(0)}$ e $E_F^{(0)}$, resultando assim no primeiro potencial auto-consistente $\phi_{sc}^{(1)}$. Com este potencial, retorna-se à equação de Schrödinger obtendo-se novos valores para E_j , n_j , χ_j e E_F. Neste passo do programa os valores determinados para os E_j são armazenados em vetores, que serão utilizados para efeito de comparação. Com estas novas funções de onda, calcula-se novamente o potencial auto-consistente e, então, este é introduzido mais uma vez na eq. de Schrödinger para a obtenção dos novos valores de E_j, n_j, χ_j e E_F. O critério de convergência estabelecido é de que a raiz quadrada da soma dos quadrados das diferenças entre as energias de duas iterações consecutivas seja menor que 0,1 meV. Desta maneira, assegura-se que cada sub-banda tenha uma precisão melhor que 0,1 meV. Esta precisão é suficiente para a comparação com resultados experimentais e está dentro dos erros introduzidos nas aproximações iniciais. Para facilitar a convergência da solução, utiliza-se o método iterativo desenvolvido por Stern (1970), onde o potencial subsequente a cada iteração, $\varphi_{in}^{(j+1)}$, é uma combinação linear entre o potencial auto-consistente calculado anteriormente, $\varphi_{in}^{(j)}$, e o novo potencial, $\varphi_{out}^{(j+1)}$, da seguinte forma (Stern, 1970):

$$\varphi_{in}^{(j+1)}(z) = \varphi_{in}^{(j)}(z) + f^{(j+1)}W^{(j)}(z) \qquad \text{(IV.2.10)}$$

onde, $W^{(j)}(z)$ é definido por:

$$W^{(j)}(z) = \varphi_{out}^{(j)}(z) - \varphi_{in}^{(j)}(z) \qquad (IV.2.11)$$

O fator f, independente de z, varia entre 0 e 1. Um valor pequeno para f fornece uma convergência suave, porém lenta, enquanto que para valores próximos de 1, a convergência é rápida, mas em alguns casos pode ocorrer a divergência da solução. Utiliza-se como uma medida da convergência o máximo valor da diferença $W^{(j)}(z)$, denominado de w_n. Observou-se que a convergência é obtida mais rapidamente utilizando-se (Stern, 1970):

$$f^{(j+1)} = f^{(j)}/(1 - r) \qquad (IV.2.12)$$

onde, $r = w_j/w_{j-1}$. Assim, se a convergência é lenta e r é próximo de 1, o novo valor de f será bem maior do que o anterior. Se a convergência é rápida, r será próximo de 0 e f se mantém, praticamente, inalterado. Assim, através deste, método é possível se obter uma convergência mais rápida, diminuindo o tempo de computação.

A estrutura de sub-bandas calculadas auto-consistentemente em uma amostra "δ-doping" em GaAs está mostrada na fig.IV.2.3. Neste cálculo, utiliza-se uma concentração de doadores de $5x10^{12}$ cm^{-2}, concentração residual de aceitadores de $1x10^{14}$ cm^{-3}, temperatura de 0K e uma placa de cargas positivas de espessura 5Å centrada em z=0. Nesta figura, também graficou-se

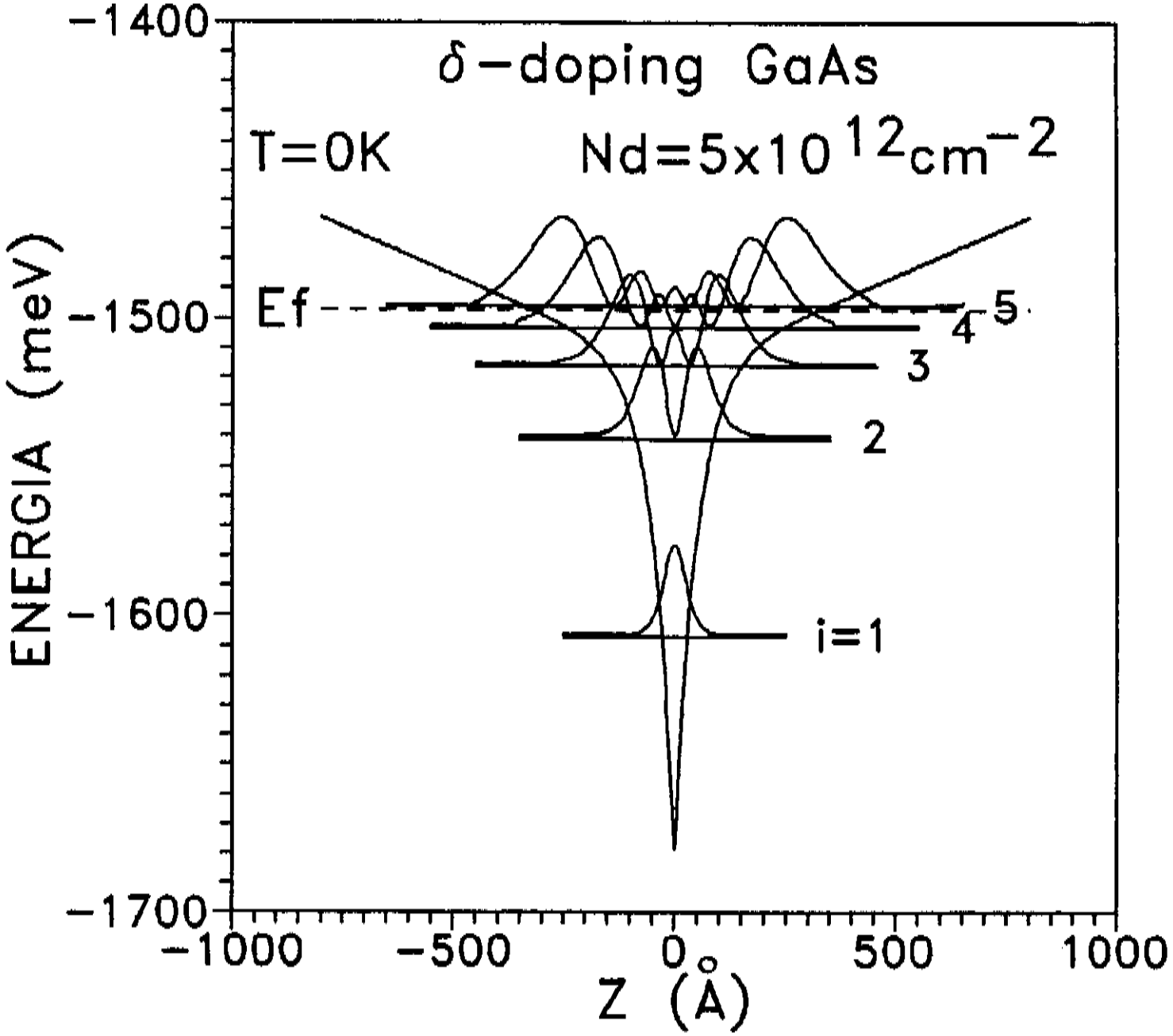


Fig.IV.2.3: Perfil do potencial (na banda-de-condução), quadrado das funções-de-onda e níveis de energia para um sistema "δ-doping" ideal (sem difusão), L=5 Å e $N_A=1x10^{14}cm^{-3}$. As separações em energia entre as quatro primeiras sub-bandas são, respectivamente, 66,4 meV, 24,4 meV e 12,9 meV.

o quadrado dos módulos das funções de onda, porém, para efeitos de visualização, este foi normalizado em relação à amplitude máxima em cada sub-banda. As separações em energia entre as quatro primeiras sub-bandas abaixo do nível de Fermi são de 68,4 meV, 24,4 meV e 12,9 meV, respectivamente, sendo as ocupações n_1=3,05 x 10^{12} cm^{-2} (ou 62%), n_2=1,23 x 10^{12} cm^{-2} (ou 24,3%), n_3=5,25 x 10^{11} cm^{-2} (ou 10,5%) e n_4=1,58 x 10^{11} cm^{-2} (ou 3,2%) e nas demais sub-bandas a ocupação é menor do que 1%. Da fig.IV.2.3 observou-se que os elétrons ficam confinados em uma região em torno de 1000 Å de largura. Devido à repulsão eletrostática, os buracos são repelidos para fora da região de dopagem, a qual age como uma barreira e, portanto, não existe confinamento de buracos na banda-de-valência. Esta separação espacial dos elétrons e buracos reduz significativamente a probabilidade de recombinação direta entre os mesmos, inviabilizando assim a espectroscopia de luminescência como forma de análise da estrutura de sub-bandas em "δ-doping".

Vários fatores como a difusão dos átomos de silício, a concentração N_{Si}^{2D} , concentração de aceitadores N_A e a temperatura podem influenciar na forma, na largura e na profundidade do poço de potencial, bem como na separação em energia inter sub-bandas. Para analisar a influência destes fatores no sistema "δ-doping", fez-se um estudo sistemático, calculando a ocupação de elétrons n_i e a energia E_i em relação ao nível de Fermi, em função de L , N_{Si}^{2D} ,T e N_A.

A fig.IV.2.4 mostra a forma do poço de potencial na

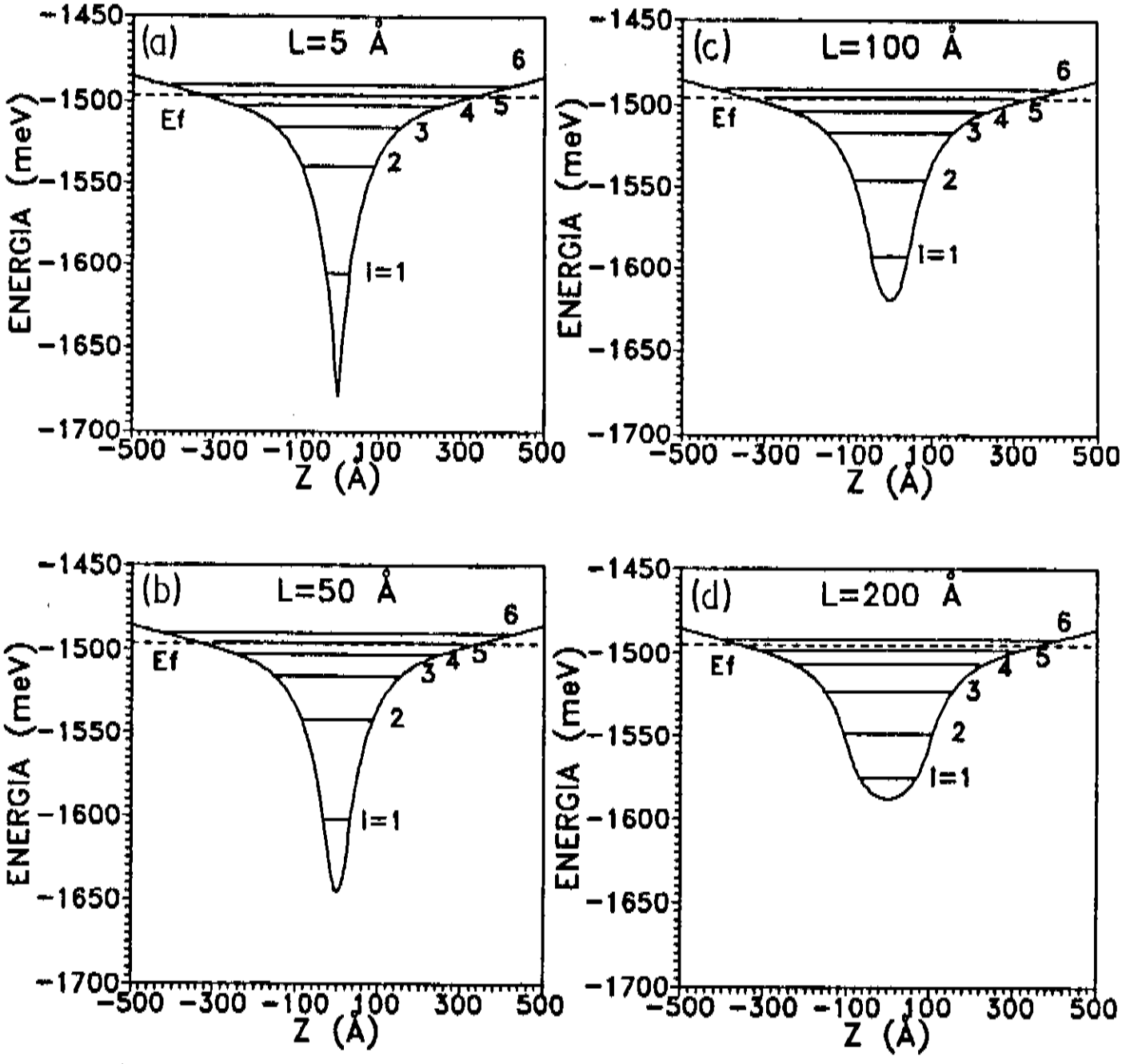


Fig.IV.2.4: Perfis dos poços de potencial e níveis de energia, para estruturas "δ-doping" com diferentes larguras L, considerando T=0K, $N_A=1\times10^{14}$ cm^{-3} e $N_{Si}^{2D} = 5\times10^{12}$ cm^{-2}.

banda de condução e os respectivos níveis de energia para diferentes larguras L. A profundidade do poço de potencial é bastante sensível à difusão dos átomos de silício, experimentando um decréscimo de aproximadamente 91 meV quando L varia de 5 para 200 Å. A fig. IV.2.5 mostra a ocupação eletrônica n_i e as energias $(E_i - E_F)$, calculadas para as várias sub-bandas, em função da largura L. Pode-se observar que para valores de L>300 Å a forma do poço de potencial se assemelha a de um poço quadrático, onde os espaçamentos entre as sub-bandas ficam, praticamente, eqüidistantes. Com o aumento de L as separações entre os níveis diminuem, significativamente, para as três primeiras sub-bandas abaixo do nível de Fermi, porém para os níveis superiores as variações são muito pequenas. A diferença entre os dois primeiros níveis passa de 90,8 meV para 6,9 meV, quando L varia desde 5 até 500 Å (fig. IV.2.5.b). A ocupação fracional da primeira sub-banda diminui de 62% para para 29% quando L varia de 5 para 500 Å. Este decréscimo é consequência do aumento da população dos níveis mais excitados, como pode-se verificar diretamente da fig.IV.2.5(a). De uma maneira geral, as figs. IV.2.5.a e IV.2.5.b mostram que tanto as separações entre as sub-bandas, como as suas ocupações podem fornecer uma medida quantitativa da difusão de silício envolvida nas amostras "δ-doping". Entretanto, apesar das separações em energia entre as primeiras sub-bandas serem mais sensíveis às variações de L, as mesmas estão localizadas abaixo do nível de Fermi, impossibitando a observação da absorção óptica com excitação de elétrons da banda-de-valência para as primeiras

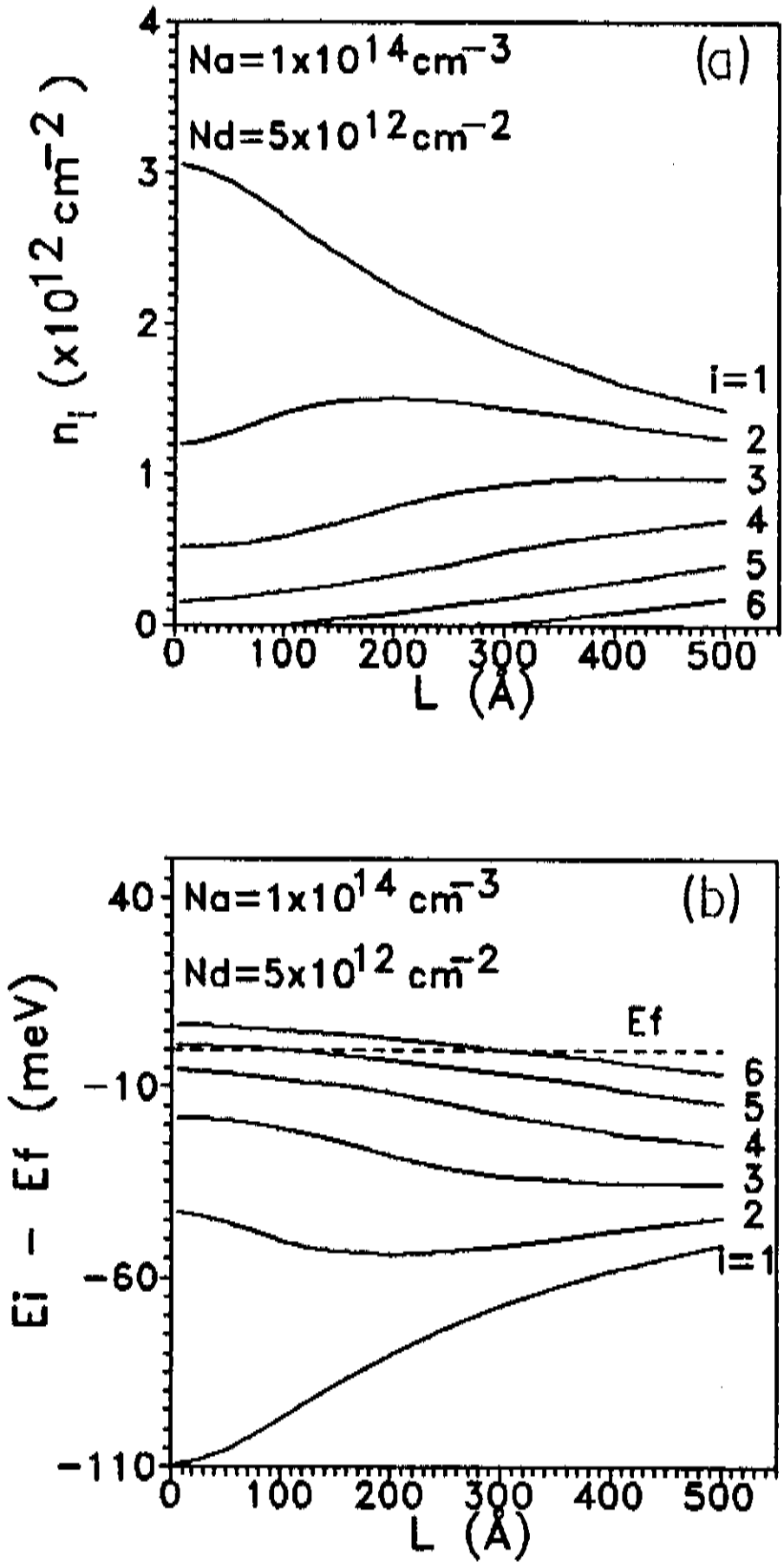


Fig.IV.2.5: (a) concentração de elétrons e (b) energias das várias sub-bandas, em função da largura L, para T=0K.

sub-bandas.

A fig.IV.2.6 ilustra o efeito da concentração de Si na forma do poço do potencial, para T=0K e L=100Å. Pode-se observar uma forte influência de N_{Si}^{2D} na profundidade (V_B) e na largura do poço de potencial. O valor de V_B varia de -1517 meV para -2140 meV quando N_{Si}^{2D} passa de $1x10^{11}$ cm^{-2} para $5x10^{13}$ cm^{-2}. Com o aumento da concentração de Si mais sub-bandas são ocupadas , provocando assim o alargamento e aprofundamento do poço de potencial, como consequência do aumento dos íons positivos e da extensão espacial das funções de onda $\chi_i(z)$ dos estados mais excitados. A fig.IV.2.7 mostra como as ocupações n_i e as energias (E_i $-E_F$) variam com N_{Si}^{2D}. Para $1 \times 10^{11} \leq N_{Si}^{2D} \leq 5 \times 10^{11}$ cm^{-2} apenas a primeira sub-banda está ocupada e acima de 5×10^{11} cm^{-2} começam a ser ocupadas a segunda e terceira sub-bandas. A partir de $N_{Si}^{2D} \cong 1 \times 10^{13}$ cm^{-2} a ocupação n_i aumenta quase que linearmente com N_{Si}^{2D} e para a maior concentração de Si calculada, 5×10^{13} cm^{-2}, oito sub-bandas estão ocupadas.

