

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN"**

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO  
E CIÊNCIA DOS MATERIAIS**

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS  
DE  
NANOESTRUTURAS MODULADAS**

**ERIC ALBERTO DE MELLO FAGOTTO ✓**

**ORIENTADOR:**

**PROF. DR. JOSÉ ANTÔNIO BRUM**

**CO-ORIENTADOR:**

**PROF. DR. PETER ALEXANDER SCHULZ**

*Este exemplar corresponde  
redução final de Tese de graduação  
do aluno Eric A. M. Fagotto  
aprovada pela Comissão Julgadora.  
Campinas, 20 dezembro 1995.  
M. L. S.*

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

Campinas, dezembro de 1995.



UNIDADE	IF
N.º CHAMADA:	
	UNICAMP
	F138P
V.	Ex.
TOMBO BC/	27099
PROC.	667196
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	84.11.00
DATA	20/03/96
N.º CPD	M.00086.167.5

IF 1012 m

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

F138p

Fagotto, Eric Alberto de Mello  
Propriedades eletrônicas de nanoestruturas  
moduladas / Eric Alberto de Mello Fagotto. --  
Campinas, SP : [s.n.], 1995.

Orientador: José Antônio Brum.  
Co-orientador: Peter Alexander Schulz.  
Tese (doutorado) - Universidade Estadual  
de Campinas, Instituto de Física "Gleb  
Wataghin".

1. Nanoestrutura. 2. Eletrônica do esta-  
do sólido. 3. Superestrutura como material.  
I. Brum, José Antônio. II. Schulz, Peter  
Alexander Bleinroth. III. Universidade  
Estadual de Campinas. Instituto de Física  
"Gleb Wataghin". IV. Título.



INSTITUTO DE FÍSICA  
GLEB WATAGHIN

**PARECER DE APROVAÇÃO**  
**DEFESA DE TESE DE DOUTORADO**  
**ÉRIC ALBERTO DE MELLO FAGOTTO**

DATA: 12.12.95

BANCA EXAMINADORA:

- Prof. Dr. JOSÉ ANTÔNIO BRUM (Orientador)

- Prof. Dr. NELSON STUDART FILHO

- Profa. Dra. ANDRÉA BRITO LATGÉ

- Profa. Dra. YARA GALVÃO GOBATO

Prof. Dr. GEORGE GERSHON KLEIMAN

**A meus pais e avós**

## **RESUMO**

Neste trabalho investigamos os efeitos causados por um campo elétrico às propriedades eletrônicas de um sistema de fio quântico corrugado, conectado a dois reservatórios bi-dimensionais (**2D**). Este campo elétrico é aplicado de forma paralela à direção do transporte no sistema, dando origem à formação de estados localizados de Wannier-Stark. Devido à geometria da estrutura, que possui cavidades abertas (*quase-0D*) conectadas por canais unidimensionais (**1D**), temos a formação de minibandas hibridizadas que sob a ação do campo elétrico quebram-se, dando origem a ressonâncias de Fano. Nosso estudo, para o acompanhamento destes fenômenos foi conduzido através da análise da transmissão eletrônica através do sistema e do cálculo da densidade espectral.

## **ABSTRACT**

In this work we investigated the effects of an electric field on the electronic properties of a corrugate quantum wire system, linked to two two-dimensional (**2D**) reservoirs. The applied electric field is parallel to the transport direction in the system, and it produces localized Wannier-Stark states. The structure has open cavities (*quasi-0D*) connected to one-dimensional channels (**1D**), leading to the formation of hybridized minibands. These minibands under the action of the electric field are broken, what produces Fano resonances. We followed these phenomena by analyzing the electronic transmission through the system and by calculating the spectral density.

# AGRADECIMENTOS

Para que este trabalho se tornasse possível foi necessária a colaboração de muitos, de forma direta e indireta. Dentre estes, é imprescindível registrar os meus agradecimentos

ao Prof. Dr. José Antônio Brum pela sua orientação neste trabalho e ao Prof. Dr. Peter Alexander Schulz pela co-orientação;

aos meus familiares pelo apoio e dedicação prestados, especialmente a meus pais e avós;

aos Profs. Drs. George Kleiman, Marco Aurélio Pinheiro Lima, Yara Gobato, Néelson Studart, Andréa Latgé, Edson Moschim, Maria José e Fernando Iikawa pelas discussões e sugestões apresentadas;

aos amigos do GPO, Adm. Abbade, Ximenes, Rudson, Pablo, Adriana, Manoel, Brás, Evaldo, Ivã, Rafael, Luis Guilherme e Valéria pelo companherismo;

aos amigos Dario, Harry e Júnior pelas motivantes discussões;

ao amigo Sandro pelas várias ajudas na parte computacional deste trabalho;

à Amy por sua simpatia e atenção;

à Sra. Lene, secretária do GPO, e à Sra. Marisa, secretária do Grupo de Teoria por seus ótimos serviços e dedicação;

à equipe da biblioteca do IFGW por sua disposição e simpatia no atendimento;

à equipe do "Centro de Computação John Rogers" pelo gerenciamento do sistema de computação ;

aos amigos do Centro Cultural do Castelo pelo contínuo incentivo;

ao CAPES e a FAPESP pelo financiamento deste trabalho;

e finalmente ao Astor pelo uso de seu nome.

# **SUMÁRIO**

	página
<b><u>Capítulo 1 - Introdução</u></b>	1-1
1.1 Técnicas de construção de nanoestruturas	1-1
1.2 Revisão	1-3
1.2.1 Quantização da condutância	1-4
1.2.2 Transporte através de um cristal unidimensional finito	1-5
Referências	1-6
<b><u>Capítulo 2 - Método de Cálculo</u></b>	2-1
2.1 Aproximação de quase-desacoplamento	2-2
2.2 Cálculo do espectro eletrônico	2-4
2.3 Propriedades eletrônicas de uma nanoestrutura	2-4
2.4 Condutância e transmissão	2-11
2.5 Propriedades eletrônicas de uma nanoestrutura na presença de um campo elétrico externo	2-12
2.6 Densidade espectral	2-13
Referências	2-14
<b><u>Capítulo 3 - Nanoestruturas de Semicondutores</u></b>	3-1
3.1 Fio quântico	3-1
3.2 Estrutura de caixa quântica assimétrica e aberta	3-4
3.3 Superrede de caixas quânticas assimétricas e abertas	3-8
Referências	3-14
<b><u>Capítulo 4 - Estados de Wannier-Stark em Nanoestruturas</u></b>	4-1
4.1 Formação de estados de Wannier-Stark: modelo de uma banda	
4.2 Efeitos de um campo elétrico longitudinal às propriedades eletrônicas de uma caixa quântica aberta	4-2 4-6
4.3 Efeitos de um campo elétrico longitudinal às propriedades eletrônicas de um sistema de caixas quânticas abertas e conectadas	4-11
4.4 Análise da evolução das propriedades eletrônicas através da densidade espectral	4-19
Referências	4-26
<b><u>Capítulo 5 - Conclusão</u></b>	5-1
Referências	5-3

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo do transporte eletrônico através de pequenas estruturas teve início com um trabalho de James Clerk Maxwell[1] em 1891, sobre a resistência elétrica associada a um orifício feito numa placa metálica. O primeiro estudo sobre transporte balístico, i.e., em condições que o livre caminho médio é maior do que o comprimento da amostra, foi feito por Sharvin[2], e envolveu a injeção e a detecção de um feixe eletrônico através de contatos de pontas, aplicados a uma amostra metálica. Contudo, devido ao pequeno comprimento de onda dos elétrons no nível de Fermi ( $\lambda_F$ ) nos metais ( $\sim 0.5 \text{ nm}$ ), torna-se muito difícil obter efeitos de quantização conjugados ao transporte balístico. Por outro lado,  $\lambda_F$  nos semicondutores dopados é consideravelmente maior. Para uma heteroestrutura de GaAs/(Al,Ga)As encontramos um valor de cerca de  $40 \text{ nm}$  na camada de inversão formada no GaAs, para uma densidade de portadores de  $4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Isto, em conjunto com a evolução das técnicas de crescimento, tornou possível confinar elétrons em estruturas de semicondutores criadas artificialmente, viabilizando a proposta de Esaki e Tsu[3]. Estes sistemas, conhecidos como nanoestruturas de semicondutores, podem ser construídos em diversas geometrias, permitindo um estudo controlado do transporte quântico. Com isso, temos a possibilidade de investigar as propriedades eletrônicas e de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade, o que traz grandes expectativas tanto para aplicações[4] como para pesquisa básica[5].

### 1.1 TÉCNICAS DE CONSTRUÇÃO DE NANOESTRUTURAS

O objeto de estudo deste trabalho consistiu de nanoestruturas com confinamento bidimensional, i.e. fios quânticos. Restringiremos a breve revisão desta

secção a este tipo de estrutura. Além disso, apesar das nanoestruturas poderem ser construídas empregando-se vários sistemas de semicondutores, faremos somente referência ao de GaAs/(Al,Ga)As com o qual fizemos nossos cálculos.

O primeiro passo para a construção de um fio quântico, é se conseguir uma heteroestrutura de GaAs/(Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>)As (tipicamente  $x=0.3$ ) com um gás de elétrons bidimensional (2DEG) de alta mobilidade (da ordem de  $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ). Isto é usualmente feito através de epitaxia por feixe molecular (MBE) e dopagem modulada[6], o que conduz à configuração mostrada na Figura 1.1.

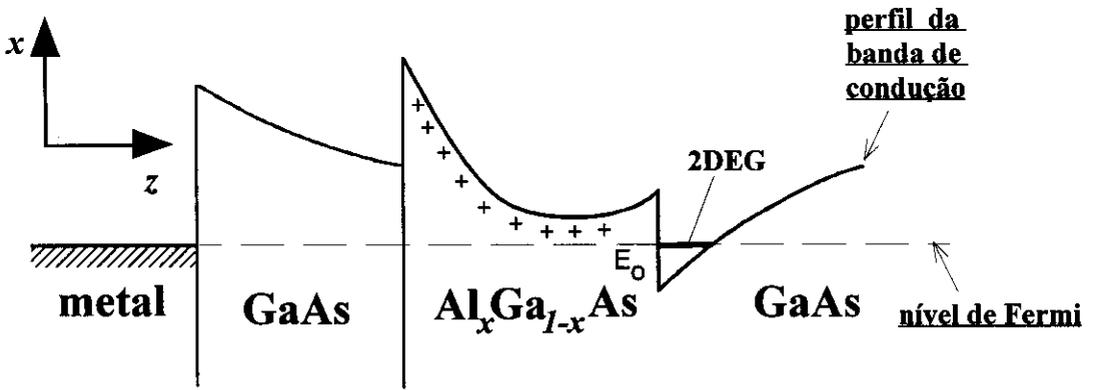


Figura.1.1: Perfil da banda de condução no ponto  $\Gamma$  ao longo da direção de crescimento para uma heteroestrutura de GaAs/(Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>)As/GaAs ( $0.3 \leq x \leq 0.5$ ), com dopagem modulada tipo-n na camada de (Al,Ga)As. Um 2DEG de alta mobilidade forma-se na camada não dopada de GaAs junto à interface com o (Al,Ga)As. Esta figura é adaptada de [8].

O 2DEG está presente na camada de GaAs não dopada e é formado pelo confinamento dos elétrons no poço de potencial triangular, criado pela redistribuição de carga na heteroestrutura. Para reduzir o espalhamento pelas impurezas doadoras existe uma camada espaçadora no (Al,Ga)As, i.e. não dopada, distanciando-as da interface com o GaAs. A etapa seguinte para se obter um sistema unidimensional é impor sobre o 2DEG um confinamento lateral (e.g., direção  $x$ ). Uma das técnicas mais utilizadas para este fim recebe o nome de "split-gate", e consiste basicamente de uma depleção seletiva no 2DEG causada por um campo eletrostático, aplicado à

amostra através de contactos metálicos. Estes contactos, chamados de *gates*, são construídos no topo da amostra (Figura 1.2(a)) utilizando-se de técnicas elaboradas de litografia[7]. Aplicando-se uma voltagem negativa aos gates ocorre uma depleção de carga sob eles, formando-se um canal 1D que estende-se ao longo da direção  $y$  (Figura 1.2(b)).

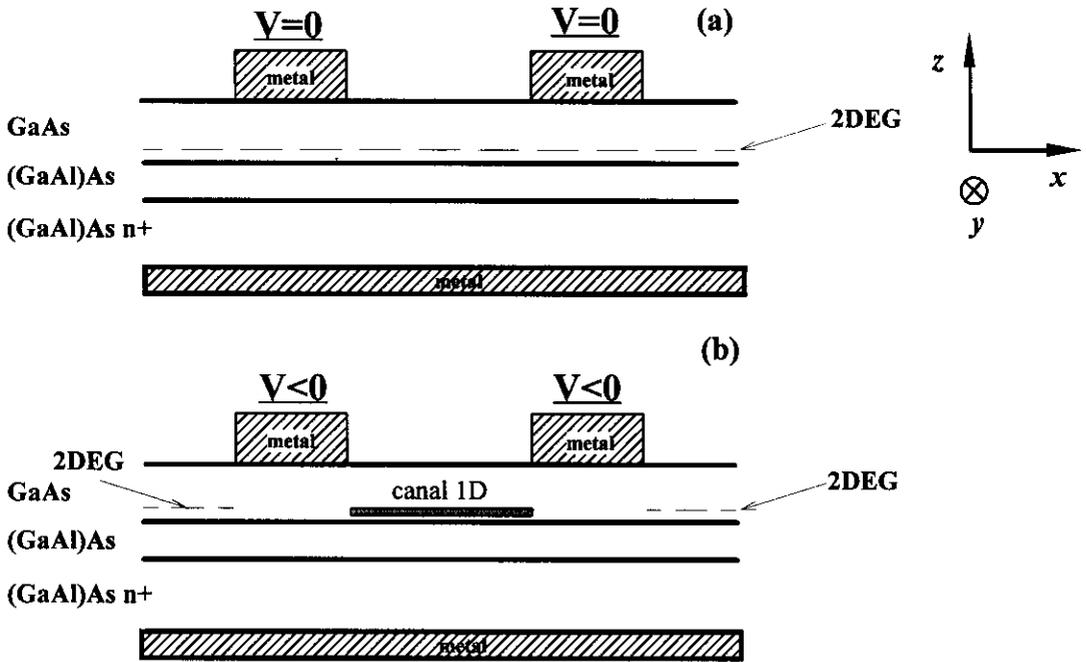


Figura.1.2: Representação esquemática da técnica de "split-gate". (a) Os contactos metálicos definidos no topo da heteroestrutura estão conectados ao terra, e o 2DEG está distribuído de forma homogênea sob a superfície. (b) É aplicada uma voltagem negativa aos contactos, e o 2DEG é depletado sob eles formando-se um canal 1D, devido ao confinamento lateral (e.g. direção  $x$ ). Esta figura é adaptada de [8].

## 1.2 REVISÃO

Apresentamos a seguir uma rápida revisão de alguns dos trabalhos que motivaram esta tese.

## 1.2.1 Quantização da Condutância

A primeira proposta para a construção de nanoestruturas unidimensionais (1D) foi feita em 1980 por Sakaki[9], com o objetivo de se criar dispositivos mais rápidos e eficientes (chaves eletrônicas, lasers sintonizáveis, etc), beneficiando-se das altas mobilidades destes sistemas.

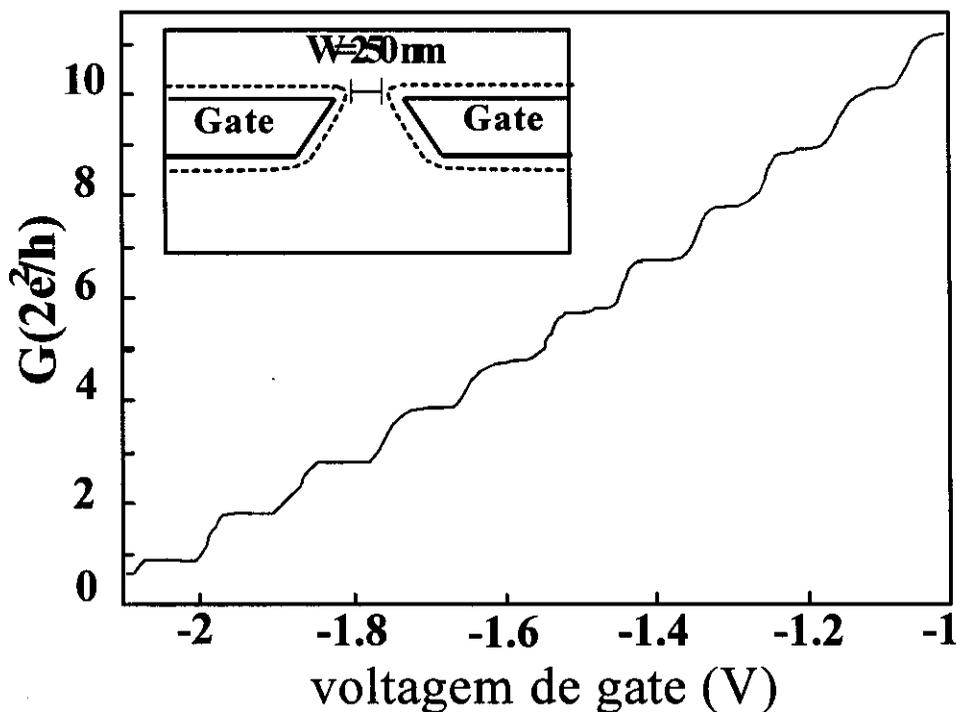


Figura 1.3: Condutância ( $T=0.6\text{K}$ ) para um sistema de pontas de quantização como função da tensão de gate (cf.[12]). O detalhe no gráfico mostra a disposição dos gates.

Entretanto somente em 1988, que Van Wees et al[10] e Wharam et al[11], independentemente, verificaram a quantização da condutância para um canal 1D (*quantum point contact*) em função de sua largura, definida pela tensão aplicada a contatos de gate (Figura 1.3). Eles encontraram patamares de condutância cujas alturas eram múltiplos inteiros de  $2e^2/h$ , o que atribuíram a unidimensionalidade do sistema. Em argumentos simples[13] a velocidade eletrônica é inversamente

proporcional à densidade de estados nestes sistemas, o que leva a uma expressão para a condutância,  $G$ :

$$G = \frac{2e^2}{h} N, \quad (1.1)$$

onde  $N$  é o número de sub-bandas unidimensionais ocupadas.

Experimentos realizados com canais mais extensos do que os utilizados nos experimentos originais ( $\sim 100$  nm)[12, 13], apesar de ainda menores do que o livre caminho médio, não mostraram efeitos de quantização na condutância[12]. Os fatores mais prováveis para este comportamento devem ser o aumento do espalhamento reverso (*backscattering*) no canal, ou o espalhamento por impurezas causado pela reduzida blindagem no 1DEG[14].

### 1.2.2 Transporte através de um Cristal Unidimensional Finito

Kouwenhoven et al[13] estudaram uma estrutura de fio quântico com modulação do confinamento lateral, objetivando observar um comportamento de superrede 1D. A amostra, construída a partir de uma heteroestrutura de GaAs/(Al,Ga)As, possuía em seu topo gates dispostos conforme mostrado no detalhe da Figura 1.4. Um destes gates contava com quinze corrugações de  $200$  nm de período, o que resultava na formação de quinze cavidades conectadas em série, assim que fosse aplicada uma voltagem negativa. Na Figura 1.4 é mostrada a condutância deste sistema medida à temperatura de  $10$  mK e na presença de um campo magnético de  $2$  T, em função da voltagem aplicada ao gate corrugado, mantendo-se fixa a voltagem no outro gate ( $V_{g1} = -0.45$  V). Pode ser notada a formação de dois mínimos mais pronunciados, indicados na figura pelos símbolos \* e +, e entre eles quinze oscilações de menor amplitude. Kouwenhoven et al[15] associaram estes dois mínimos a gaps de periodicidade, e as quinze outras oscilações aos estados de Bloch que formam as minibandas. A existência destas oscilações é uma prova da existência de coerência de fase na estrutura, permitindo um comportamento de superrede.

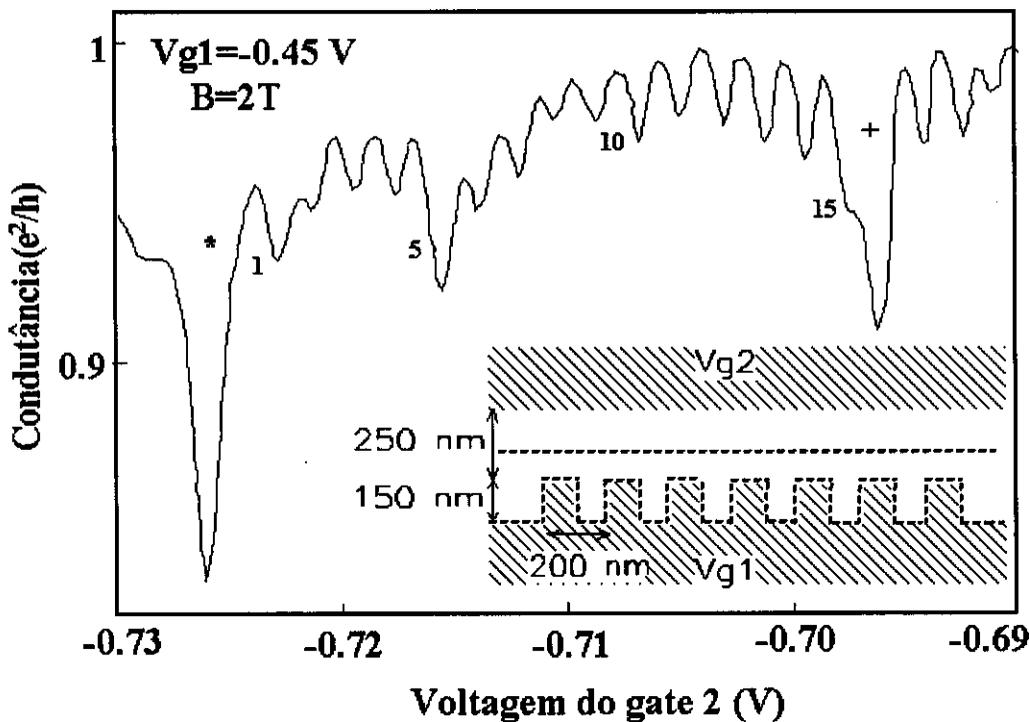


Figura 1.4: Variação da condutância para uma estrutura de fio quântico corrugado em função da voltagem aplicada a um dos gates ( $V_{g2}$ ). No detalhe encontramos a geometria de disposição dos gates no topo da amostra (cf[15]).

Uma estrutura semelhante foi estudada por Haug et al[14]. Neste caso, a estrutura possuía apenas quatro períodos e os resultados obtidos evidenciaram os efeitos de carga (bloqueio de Coulomb).

Em nosso trabalho, vamos estudar as propriedades eletrônicas de nanoestruturas quase-unidimensionais que apresentam efeitos de periodicidade. No **Capítulo 2** apresentaremos os métodos de cálculo utilizados no trabalho. O **Capítulo 3** traz uma discussão das propriedades físicas das nanoestruturas estudadas. O **Capítulo 4** discute os efeitos de um campo elétrico longitudinal nestes sistemas. Finalmente, no **Capítulo 5** apresentamos as conclusões deste trabalho.

## **REFERÊNCIAS**

- [1] J. C. Maxwell in "Tretise on Electricity and Magnetism." reprint by Dover, New York (1954).
- [2] Y. V. Sharvin, *Sov. Phys. JETP* **21**, 655 (1965). Y. V. Sharvin and N. I. Bogatina, *Sov. Phys. JETP* **29**, 419 (1969).
- [3] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
- [4] R. Landauer, *Phys. Today* **42**, 119 (1989). R. T. Bate, *Sci. Am.* **258**, 437 (1982)
- [5] Y. Imry, in "*Directions in Condensed Matter Physics*" Vol. **1**, World Scientific, Singapore (1986).
- [6] R. Dingle, H. L. Stormer, A. C. Gossard, and W. Wiegman, *Appl. Phys. Lett.* **7**, 665 (1978).
- [7] Veja por ex. "*Physics and Technology of Semiconductor Quantum Devices*", K. H. Ploog and L. Tapfer Eds., Springer-Verlag (1993).
- [8] C. W. J. Beenakker and H. van Houten in "*Solid State Physics*", **44**, 11-12(1991).
- [9] H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**, L735 (1980).
- [10] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Willianson, L. P. Kouwenhoven, D. van Der Marel, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988).
- [11] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, *J. Phys. C* **21**, L209 (1988).
- [12] H. van Houten, C. W. Beenaker, and B. J. van Wees in "*Nanostructured Systems*", Academic Press, New York (1992). G. Timp in "*Mesoscopic Phenomena in Solids*", Elsevier, Amsterdam (1992).
- [13] L. P. Kouwenhoven, F. W. J. Hekking, B. J. van Wees, C. J. P. M. Harmans, C. E. Timmering, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 361 (1990).
- [14] R. F. Haug, K. Y. Lee, T. P. Smith III, and J. M. Hong, in "*Proceedings at 20th International Conference on Physics of Semiconductors*", ed. by J. Joannoulos (World Scientific, London, 1990), pag. 2443.