A fig.IV.2.8 mostra a influência da temperatura na forma do poço de potencial, para $N_{Si}^{2D} = 5x10^{12}$ cm^{-2}, L=100 Å e $N_A = 1x10^{14}$ cm^{-3}. Com o aumento da temperatura os elétrons das sub-bandas mais baixas são excitados termicamente para as sub-bandas de maior energia. Assim, ocorre um aumento na extensão das funções de onda $\chi_i(z)$ dos estados excitados, provocando o alargamento e aprofundamento do poço de potencial. Quando a temperatura varia de 0 para 300 K o valor de V_B passa de -1620 meV para -1671 meV. Na fig.IV.2.9 estão mostrados as variações de n_i e

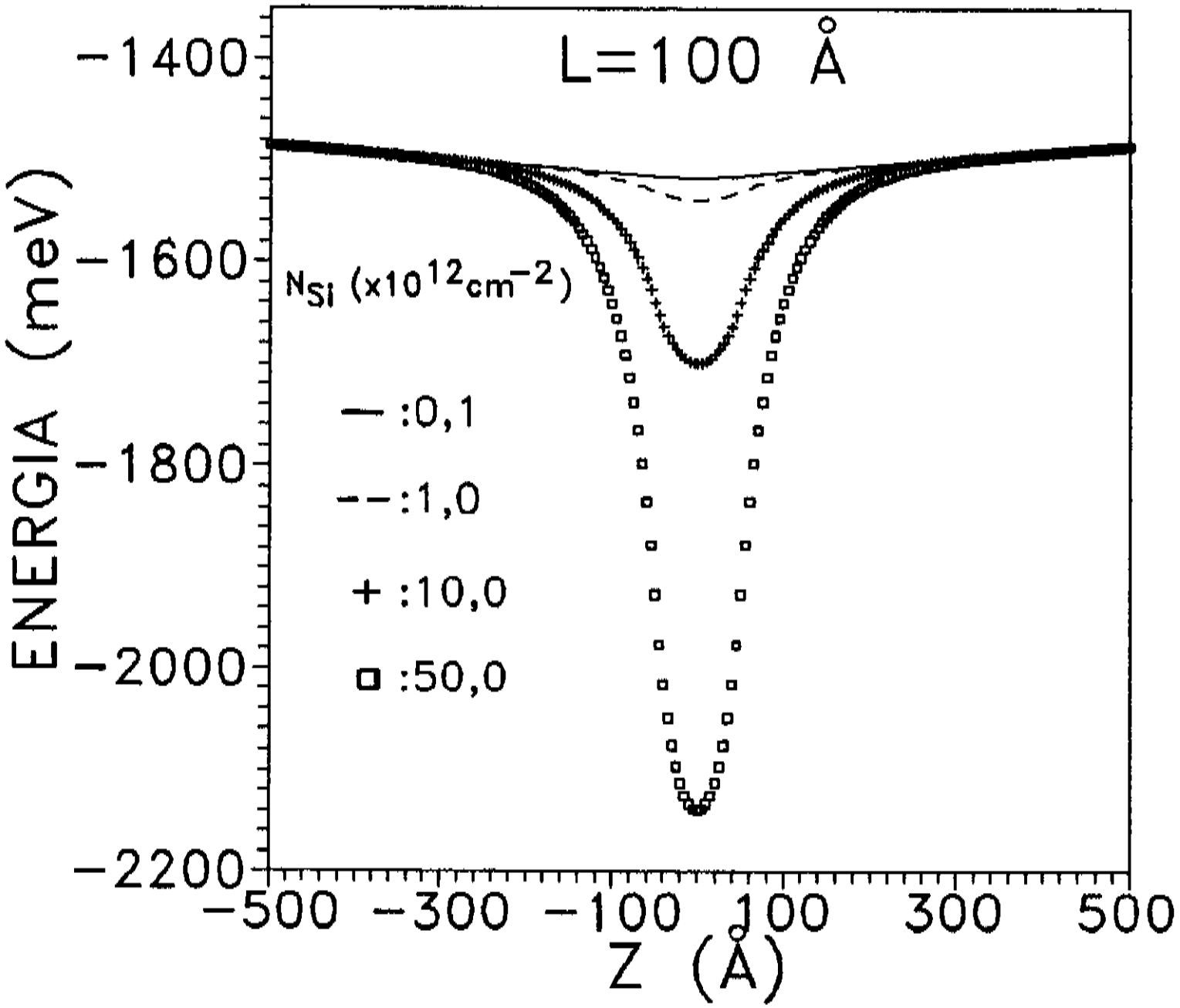


Fig.IV.2.6: Perfis dos poços de potencial, para diferentes concentrações N_{Si}^{2D}, para T=0K e N_A=1x10^{14} cm^{-3}.

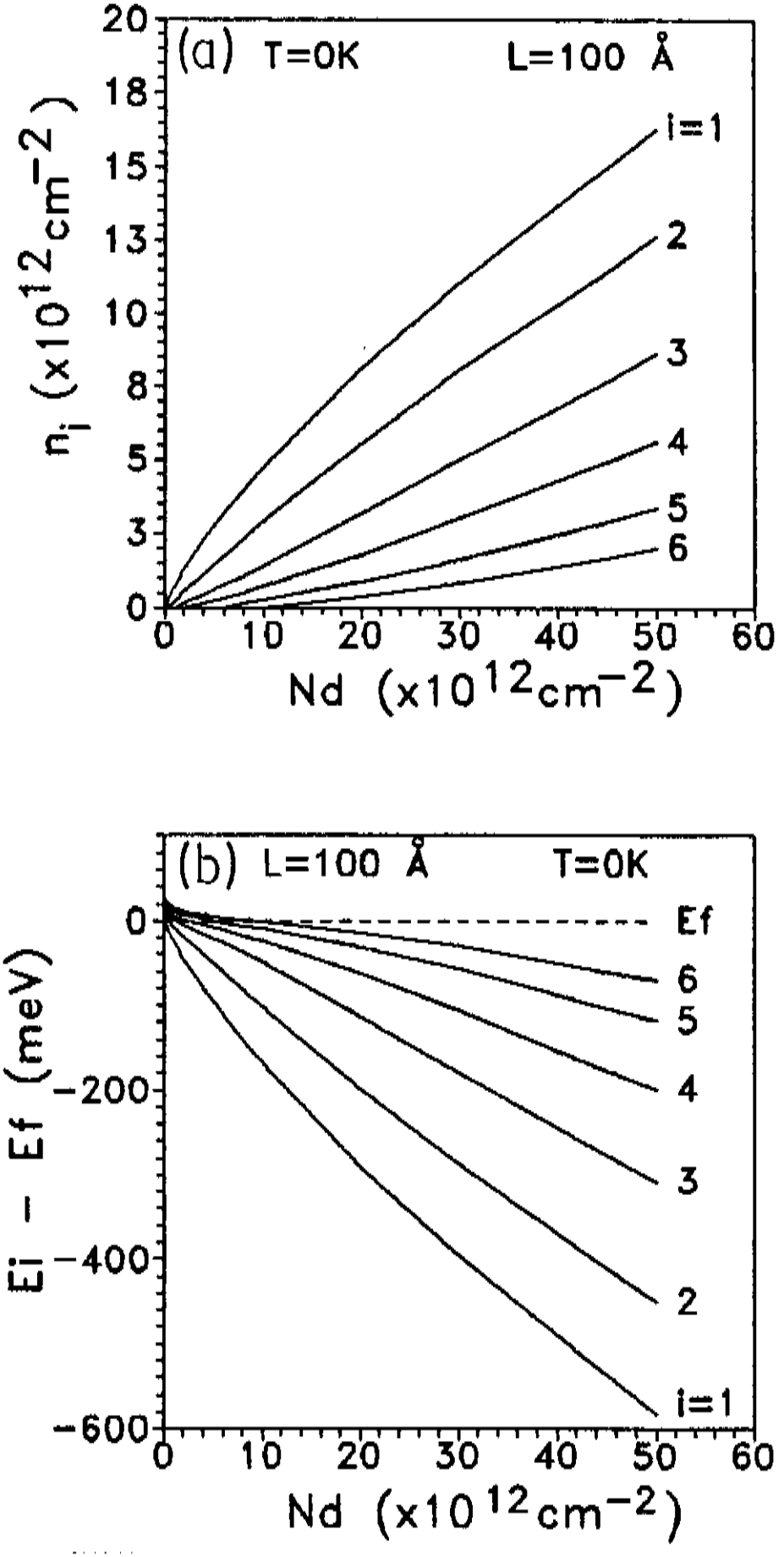


Fig.IV.2.7: (a) concentração de elétrons e (b) energias das várias sub-bandas, em função da concentração N_{Si}^{2D}, para $N_A=1x10^{14}$ cm^{-3}.

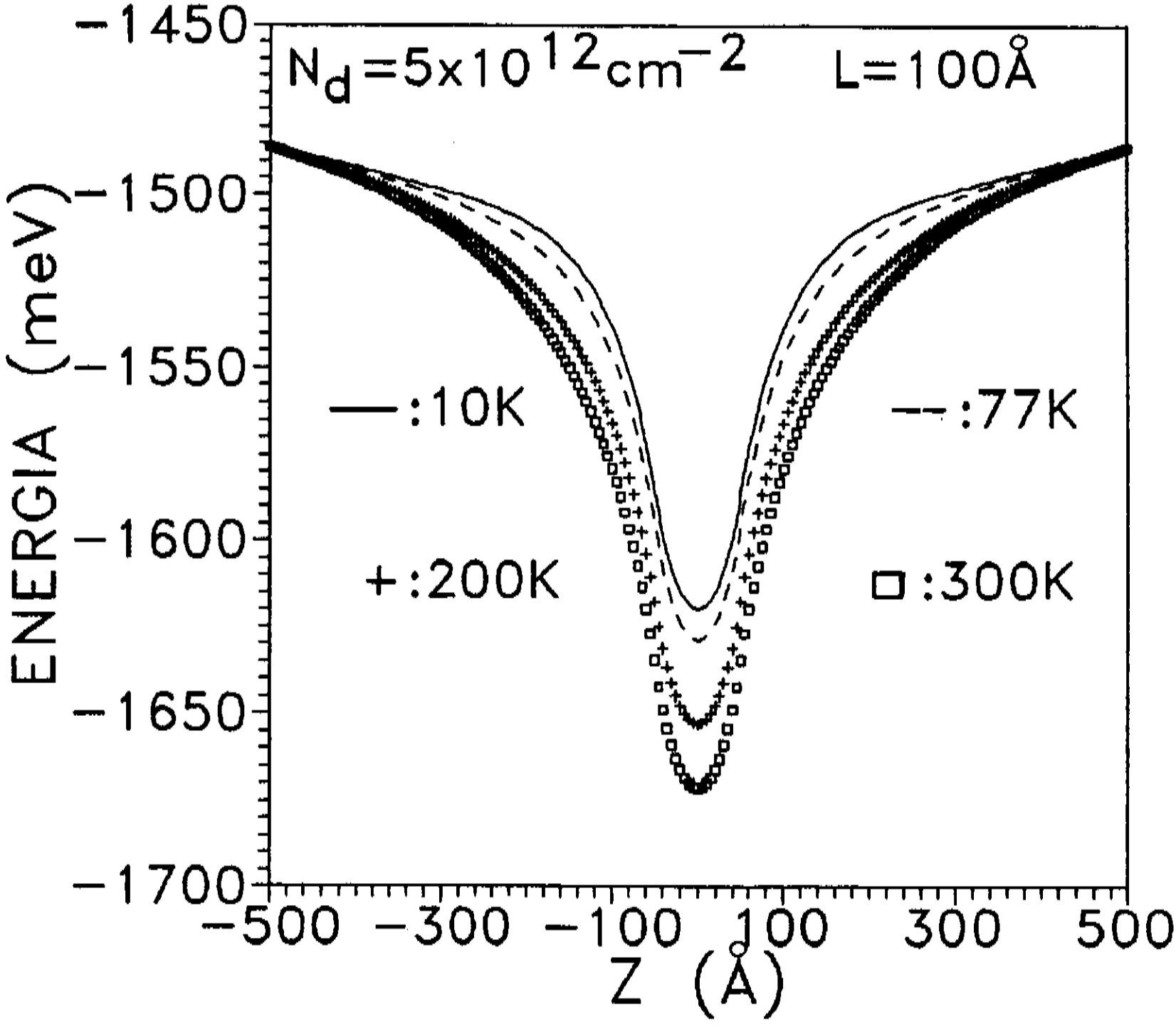
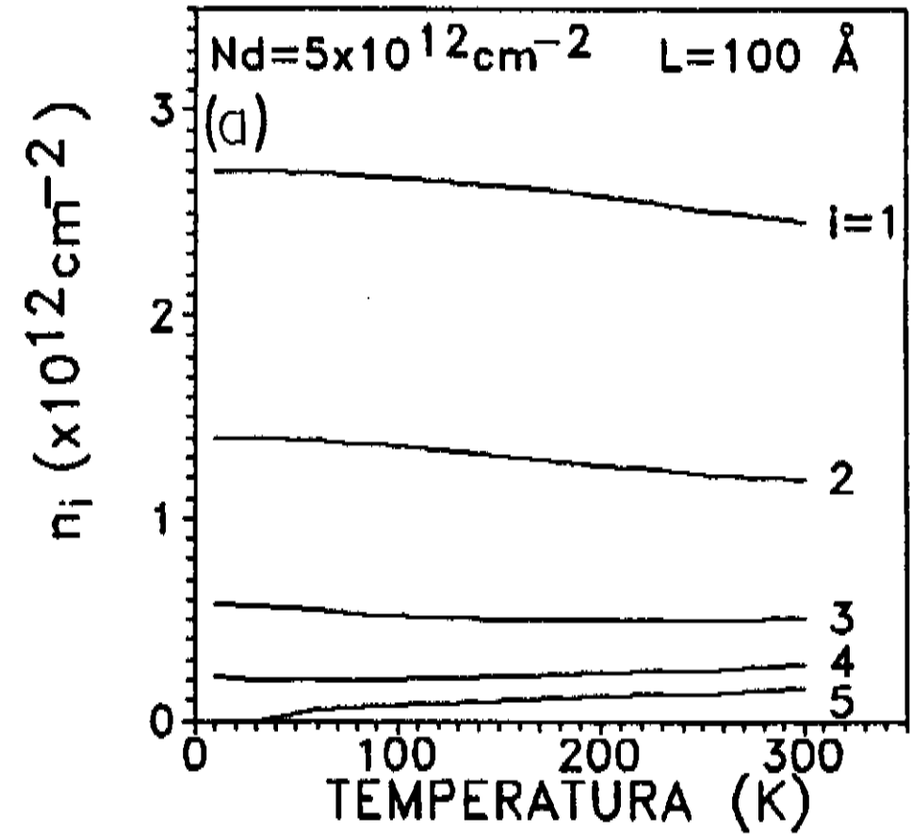


Fig.IV.2.8: Perfis dos poços de potencial do "δ-doping" para diferentes temperaturas e $N_A=1x10^{14}$ cm^{-3}.



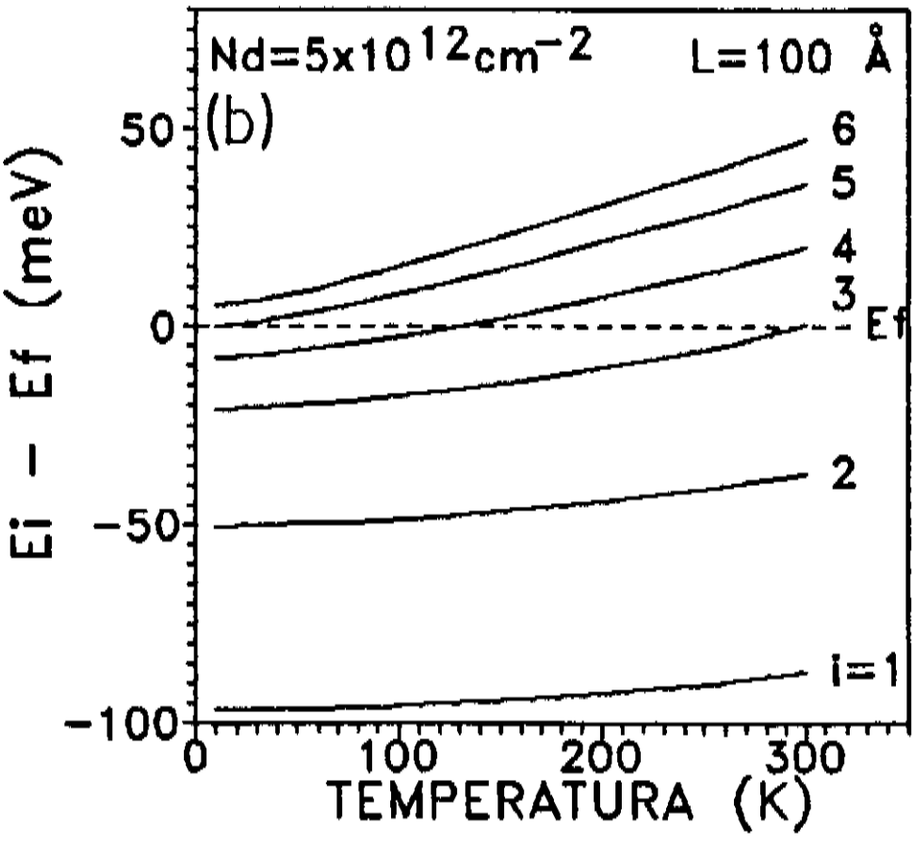


Fig.IV.2.9: (a) concentração de elétrons e (b) energias das várias sub-bandas, em função da temperatura, para $N_A=1x10^{14}$ cm^{-3}, $N_{Si}^{2D}=5x10^{12}$ cm^{-2} e L=100 Å.

(E_1-E_F) em função de T. As ocupações fracionais de elétrons das três primeiras sub-bandas variam de 55%, 28% e 11,8% para 50%, 24,2% e 10,4%, quando T varia de 0 para 300K. As posições das sub-bandas em relação ao nível de Fermi no sistema "δ-doping" são bastante influenciadas pelo aumento da temperatura. Para T=0 K, praticamente quatro sub-bandas estão abaixo do nível de Fermi, e quando T aumenta para 300 K apenas as duas primeiras sub-bandas estão abaixo do nível de Fermi. As separações em energia entre as três primeiras sub-bandas permanecem, praticamente, inalteradas no intervalo de temperatura entre 0 e 300 K. Porém, para as sub-bandas mais altas estas separações sofrem aumentos mais significativos, principalmente para as sub-bandas próximas ao nível de Fermi, como no caso de (E_5-E_F), que varia de 0,3 meV,a T=0K, para 38,3 meV em T=300 K.

A concentração residual de aceitadores N_A exerce uma forte influência na forma do poço de potencial, mas é menos significativa na sua profundidade, como mostra a fig.IV.2.10. O valor de V_B diminui em torno de 74,6 meV quando N_A varia desde $1x10^{14}$ cm^{-3} para $1x10^{16}$ cm^{-3}. O termo do potencial, devido aos aceitadores na eq. IV.2.8, influencia a forma do potencial na região fora da placa carregada n^+ e, com o aumento de N_A a inclinação do perfil do potencial aumenta com $(N_A/2)(z + w)^2$. Este aumento na inclinação do perfil de potencial produz uma diminuição na extensão das funções de onda dos estados excitados, diminuindo a profundidade do poço e, consequentemente, a população nestas sub-bandas. Este comportamento se reflete na variação de n_i e

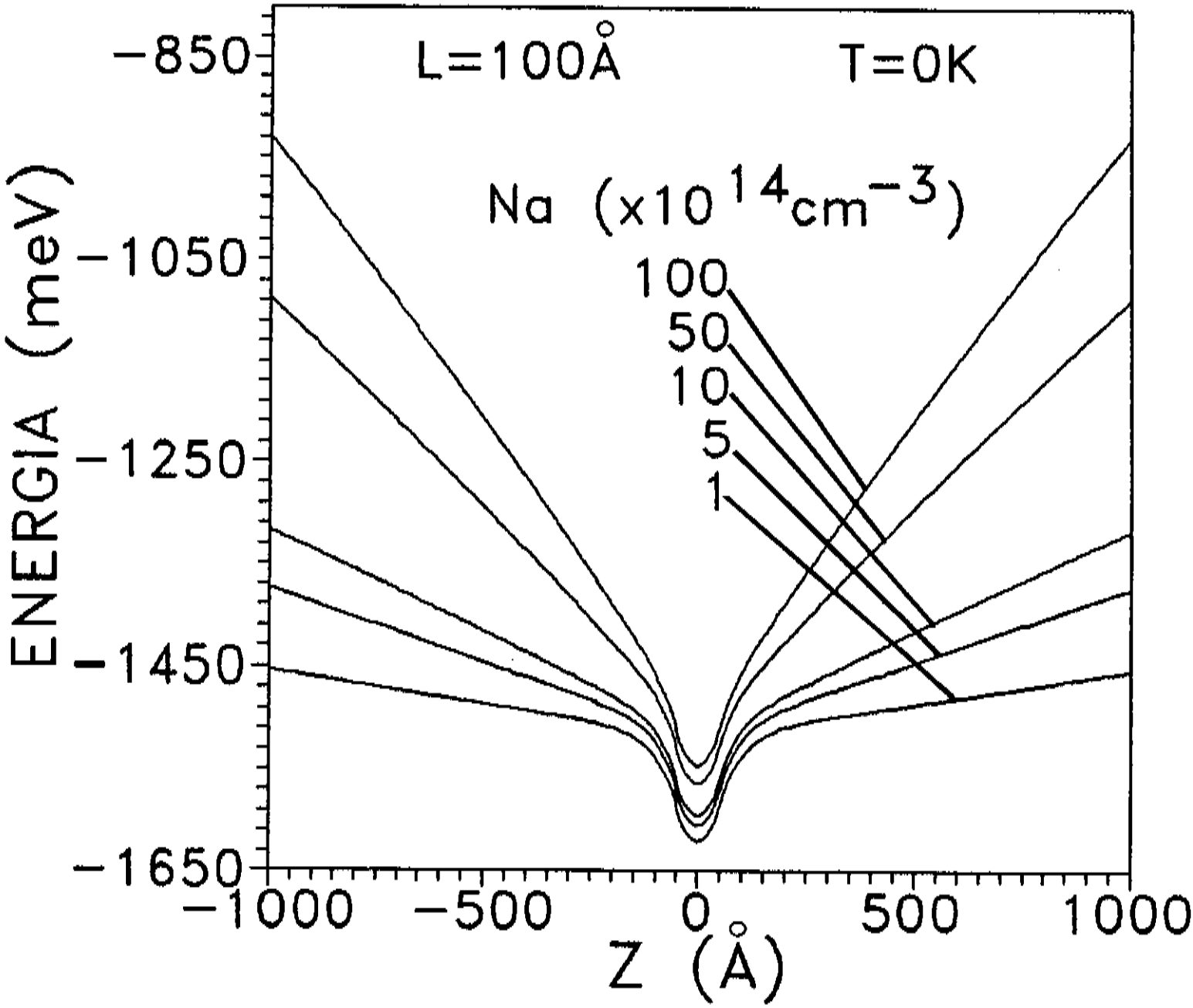


Fig.IV.2.10: Perfis dos poços de potencial para diferentes concentrações residuais de aceitadores, para $N_{Si}^{2D} = 5x10^{12}$ cm^{-2}, L=100 Å e T=0K.