# Capítulo 2

## Método de Cálculo

Sistemas que apresentam confinamento em mais do que uma direção, raramente apresentam soluções analíticas para o cálculo de suas autofunções. Isto, por exemplo, pode ser constatado através de um simples caso, como o de um poço de potencial bidimensional[1]. Teremos soluções exatas somente se a simetria do potencial for bem definida, e se as barreiras têm altura infinita. Esta não é a situação geralmente encontrada nas nanoestruturas, e por isso diversos métodos de cálculo têm sido desenvolvidos para investigar estes sistemas. Laux e Stern[2] resolveram numericamente a equação de Schrödinger e de Poisson de forma autoconsistente, para tratar o problema da transferência de carga em sistemas *quase-1D*, definidos por confinamento eletrostático sobre um **2DEG**. Brum e Bastard[3] introduziram a aproximação de *quase-desacoplamento*, permitindo assim uma solução quase analítica para discutir os efeitos de campos elétrico e magnético nas bandas de condução e de valência de um fio quântico. Outros métodos têm sido desenvolvidos para tratar deste problema. Basicamente, eles se apoiam em dois tipos de ataque ao problema: *i*) solução numérica e *ii*) utilizando uma base de funções analíticas, em geral obtidas através da solução exata de uma parte do Hamiltoniano.

Ulloa et al.[4] calcularam a condutância para um sistema de fio quântico com corrugação periódica, e identificaram as antiressonâncias na condutância[5] com os gaps devidos à periodicidade da estrutura. Logo após, Brum[6] mostrou que existem dois tipos de gap neste tipo de estrutura, um devido à periodicidade e o outro à interferência de estados de cavidade aberta (*quase-0D*), com estados de fio (**1D**). Leng e Lent[7] calcularam a quantização da condutância para uma superrede *quase-1D*, na

presença de um campo magnético. Maslov et al.[8] consideraram o transporte entre dois reservatórios **2D** desordenados, conectados através de um condutor balístico. Eles verificaram que a inserção de uma constrição no condutor reduz o efeito da desordem, atenuando as flutuações na condutância.

Introduzimos nas seções seguintes o método de cálculo que utilizamos para estudar as propriedades eletrônicas de nanoestruturas, introduzido por Brum e Bastard[3, 6, 9], baseado na construção de uma base de estados com soluções analíticas.

## 2.1 APROXIMAÇÃO DE *QUASE-DESACOPLAMENTO*

Brum e Bastard [3, 9] propuseram um método de cálculo perturbativo, adequado para tratar a situação em que o potencial de confinamento lateral é fraco, quando comparado ao epitaxial. Esta situação se verifica na maior parte das amostras disponíveis atualmente[10, 11]. Isto é descrito por:

$$V(x, z) = V_b(z) + \Delta w(x, z), \quad (2.1)$$

onde  $V(x, z)$ ,  $V_b(z)$  e  $\Delta w(x, z)$  são o potencial total, o potencial epitaxial e a perturbação (considerados separadamente) que acopla os movimentos nas direções  $x$  e  $z$ , respectivamente. De agora em diante adotaremos como convenção, que  $z$  é direção do crescimento epitaxial,  $x$  a do confinamento lateral, e a direção  $y$  é livre.

Ao resolvermos a equação de Schrödinger para o potencial  $V(x, z)$ , utilizamos uma base de autofunções da forma

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}} \sum_n \chi_n(z) \alpha_n(x), \quad (2.2)$$

onde  $\chi_n(z)$  é a  $n$ -ésima solução da equação unidimensional de Schrödinger para o movimento em  $z$ ,  $k_y$  é o vetor de onda caracterizando o movimento ao longo da direção  $y$ , e  $\alpha_n(x)$  é a solução para o conjunto de equações de Schrödinger acopladas

$$\sum_m \left\{ \left[ \frac{P_x^2}{2m^*} \right] \delta_{nm} + \int \chi_n^* \Delta w(x, z) \chi_m(z) dz \right\} \alpha_m(x) = \left[ \varepsilon - E_n - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \right] \alpha_n(x), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.3)$$

onde  $E_n$  são os autovalores para o movimento em  $z$ . Dentro deste procedimento podemos, a princípio, resolver qualquer geometria de confinamento bidimensional. Evidentemente este método tem convergência mais rápida quanto menor for a perturbação  $\Delta w(x, z)$  comparada ao potencial  $V_b(z)$ . Resolvendo a Eq.(2.3), levando-se em conta apenas os termos diagonais para  $\Delta w(x, z)$ , encontramos que cada sub-banda em  $z$  gera uma família de sub-bandas em  $x$ , soluções do Hamiltoniano efetivo:

$$H_n = E_n + T_x + \int \chi_n^2(z) \Delta w(x, y) dz + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}. \quad (2.4)$$

Desta forma, os autovalores do Hamiltoniano total, em ordem zero, são dados por

$$\varepsilon(n, m, k_y) = E_n + \varepsilon_m(n) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}, \quad (2.5)$$

onde  $\varepsilon_m(n)$  é a  $m$ -ésima sub-banda em  $x$ , relacionada a  $n$ -ésima sub-banda em  $z$ . Eventualmente poderá existir alguma degenerescência acidental entre sub-bandas 1D relacionadas a diferentes estados em  $z$ , mas esta pode ser quebrada quando da inclusão de ordens superiores de acoplamento.

## 2.2 CÁLCULO DO ESPECTRO ELETRÔNICO

O procedimento por nós adotado para estudar as propriedades eletrônicas de uma nanoestrutura consistiu em considerar o caso em que ela encontra-se conectada a dois reservatórios **2D**, e calcular a transmissão através dela. Empregamos para isto o *método da função envelope*[12] e a *aproximação de quase-desacoplamento em ordem zero*. Escolhemos, também, obter suas autofunções projetando o seu Hamiltoniano na base gerada pelo confinamento lateral dos reservatórios **2D**, em vez de trabalhar com a solução "exata" da estrutura. O motivo para isso reside na impossibilidade de se construir uma base completa que descreva o sistema, o que acarreta vários inconvenientes, dentre eles o de não haver conservação da unitariedade quando da transmissão. A utilização de uma mesma base para toda a estrutura mantém a unitariedade do sistema. Em compensação, perdemos um pouco da precisão nos níveis de energia da nanoestrutura ( $\leq 10\%$  para a base utilizada). Esta precisão é suficiente para desenvolvermos o nosso estudo e permite utilizar uma base de tamanho razoável, dentro dos recursos computacionais disponíveis. Também consideramos que todos os sistemas a serem discutidos no decorrer deste trabalho, estarão no limite quântico elétrico ao longo da direção  $z$ , devido ao forte confinamento epitaxial.

## 2.3 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UMA NANOESTRUTURA

Na Fig.2.1 temos representado o esquema geral com qual trataremos o problema da transmissão eletrônica através de nanoestruturas. No decorrer deste trabalho a origem das coordenadas estará sempre posicionada na interface entre o reservatório emissor **2D** e a estrutura, definida na figura através de um potencial genérico  $V(x,y)$ . Adicionalmente, consideramos que os elétrons que incidem sobre a estrutura a partir do reservatório da esquerda, atravessam-na balisticamente e são coletados no reservatório à direita. Apresentamos agora o método de cálculo

desenvolvido por Bastard et al[9] e utilizado por nós para obtermos a transmissão através destas nanoestruturas.

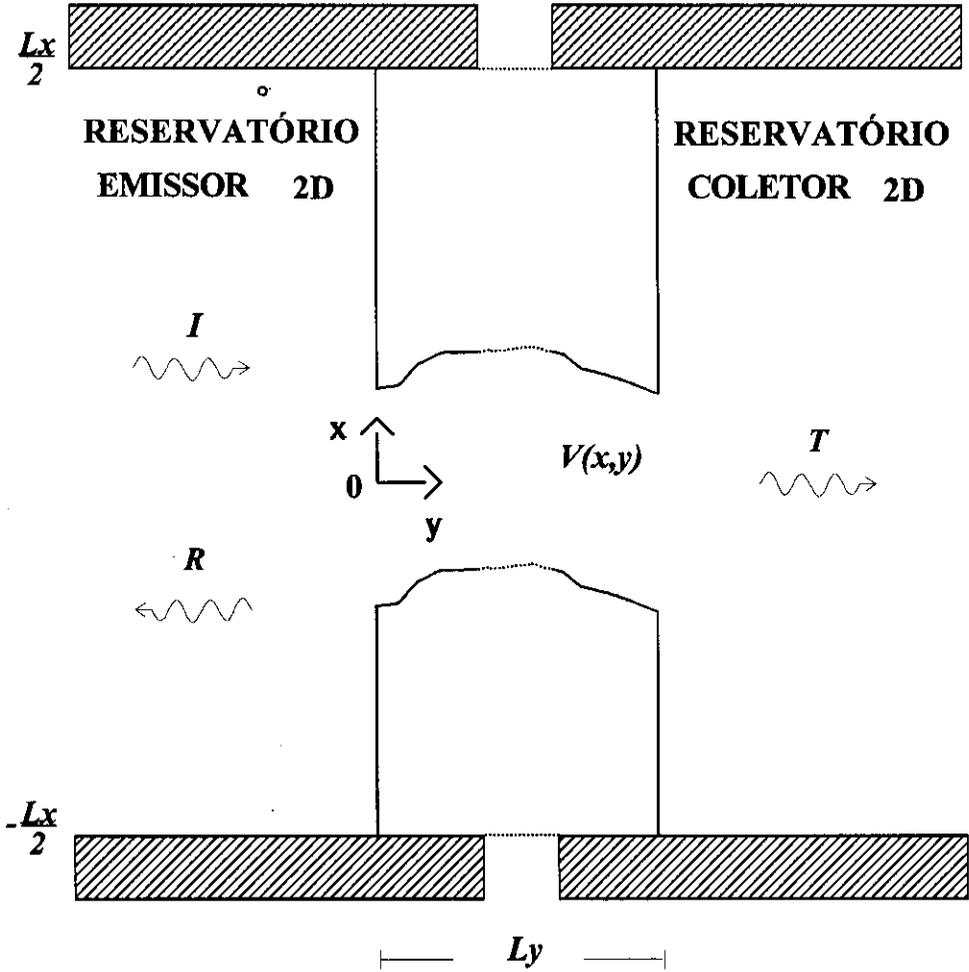


Fig.2.1: Nanoestrutura de geometria genérica, envolvida por dois reservatórios bidimensionais. As letras I, R e T indicam as ondas eletrônicas incidentes, refletidas e transmitidas, respectivamente. Nas regiões hachuradas o potencial assume valor infinito.

A solução no reservatório emissor, para o  $j$ -ésimo canal de entrada, tem a forma

$$\Psi_E(x, y; E) = \left[ e^{iq_j y} \alpha_j(x) + \sum_{s=1}^N r_{j,s} e^{-iq_s y} \alpha_s(x) \right] \quad (2.6)$$

e no reservatório coletor

$$\Psi_C(x, y; E) = \sum_{s=1}^N t_{j,s} e^{iq_s y} \alpha_s(x).$$

(2.7)

Nas Eqs.(2.6) e (2.7),  $r_{j,s}$  e  $t_{j,s}$  são os coeficientes de reflexão e de transmissão, respectivamente, para o  $j$ -ésimo canal incidente, espalhado para o  $s$ -ésimo canal tran. Os  $\alpha(x)$ 's são as autofunções que definem o confinamento lateral para os reservatórios.

$$H_W(x)\alpha_m(x) = \varepsilon_m \alpha_m(x)$$

(2.8)

onde  $H_W(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_W(x)$ ,

$$\text{com } V_W(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 \leq |x| \leq \frac{L_x}{2} \\ \infty & \text{para } |x| \geq \frac{L_x}{2} \end{cases},$$

$$\varepsilon_m = \frac{\hbar^2 \pi^2 m^2}{2m^* L_x^2} \quad (m=1,2,3,\dots),$$

e  $q_i = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - \varepsilon_i)}$ , onde  $E$  é energia total do estado.