$(E_i - E_F)$, mostrada na fig.IV.2.11. A ocupação e a posição em energia das três primeiras sub-bandas permanecem, praticamente, inalteradas quando N_A varia desde $1x10^{14}$ cm^{-3} para $1x10^{15}$ cm^{-3}. Porém, para valores de $N_A > 1x10^{16}$ cm^{-3} a ocupação nas duas primeiras sub-bandas aumenta, enquanto que as concentrações nas sub-bandas mais excitadas diminuem.

IV.3: Transições ópticas no sistema "δ-doping":

Como foi discutido anteriormente, a separação espacial de elétrons e buracos na estrutura "δ-doping" torna a probabilidade de recombinação direta muito pequena, dificultando, demasiadamente, a espectroscopia de luminescência. Assim, técnicas ópticas sensíveis à absorção, por exemplo, relacionadas à derivada do coeficiente de absorção, devem ser utilizadas para estudo da estrutura de sub-bandas em "δ-doping". Em particular, a espectroscopia de fotorefletância tem demonstrado ser de grande utilidade no estudo de níveis confinados em micro-estruturas (Glembocki, *e outros*;1985). As transições inter-bandas, no caso de fotoabsorção em "δ-doping", envolveriam estados contínuos 3D na banda-de-valência e estados localizados 2D na banda-de-condução e a probabilidade destas transições dependem da superposição ("overlap") das funções de onda da banda-de-valência e as funções envelope das sub-bandas na banda-de-condução no poço de potencial. Em primeira aproximação, pode-se relacionar, tentativamente, às transições observadas experimentalmente com o máximo da

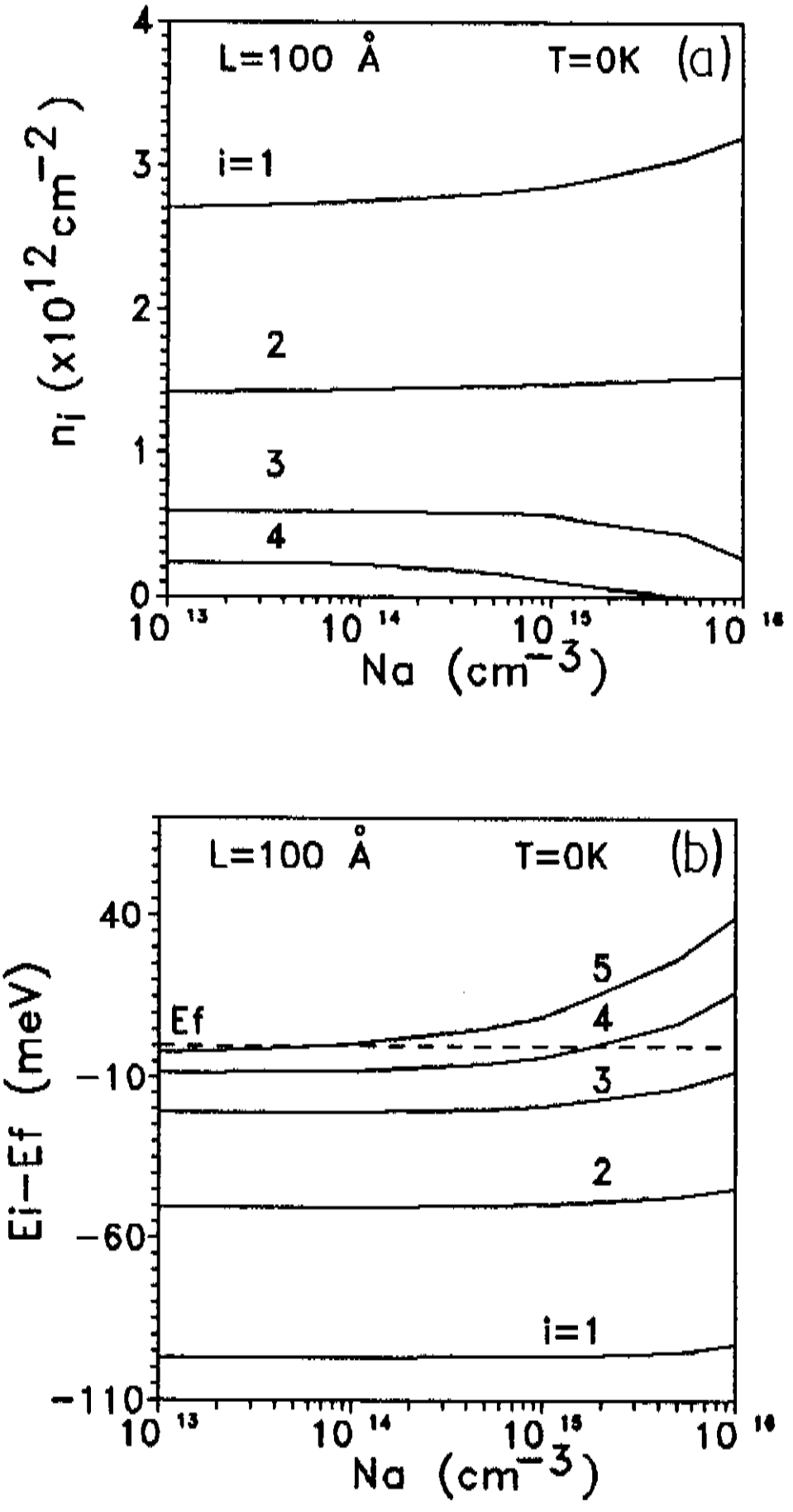


Fig.IV.2.11: (a) concentração de elétrons e (b) energias das várias sub-bandas, em função da concentração de aceitadores, para $N_{Si}^{2D} = 5\times10^{12}$ cm^{-2}.

probabilidade $(\chi_i(z)\chi_i^*(z))$ para cada sub-banda acima do nível de Fermi. Esta correlação é uma tentativa para localizar o "centro de gravidade" das estruturas existentes no coeficiente de absorção. Espera-se que as posições reais destas transições sejam em torno destes máximos. Isto implica que a principal contribuição para as estruturas ópticas nos espectros de PR de cada sub-banda, estará localizada fora da região da camada que contém os íons dopantes e, onde o potencial varia, lentamente, com o aumento de z. Consequentemente, as energias das transições ópticas da banda-de-valência para as primeiras sub-bandas acima do nível de Fermi na banda-de-condução serão, praticamente, indistinguíveis. A fig. IV.3.1 ilustra (tentativamente) os máximos das transições ópticas mais prováveis para as primeiras sub-bandas acima do nível de Fermi, considerando T=0 K, L=100 Å, $N_A=1\times10^{15}$ cm^{-3} e N_{Si}^{2D} = 5×10^{12} cm^{-2}. A diferença em energia entre as transições para a 5a. e a 6a. sub-bandas é da ordem de 1 meV, o que é indistinguível experimentalmente. De um modo geral as transições dependem fundamentalmente da localização do máximo da probabilidade $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$ em cada sub-banda. Assim, espera-se que alterações nas energias das transições (E_i-E_F) ocorram quando a forma do potencial perto do nível de Fermi sofra mudanças significativas. Para uma mesma amostra, isto só é possível, por exemplo, com o aumento da temperatura, que aprofunda o poço de potencial e abaixa o nível de Fermi.

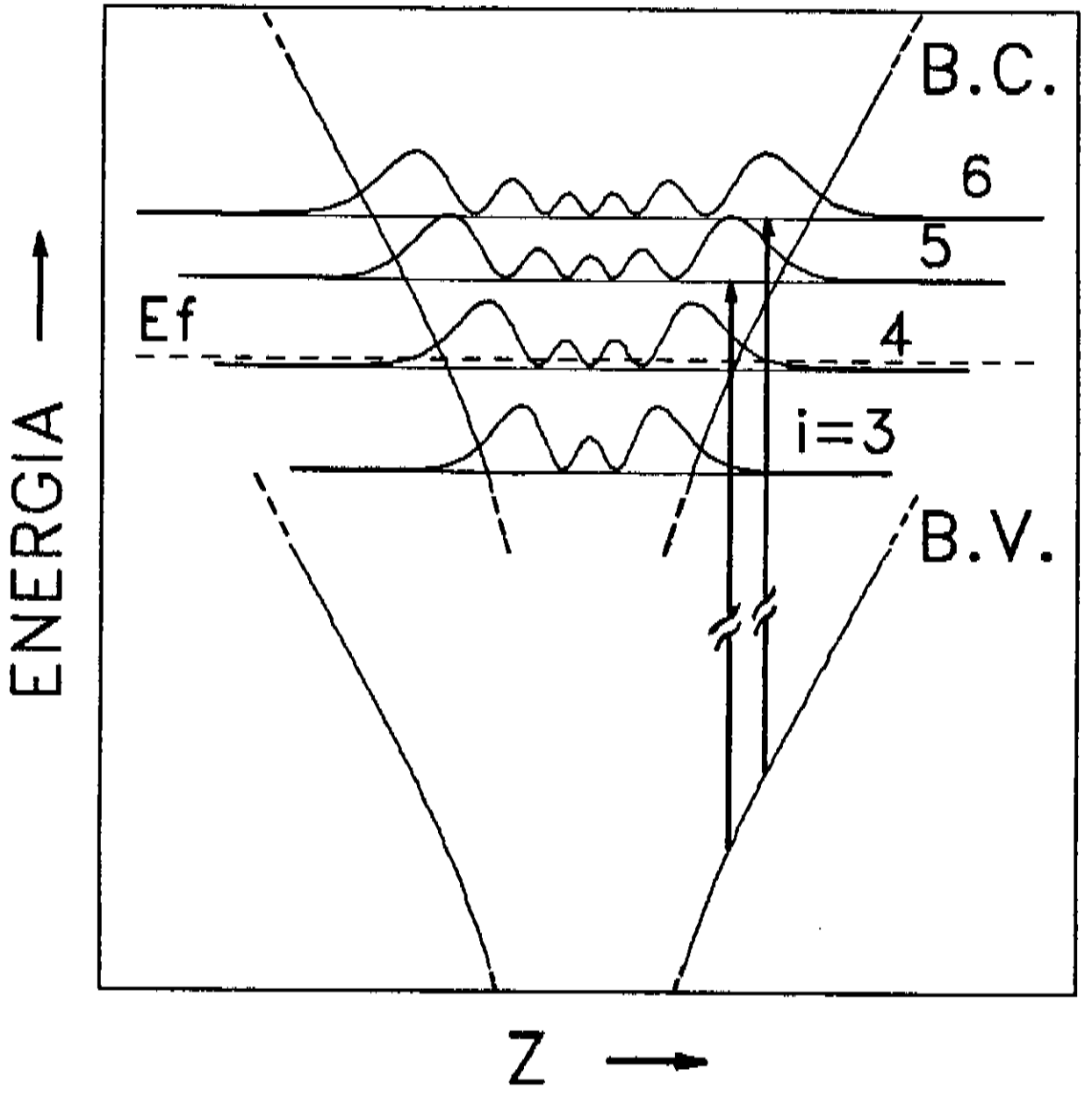


Fig.IV.3.1: Ilustração esquemática das transições ópticas entre estados contínuos na banda-de-valência estados localizados na banda-de-condução, para camadas semicondutoras contendo uma única dopagem delta, para T=0K, L=100 Å, $N_A=1\times10^{15}$ cm^{-3} e $N_{Si}^{2D} = 5\times10^{12}$ cm^{-2}.

V. RESULTADOS E DISCUSSÕES:

V.1.: Medidas de fotoluminescência em camadas de GaAs contendo dopagem planar de silício:

Objetivando informações sobre a qualidade das camadas de GaAs, utilizadas para a fabricação de amostras com dopagem delta, foram realizadas medidas de fotoluminescência (PL) a 2K. Espectros típicos de PL de uma amostra de GaAs com dopagem delta estão mostrados na fig.V.1.1. O espectro da fig. V.1.1.a, correspondente à região conhecida como excitônica, mostra três transições devido à recombinação de excitons ligados a impurezas doadoras [ionizadas, (D^+-X) e neutras, (D^o-X)] e a impurezas aceitadoras neutras (A^o-X) (Bernussi, *e outros*; 1987 e 1988). Não foi observada nenhuma transição na região espectral compreendida entre (A^o-X) e (e-C_{As}), relacionada com exciton ligado a defeitos e/ou impurezas profundas, como mencionado por Skolnick, *e outros* (1988), indicando uma baixa concentração ou inexistência destes defeitos nas amostras analisadas. No espectro da fig.V.1.1.b observa-se apenas uma única banda com máximo em 1,493 eV. Esta banda está associada à transição banda-de-condução ao nível aceitador do C_{As} (Bernussi, *e outros*; 1988). Assim, as impurezas aceitadoras residuais são devido, principalmente, à incorporação de carbono durante o processo de crescimento. Medidas de efeito Hall, à temperatura ambiente, em camadas epitaxiais de GaAs sobre

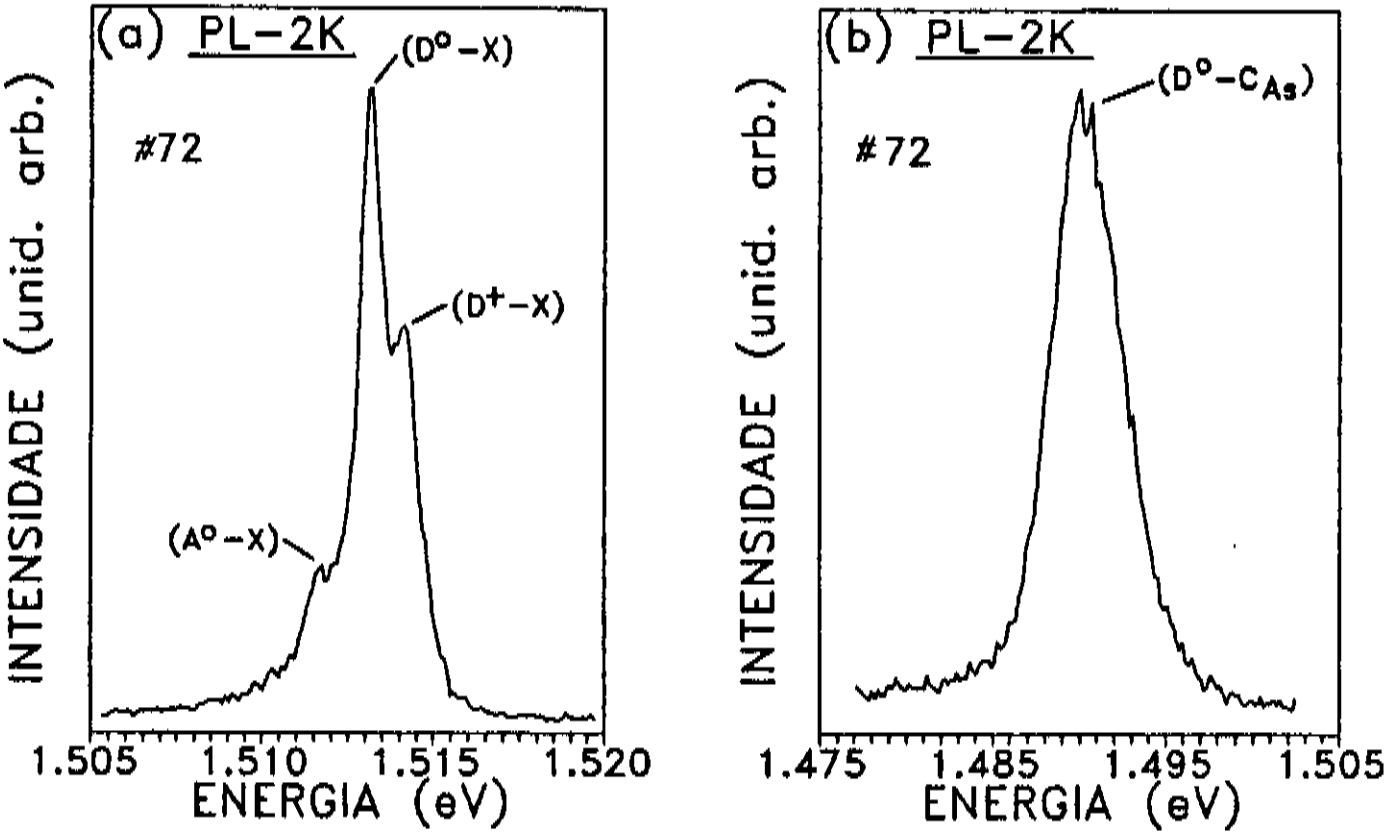


Fig.V.1.1: Espectros típicos de PL a 2K, de uma amostra "δ-doping" (#72), para as regiões (a) excitônica e (b) de impurezas residuais aceitadoras.

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

substratos semi-isolantes, crescidas nas mesmas condições das amostras "δ-doping" aqui analisadas, mostraram que estas são do tipo p, com densidade de portadores livres da ordem $1x10^{15}$ cm^{-3}. De uma maneira qualitativa, pode-se dizer também, através da separação espectral das linhas excitônicas da fig.V.1.1.a, que a concentração de impurezas residuais é da ordem de $1x10^{15}$ cm^{-3} (Ashen, *e outros*; 1975). Outro fato relevante sobre as medidas de PL é a inexistência de quaisquer outras transições, além daquelas mostradas na fig.V.1.1, em um intervalo de ± 200 meV em torno da energia do "gap" do GaAs, ou seja, não foi observada nenhuma transição radiativa associada aos níveis confinados no "δ-doping". Isto se deve ao fato de que os elétrons e os buracos foto-excitados, na região do potencial do "δ-doping", serem rapidamente separados espacialmente pelo campo local. Por outro lado, a foto-absorção com a excitação de um elétron da banda-de-valência, para as sub-bandas vazias no potencial "δ-doping" são transições permitidas. Assim, a espectroscopia de PR, que está relacionada com processos de absorção, mostra ser adequada para estudar a estrutura de sub-bandas nas amostras "δ-doping".