Vemos que os  $q_i$ 's podem assumir valores imaginários, que correspondem às ondas evanescentes nos reservatórios emissor e coletor.

Com este modelo estamos, na prática, substituindo os reservatórios **2D** por estruturas **1D**, mas largas o suficiente (i.é.  $L_x \gg W$ , ver Figura 3.1).

Para obtermos as soluções na nanoestrutura vamos aproximar o potencial real  $V(x, y)$ , por uma série de  $\lambda$  camadas discretas de potencial  $V_a(x)$ , cada uma delas com largura  $L_a$  ao longo de  $y$ , conforme mostrado na Fig.2.2

Feito isto, escrevemos  $\lambda$  equações de Schrödinger, uma para cada camada de potencial

$$H_a(x, y)\Psi^a = \varepsilon_a\Psi^a, \quad (2.8-a)$$

onde

$$H_a(x, y) = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_{x,y}^2 + V_a(x), \quad (a=1,2,3,\dots,\lambda). \quad (2.8-b)$$

A  $l$ -ésima solução para  $a$ -ésima camada, tem a forma

$$\Psi_l^a(x, y) = [A_l e^{ik_l, ay_p} + B_l e^{-ik_l, ay_p}] \beta_l^a(x), \quad (2.8-c)$$

onde  $y_p = y - \sum_{p=1}^{a-1} L_p$  e  $\beta_l^a(x)$  são as autofunções para o confinamento lateral  $V_a(x)$ .

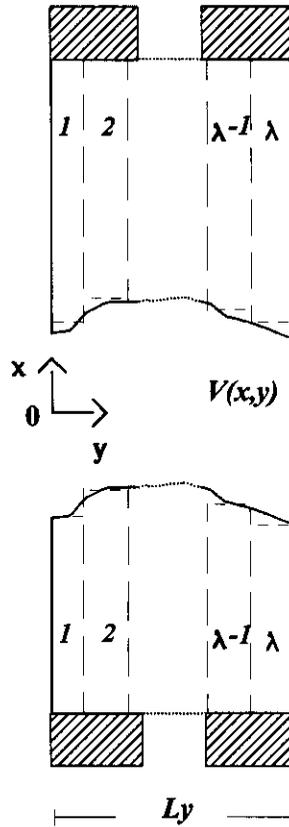


Fig.2.2: Discretização do potencial  $V(x,y)$ , que define a nanoestrutura, em  $\lambda$  regiões de potencial constante  $V_a(x)$  ao longo de  $y$ .

Contudo, de acordo com o que expusemos anteriormente, não utilizaremos diretamente as funções  $\beta_l^a(x)$ , Eq.(2.8-c), para construir as soluções, mas suas projeções sobre os  $\alpha_m(x)$ 's, ou seja

$$\begin{aligned}\Psi_l^a(x, y) &= \left[ A_l e^{ik_{l,a}y_p} + B_l e^{-ik_{l,a}y_p} \right] \sum_{m=1}^N |\alpha_m(x)\rangle \langle \alpha_m(x) | \beta_l^a(x)\rangle \\ &= \left[ A_l e^{ik_{l,a}y_p} + B_l e^{-ik_{l,a}y_p} \right] \sum_{m=1}^N b_{l,m}^a |\alpha_m(x)\rangle.\end{aligned}$$

onde  $b_{l,m}^a = \langle \alpha_m(x) | \beta_l^a(x)\rangle$

(2.9)

Aplicando  $H_a(x, y)$  à Eq.(2.9), encontramos

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{x,y}^2 + V_a(x) \right] |\Psi_l^a(x, y)\rangle = \varepsilon_l^a |\Psi_l^a(x, y)\rangle,$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_w(x) + V_a(x) - V_w(x) - \varepsilon_l^a \right] |\Psi_l^a(x, y)\rangle = 0,$$

$$\left[ H_w - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_a(x) - V_w(x) - \varepsilon_l^a \right] |\Psi_l^a(x, y)\rangle = 0,$$

$$\left[ \varepsilon_m + \frac{\hbar^2 k_{l,a}^2}{2m^*} - \varepsilon_l^a + V_a(x) - V_w(x) \right] \left[ A_l e^{ik_{l,a}y_p} + B_l e^{-ik_{l,a}y_p} \right] \sum_{m=1}^N b_{l,m}^a |\alpha_m(x)\rangle = 0.$$

(2.10)

Determinamos os  $b_{l,m}^a$ 's diagonalizando o determinante gerado pelo conjunto de equações acopladas

$$\left( \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_{l,a}^2}{2m^*} - \varepsilon_l^a \right) \delta_{m,n} + \sum_{m=1}^N b_{l,m}^a \langle \alpha_n(x) | [V_a(x) - V_w(x)] | \alpha_m(x)\rangle = 0,$$

(2.11)

A energia total do estado é  $E = \frac{\hbar^2 k_{l,a}^2}{2m^*} + \varepsilon_l^a$ , o que determina os  $k_{l,a}$ 's:

$$k_{l,a} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - \varepsilon_l^a)}. \quad (2.12)$$

podendo assumir valores reais, correspondendo a estados transmissíveis, ou imaginários, dando origem a estados não propagativos. Apesar de estarmos interessados na transmissão através da estrutura, é fundamental incluir tanto os valores imaginários como os reais de  $k_{l,a}$ , pois ambos são soluções de significado físico, e além disso necessários para a completeza da base. Devemos notar que os valores imaginários são responsáveis pela formação dos estados quase-confinados nas cavidades.

De acordo com esses resultados, escrevemos a solução geral para a  $a$ -ésima camada como

$$\Psi^a(x, y; E) = \sum_{l=1}^N \left( A_{j,l}^a e^{ik_{l,a}y_p} + B_{j,l}^a e^{-k_{l,a}y_p} \right) \sum_{m=1}^N b_{l,m}^a \alpha_m(x). \quad (2.13)$$

Falta-nos ainda determinar as  $2 \times N \times (\lambda - 1)$  incógnitas,  $r_{j,s}$ ,  $t_{j,s}$ ,  $A_{j,l}^a$  e  $B_{j,l}^a$ , para uma descrição completa do problema. Isto é feito impondo-se, de forma separada para cada canal de entrada, a continuidade da função de onda e do seu fluxo nas  $2\lambda$  interfaces da estrutura. Utilizando das Eqs.(2.6), (2.7) e (2.13), escrevemos

$$2q_n \delta_{j,n} = \sum_{l=1}^N \left[ (q_n + k_{l,1}) A_{v,l}^1 + (q_n - k_{l,1}) B_{v,l}^1 \right] b_{l,n}^1$$

$$2q_n r_{j,n} = \sum_{l=1}^N \left[ (q_n - k_{l,1}) A_{v,l}^1 + (q_n + k_{l,1}) B_{v,l}^1 \right] b_{l,n}^1$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^N \left[ (q_n + k_{l,a}) A_{v,l}^a e^{ik_{l,a}L_a} + (q_n - k_{l,a}) B_{v,l}^a e^{-ik_{l,a}L_a} \right] b_{l,n}^a = \\
& = \sum_{l=1}^N \left[ (q_n + k_{l,a+1}) A_{v,l}^{a+1} + (q_n - k_{l,a+1}) B_{v,l}^{a+1} \right] b_{l,n}^{a+1} \\
& \sum_{l=1}^N \left[ (q_n - k_{l,a}) A_{v,l}^a e^{ik_{l,a}L_a} + (q_n + k_{l,a}) B_{v,l}^a e^{-ik_{l,a}L_a} \right] b_{l,n}^a = \\
& = \sum_{l=1}^N \left[ (q_n - k_{l,a+1}) A_{v,l}^{a+1} + (q_n + k_{l,a+1}) B_{v,l}^{a+1} \right] b_{l,n}^{a+1} \\
2q_n t_{j,n} & = \sum_{l=1}^N \left[ (q_n + k_{l,\lambda}) A_{v,l}^\lambda e^{ik_{l,\lambda}L_\lambda} + (q_n - k_{l,\lambda}) B_{v,l}^\lambda e^{-ik_{l,\lambda}L_\lambda} \right] b_{l,n}^\lambda \\
0 & = \sum_{l=1}^N \left[ (q_n - k_{l,\lambda}) A_{v,l}^\lambda + (q_n + k_{l,\lambda}) B_{v,l}^\lambda \right] b_{l,n}^\lambda,
\end{aligned} \tag{2.14}$$

onde  $n=1, \dots, N$ .

Resolvido o sistema linear não homogêneo gerado pelo conjunto de Eqs.(2.14), podemos conhecer a transmissão eletrônica através da estrutura. Para uma dada energia  $E$ , ela é obtida através da razão entre os fluxos de probabilidade transmitido e incidente[13]. Desta forma, a partir das equações Eqs. (2.6) e (2.7) escrevemos

$$T(E) = \sum_{j=1}^{NF} \sum_{s=1}^N \frac{|q_s|}{|q_j|} |t_{j,s}|^2, \tag{2.15}$$

onde a soma em  $s$  percorre todos os canais disponíveis, ou seja todos aqueles que constituem a base e são transmissíveis, enquanto a soma sobre os  $j$ 's corre todos os canais até a posição do nível de Fermi ( $NF$ ) no reservatório emissor, que é determinada pela energia de entrada do elétron,  $E$ .

## 2.4 CONDUCTÂNCIA E TRANSMISSÃO

É de uso corrente na literatura, o formalismo desenvolvido por Landauer[14] e generalizado por Büttiker[15], para a conexão da transmissão com a condutância. Para um sistema multicanal de dois terminais, à  $T=0$  K, a fórmula de Landauer prevê que a condutância  $G$  é dada por

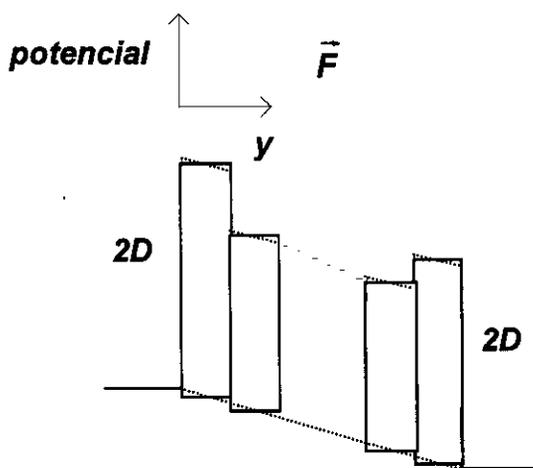
$$G = \frac{2e^2}{\hbar^2} \sum_{j,s} |t_{j,s}|^2, \quad (2.16)$$

se a medida é feita através de pontas de prova bastante afastadas da nanoestrutura. Contudo, quando a interação entre as pontas de prova e nanoestrutura é significativa, a descrição da condutância torna-se mais complexa. Infelizmente é extremamente difícil de se determinar em qual das situações são realizados os experimentos. Landauer[14] argumenta que a Eq.(2.16) pode descrever ambas as situações, desde que  $L_x$  (veja Fig.2.1) seja suficientemente grande. Apesar disto, fica a dúvida de como é feita a transição entre o sistema clássico, os contatos, e o sistema quântico, a nanoestrutura.

Ainda devemos ter em conta, que no atual estado-da-arte da construção das amostras, os efeitos de carga, a exemplo do bloqueio de Coulomb[16], dominam sobre os efeitos de quantização, o que torna mais complexa a interpretação dos experimentos. Sendo assim, não buscamos uma direta comparação de nossos resultados com a experiência, e nos limitaremos à análise dos coeficientes de transmissão da estrutura. Contudo, acreditamos que os efeitos previstos por nós se manifestem nas propriedades de transporte destas nanoestruturas.

## 2.5 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UMA NANOESTRUTURA NA PRESENÇA DE UM CAMPO ELÉTRICO EXTERNO ( $\parallel y$ )

Nesta seção supomos que o sistema constituído pelos reservatórios **2D** e a nanoestrutura estão submetidos a um campo elétrico  $F$ , aplicado ao longo da direção  $y$ . Em vez de considerarmos o potencial elétrico linearmente distribuído através da estrutura, fazemos a aproximação de que ele seja constante dentro de cada uma das  $\lambda$  camadas discretizadas. Para isto tomaremos o valor do potencial elétrico dentro de cada camada, como sendo aquele no centro da camada para a distribuição linear (Figura 2.3). Este procedimento nos leva a resultados quantitativamente corretos dentro das intensidades de campo elétrico a serem consideradas, e evita o uso de Funções d'Airy, o que aumentaria as dificuldades numéricas do problema.



**Fig.2.3:** Visão em corte do sistema ao longo de uma posição genérica em  $x$ . É aplicado um campo elétrico  $F$  ( $\parallel y$ ). As linhas cheias indicam a aproximação empregada no cálculo, enquanto as pontilhadas mostram o potencial real, que é linearmente distribuído.

Feita esta aproximação, a solução do problema segue os mesmos passos da **secção 2.3**, havendo uma única alteração quando do cálculo dos  $k_{i,a}$ 's. Devido à presença do campo elétrico, devemos reescrever a Eq.(2.12), levando em conta a queda de potencial através da estrutura:

$$k_{l,a} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left[ E - \varepsilon_l^a - eF \left( \sum_{p=1}^{a-1} L_p + \frac{L_a}{2} \right) \right]}. \quad (2.17)$$

Nos reservatórios **2D** consideramos que a alta densidade eletrônica blinda os efeitos do campo  $F$ , de modo que o potencial elétrico é constante ao longo deles.

## 2.6 DENSIDADE ESPECTRAL

No decorrer deste trabalho fazemos uso, além da probabilidade de transmissão, de duas outras grandezas para estudar as propriedades eletrônicas. A primeira delas é a *densidade de probabilidade local*,  $\rho(x, y; E) = |\Psi(x, y; E)|^2$ , que utilizamos para distinguir as contribuições dos estados à estrutura eletrônica e mapear suas distribuições ao longo do sistema. A segunda é a *densidade espectral*, que é simplesmente a *densidade de probabilidade local* na representação dos *momentos*, e consequentemente nos permite mapear os estados no espaço recíproco.

Apesar de nossa discussão envolver sistemas com número finito de períodos, é importante conhecer as dispersões de minibanda, calculada para sistemas infinitos, para uma melhor descrição das propriedades eletrônicas. Contudo, quando da aplicação de uma perturbação externa, que acaba destruindo esta periodicidade, a dispersão de minibanda deixa de ser uma solução do sistema. Nesta situação, suprimos esta perda de informação através da *densidade espectral*. A partir da Eq.(2.13) escrevemos

$$\begin{aligned} \Psi(x, p; E) &= \int_0^{L_y} dy e^{-ipy} \sum_{a=1}^{\lambda} \Psi^a(x, y; E) = \\ &= \sum_{a=1}^{\lambda} \sum_{l=1}^N \left\{ \frac{A_{j,l}^a \left[ e^{i(k_{l,a}-p)L_y} - 1 \right]}{i(k_{l,a} - p)} - \frac{B_{j,l}^a \left[ e^{i(k_{l,a}-p)L_y} - 1 \right]}{i(k_{l,a} + p)} \right\} \sum_{m=1}^N b_{l,m}^a \alpha_m(x), \end{aligned}$$

e a densidade espectral como

$$\rho(p; E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(p, y; E)|^2, \quad (2.20)$$

onde  $L_y$  é a extensão total da nanoestrutura (cf. Fig.2.1). A integração na Eq.(2.20) é feita para termos o efeito médio ao longo da direção  $x$ , que é a situação que nos interessa.

Vale a pena lembrar que para um sistema periódico infinito,  $\rho(p; E)$  é exatamente a dispersão de minibanda.

## REFERÊNCIAS

- [1]Veja por exemplo: A. Messiah, "*Quantum Mechanics*", North-Holland Amsterdam (1966).
- [2]S. E. Laux and F. Stern, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 91 (1986).
- [3]J. A. Brum and G. Bastard, *Superlattices and Microstructures* **4**, 443 (1988).
- [4]S. E. Ulloa, E. Castaño, and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **41**, 12350 (1991).
- [5]L. P. Kouwenhoven, F. W. J. Hekking, B. J. van Wees, C. J. P. M. Harmans, C. E. Timmering, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 361 (1990).
- [6]J. A. Brum, *Phys. Rev. B* **43**, 12082 (1991).
- [7]M. Leng and C. Lent, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 137 (1993).
- [8]D. L. Maslov, C. Barnes, and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **48**, 2543 (1993).
- [9]G. Bastard, J. A. Brum and R. Ferreira, "*Solid State Physics*" **44**, 382 (1991).
- [10]H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**, L735 (1980).
- [11]J. A. Brum, G. Bastard, L. L. Chang, and L. Esaki, *Proceedings of the 18th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Stockholm (1986) edited by O. Engström, World Scientific Singapore (1987), page 505.
- [12]G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 5693 (1981) and *Phys. Rev. B* **25**, 7584 (1982).
- [13]E. Merzbacher. "*Quantum Mechanics*" p. 90, 2nd. ed, John Wiley&Sons (1970).
- [14]R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957) and **32**, 306 (1988).
- [15]M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).
- [16]L. P. Kouwenhoven, A. T. Johnson, N. C. van der Vaart, C. J. P. M. Harmans, and C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1626 (1991).

# Capítulo 3

## Nanoestruturas de Semicondutores

Discutiremos neste capítulo as propriedades eletrônicas básicas das nanoestruturas de semicondutores, com as quais estaremos lidando no decorrer deste trabalho. Estas nanoestruturas serão sistemas com confinamento bidimensional, construídos a partir de uma heterojunção de GaAs/(Al,Ga)As, que foi dopada de forma modulada durante o seu crescimento. O primeiro confinamento vem da própria epitaxia, e coloca o sistema em regime de confinamento quântico elétrico ao longo da direção do crescimento ( $z$ ). O segundo confinamento, ao qual denominaremos lateral, ocorre numa direção perpendicular ao confinamento epitaxial ( $x$ ), e é devido à depleção de carga causada por um campo eletrostático, aplicado à amostra através de contactos metálicos. Supomos também que a depleção é muito forte, de maneira que possamos aproximar o confinamento lateral numa dada posição em  $y$ , por um poço quadrado cercado por barreiras de potencial de  $600 \text{ meV}$  de altura[1].

Finalmente, consideraremos que estas nanoestruturas poderão ter suas propriedades eletrônicas descritas dentro da aproximação de *quase-desacoplamento*[2]. Para uma maior clareza durante a discussão, reservamos a palavra banda para designar uma largura em energia no espectro de transmissão. Assim esperamos evitar uma possível confusão com o termo minibanda, quando fizermos a comparação entre a dispersão de minibanda e o espectro de transmissão.

### 3.1 FIO QUÂNTICO

Na Figura 3.1 temos representada a mais simples das geometrias de nanoestrutura com a qual trabalharemos, um fio quântico com uma única largura de confinamento lateral. Este fio quântico está conectando dois reservatórios bidimensionais, com a finalidade de permitir o cálculo da probabilidade de transmissão eletrônica através dele.

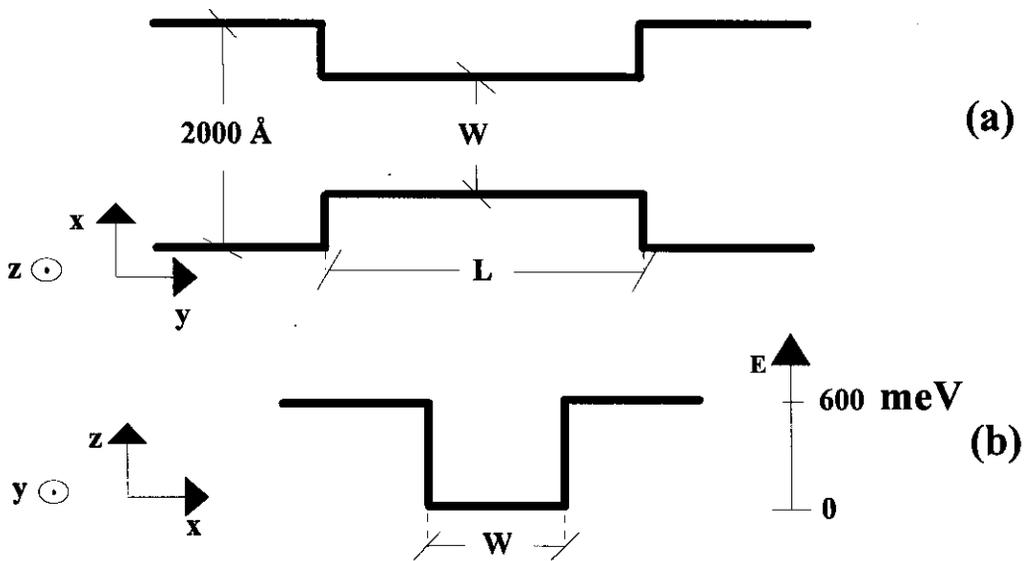


Figura 3.1:(a) Visão de topo de um fio quântico conectado a dois reservatórios bidimensionais.(b) Secção transversa do fio, evidenciando o confinamento de poço quadrado.

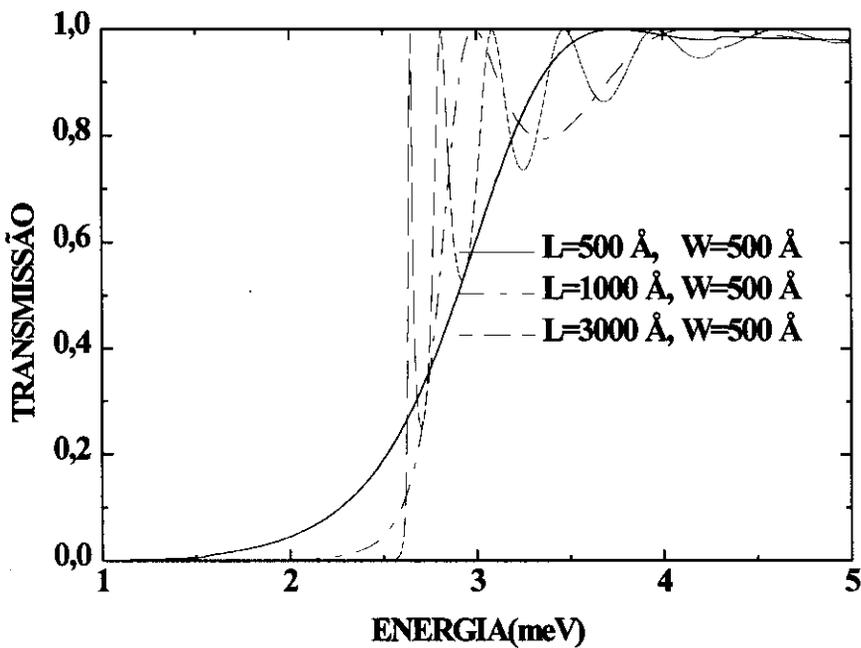


Figura 3.2:Espectro de transmissão para fios quânticos definidos por uma mesma largura de confinamento lateral, mas com diferentes comprimentos, identificados conforme a legenda.

Na Figura 3.2 são mostrados os espectros de transmissão para três fios quânticos de comprimentos diferentes, mas todos com a mesma largura de confinamento lateral ( $W=500 \text{ \AA}$ ). Podemos notar a existência de um comportamento

oscilatório em função da energia de entrada, que depende fortemente do comprimento  $L$  do fio. Estas oscilações se mostram mais intensas quanto maior for  $L$ , e correspondem ao efeito de Fabry-Perot, causado pelas reflexões das ondas eletrônicas nas interfaces abruptas da estrutura. Experimentalmente este tipo de oscilações não são observadas pois as interfaces das amostras são suaves, o que destrói este efeito[3].