V.2.: Medidas de fotorefletância em amostras de GaAs com dopagem delta:

A fig.V.2.1 mostra um espectro típico de PR a 77K de uma camada de GaAs com dopagem delta, com concentração nominal de

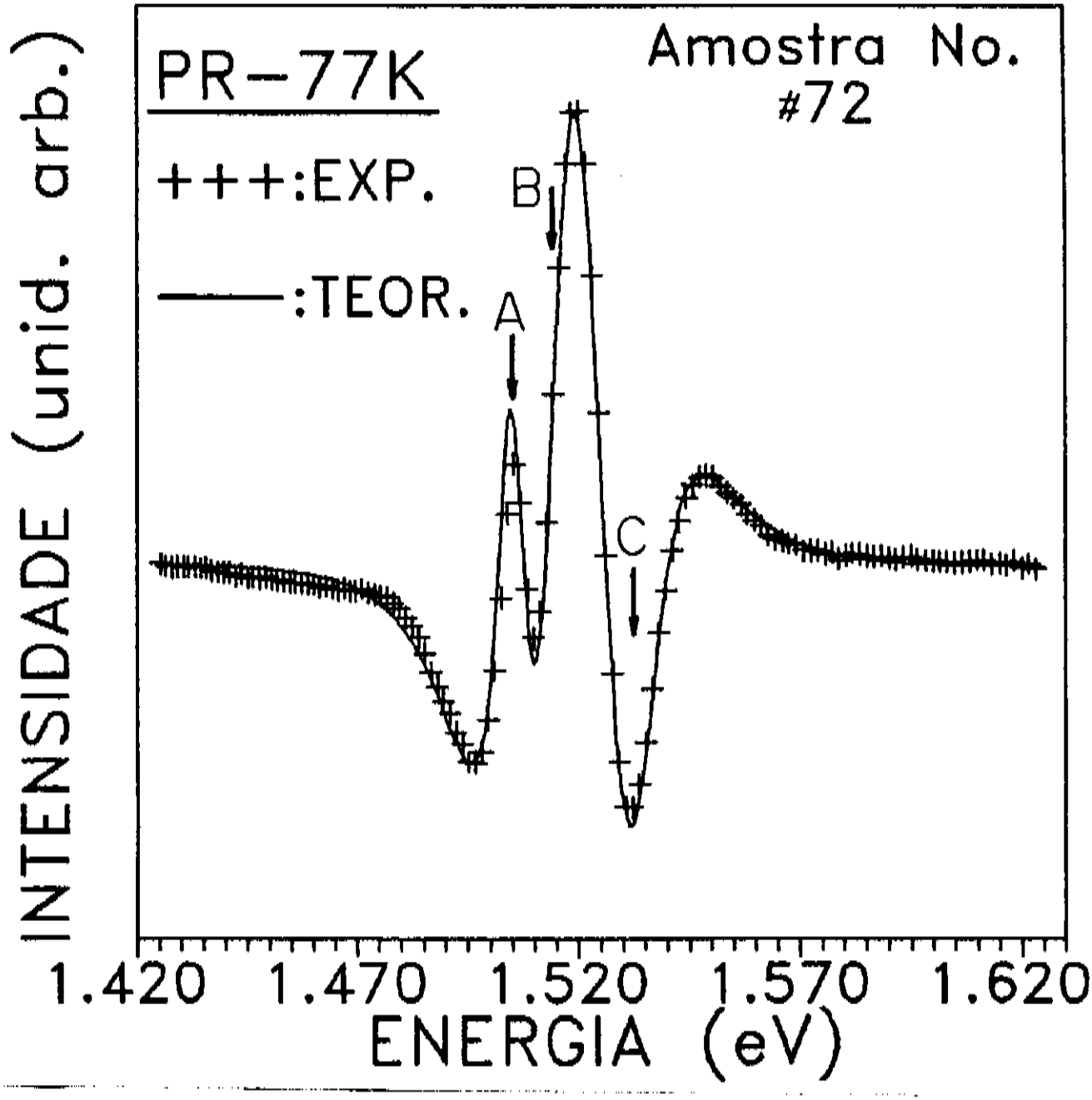


Fig.V.2.1: Espectro típico de PR a 77K de uma amostra "δ-doping" (#72). A curva contínua representa o melhor ajuste da eq. III.4.21, com p=3 e n=3.

silício de $1,8x10^{13}$ cm^{-2}. A forma deste espectro de PR é bastante similar ao da heterojunção de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ com dopagem modulada, onde foi observada estruturas acima do "gap" fundamental do GaAs. Estas transições foram atribuídas à presença de um gás bi-dimensional na interface $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (Glembocki, *e outros*; 1985 e Snow, *e outros*; 1988). A análise do espectro de PR da fig.V.2.1 pode ser feita através da forma funcional da terceira derivada da constante dielétrica (vide eq.III.4.21) (Aspnes; 1980). Entretanto, deve-se lembrar que tem sido mostrado, que transições envolvendo sistemas 2D, apresentam uma forma de linha espectral do tipo primeira derivada da constante dielétrica (Shanabrook, *e outros*; 1986). Ajustando os dados obtidos com n_j=1 ou n_j=3, correspondendo, respectivamente, à primeira e à terceira derivada da constante dielétrica de um ponto crítico bi-dimensional (vide seção III.4), os resultados foram, praticamente, os mesmos. A mesma conclusão foi obtida por Shen, *e outros* (1986) nas medidas de PR em super-redes de dopagem modulada do tipo NIPI. O melhor ajuste dos dados experimentais da fig.V.2.1 foi obtido com a soma de três linhas com n_j=3. As energias de transição assim obtidas estão indicadas por setas nesta figura. A transição em 1.506 eV (transição A) é atribuída ao "gap" fundamental do GaAs e as estruturas observadas no lado de maior energia (transições B e C) são atribuídas, tentativamente, à transições envolvendo os estados da banda-de-valência e os estados eletrônicos no poço de potencial no "δ-doping".

A fig.V.2.2 mostra os espectros de PR a 77K de quatro

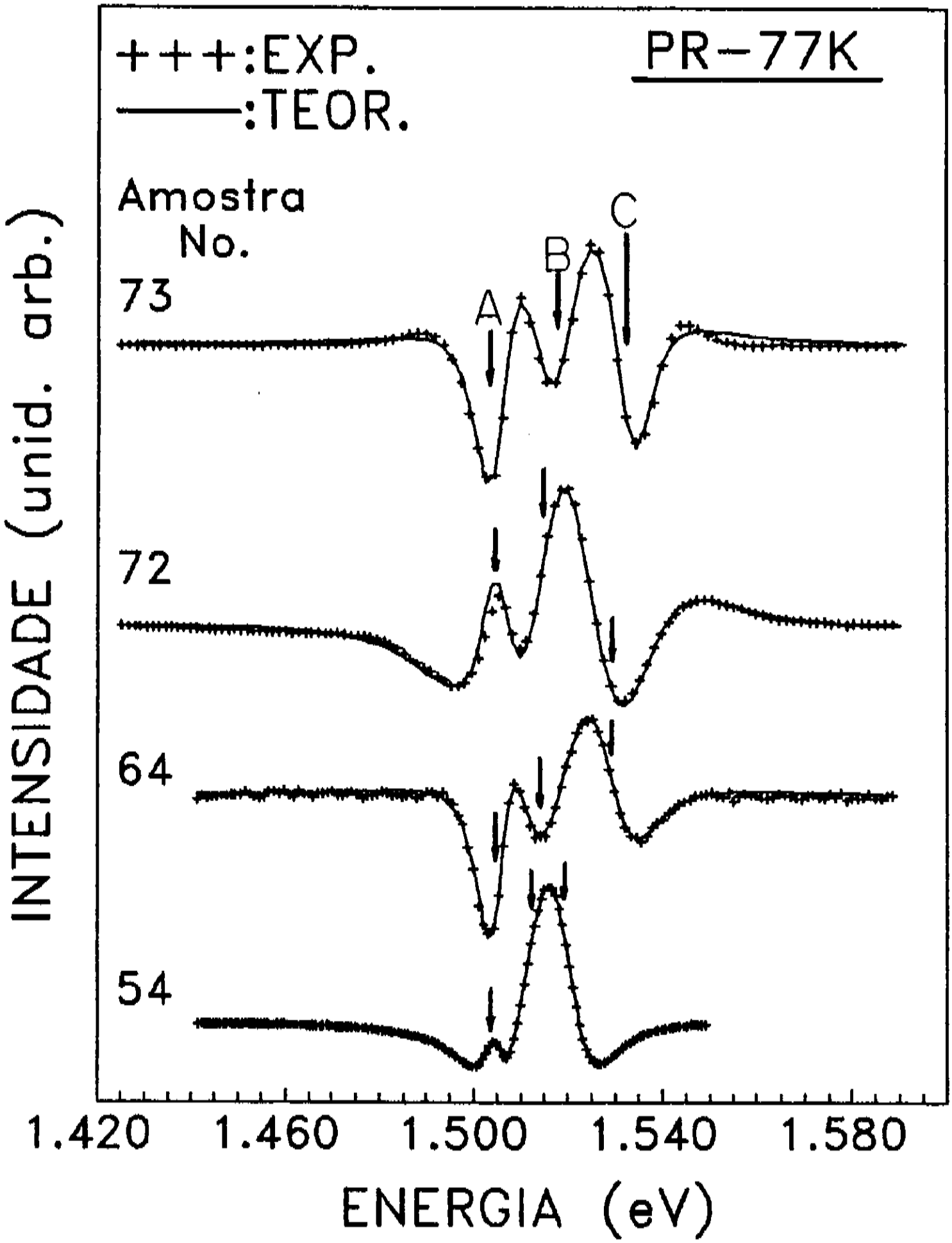


Fig. V.2.2: Espectros de PR a 77K de quatro amostras "δ-doping" com diferentes concentrações N_{Si}^{2D}. A curva contínua representa o melhor ajuste da eq. III.4.21 com p=3 e n=3.

amostras de GaAs com dopagem delta à diferentes concentrações nominais de silício. As energias das transições, obtidas através de ajuste com a eq.III.4.21, estão representadas por setas. Na Tabela V.2.1 abaixo, estão listadas as características destas quatro amostras e as respectivas energias de transição obtidas da fig. V.2.2.

Tabela V.2.1: Energias de transição e características das amostras "δ-doping" com diferentes concentrações nominais N_{Si}^{2D}.

Amostra #	N_{Si}^{2D} ($\times 10^{13}$ cm^{-2})	d_c(nm)	Energia das estruturas (eV) A	B	C
54	0,01	200	1,505	1,513	1,519
64	1,8	200	1,506	1,516	1,530
72	1,9	200	1,504	1,517	1,531
73	2,0	200	1,506	1,519	1,533

Como mencionado anteriormente, a transição A foi atribuída ao "gap" fundamental do GaAs e as estruturas B e C aos estados confinados no poço de potencial do "δ-doping". Com o aumento da concentração, N_{Si}^{2D} observa-se que as diferenças de energia (E_B-E_A) e (E_C-E_A) variam muito pouco, o que é uma indicação de que a difusão de Si nestas amostras foi suficientemente grande para alargar o poço de potencial (vide figs.IV.2.4 e IV.2.5). Considerando valores típicos de N_{Si}^{2D}=1x10^{13} cm^{-2}, N_A=1x10^{15} cm^{-3}, L=100 Å e T=77K, as energias de transição da banda-de-valência para as sub-bandas acima do nível de Fermi,

calculadas para a posição do máximo principal da probabilidade $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$, são 1,521 eV, 1,520 eV e 1,519 eV, respectivamente, para a 1a., 2a. e 3a. sub-bandas acima do nível de Fermi. Estes valores são muito próximos daqueles determinados através de ajustes dos espectros de PR, correspondentes à transição B.

A fig.V.2.3 mostra as diferenças de energia (E_i-E_g), calculadas auto-consistentemente para as sete primeiras sub-bandas e as diferenças de energia (E_B-E_A) obtidas experimentalmente (veja Tabela V.2.1). Nestes cálculos, considera-se $N_A=1\times10^{15}$ cm^{-3}, T=77 K, L=100 Å e 1×10^{10} $cm^{-2} \leq N_{Si}^{2D} \leq 2\times10^{13}$ cm^{-2}. As setas nesta figura mostram os valores de N_{Si}^{2D} onde o nível de Fermi cruza as sub-bandas indicadas (em k=0). Pode-se observar desta figura que a diferença de energia (E_i-E_g) para a primeira sub-banda acima do nível de Fermi varia muito pouco com o aumento de N_{Si}^{2D}. Este comportamento concorda, qualitativmente , com aquele observado experimentalmente. Os valores de (E_B-E_A) obtidos experimentalmente são sistematicamente menores do que os (E_i-E_g) calculados auto-consistentemente para um potencial simétrico. Isto pode ser devido aos efeitos de muitos-corpos não terem sido levados em consideração no presente modelo, que renormaliza o "gap" para valores mais baixos.

A fig.V.2.4 mostra os espectros de PR da amostra #72 em função da temperatura no intervalo $40 \leq T \leq 300$ K. As energias de transição, indicadas por setas nesta figura, foram obitas através de ajuste da forma de linha de terceira derivada da constante dielétrica de um ponto crítico bi-dimensional (vide eq.III.4.21),

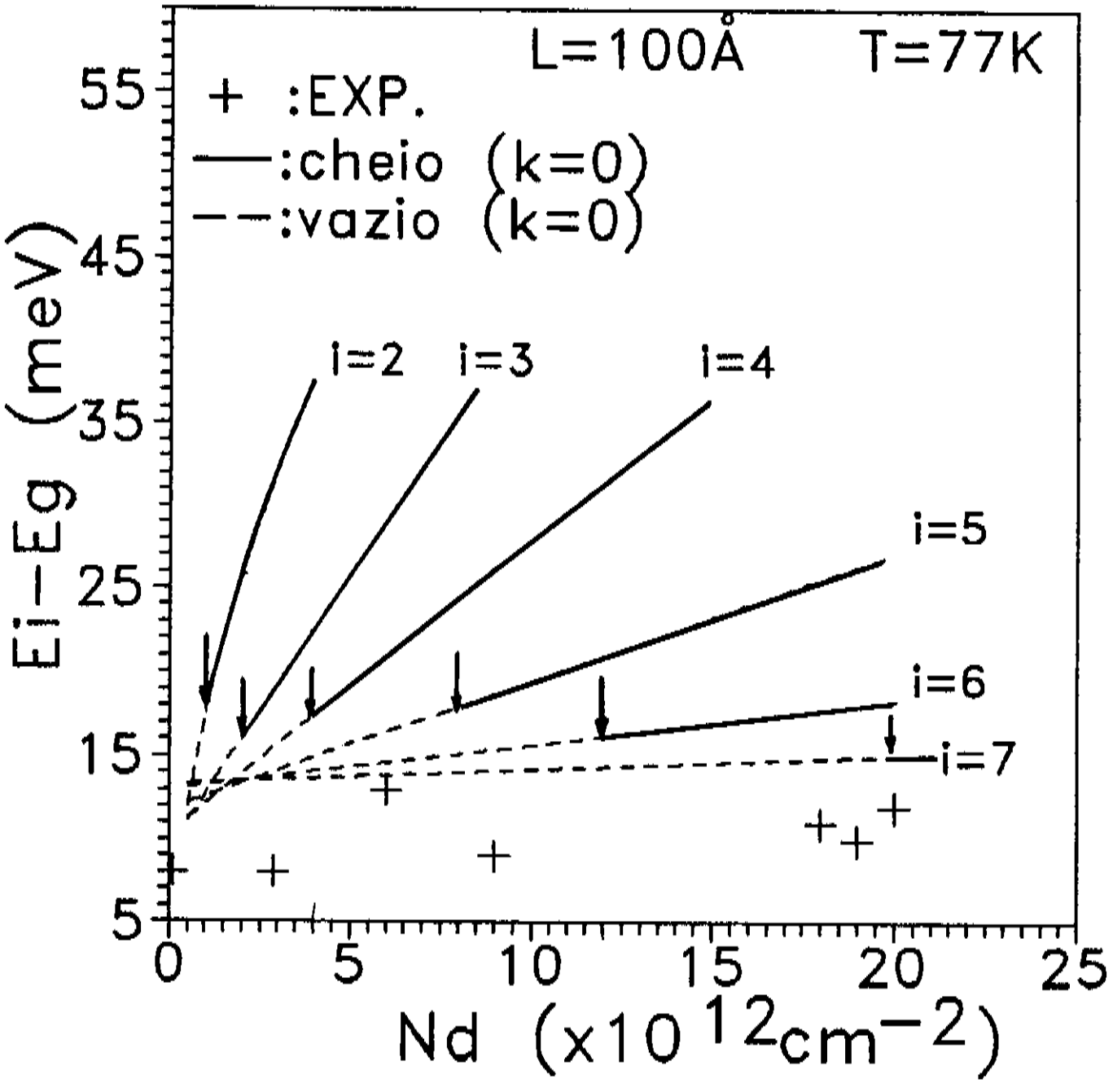


Fig.V.2.3: Diferenças de energia (E_B-E_A), obtidas experimentalmente, do ajuste de curvas da fig.V.2.2, e calculadas (E_i-E_g) auto-consistentemente, considerando $N_A=1x10^{15}$ cm^{-3}, L=100 Å e T=77K.

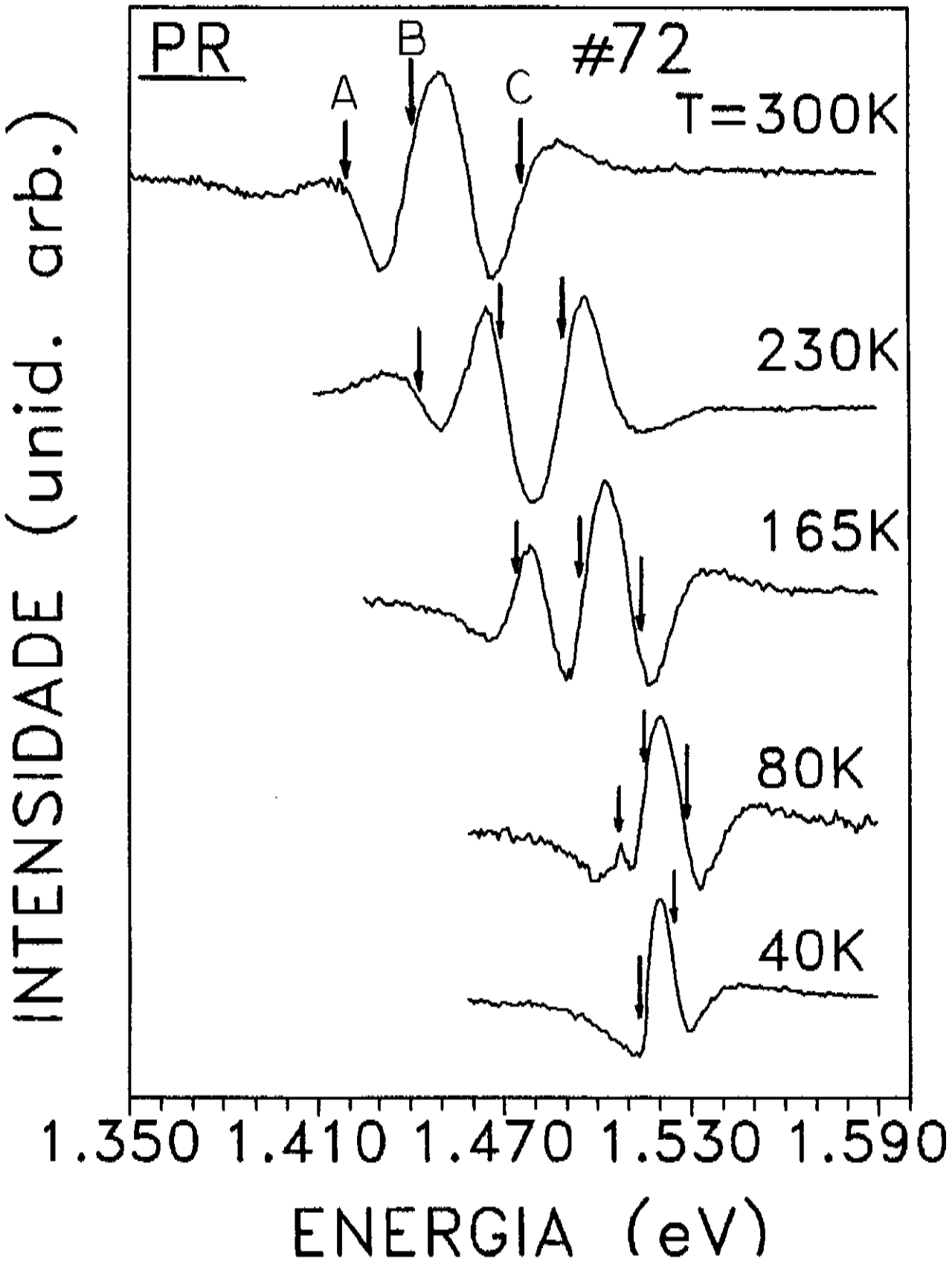


Fig.V.2.4: Espectros de PR de uma amostra "δ-doping" (#72), para temperaturas indicadas em cada espectro. As setas indicam as posições em energia das transições obtidas por ajuste da eq.III.4.19.

aos dados experimentais. À baixa temperatura, o espectro de PR é dominado pela transição B, associada ao nível confinado. A comparação entre os dados experimentais de (E_B-E_A) com aqueles calculados auto-consistentemente (E_i-E_g), considerando L=100 Å, $N_{Si}^{2D}=1\times10^{13}$ cm^{-3} e $N_A=1\times10^{15}$ cm^{-3}, estão mostrados na fig.V.2.5. As setas mostradas nesta figura indicam o intervalo de temperatura, onde o nível de Fermi cruza a 5a. sub-banda em k=0 (o nível de Fermi está abaixo da 6a. sub-banda para T<130 K e está abaixo da 5a. sub-banda para T>160 K). Com o aumento da temperatura, aumenta a diferença (E_i-E_g) e, no intervalo 130 <T< 160 K, experimenta um "salto" para energias maiores, devido ao cruzamento do nível de Fermi com a 5a. sub-banda . Os dados experimentais da fig.V.2.4 também exibem um "salto" similar no mesmo intervalo de temperatura. Esta é uma boa indicação da concordância entre o modelo proposto para as transições ópticas e os dados experimentais. As pequenas diferenças entre os valores de (E_i-E_g) calculadas e os dados experimentais (E_B-E_A) podem ser atribuídas, qualitativamente, aos efeitos de superfície e de muitos-corpos, que não são levados em consideração no presente modelo. A proximidade da superfície da amostra à camada de dopagem delta torna o perfil do potencial, no "δ-doping", assimétrico, devido a estados superficiais que localizam o nível de Fermi na superfície, em 0,8 eV acima da banda-de-valência (Mönch, *e outros*; 1982). Esta assimetria do poço de potencial pode modificar a posição dos máximos principais da probabilidade $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$ em cada sub-banda em ambos os lados da dopagem delta e, consequentemente,

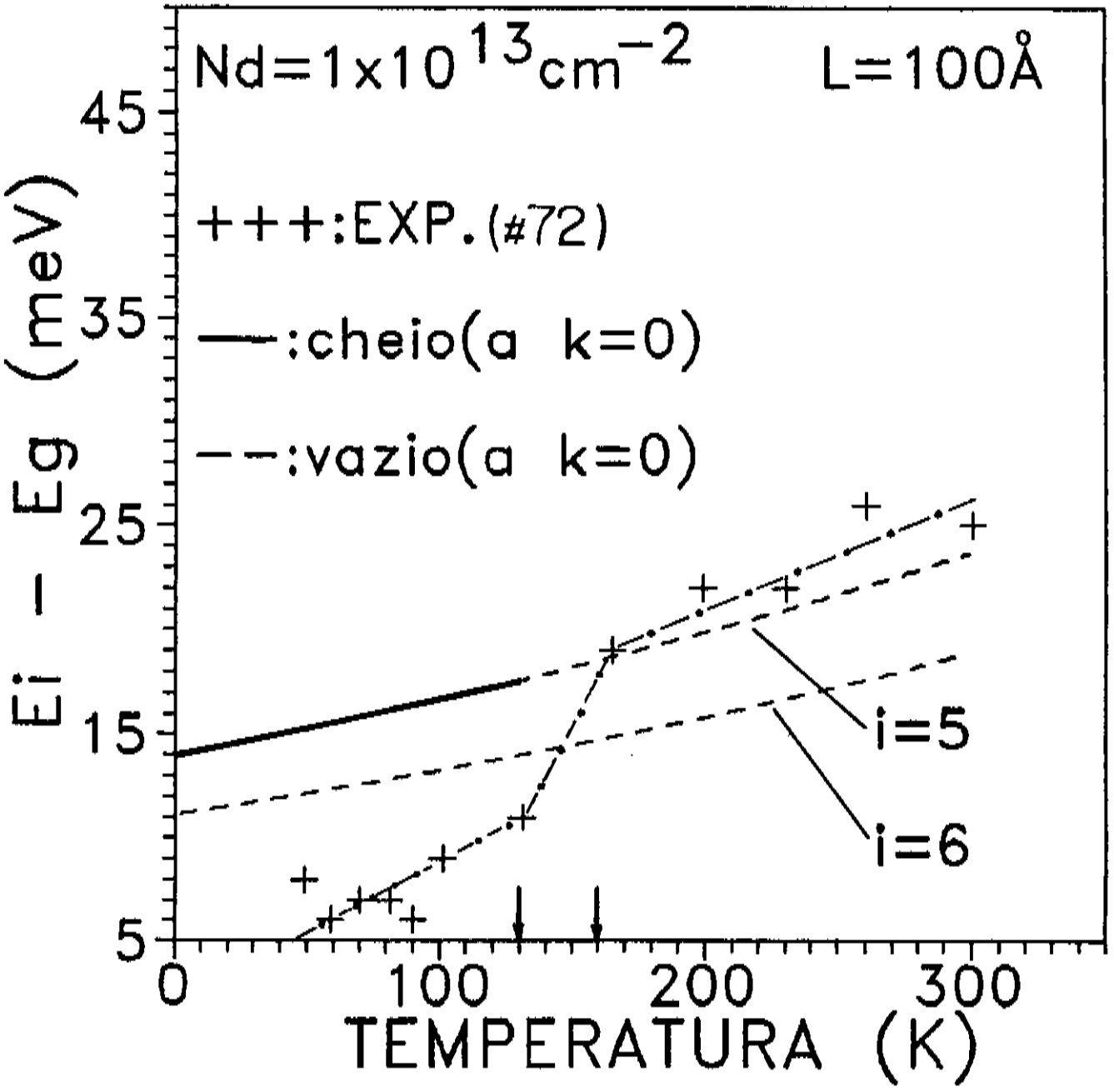


Fig.V.2.5: Diferenças de energia (E_B-E_A) obtidas experimentalmente do ajuste de curvas da fig.V.2.4 e calculadas (E_i-E_g) auto-consistentemente, para N_A=1x10^{15} cm^{-3}, L=100 Å e N_{Si}^{2D} =1x10^{13} cm^{-2}. A linha cheia representa as sub-bandas ocupadas e, as tracejadas, as vazias. As setas indicam as temperaturas onde o nível de Fermi cruza as sub-bandas, e a linha (—·—·—) foi traçada como um "guia para os olhos".

poderá modificar as energias das transições. Esta é uma possível explicação para a origem da transição C.

V.3.: Oscilações de Franz-Keldysh em amostras de GaAs com dopagem delta:

A fig.V.3.1 mostra os espectros de PR a 77K de quatro amostras "δ-doping" com diferentes espessuras d_c da camada de topo (vide fig.II.1). As características e as posições em energia das diferentes estruturas estão listadas na Tabela V.2 abaixo.

Tabela V.3.1: Transições inter-bandas observadas a 77K para várias amostras "δ-doping" com diferentes espessuras da camada de topo.

Amostra No.	N_{Si}^{2D} ($x10^{13}$ cm^{-2})	d_c (nm)	E_A (eV)	E_B (eV)	E_C (eV)
65	0,8	267	1,506	(não resolvido)	
74	1,8	167	1,506	1.517	1.532
77	1,8	66	1,506	(não resolvido)	
76	1,8	33	1,505	1.510	1.520

Em todos os espectros observou-se transições em torno de 1,506 eV, associadas ao "gap" do GaAs. No intervalo de 5 a 30 meV acima do "gap" as estruturas são bastante similares àquelas observadas na fig.V.2.2. Assim, atribuí-se estas estruturas às transições eletrônicas da banda-de-valência para os estados ligados no poço de potencial do "δ-doping" acima do nível de

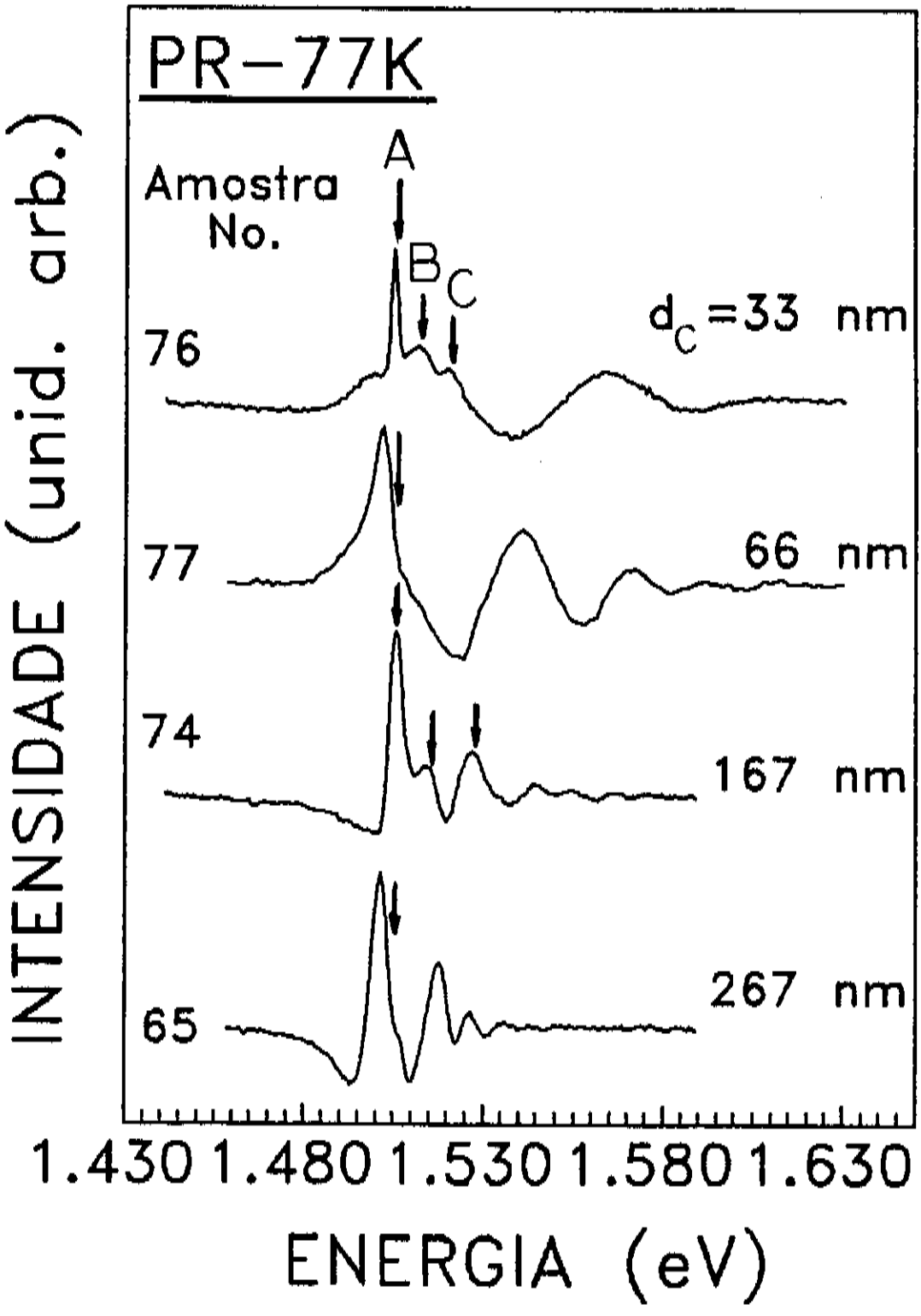


Fig.V.3.1: Espectros de PR a 77K de várias amostras "δ-doping", com diferentes espessuras da camada de topo d_c indicadas. As setas indicam aproximadamente as posições em energia, das transições ópticas.

Fermi. Para energias mais altas, observa-se estruturas oscilatórias, cujos períodos diminuem com o aumento da espessura d_c. A periodicidade destas estruturas apresenta um comportamento típico de oscilações de Franz-Keldysh (OFK) (Aspnes, *e outros*; 1980 e Weinstein, *e outros*; 1971), isto é, as posições dos máximos e mínimos destas oscilações obedecem a aproximação assintótica das funções eletro-ópticas, dada através da eq.III.4.15.a. Na fig.V.3.2 estão graficados as posições em energia dos máximos e mínimos das oscilações, em função do parâmetro F_j definido na eq.III.4.15.b. A concordância entre os dados experimentais e a forma assintótica dada pela eq.III.4.15.b é excelente. No caso das amostras #76, #77 e #65 as extrapolações lineares destes ajustes fornecem as energias de transição em torno de 1,506 eV, que está associado ao "gap" do GaAs a 77 K. Entretanto, a energia obtida para a amostra #74 foi de 1,521 eV, um valor acima daqueles obtidos para as outras três amostras. A origem desta diferença será discutida mais adiante. A energia eletro-óptica, obtida do coeficiente angular do ajuste linear da eq.III.4.15.a, está mostrada no "inset" da fig. V.3.2 em função da espessura da camada de topo. Pode-se calcular o campo elétrico relativo às OFK, através da eq.III.4.8, supondo que estas oscilações estejam associadas a um ponto crítico tri-dimensional M_o. Utilizando este procedimento, obteve-se os seguintes valores de campos elétricos: 43 kV/cm, 24 kV/cm, 10 kV/cm e 4,2 kV/cm, respectivamente, para as amostras #76, #77, #74 e #65. Esta diminuição de $\mathbb{E}$ com o aumento de d_c, pode estar associada a um campo elétrico de superfície, que

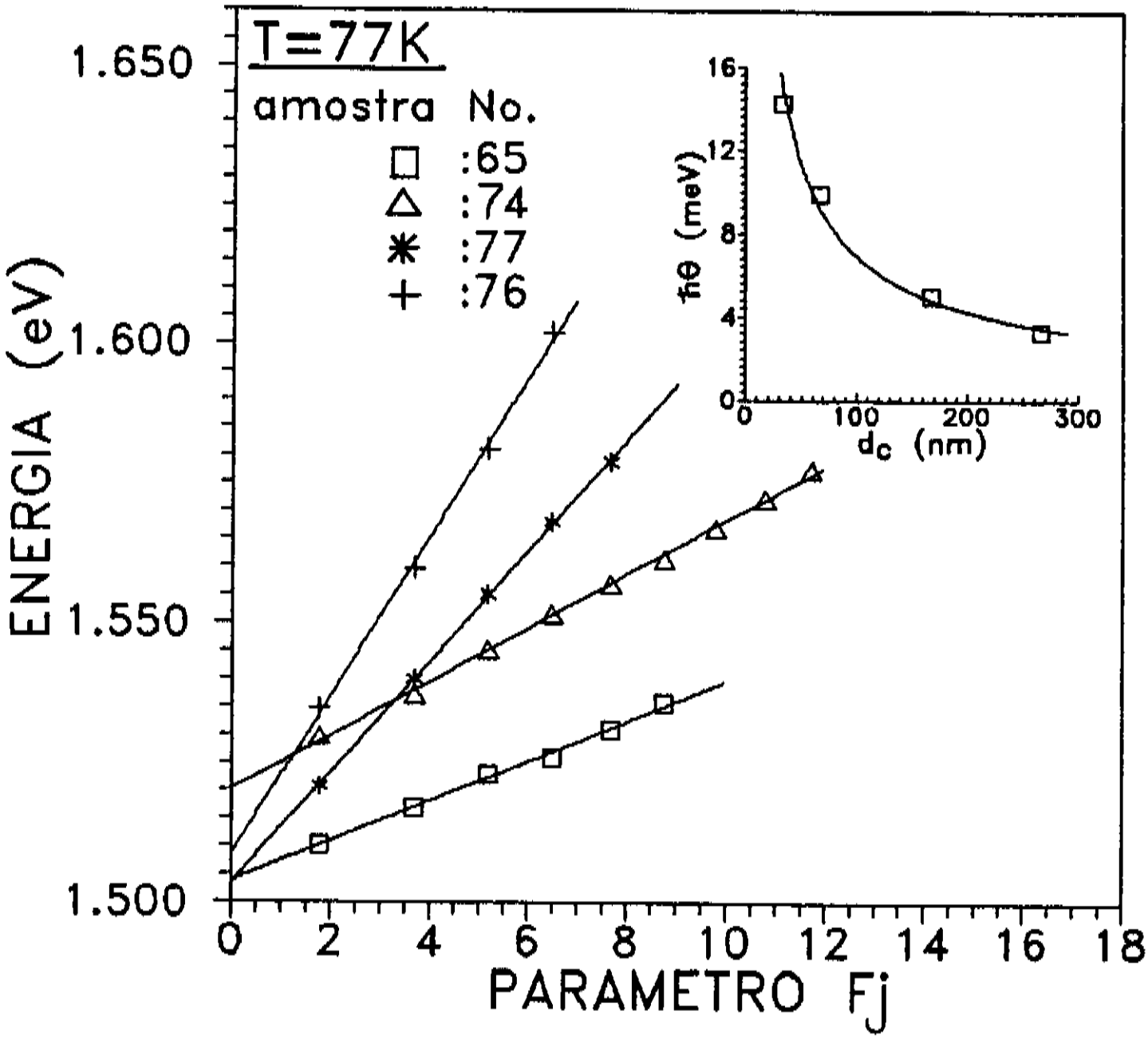


Fig.V.3.2: Energias das posições dos máximos e mínimos das OFK, da fig.V.3.1, graficados em função do parâmetro F_j . As retas representam o ajuste dos dados com a forma assintótica da eq. III.4.15. No "inset" foi graficado a energia eletro-óptica ($\hbar\theta$) em função da espessura da camada de topo.

dá origem às ØFK. A fig.V.3.3 ilustra, esquematicamente, a estrutura de bandas para estas quatro amostras com dopagem delta. Nestes esquemas de bandas, foi considerado que o nível de Fermi na superfície fica "preso" em 0,8 eV, acima da banda-de-valência e, que no poço de potencial do "δ-doping", o semicondutor é degenerado. Pode-se observar que, quanto menor a espessura d_c, maior o gradiente do potencial e, consequentemente, do campo elétrico próximo à superfície. Isto sugere que a origem das ØFK, observadas nos espectros de PR da fig. V.3.1, esteja associada ao campo superficial das amostras.

Medidas de PR a 77K foram realizadas nestas mesmas amostras ,em função da intensidade de modulação, I_{AC}, e de um terceiro feixe não modulado, I_{DC}, (vide esquema experimental da fig. III.2.1). No caso das amostras #76 e #77 (com camadas de topo mais finas) não foi observada nenhuma mudança significativa na posição ou na envoltória das estruturas oscilatórias, enquanto que nas amostras #74 (d_c=167 nm) e #65 (d_c=270 nm) estas variações são mais significativas. A fig.V.3.4 mostra os espectros de PR a 77K da amostra #74 em função de I_{AC} (a) e de I_{DC} (b). Com o aumento de I_{AC} (fig.V.3.4.a), as posições em energia dos máximos e mínimos das ØFK permanecem, praticamente, inalteradas, mas diminui, drasticamente sua amplitude. Isto pode estar relacionado a duas causas: (i) o aumento do parâmetro de alargamento (Γ), devido ao aumento na geração de portadores, com o consequente aumento nos diversos processos de espalhamento, o que diminui a amplitude das oscilaçes subsidiárias (Grover, *e outros*; 1971) e (ii) aumento da

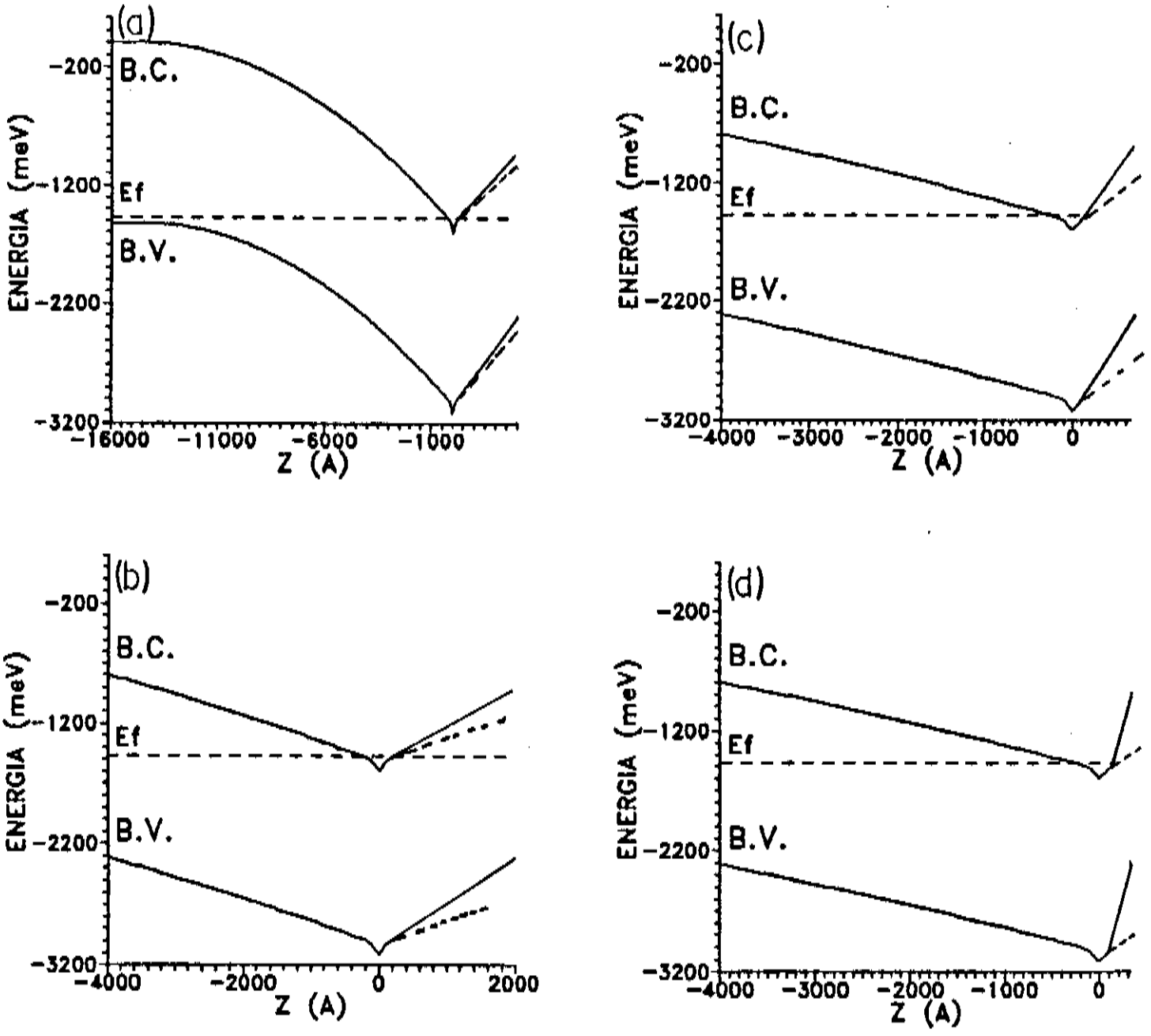


Fig.V.3.3: Ilustração esquemática das bandas de valência e de condução, para amostras "δ-doping" com diferentes espessuras da camada de topo, levando em conta o efeito da superfície, onde o nível de Fermi fica "preso" em 0,8 eV acima da banda-de-valência.