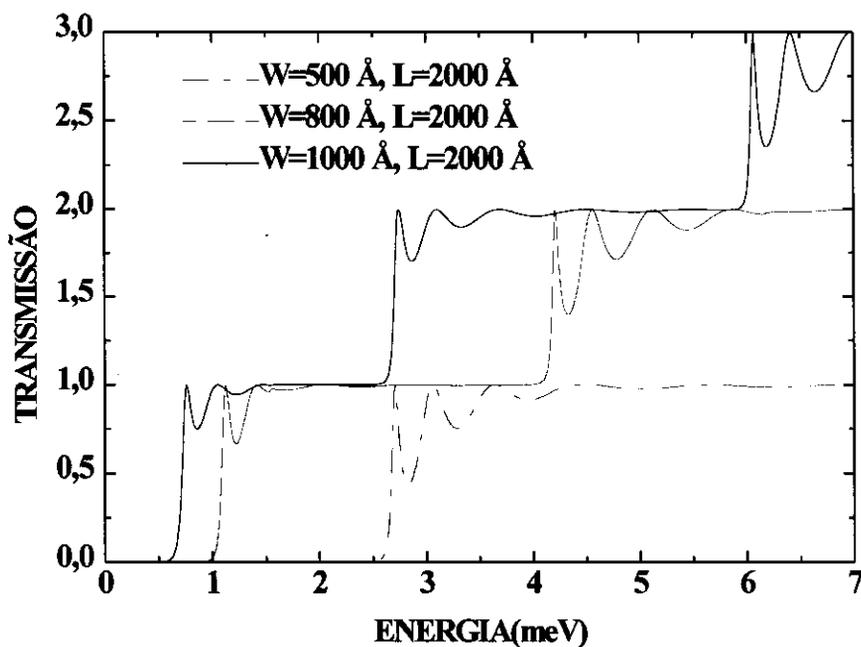


Figura 3.3: Espectro de transmissão para fios quânticos com diferentes confinamentos laterais  $W$ , mas todos de mesmo comprimento  $L$ , identificados conforme a legenda.

Contudo, o aspecto mais interessante deste tipo de estrutura não está contido nestas oscilações, mas sim na quantização da transmissão eletrônica. Isto acontece porque o confinamento lateral dá origem a subbandas, cujos mínimos de energia são determinados pelas posições dos níveis do poço quadrado e devido à unidimensionalidade dos elétrons. Deste modo, conforme a posição do nível de Fermi dos reservatórios vai sendo elevada, a fim de conhecermos a transmissão, estas subbandas tornam-se acessíveis aos canais de entrada, e assim são formados os patamares. Na Figura 3.3 temos confrontados os espectros de transmissão para três fios quânticos de  $2000 \text{ \AA}$  comprimento, mas com diferentes confinamentos laterais  $W$ . Como pode ser notado através da figura, quanto maior o confinamento lateral (i.e.

mais estreito o poço), maior a largura dos patamares, valendo a recíproca. Isto é facilmente entendido, bastando-nos lembrar que quanto menor a largura de um poço de potencial, maior será a separação entre seus níveis de energia .

Na Figura 3.4 mostramos a densidade de probabilidade num fio quântico com  $2000 \text{ \AA}$  de comprimento e  $500 \text{ \AA}$  de confinamento lateral. Este calculo é feito para um estado com energia de  $3.5 \text{ meV}$ , e evidencia o carácter unidimensional do estado que estende-se ao longo da estrutura.

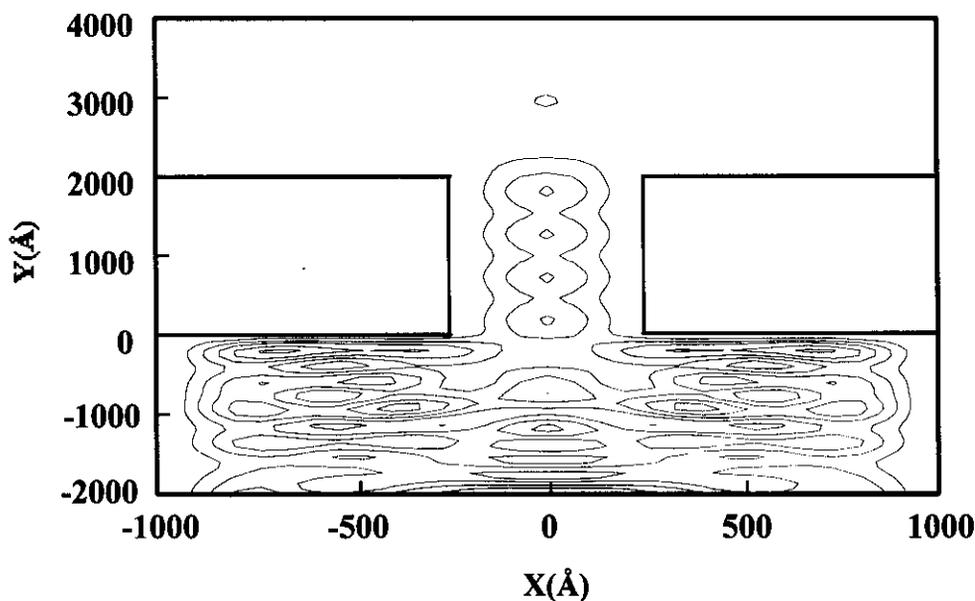


Figura 3.4: Densidade de probabilidade mapeada ao longo de um fio quântico com  $2000 \text{ \AA}$  de comprimento e  $500 \text{ \AA}$  de confinamento lateral, mostrando o carácter unidimensional do estado ( $E=3.5 \text{ meV}$ ).

### 3.2 ESTRUTURA DE UMA CAIXA QUÂNTICA ASSIMÉTRICA E ABERTA

Introduzimos na seqüência, o tipo de nanoestrutura sobre a qual estará centrada a maior parte das nossas discussões. Nós a chamamos de estrutura de caixa quântica assimétrica e aberta, ou ainda de fio com corrugação[3].

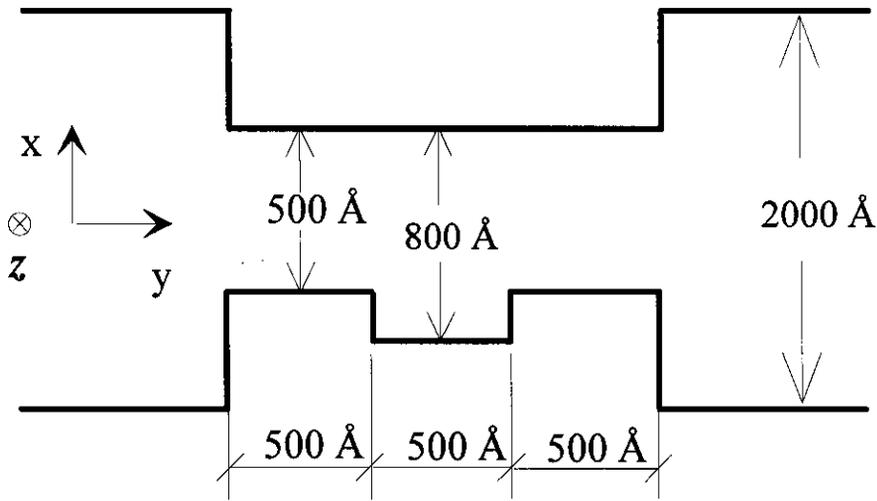


Figura 3.5: Perfil de potencial para uma estrutura de caixa quântica assimétrica conectando dois reservatórios bidimensionais. As dimensões do sistema são mostradas na figura.

Seu perfil de potencial é esquematizado na Figura 3.5, e podemos entendê-la como um fio quântico perturbado pelos estados da cavidade aberta, formada pela mudança do confinamento lateral. Tendo isto em vista, passaremos a discutir suas propriedades eletrônicas através da interação de dois tipos de estados. Um deles com carácter unidimensional (**1D**), lembrando em muito um estado de fio quântico, e o outro com dimensão *quase-zero* (**0D**), bastante localizado na cavidade.

Calculando a transmissão eletrônica através do sistema encontramos o espectro apresentado na Figura 3.6, onde notamos a formação de diferentes estruturas. O primeiro estado disponível para a transmissão ( $E \approx 2.05 \text{ meV}$ ) é o estado fundamental da cavidade (**0D**), que é muito estreito e é separado por um gap de uma banda larga de transmissão. Esta banda larga deve ser identificada como uma parte do primeiro patamar de transmissão **1D**, que acaba sendo modificado pelo primeiro estado excitado da cavidade (**0D**). Podemos ainda observar dentro desta banda **1D** a existência de uma curvatura, que, conforme ficará claro em breve, transformar-se-á num gap, quando a estrutura apresentar um número maior de cavidades. Como resultado da interação entre os estados **0D** e **1D** surge um novo gap, posicionado logo após a curvatura da banda **1D**. Esta interação pode ser interpretada como um anticruzamento entre o primeiro estado excitado da cavidade (**0D**), com o contínuo

gerado pelos estados de fio (1D), numa típica situação de ressonância de Fano[4] (Figura 3.7).

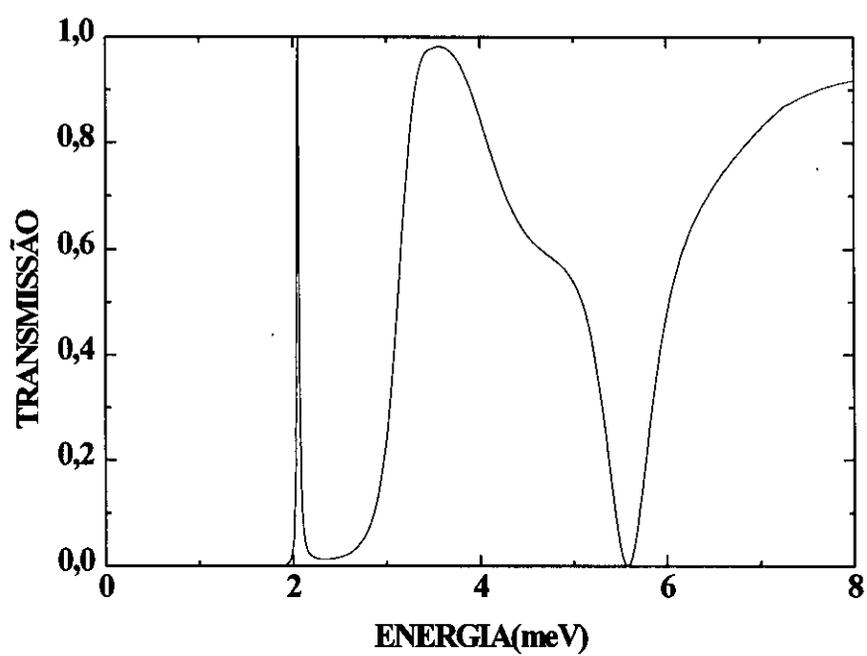


Figura 3.6: Espectro de transmissão eletrônica para uma estrutura de uma caixa quântica assimétrica e aberta, com dimensões conforme mostradas na Figura 3.5.

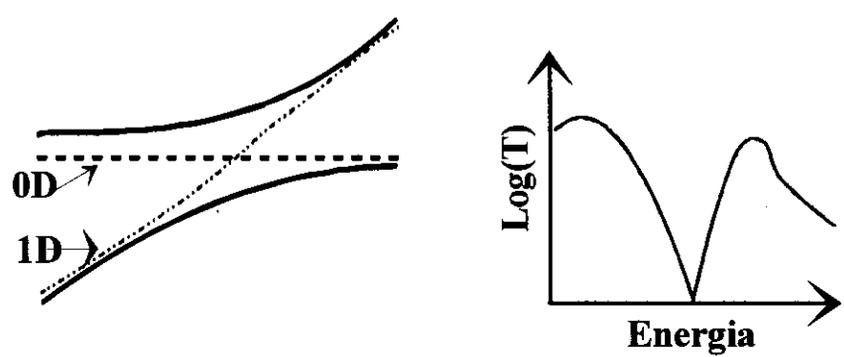


Figura 3.7: Anticruzamento entre o primeiro estado excitado da cavidade, com os estados do contínuo do fio quântico, numa típica situação de ressonância de Fano. Como resultado, as bandas que envolvem o gap de anticruzamento são bandas híbridas.

O anticruzamento ocorre porque estes estados estão intrinsecamente acoplados, e como resultado as bandas que cercam o gap de anticruzamento são constituídas por uma mistura de estados 0D e 1D. Na realidade, a primeira banda larga de transmissão apresenta esta mistura de estados, ou hibridização, somente após a curvatura (~ 4.5

$meV$ ), sendo que para seus estados de energia mais baixa ela tem carácter notadamente 1D. Esta situação é semelhante à encontrada nos metais de transição, onde as propriedades eletrônicas são descritas pela hibridização de uma banda larga tipo  $s$  com uma banda estreita tipo  $d$ [5].

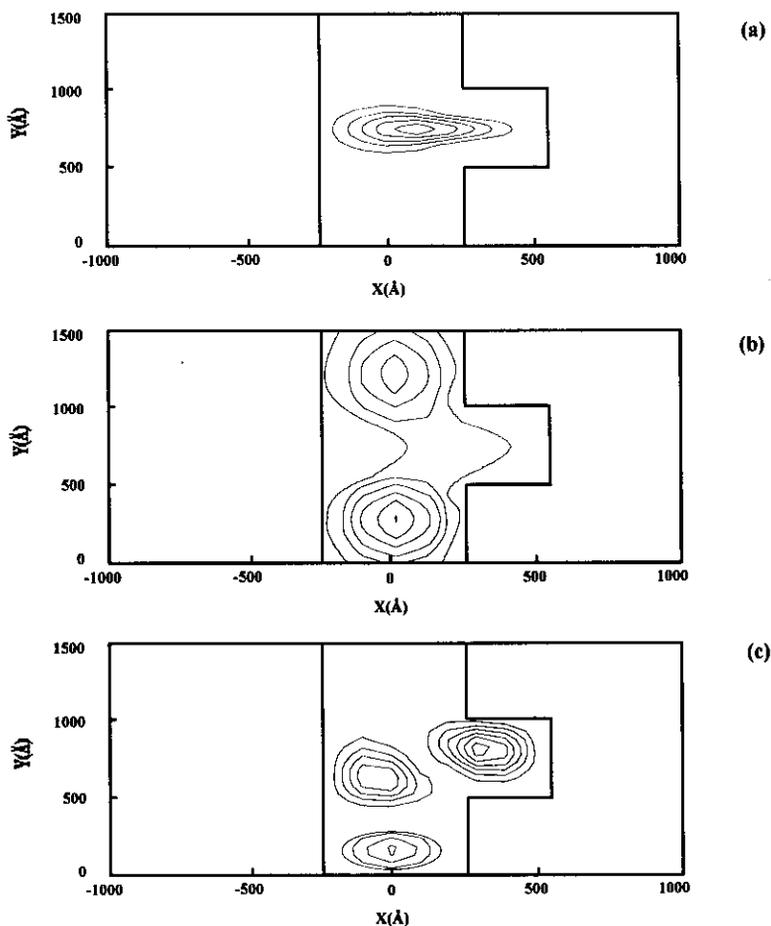


Figura 3.8: Densidade de probabilidade mapeada ao longo da estrutura de uma caixa quântica aberta. (a) Estado 0D,  $E \approx 2.1$  meV, (b) estado 1D,  $E \approx 3.5$  meV e (c) estado híbrido, 0D-1D,  $E \approx 7.0$  meV.

Mapeando-se a densidade de probabilidade ao longo da estrutura, para energias dentro de cada uma das bandas de transmissão, torna-se claro os tipos de estados que as compõem. Para o primeiro estado de transmissão,  $E \approx 2.1$  meV, encontramos um estado fortemente localizado na região da cavidade, portanto de natureza 0D (Figura 3.8-a). Enquanto isso para  $E \approx 3.5$  meV os estados são estendidos, com maior probabilidade de presença junto as constrições estreitas, de acordo com um

estado 1D (Figura 3.8-b). Finalmente, ao mapearmos um estado na banda híbrida,  $E \approx 7.0 \text{ meV}$ , nos deparamos com uma distribuição com presença tanto na região da cavidade, como no canal (Figura 3.8-c).

### 3.3 SUPERREDE DE CAIXAS QUÂNTICAS ASSIMÉTRICAS E ABERTAS

Uma evolução natural da nanoestrutura anterior é obtida conectando-se várias delas, de modo a termos um sistema periódico finito[3]. Isto é mostrado na Figura 3.9 para um conjunto de dez caixas quânticas, e o seu espectro de transmissão na Figura 3.10.

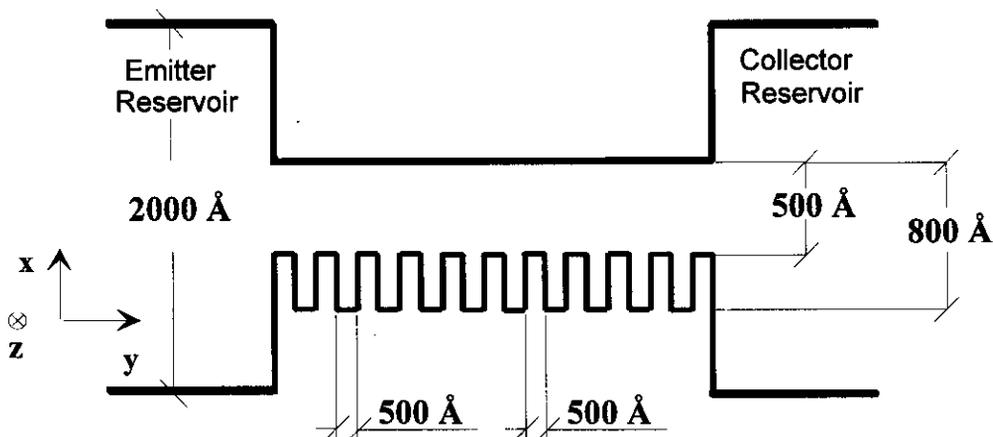


Figura 3.9: Perfil de potencial para uma estrutura de dez caixas quânticas, conectando dois reservatórios bidimensionais.

Comparando-se o espectro de transmissão de uma caixa quântica ao da superrede, podemos relacionar as bandas de transmissão que aparecem em ambos. A primeira banda de transmissão da superrede é devida aos estados fundamentais das cavidades, que acoplados dão origem a uma minibanda 0D. Na Figura 3.11(a) temos mapeada a densidade de probabilidade para um estado pertencente a esta minibanda 0D ( $E \approx 2.1 \text{ meV}$ ). Podemos observar que este estado encontra-se estendido ao longo da estrutura, evidenciando o acoplamento entre as cavidades. Contudo, seus máximos

de probabilidade localizam-se dentro das cavidades, o que dá um carácter **0D** a minibanda formada.

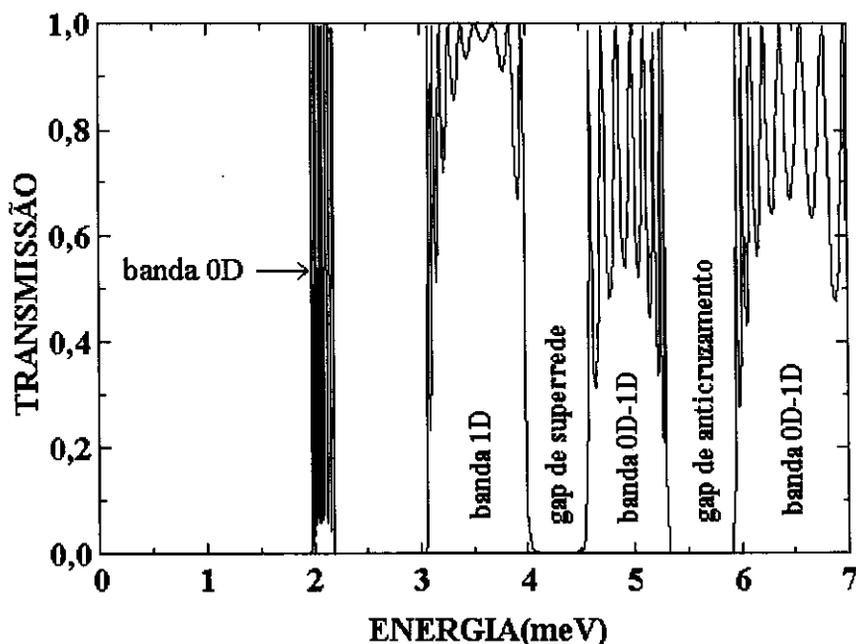


Figura 3.10: Espectro de transmissão para uma superrede de dez caixas quânticas. Pode-se notar que a curvatura que aparecia para a estrutura de uma caixa quântica, dá lugar a um gap de superrede.

A segunda banda de transmissão é proveniente do acoplamento dos estados **1D** da estrutura, a exemplo do que acontecia no caso de uma caixa quântica. Entretanto, a curvatura que estava presente na Figura 3.6 transforma-se numa forte supressão da transmissão no espectro da superrede. Sendo assim, devemos reconhecer que este efeito trata-se de uma modulação causada pela periodicidade, ou seja, um gap de superrede. Isto equivale a dizer, que o número de cavidades é agora suficiente para fazer com que as reflexões de Bragg ao longo da estrutura, façam o gap de superrede aparecer bem definido.

Na Figura 3.11(b) temos a distribuição espacial de um dos estados ( $E \approx 3.6$  meV) através do qual é feita a transmissão para a banda **1D**. Este estado é bastante estendido ao longo da superrede, tendo os máximos localizados junto as constrições estreitas, o que deixa clara a natureza **1D** do estado.

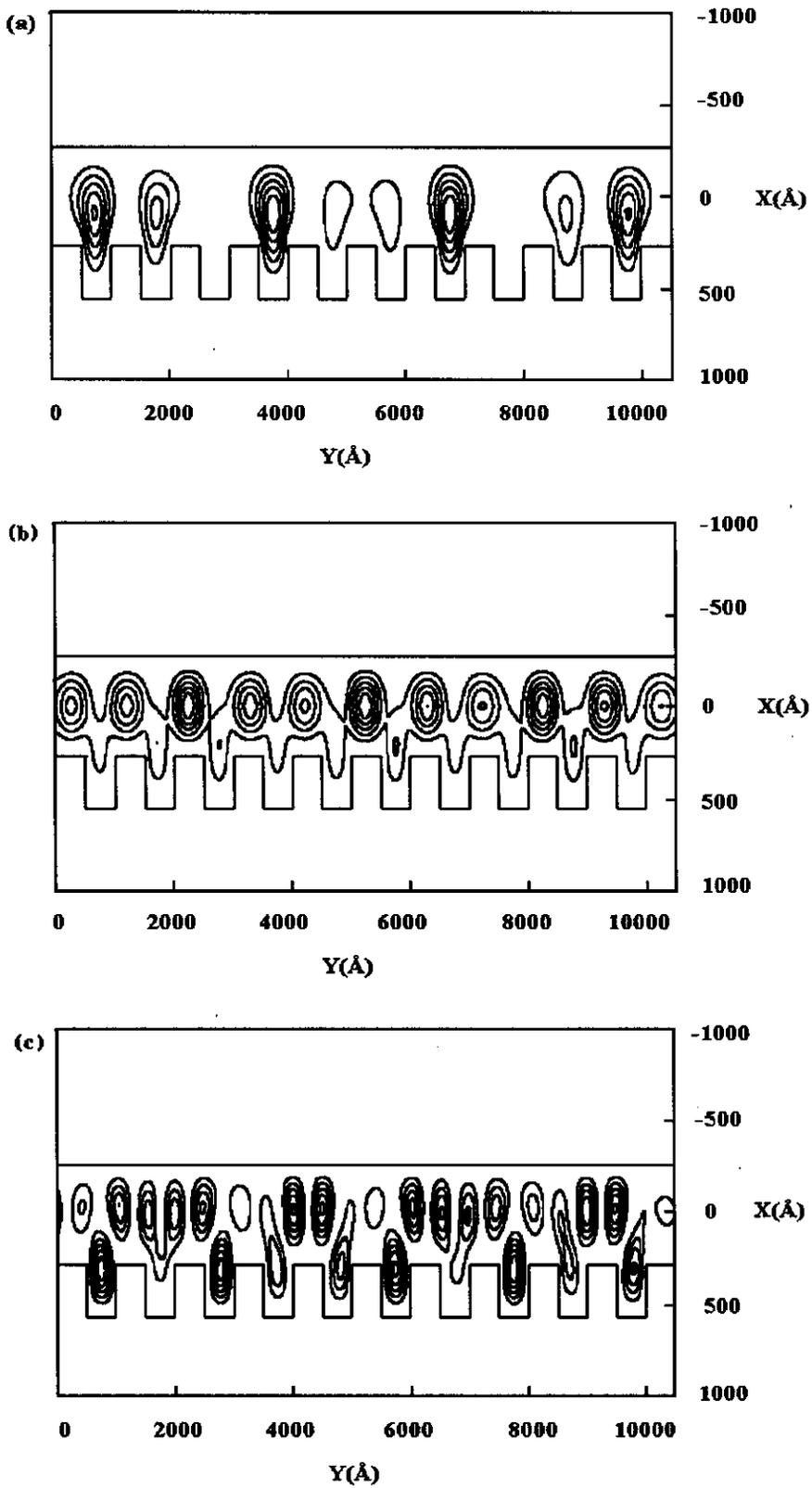


Figura 3.11: Densidade de probabilidade ao longo de uma estrutura de dez caixas quânticas. (a) estado na minibanda 0D,  $E \approx 2.1$  meV, (b) estado na minibanda 1D,  $E \approx 3.6$  meV, e (c) estado na minibanda 0D-1D,  $E = 5.0$  meV.