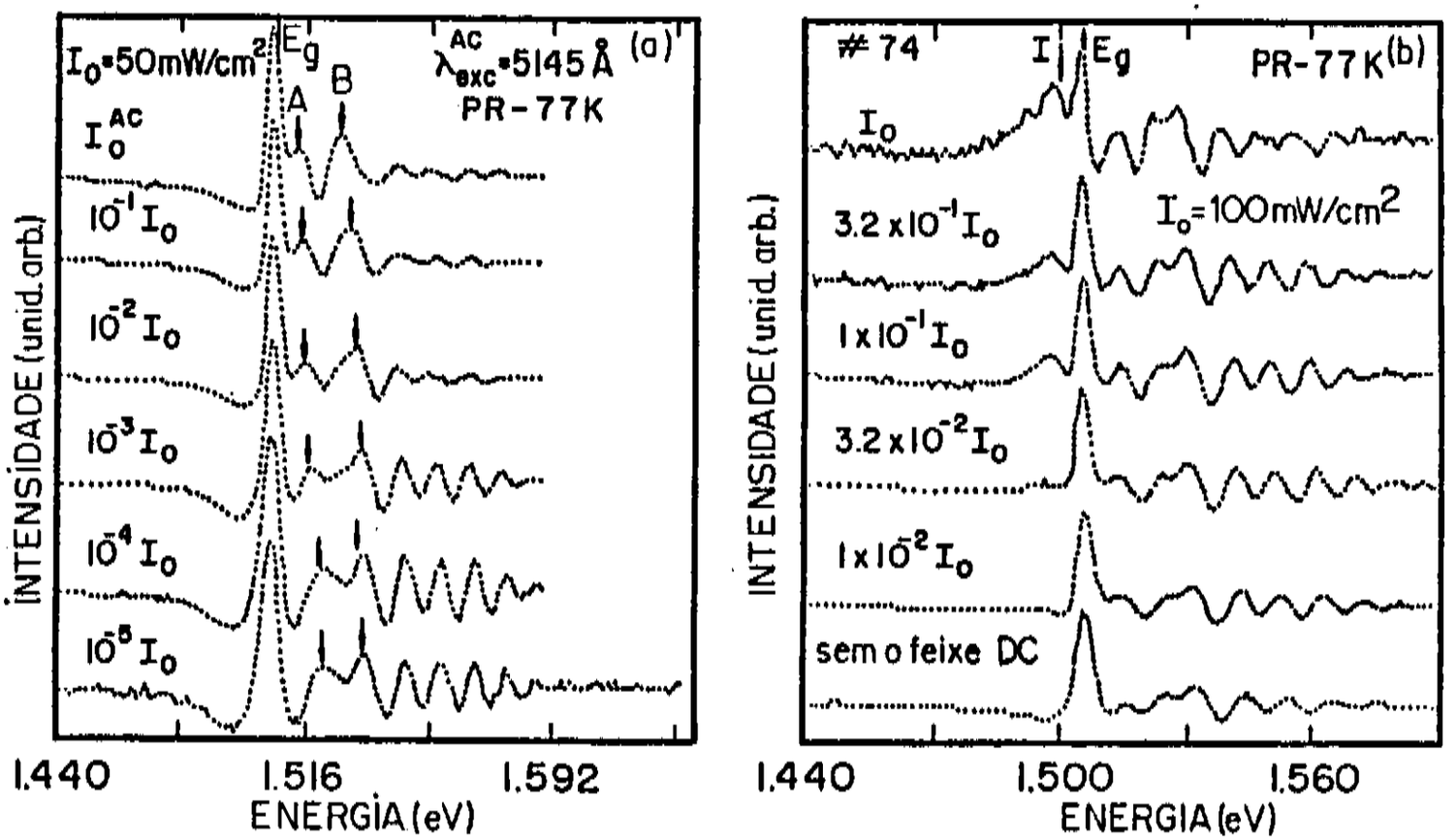


Fig. V.3.4: Espectros de PR a 77K da amostra "δ-doping" #74 em função da (a) intensidade de modulação AC e (b) da intensidade do terceiro feixe DC.

inomogeneidade do campo elétrico, que resulta também em uma diminuição na amplitude das oscilações subsidiárias, como mostraram Aspnes, *e outros* (1989) e Shen, *e outros* (1990). Por outro lado, as estruturas mais próximas ao "gap" do GaAs têm um comportamento bastante distinto daquele observado para as estruturas oscilatórias. O efeito da iluminação DC (fig. V.3.4.b), corresponde à geração de uma fotovoltagem constante com consequente redução sistemática do campo elétrico superficial (E_{bi}), (vide fig.III.2.2). Com o aumento de I_{DC} ,a posição em energia e a envoltória das estruturas oscilatórias variam muito pouco (menos de 2meV). As estruturas próximas ao "gap" do GaAs aumentam de intensidade com o aumento de I_{DC}. Além disto, uma outra estrutura (denominada I) abaixo do "gap" em 1,501 eV torna-se bastante pronunciada, quando I_{DC} aumenta Esta pequena diferença em energia entre a transição I e o "gap" do GaAs sugere que a mesma esteja relacionada com impurezas doadoras rasas (possivelmente Si_{Ga}). Assim, da fig. V.3.4, pode-se concluir que as estruturas mais próximas ao "gap" do GaAs, que são, praticamente, insensíveis à variações das intensidades dos feixes I_{AC} e I_{DC} , são distintas das estruturas oscilatórias e estão, possivelmente, associadas à transições envolvendo os estados localizados na banda-de-condução e os estados contínuos na banda-de-valência.

Os espectros de PR a 77K da amostra #65, em função das intensidades I_{AC} e I_{DC} , estão mostrados na fig.V.3.5. Não foi observada nenhuma variação significativa na posição em energia ou

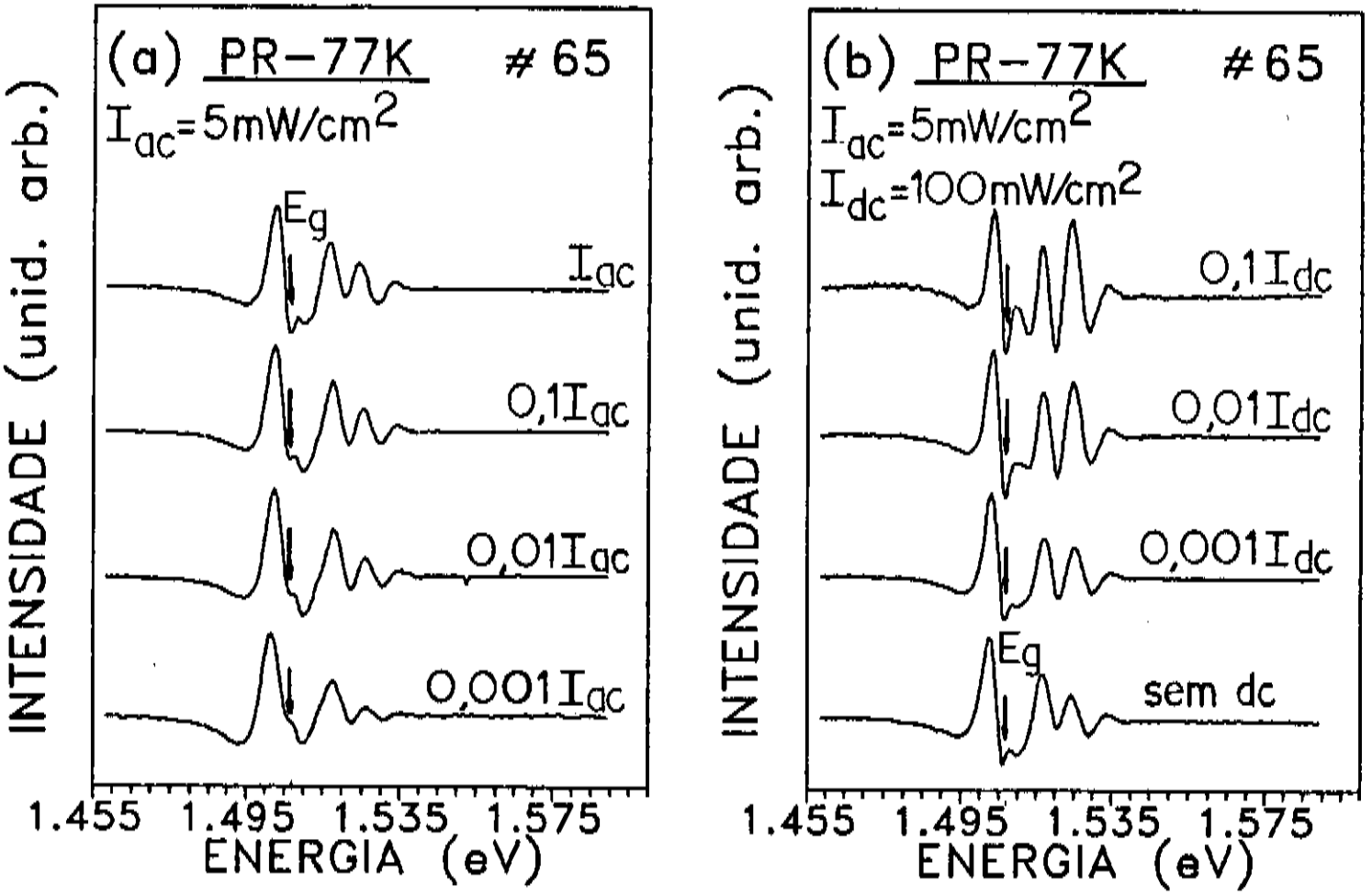


Fig.V.3.5: Espectros de PR a 77K da amostra "δ-doping" #65 em função da (a) intensidade de modulação AC e (b) da intensidade do terceiro feixe DC.

na envoltória das estruturas oscilatórias (fig.V.3.5.a), a não ser uma maior resolução da estrutura próxima ao "gap" do GaAs. Esta estrutura fica melhor resolvida quando ilumina-se a amostra com o feixe I_{DC}, como mostrado na fig.V.3.5.b. Outro fato, que merece atenção, é à medida que I_{DC} aumenta as oscilações com características de OFK mudam, passando a exibir uma forma de linha típica de terceira derivada da constante dielétrica (Aspnes; 1980). Isto se deve ao fato de que, ao iluminar a amostra com o feixe DC bastante intenso, a fotogeração de pares e-h reduz o campo elétrico da superfície. Como a amostra #65 foi a que exibiu o menor valor do campo elétrico superficial, a alta intensidade do feixe DC produz uma mudança no regime de operação, passando de campo elétrico intermediário para fraco. No caso das outras amostras (com maiores valores de $\hbar\theta$) a fotogeração de pares e-h não é suficiente para reduzir, significativamente, o campo elétrico superficial.

A fig. V.3.6 mostra os espectros de PR da amostra #74 em função da temperatura. Pode-se observar que o período das oscilações depende fortemenete da temperatura, variando desde 5 meV a T=36 K até 23,2 meV a T=300 K. A intensidade e a posição em energia das estruturas próximas ao "gap" do GaAs, também são afetadas pela temperatura. Utilizando a expressão III.4.15, determina-se a energia eletro-óptica e a magnitude do campo elétrico em função da temperatura e compara-se estes valores com aqueles obtidos para um filme de GaAs/GaAs (sem a dopagem delta). A fig. V.3.7 mostra a variação de $\hbar\theta$ com a temperatura para estas

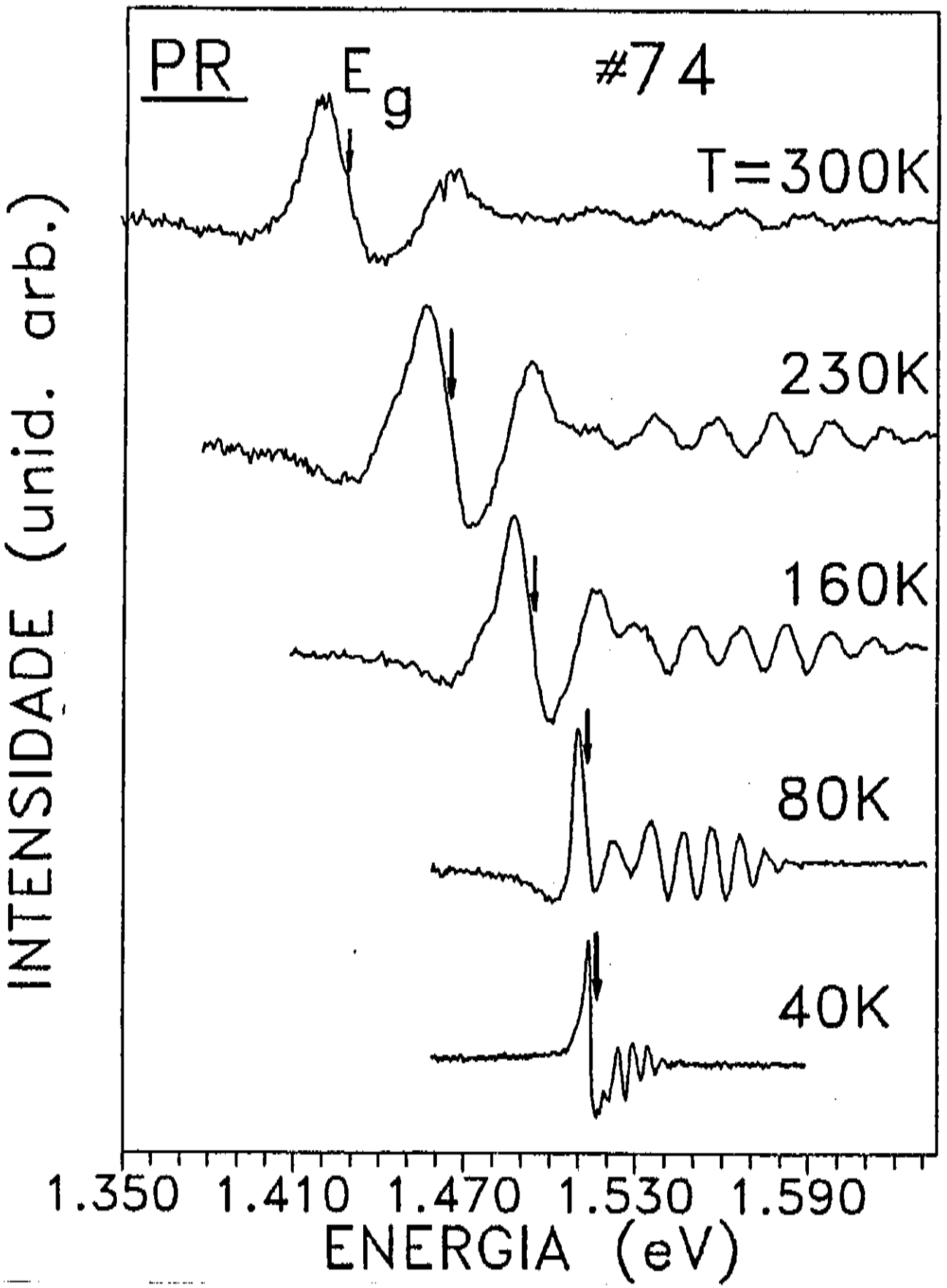


Fig.V.3.6: Espectros de PR da amostra #74 para as temperaturas indicadas. As setas indicam a posição de E_g nas temperaturas correspondentes.

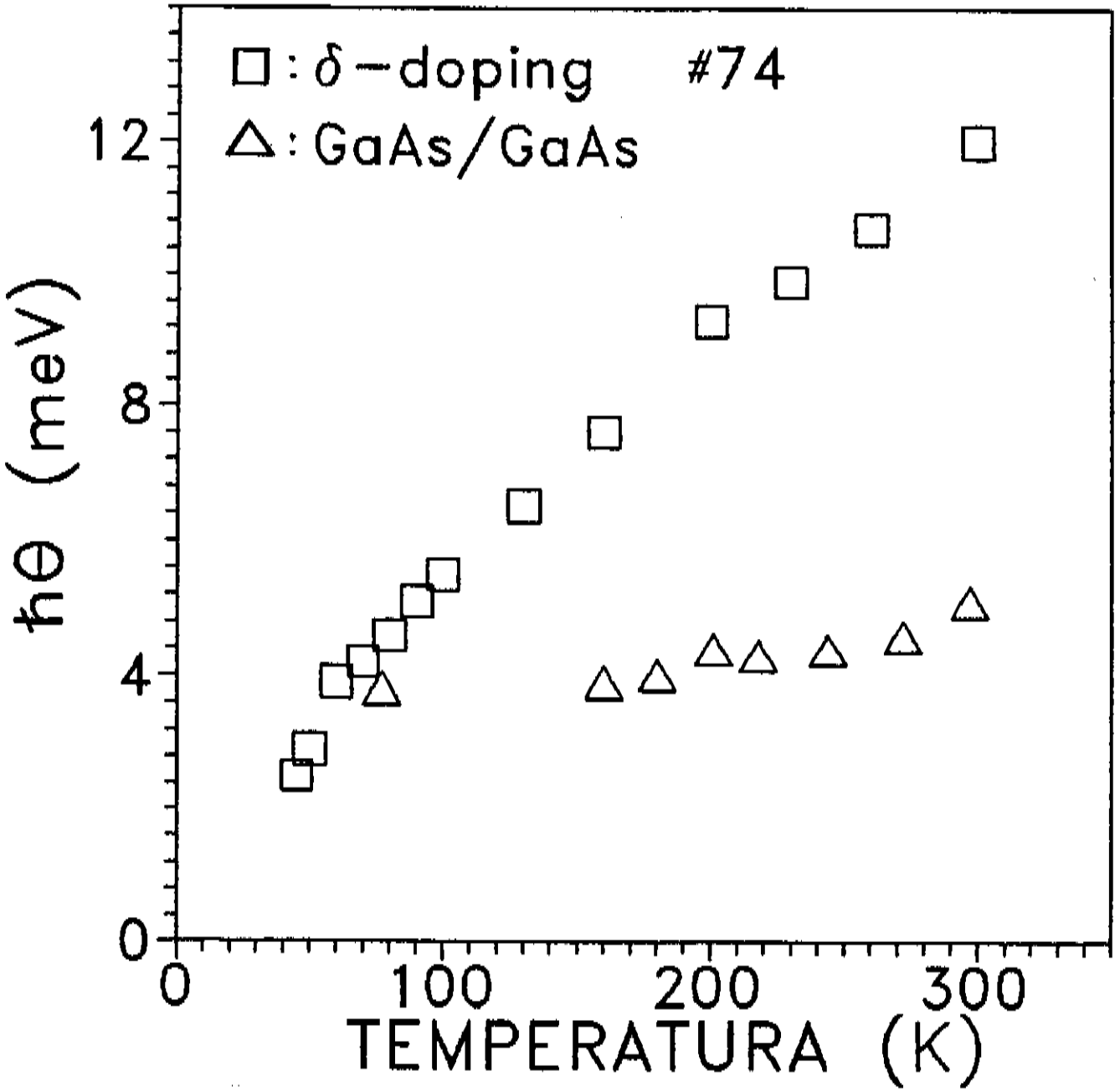


Fig.V.3.7: Energia eletro-óptica em função da temperatura, de uma amostra "δ-doping" (#74) e de uma camada de GaAs (sem dopagem delta).

duas amostras. O aumento no valor $\hbar\theta$ para a amostra #74 é da ordem de quatro vezes, quando a temperatura passa de 40 K para 300K, enquanto que no caso da amostra GaAs/GaAs o aumento de $\hbar\theta$ com a temperatura é muito pequeno. Assim, os resultados da fig.V.3.7 sugerem que o campo elétrico que dá origem às OFK na amostra #74 pode não ser, exclusivamente, o campo elétrico superficial. Uma hipótese sobre a origem destas oscilações seria a o efeito "Franz-Keldysh confinado (FKC)" (Höpfel, *e outros*; 1985 e Miller, *e outros*; 1985), onde o campo elétrico teria sua origem no gradiente do poço de potencial do "δ-doping", na região dos máximos da probabilidade $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$ das sub-bandas acima do nível de Fermi. Efetivamente, as energias de transição inter-bandas associadas ao efeito FKC seriam indistinguíveis daquelas discutidas na seção IV.3 e, neste caso, as OFK estariam associadas a essas transições. Esta poderia ser uma possível interpretação para a energia de transição interbanda obtida na amostra #74 (vide fig.V.3.2). Dois fatos importantes devem ser levados em consideração para a atribuição destas estruturas oscilatórias ao efeito FKC : (a) o campo elétrico na região, onde ocorrem as transições ópticas (fora da região dos íons doadores), varia linearmente com a distância z (vide eq. IV.2.8), tratando-se portanto, de um campo elétrico não uniforme. Assim, a integral de "overlap" entre os estados extendidos da banda-de-valência e os estados confinados na banda-de-condução será, provavelmente, diferente daquela obtida no caso de transições do tipo 3D $\rightarrow$ 3D, como foi discutido na seção III.5. Por outro lado, Snow *e outros*

(1988) mostraram que a variação no coeficiente de absorção para transições do tipo 3D → 2D, para o caso da hetero-junção $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ com dopagem modulada, não apresenta estruturas oscilatórias acima do "gap" do GaAs e (b) no caso do efeito FKC com transições do tipo 3D → 2D, não existe uma expressão analítica para as oscilações subsidiárias, como ocorre com a aproximação de campo intermediário, que utiliza as expressões assintóticas das funções eletro-ópticas (Aspnes, *e outros*; 1973). Porém, como mostrado na fig.V.3.2, a boa concordância entre os valores experimentais e a forma assintótica da eq.III.4.15.a válida para o caso tri-dimensional pode ser uma indicação de que a integral de "overlap", envolvendo transições do tipo 3D → 2D, ainda apresente um comportamento oscilatório similar ao caso 3D → 3D. As figs. V.3.8.a. e V.3.8.b mostram, respectivamente a forma do poço de potencial e o campo elétrico, calculados auto-consistentemente para uma amostra com $N_{Si}^{2D} = 1x10^{13}$ cm^{-2}, L=100 Å, T=0 K e $N_A=1x10^{15}$ cm^{-3}. Na região dos íons doadores, o campo elétrico é bastante intenso e inomogêneo. Na região dominada pelos aceitadores residuais ionizados, o campo elétrico varia, lentamente, com z. O efeito da temperatura sobre o campo elétrico, foi graficado na fig.V.3.8.c através da variação de $|\vec{E}|$ x z(para z>0), para diferentes temperaturas. Como era de se esperar, o campo elétrico na região de depleção dominada pelos aceitadores residuais é muito pouco afetada pela variação da temperatura, porém é bastante acentuada na região do poço de potencial onde $|z|<2L$. Assim, pode-se comparar o campo elétrico calculado para máximo principal

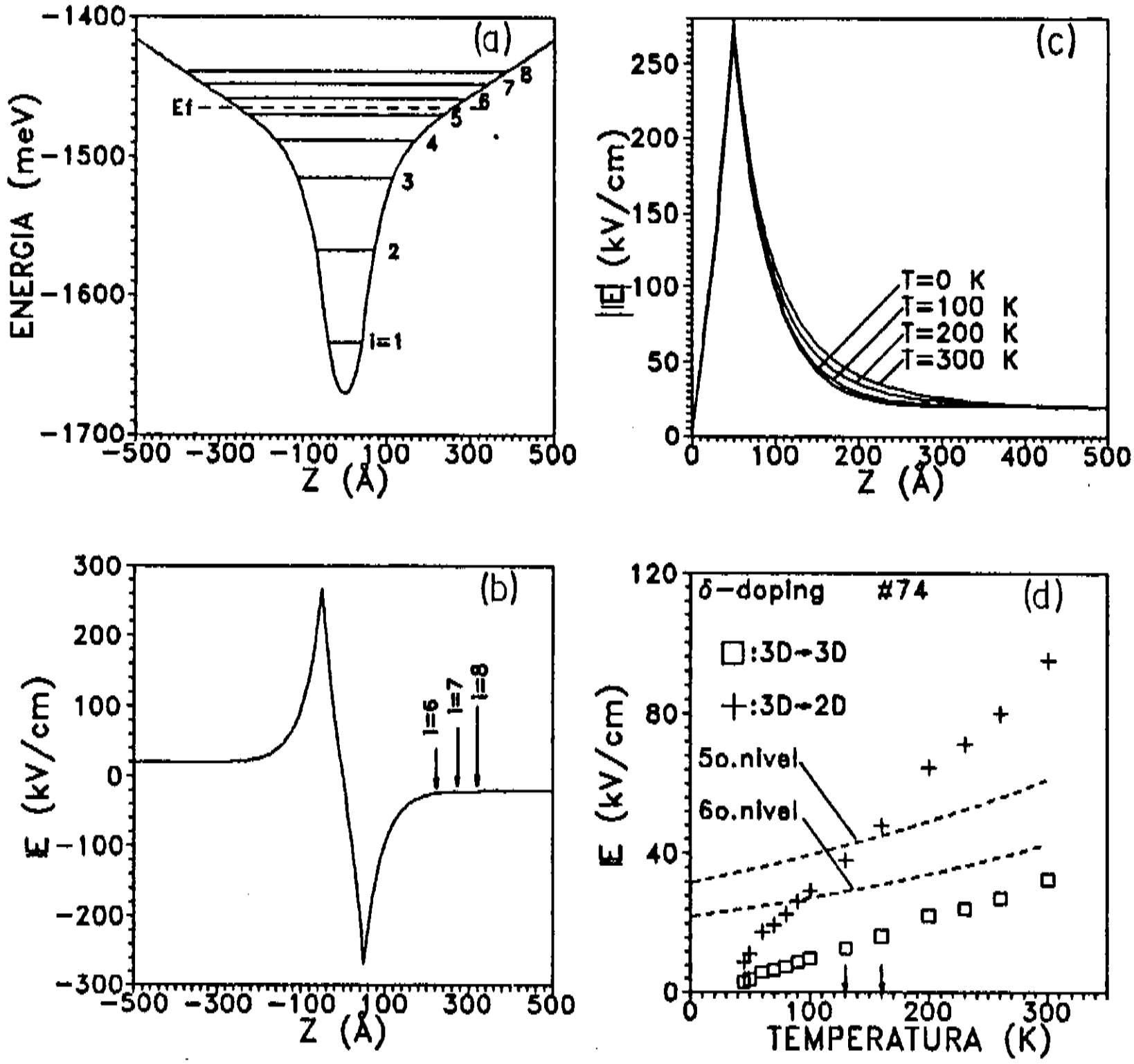


Fig.V.3.8: (a) perfil do potencial e níveis de energia em um potencial de "δ-doping" com L=100 Å, T=0K, $N_{Si}^{2D}=1\times10^{13}$ cm^{-2} e $N_A=1\times10^{15}$ cm^{-3}, (b) campo elétrico obtido do perfil do potencial da parte (a), onde as setas indicam as regiões de máxima probabilidade, $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$, de presença dos elétrons, para os três primeiros níveis acima do nível de Fermi, (c) módulo do campo elétrico para diferentes temperaturas (para z > 0) e (d) valores dos campos elétricos na região dos máximos de probabilidade de presença dos elétrons (para a 5a. e 6a. sub-bandas), em função da temperatura e campo elétrico, obtido experimentalmente da fig.V.12 para a amostra #74, supondo OFK do tipo 3D → 3D e 3D → 2D; as setas indicam a temperatura onde o nível de Fermi cruza as sub-bandas.

de probabilidade $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$, da presença dos elétrons para as sub-bandas acima do nível de Fermi, com aqueles obtidos da fig.V.3.7. A fig.V.3.8.d mostra a variação com temperatura dos valores dos campos elétricos calculados para a 5a. e 6a. sub-bandas e dos valores dos campos elétricos, obtidos para a amostra #74 (vide fig.V.3.7) através da eq.III.4.8, de duas formas: (a) considerando uma transição do tipo 3D → 3D, com massa reduzida do elétron e buraco pesado e (b) considerando uma transição do tipo 3D → 2D, com massa reduzida apenas do buraco pesado (massa do elétron na direção z é muito maior do que do buraco). Estes valores calculados de $\mathbb{E}$ não apresentam uma boa concordância com os obtidos experimentalmente. Entretanto, deve-se notar que para os dois casos é observado um aumento quase linear de $\mathbb{E}$ com a temperatura, indicando que poderá existir uma relação entre $\mathbb{E}$ e T. Dos resultados obtidos pode-se concluir, no momento, que a evolução das estruturas oscilatórias com o aumento da temperatura não pode ser atribuída apenas à variação do campo elétrico da superfície com a temperatura, e nem tão pouco pode-se atribuí-la apenas ao efeito Franz-Keldysh confinado de um poço de potencial simétrico do "δ-doping". Provavelmente, ambos os efeitos estão presentes no comportamento oscilatório da amostra #74, tornando-se necessário o desenvolvimento de um modelo que leve em conta os efeitos de superfície e de muitos-corpos para melhor analisar os dados experimentais.

V.4. Camadas de GaAs com dopagem multi-delta:

A dopagem multi-delta (ou "Mδ-doping") em uma camada epitaxial de GaAs, é uma estrutura mais elaborada contendo gás bi-dimensional de elétrons. Ela é constituída de uma sequência de camadas "δ-doping", do mesmo tipo de dopagem, separadas eqüidistantemente por regiões não dopadas. O perfil de dopagem destas estruturas, levando em conta a difusão de dopantes, está ilustrado na fig.V.4.1:

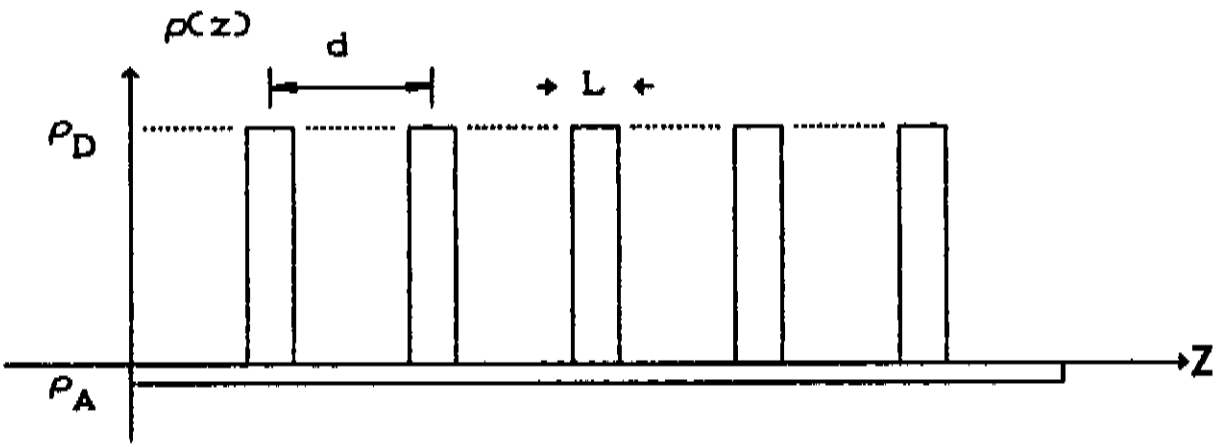


Fig.V.4.1: Perfil de dopagem em estruturas com sequência periódica de "δ-doping", onde d é a distância entre dois planos consecutivos e L é a largura da camada que contém os átomos de Si.

Neste sistema, além do confinamento dos elétrons na banda-de-condução, tem-se o confinamento dos buracos na banda-de-valência na região entre os planos de dopagem. Entretanto, os elétrons e os buracos estão separados espacialmente, o que diminui bastante a probabilidade de recombinação direta. A ilustração esquemática da estrutura de bandas no sistema "Mδ-doping" está ilustrado na fig.V.4.2, onde foram consideradas cinco camadas de dopagem planar separadas por

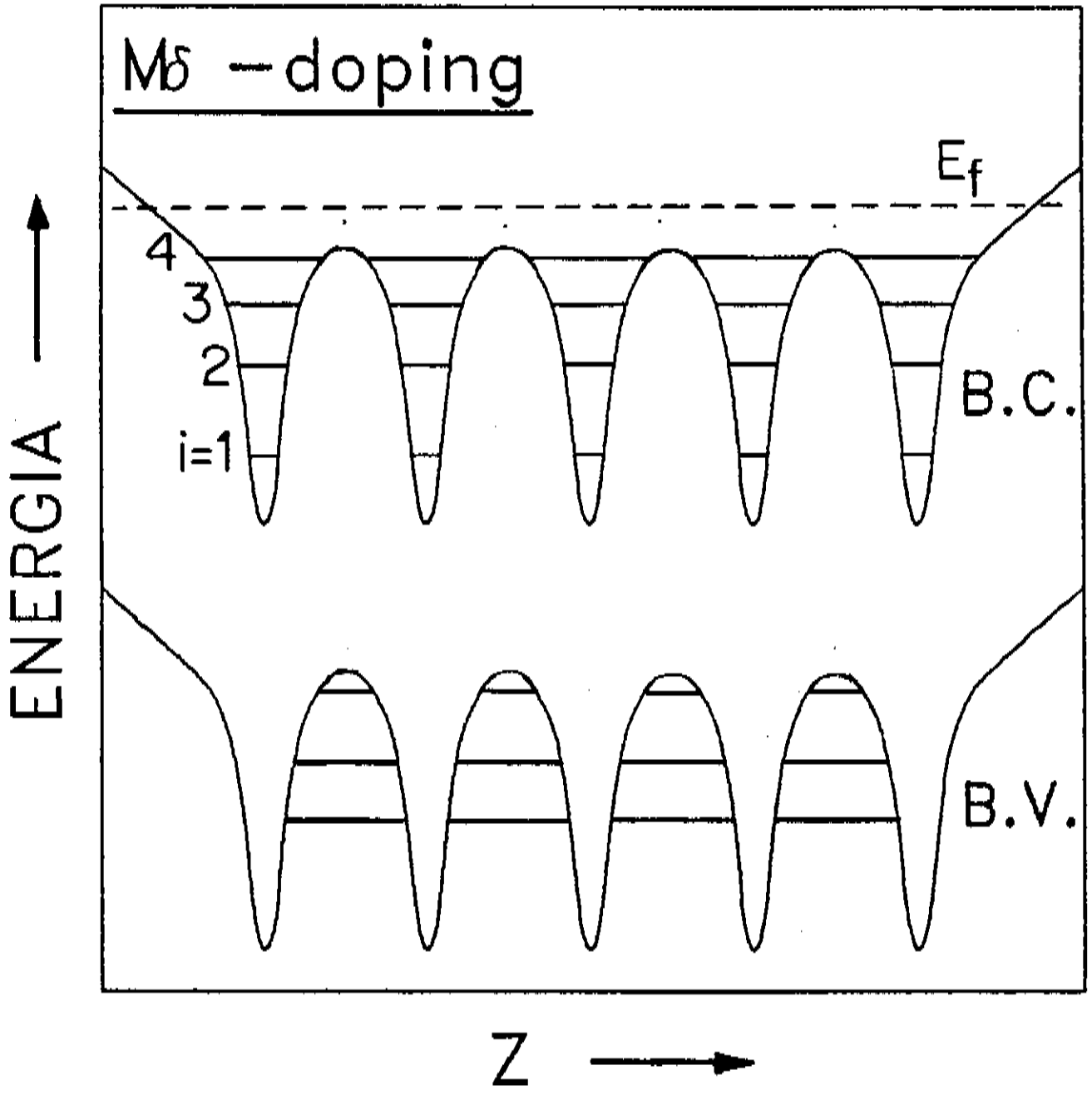


Fig.V.4.2: Estrutura esquemática das bandas de energia e as sub-bandas, para uma amostra contendo cinco planos de dopagem delta igualmente espaçadas.

500 Å, uma difusão homogênea de dopantes formando camadas com átomos de Si, com largura L=100 Å, a T=0K. Como a distância entre os poços é relativamente grande, existe apenas uma pequena interação entre os mesmos. Assim, a posição das primeiras sub-bandas da banda-de-condução pode ser considerada como sendo igual a de um "δ-doping" simples. Entretanto, sub-bandas mais próximas ao nível de Fermi podem apresentar um acoplamento bastante significativo, formando um contínuo. As transições ópticas neste sistema podem ocorrer entre os estados localizados na banda-de-valência para os estados contínuos acima do nível de Fermi.

Pode-se obter uma estimativa da dispersão da mini-banda na estrutura "Mδ-doping", utilizando uma aproximação "tight-binding" de primeiros vizinhos, para as sub-bandas de condução. O potencial da estrutura periódica $V_p(z)$ é escrito como uma soma de n potenciais auto-consistentes devido a "δ-doping" simples centrados em (z-nd), onde d é o período da estrutura.

$$V_p(z) = \sum_n V_d(z - nd) \qquad (V.4.1)$$

A dispersão (E_i) das sub-bandas no M-δ-doping pode ser escrita na forma (Voisin, *et. al.*, 1984 e Bastard, 1988):

$$E_i = \varepsilon_i + s_i + 2t_i \cos(qd) \qquad (V.4.2)$$

onde, ε_i são as energias das sub-bandas para os poços de potencial

individual, q é o momentum da estrutura periódica na direção z e s_i e t_i são definidos por (Voisin, e outros, 1984 e Bastard, 1988):

$$s_i = \int dz \; |\chi_i(z)|^2 \; V_d(z - d) \qquad (V.4.3.a)$$

$$t_i = \int dz \; \chi_i(z)\chi_i(z-nd) \; V_d(z - d) \qquad (V.4.3.b)$$

A largura da mini-banda (σ_i) é, simplesmmente, dada por:

$$\sigma_i = 4|t_i| \qquad (V.4.4)$$

No caso da estrutura "Mδ-doping" (vide fig.V.4.2) as sub-bandas acima do quarto nível, formam praticamente um contínuo de estados e as funções de onda ficam bastante delocalizada, situando-se algumas vezes fora do poço de referência. Além disso, para estas sub-bandas, o acoplamento entre os poços "δ-doping" deve alterar, substancialmente, a auto-consistência do problema. Limitou-se o cálculo na aproximação "tight-binding" para as sub-bandas inferiores (na banda-de-condução), onde calcula-se a dispersão de mini-bandas para diferentes períodos da estrutura e diferentes larguras L. Estes resultados estão sumarizados nas Tabelas V.4.1 e V.4.2. Nestes casos as funções de onda dos estados mais excitados, relativas ao poço de referência, se extendem sobre poços vizinhos. Para d=400 Å (vide Tabela V.4.1) observa-se a

maior dispersão de mini-bandas (≅ 3.8 meV), como era esperado. À medida que d aumenta, diminui o acoplamento entre as funções de onda de poços vizinhos, diminuindo assim a dispersão. Essencialmente, para valores de d superiores a 600 Å a interação entre poços vizinhos é praticamente desprezível. Com o aumento de L (Tabela V.4.2), aumenta a dispersão da mini-banda devido à diminuição da barreira entre os poços de potenciais consecutivos. Mesmo assim, da Tabela V.4.2 ainda pode-se supor que as dispersões das quatro primeiras mini-bandas da estrutura "Mδ-doping" da fig. V.4.2 são praticamente nulas, e estas sub-bandas se assemelham àquelas calculadas auto-consistentemente para um único "δ-doping". Deve-se lembrar que no cálculo da estrutura de bandas do "Mδ-doping" é necessário levar em consideração o potencial auto-consistente total, e não apenas aquele obtido de um único "δ-doping". As sub-bandas superiores apresentam um maior acoplamento, formando um contínuo. Zrenner, *e outros* (1988) observaram, experimentalmente, através de medidas de magneto-resistividade, a distinção entre sub-bandas fortemente confinadas e as que formam o contínuo.

Neste trabalho, estuda-se uma amostra constituída de uma camada de GaAs contendo cinco planos de dopagem, separados por 500 Å, com concentração nominal de silício em cada plano de $5x10^{12}$ cm^{-2}. O caráter bi-dimensional dos estados eletrônicos nesta amostra foi verificado através de medidas de Schubnikov-de-Haas (Basmaji; 1989), onde foi determinada a população dos três primeiros níveis eletrônicos. Estes valores estão listados na

Tabela V.4.3. Como mostrado anteriormente as dispersões da mini-banda são praticamente desprezíveis no caso desta amostra (d=500 Å) e, portanto, pode-se estimar a largura L da camada devido a difusão de silício utilizando o cálculo auto-consistente para um "δ-doping" simples. Fazendo isto, obtém-se uma largura L em torno de 100 Å.

A fig.V.4.3 mostra o espectro de PR a 300 K desta amostra "Mδ-doping" . Os dados desta figura foram ajustados com a forma de linha da eq.III.4.21. A transição em 1.4111 eV (denominda, "I") pode estar associada a algum nível de impureza doadora e esta domina o espectro. A transição "A", em 1,425 eV, pode ser associada ao "gap" do GaAs à temperatura ambiente. As transições, "B" e "C" (em 1.459 eV e 1.544 eV, respectivamente), em analogia ao caso do "δ-doping" simples, podem estar relacionadas com estados confinados no "Mδ-doping". Neste caso, as transições envolveriam estados contínuos na banda-de-condução (acima do nível de Fermi) e estados de buraco confinados na banda-de-valência. A evolução dos espectros de PR com a temperatura, mostrados na fig.V.4.4 apresenta um comportamento bastante complicado, principalmente, pelo fato da transição associada à impureza dominar os espectros de PR. Assim, até o presente momento não se tem uma interpretação definitiva para os resultados observados na fig.V.4.4, em função da temperatura, mas outros estudos estão em andamento com o intuito de esclarecer este problema.

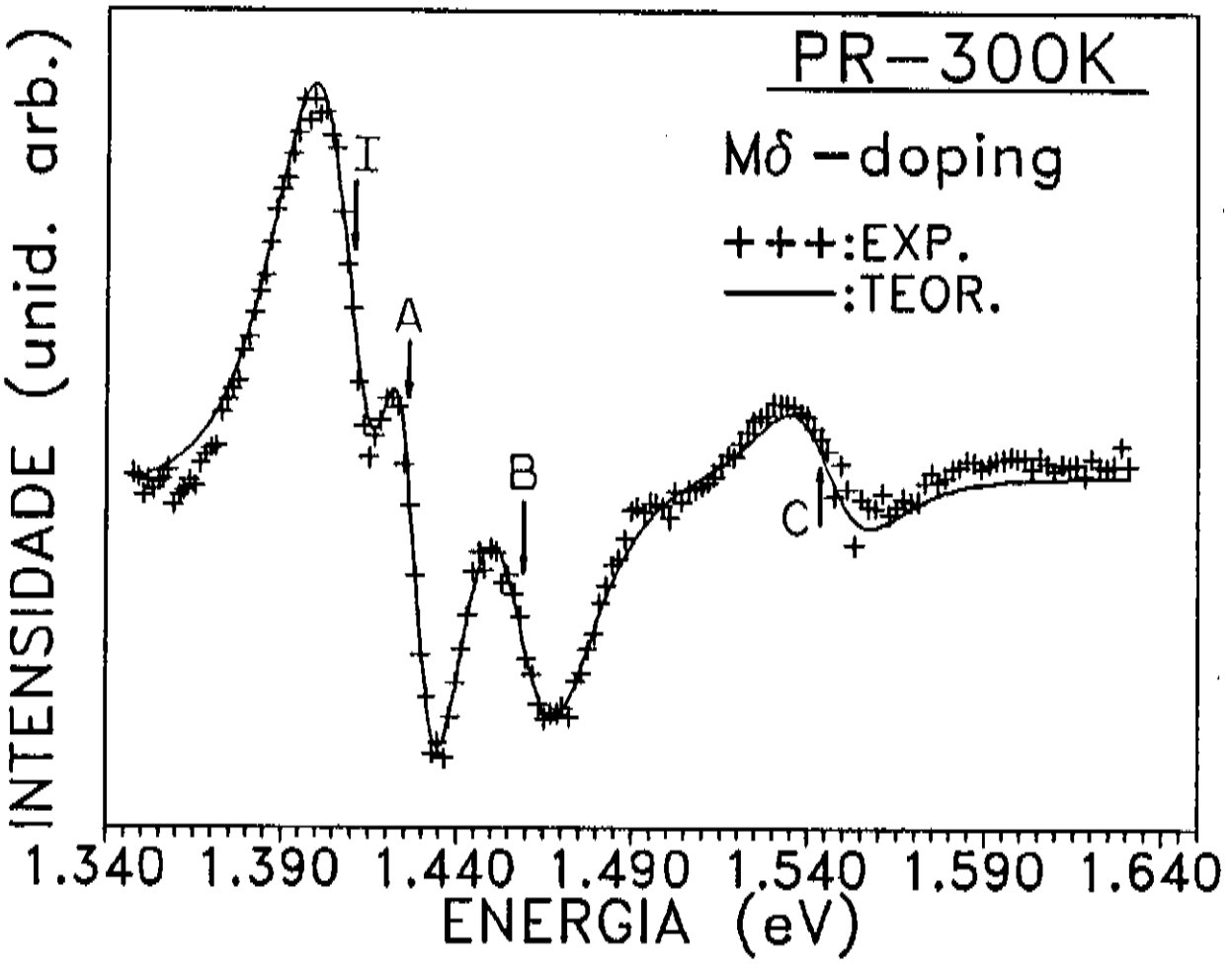


Fig.V.4.3: Espectro de PR a 300K de uma amostra "Mδ-doping". A linha cheia representa o melhor ajuste obtido com a equação III.4.19 com p=4 e n=3.

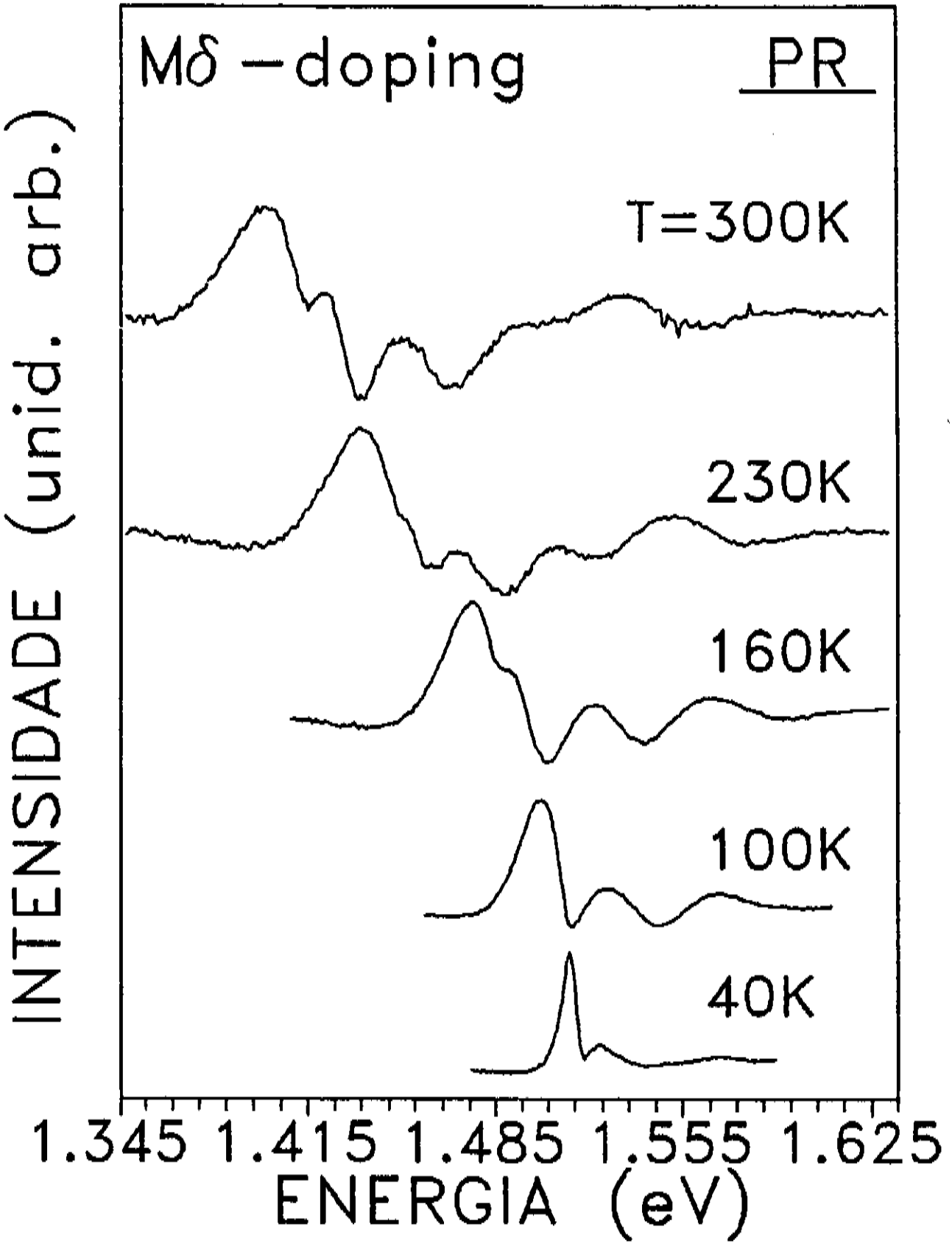


Fig.V.4.4: Espectros de PR em função da temperatura da amostra "Mδ-doping".

Tabela V.4.1: Valores de s_i e t_i para diferentes períodos da estrutura M-δ-doping, para L=100 Å, T=0K e $N_{Si}^{2D} = 5x10^{12}$ cm^{-2}.

d (Å)	i	s_i (meV)	t_i (meV)
400	1	$-4,2x10^{-8}$	$-5,5x10^{-4}$
	2	$-1,4x10^{-3}$	$-8,0x10^{-2}$
	3	-0,2	-0,9
	4	———	———
500	1	$-4,2x10^{-8}$	$-1,1x10^{-5}$
	2	$-4,7x10^{-5}$	$-4,2x10^{-3}$
	3	$-1,7x10^{-2}$	-0,2
	4	-0,6	-0,4
600	1	$-4,4x10^{-10}$	$-1,1x10^{-7}$
	2	$-1,8x10^{-6}$	$-2,6x10^{-4}$
	3	$-1,6x10^{-3}$	$-4,9x10^{-2}$
	4	-0,1	-0,4
800	1	$-6,0x10^{-14}$	$-2,9x10^{-12}$
	2	$-2,1x10^{-9}$	$-4,0x10^{-7}$
	3	$-1,6x10^{-5}$	$-1,4x10^{-3}$
	4	$-4,0x10^{-3}$	$-8,5x10^{-2}$
1000	1	$-4,2x10^{-18}$	$-8,5x10^{-18}$
	2	$-3,9x10^{-12}$	$-2,1x10^{-10}$
	3	$-2,3x10^{-7}$	$-2,9x10^{-5}$
	4	$-1,8x10^{-4}$	$-6,2x10^{-3}$

Tabela V.4.2: Valores de s_i e t_i para diferentes L, para d=500 Å, T=0K e $N_{Si}^{2D} = 5x10^{12}$ cm^{-2}.

L (Å)	i	s_i (meV)	t_i (meV)
5	1	$-5,3x10^{-9}$	$-1,8x10^{-6}$
	2	$-9,5x10^{-5}$	$-7,5x10^{-3}$
	3	$-2,0x10^{-2}$	-0,3
	4	——	——
50	1	$-9,7x10^{-9}$	$-3,1x10^{-6}$
	2	$-6,9x10^{-5}$	$-5,9x10^{-3}$
	3	$-1,9x10^{-2}$	-0,3
	4	——	——
100	1	$-4,2x10^{-8}$	$-1,1x10^{-5}$
	2	$-4,7x10^{-5}$	$-4,2x10^{-3}$
	3	$-1,7x10^{-2}$	-0,2
	4	-0,6	-0,4
200	1	$-1,4x10^{-6}$	$-2,0x10^{-4}$
	2	$-1,1x10^{-4}$	$-7,8x10^{-3}$
	3	$-1,0x10^{-2}$	-0,2
	4	-0,4	-0,7

Tabela V.4.3: População eletrônica das três primeiras sub-bandas, obtidas por Schubnikov-de-Haas, para a amostra "Mδ-doping".

índice da sub-banda i	n_i ($x10^{12}$ cm^{-2})
1	2,11
2	0,72
3	0,22

V.I. CONCLUSÕES:

Neste trabalho, utilizou-se a espectroscopia de fotorefletância para estudar a estrutura de sub-bandas em amostras de GaAs com dopagem planar de silício, crescidas por MBE. As amostras "δ-doping" foram crescidas com diferentes concentrações de silício e diferentes espessuras das camadas de topo. As estruturas observadas nos espectros de PR acima do "gap" fundamental do GaAs foram atribuídas à transições envolvendo os estados contínuos da banda-de-valência e os estados quânticos confinados na banda-de-condução. Estas energias das transições inter-bandas, observadas nos espectros de PR, concordam, qualitativamente, com aquelas calculadas auto-consistentemente. Fez-se um estudo teórico detalhado das energias e das ocupações em cada sub-banda em função da difusão dos dopantes, da temperatura e das concentrações de aceitadores residuais e de doadores dopantes. Nestes cálculos, observou-se que as energias e as ocupações de elétrons para as sub-bandas abaixo do nível de Fermi são bastante sensíveis à difusão dos dopantes, principalmente, para L<100 Å. A concentração areal de silício exerce uma forte influência na profundidade do poço de potencial e, consequentemente, nas energias e nas ocupações das sub-bandas. A concentração de aceitadores residuais não produz, praticamente, nenhum efeito na posição e na ocupação dos níveis de energia, porém altera, profundamente, a forma do poço de potencial fora da região dos íons doadores. As energias e as ocupações, para sub-bandas abaixo

do nível de Fermi, são fracamente, influenciados pela temperatura, enquanto que para os níveis mais altos observa-se um aumento significativo de $(E_i - E_F)$ com a temperatura.

As transições inter-bandas, no caso de foto-absorção, dependem do "overlap" dos estados extendidos 3D na banda-de-valência e das funções envelope dos estados localizados 2D na banda-de-condução. As energias destas transições dependem deste "overlap" e da média sobre as transições permitidas. Foi proposto um modelo, onde as transições observadas, experimentalmente, estão associadas ao máximo da probabilidade $\chi_i(z)\chi_i^*(z)$ de presença dos elétrons para cada sub-banda acima do nível de Fermi. Esta atribuição é uma tentativa de localizar o "centro de gravidade" das estruturas existentes no coeficiente de absorção. Nestas condições, a principal contribuição para as estruturas observadas nos espectros de PR em cada sub-banda estará localizada fora da região que contém os íons dopantes e, onde o potencial varia lentamente. Neste modelo previu-se que as energias das transições interbandas devem variar muito pouco com a concentração areal de silício. Este comportamento foi verificado experimentalmente, onde observou-se uma pequena variação de $(E_i - E_g)$, quando N_{Si}^{2D} variou desde $1x10^{10}$ cm^{-2} até $2x10^{13}$ cm^{-2}. O efeito da temperatura é bastante significativo no sistema "δ-doping", devido à transferência de elétrons das sub-bandas ocupadas mais baixas para as sub-bandas vazias acima do nível de Fermi, modificando assim o potencial de confinamento eletrostático e, consequentemente, a posição das sub-bandas. Os espectros de PR,

em função da temperatura, mostraram uma variação abrupta na posição em energia (E_i-E_g) no intervalo de 130 a 160 K. Isto pode ser bem explicado pelo modelo teórico, sendo associado ao deslocamento do pico principal da absorção para sub-bandas mais baixas (em k=0), devido ao deslocamento do nível de Fermi para o lado de menor energia. Esta é uma forte evidência para confirmar o modelo proposto para a origem das transições ópticas observadas experimentalmente.

Em algumas das amostras analisadas, foram observadas estruturas com comportamento oscilatório para energias bem acima do "gap" fundamental do GaAs, que foram atribuídas ao efeito Franz-Keldysh. Medidas de PR em amostras "δ-doping" com diferentes espessuras de camadas de topo, sugerem que o campo elétrico associado à estas oscilações tem sua origem na superfície da amostra. Entretanto, em alguns casos, a energia inter-banda obtida para estas oscilações é maior do que a energia do "gap" do GaAs e, portanto não poderia ser associada a um efeito de superfície. Medidas de PR em função da temperatura mostraram um comportamento bastante diferente daquele obtido para amostras simples de GaAs/GaAs sem dopagem delta. Uma hipótese, que se levanta sobre a origem destas oscilações, é a possibilidade de existência do efeito Franz-Keldysh associado aos estados confinados no "δ-doping". Porém, os resultados obtidos do cálculo auto-consistente mostram um comportamento para os valores de campo elétrico bastante distintos daqueles observados experimentalmente. A grande variação do campo elétrico com a temperatura sugere uma

forte correlação com o potencial de confinamento, uma vez que este é, fortemente, afetado pela temperatura, porém não há até o presente nenhuma explicação convincente para o comportamento destas oscilações, havendo bastante empenho na solução deste problema.

Além das amostras de GaAs contendo um único plano de dopagem, também foi analisada uma amostra com uma sequência periódica de cinco dopagens delta. O caráter bi-dimensional deste sistema foi comprovado através de medidas de Schubnikov-de-Haas. Analogamente ao caso do "δ-doping" simples, os espectros de PR da amostra "Mδ-doping" exibiu estruturas que estão localizadas acima do "gap" do GaAs. Neste caso, as transições ópticas envolvem estados localizados na banda-de-valência e estados contínuos, acima do nível de Fermi, na banda-de-condução.

VII. REFERÊNCIAS:

Antosiewicz, H.A. (1964); em "Handbook of Mathematical Functions" (editado por M.Abramowitz e I.A. Stegun; U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards, Washington, D.C.), 1964.

Ashen, D.J. (1975), Dean, P.J., Hurle, D.T.J., Mullin, J.B., White, A.M., Greene, P.D.; J. Phys. Chem. Solids 36, 1041.

Aspnes, D.E. (1966); Phys. Rev. 147, 554.

Aspnes, D.E. (1967); Phys. Rev. 153, 972.

Aspnes, D.E. (1969) e Frova, A.; Sol. St. Comm. 7, 155.

Aspnes, D.E. (1972); em, "Semiconductors and Semimetals", vol.9, edited by R.L. Willardson and A.C. Beer (Academic New York).

Aspnes, D.E. (1973.a), Studna, A.A.; Phys. Rev. B7, 4605.

Aspnes, D.E. (1973.b); Surface Science 31, 419.

Aspnes, D.E. (1980); em, "Handbook on Semiconductors", vol.2 (edited by M.Balkanski, North Holland, Ney York)

Basmaji, P. (1989); *comunicacao pessoal.*

Basmaji, P. (1990), Ceschin, A.M., Li, M.S., Hipólito, O., Bernussi, A.A., Iikawa, F., Motisuke, P.; Surface Science, *a ser publicado.*

Bastard, G. (1988); em "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", (Les éditons de physique, Les Ulis Cedex, França), 1988.

Bernussi, A.A. (1987), Maia, I.A., Machado, A.M., Motisuke, P.; Rev. Fis. Aplicada e Instrumentação; 2, 286.

Bernussi, A.A. (1988), Barreto, C.L., Carvalho, M.M.G., Motisuke,

P.; J.Appl. Phys. 64, 1358.

Bernussi, A.A. (1989), Rodrigues, P.A.M., Cerdeira, F.,Crivelenti, V.L., Motisuke, P., Sacilotti, M.A., Machado, A.M., Vásquez, C.; 4a. Escola Brasileira de Semicondutores, *a ser publicado.*

Bernussi, A.A. (1990.a), Iikawa, I., Motisuke, P., Basmaji, P., Li, M.S., Hipólito, O.; J.Appl. Phys., *a ser publicado.*

Bernussi, A.A. (1990.b), Iikawa, I., Motisuke, P., Basmaji, P., Li, M.S., Hipólito, O.; Procceedings, SPIE, *a ser publicado.*

Bhattacharya, R.N. (1988), Shen, H., Parayanthal, Pollak, F.H., Cutts, T. e Aharoni, H.; Phys. Rev. B37, 4044.

Bottka, N. (1988), Gaskill, D.K., Sillmon, R.S., Henry, R. e Glosser, R.; J. Electron. Materials 17, 161.

Chiu, T.H. (1988), Cunningham, J.E., Tell, B., Schubert, E.F.; J. Appl. Phys. 64, 1576.

Dohler, G.H. (1976); Surface Science 73, 97.

Eisele, I. (1989); Superlattices and Microstructures, 6, 123.

Glembocki, O.J. (1985), Shanabrook, B.V., Bottka, N., Beard, W.T., Comas, J.; Appl. Phys. Lett. 46, 970.

Grover, J. (1971), Koeppen, S. e Handler, P.; Phys. Rev. B4, 2830.

Hopfel, R.A. (1985), Shah, J., Gossard, A.C., Weigmann, W.; Appl. Phys. Lett. 47, 163.

Koch, F. (1986), Zrenner, A., Zachau, M.; Series in Solid State Sciences, 67 (Springer, Berlin), 175.

Koenraad, P.M. (1990), Blom, F.A.P., Langerak, C.J.G.M., Leys, M.R., Perenboom, J.A.A.J., Singleton, J., Spermon, S.J.R.M., Vleuten, W.C., Voncken, A.P.J., Wolter, J.H.; Surface Science, *a*

ser publicado.

Lanzilotto, A.M. (1989), Santos, M., Shayegan, M.; Appl. Phys. Lett. 66, 1456.

Maciel, A.C. (1990), Tathan, M., Ryan, J.F., Worlock, J.M., Nahory, R.E., Harbison, J.P., Florez, L.T.; Surface Science, *a ser publicado.*

Meynadier, M.H. (1986), Orgonosi, J., Delalande, C., Brum, J.A., Bastard, G., Voos, M., Weimann, G. e Schlapp, W.; Phys. Rev. B34, 2482.

Miller, D.A.B. (1986), Chemla, D.S., Rink, S.S.; Phys. Rev. B33, 6976.

Monch, W. (1982) e Gant, H.; Phys. Rev. 48, 512.

Perry, C.H. (1988), Lee, K.S., Zhou, W., Worlock, J.M., Zrenner, A., Koch, F., Ploog, G.; Surface Science 196, 677.

Petroff, Y. (1980); "Handbook of Semiconductors", vol.2 (editado por M.Balkanski, North Holland, New York), pag.3.

Ploog, K. (1983) e Dölher, G.H.; Adv. Phys. 32, 285.

Ploog, K. (1987); J. Cryst. Growth, 81, 304.

Schwarz, N. (1989), Müller, F., Tempel, G., Koch, F., Weimann, G.; Semicond. Sci. Tecchnol. 4, 571.

Schubert, E.F. (1986), Fischer, A., Ploog, K.; IEEE Trans. Electr. Devices, ED33, 625.

Schubert, E.F. (1988), Stark, J.B., Ullrich, B., Cunningham, J.E.; Appl. Phys. Lett. 52, 1508.

Shanabrook, B.V. (1987), Glembocki, O.J., Beard, W.T.; Phys. Rev. B35, 2540.

Shen, X.C. (1986), Shen, H., Parayanthal, P., Pollak, F.H., Schulman, J.N., Smirl, A.L., Mcfarlane, R.A., D'Haenens, I.; Superlattices and Microstructures, 2, 513.

Shen, H. (1990) e Pollak, F.H.; *submetido ao Phys. Rev. B.*

Skolnick, M.S. (1986), Tu, C.W., Harris, T.D.; Phys. Rev. B33, 8468.

Snow, E.S. (1988), Glembocki, O.J., Shanabrook, B.V.; Phys. Rev. B38, 12483.

Stern, F. (1970); J. Comp. Phys. 6, 56.

Stern, F. (1984), Sarma, S.D.; Phys. Rev. B30, 840.

Voisin, P. (1984), Bastard, G. e Voos, M.; Phys. Rev. B29, 935.

Weinstein, F.C. (1971), Dow, J.D., Lao, B.Y.; Phys. Rev. B4, 3502.

Wood, C.E.C. (1980), Metze, G., Berry, J., Eastman, L.F.; J.Appl. Phys. 51, 383.

Zhou, W. (1989), Perry, C.H., Lee, K.S., Ma, L., Worlock, J.M., Zrenner, A., Koch, F., Ploog, K.; Superlattice and Microstructures, *a ser publicado.*

Zrenner, A. (1985), Reisinger, H., Koch, F., Ploog, G.; Proc. 17th Intern. Conf. on the Physics of Semiconductors, San Francisco, 1984, Eds. J.P. Chadi and W.A. Harrison (Springer, New York), 325.

Zrenner, A. (1988.a), Koch, F., Ploog, G.; Surface Science 196, 671.

Zrenner, A. (1988.b), Koch, F., Leotin, J., Goiran, M. e Ploog, K.; Semicond. Sci. Technol. 3, 1132.