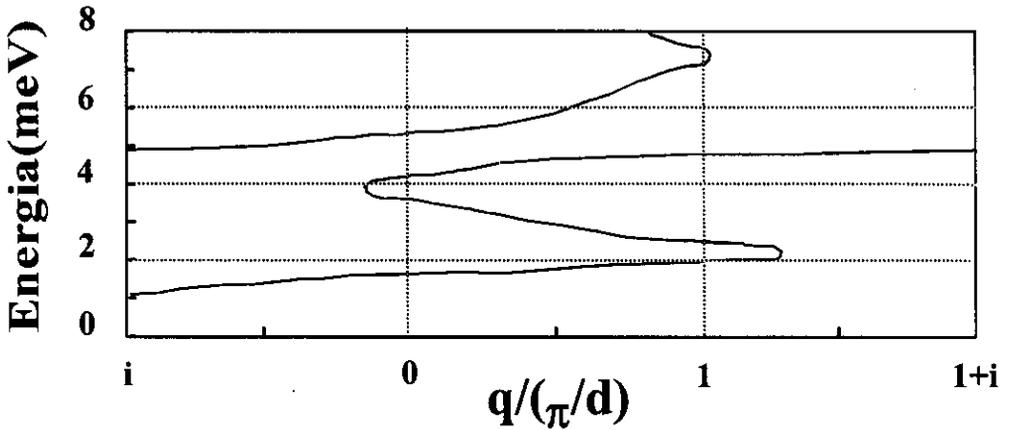


Figura 3.12: Dispersão de minibanda para uma superrede infinita de caixas quânticas abertas e conectadas. As dimensões e a geometria são as mesmas da estrutura discutida no nosso texto (adaptado de [3]).

Os primeiros estados excitados das cavidades também se acoplam, formando uma minibanda **0D**. Isto, de acordo com o nosso modelo de duas bandas, nos faz esperar que o gap de interferência torne-se mais longo do que no caso de uma caixa quântica, devido à largura da minibanda do estado excitado **0D** que soma-se à energia do potencial de anticruzamento. Esta é exatamente a situação que encontramos no espectro de transmissão da superrede, onde o gap de interferência apresenta uma largura de aproximadamente  $1\text{ meV}$ . Como o gap de superrede está bem definido para a estrutura de dez caixas quânticas, nós podemos facilmente distinguir as duas bandas híbridas (**0D-1D**) cercado o gap de anticruzamento. Na Figura 3.11(c) é mostrada a densidade de probabilidade para um estado ( $E \approx 5.0\text{ meV}$ ) pertencente a primeira destas minibandas **0D-1D**. Nós o encontramos estendido ao longo da estrutura, e tendo máximos de probabilidade tanto nas cavidades como nas constricções estreitas do canal, o que evidencia o acoplamento entre estados **0D** e **1D**.

Devemos ainda notar que as oscilações que aparecem nas bandas de transmissão são devidas aos estados de Bloch que as compõem, e não mais ao Fabry-

Perot nas interfaces abruptas da nanoestrutura, sendo que este último efeito não é visível no espectro de transmissão da superrede.

A dispersão de minibanda para uma superrede infinita de caixas quânticas, com as mesmas dimensões que estamos utilizando, é apresentada na Figura 3.12 (adaptado de [3]). Esta dispersão é mapeada para vetores de onda no plano complexo, de modo que nela estão representados tanto os estados transmissíveis ( $q$  real), como aqueles que não contribuem à transmissão. Inspeccionando-se a Figura 3.12 podemos identificar as minibandas e os gaps responsáveis pelo espectro de transmissão, tornando mais completa a informação sobre as propriedades eletrônicas do sistema. Na faixa de energia da primeira banda de transmissão encontramos uma minibanda estreita, que deve ser identificada como àquela originada do acoplamento entre os estados fundamentais das cavidades. A pequena largura é explicada pelo fraco acoplamentos entre estes estados. A seguir encontramos um gap direto, que se conecta no plano complexo a pequenos valores de vetor de onda, e separa a primeira minibanda **0D** de outra minibanda bem mais larga. Esta minibanda larga estende-se sobre as mesmas energias da banda **1D**, sendo portanto a responsável pela transmissão destes estados. Continuando a aumentar a energia encontramos outro gap, também conectado a valores finitos de vetor de onda complexo, que identificamos como sendo o gap de superrede. Este gap separa a minibanda **1D** de outra minibanda larga, que devemos identificar como a primeira banda híbrida (**0D-1D**). Após esta minibanda, encontramos o gap de anticruzamento, que não se conecta a pequenos valores de vetor de onda, e separa a primeira da segunda minibanda híbrida.

Na Figura 3.13 estão mostrados os espectros de transmissão para estruturas com três e com dezenove caixas quânticas. Desse modo podemos visualizar melhor a evolução da estrutura eletrônica dos fios corrugados mostrados até aqui. Notemos que os principais aspectos de superrede já encontram-se bem definidos para a estrutura de três caixas, i.e, a posição e a formação dos gaps e das bandas de transmissão. Evidentemente, a supressão à transmissão no gap de superrede é mais forte para a estrutura com dezenove cavidades, pois nela acontece um maior número de reflexões

de Bragg. Por outro lado, a diferença entre seus gaps de anticruzamento é menor. Isto acontece, conforme já discutimos anteriormente, devido a este gap ser resultante do acoplamento intrínseco entre os estados, e portanto encontra-se bem definido mesmo para pequenas estruturas.

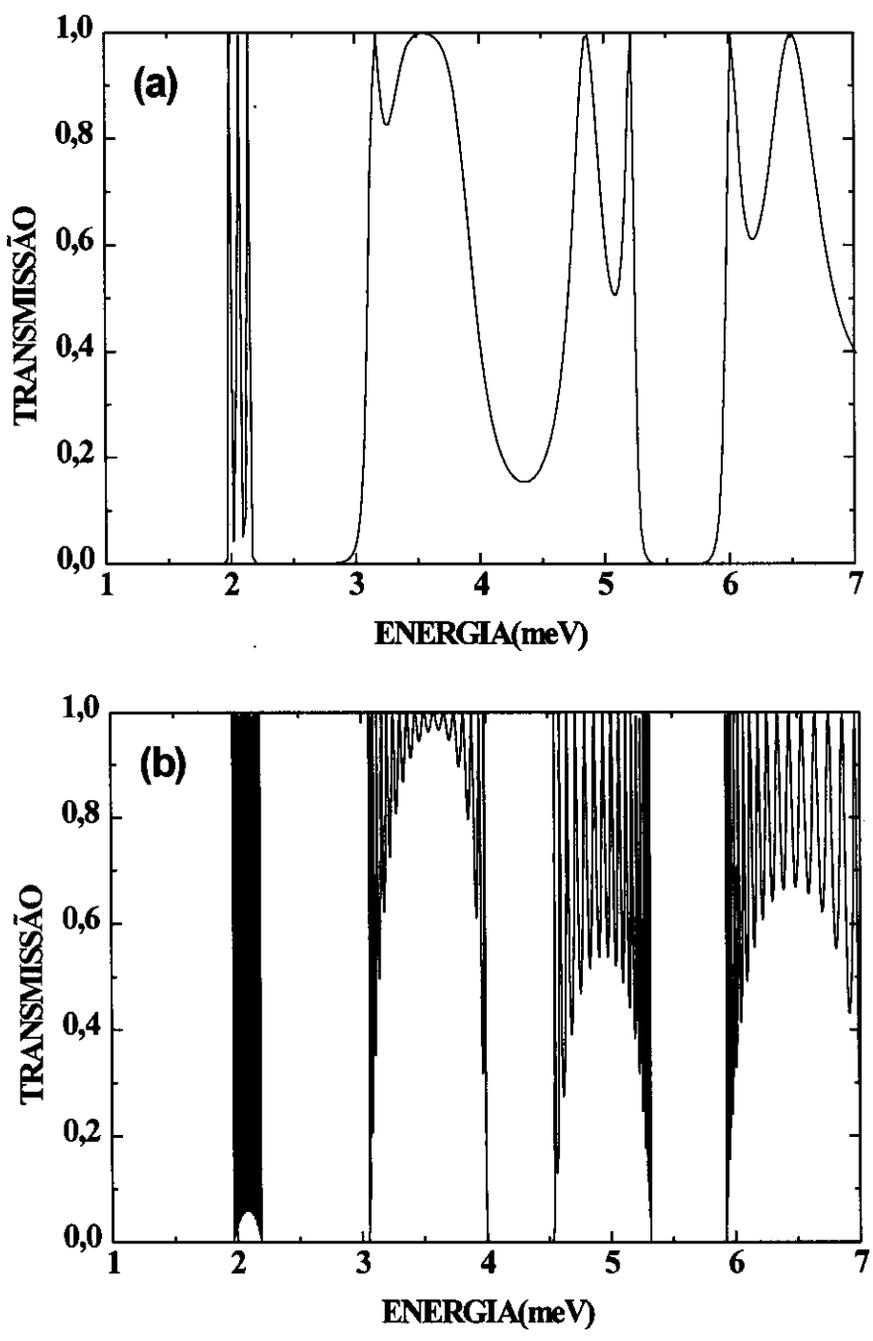


Figura 3.13: Espectros de transmissão para estruturas com três e com dezenove caixas quânticas, mostrando que os principais aspectos de superrede já encontram-se bem definidos para a estrutura de três caixas

## **REFERÊNCIAS**

- [1]S. E. Laux and F. Stern, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 91 (1986). S. E. Laux, D. J. Frank, and F. Stern, *Surf. Sci.*, **196**, 101 (1988).
- [2]J. A. Brum and G. Bastard, *Superlattices and Microstructures* **4**, 443 (1988).
- [3]J. A. Brum, *Phys. Rev. B* **43**, 12082 (1991).
- [4]U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [5]N. W. Ashcroft and N. D. Mermin in "*Solid State Physics*", page 181, New York:Holt, Rinehart & Winston (1976).

# Capítulo 4

## Estados de Wannier-Stark em Nanoestruturas

Em 1959, Wannier[1] previu que um cristal de periodicidade  $d$ , ao ser submetido a um campo elétrico constante  $F$ , teria seu espectro eletrônico substituído por um conjunto discreto de níveis, separados em energia por  $eFd$  (Figura 4.1). Contudo, durante muito tempo a existência ou a formação de tais níveis, conhecidos como estados de Wannier-Stark (WSS), foi objeto de extensos debates teóricos[2], e sua comprovação experimental só foi verificada recentemente[3, 4].

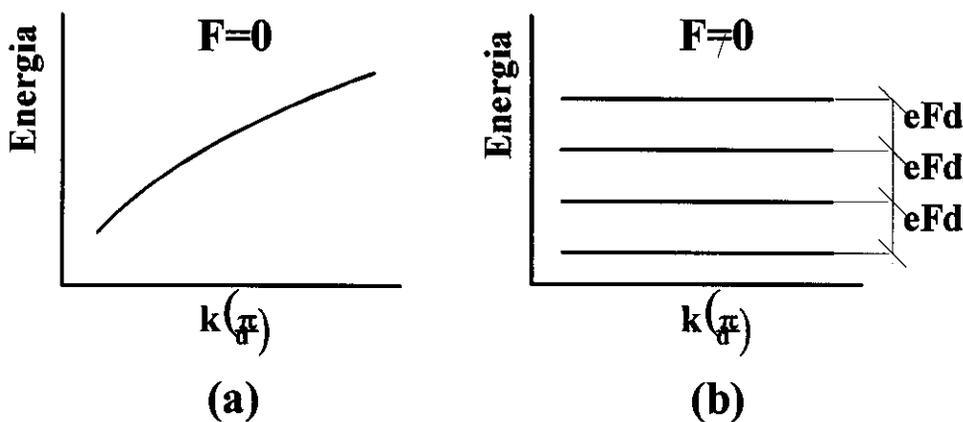


Figura 4.1: (a)Espectro eletrônico de um cristal de periodo  $d$ . (b)Após a aplicação de um campo elétrico temos a formação de um conjunto discreto de níveis, separados em energia de  $eFd$  (b).

Experimentos de resolução temporal têm sido realizados em superredes submetidas a campos elétricos, para acompanhar a dinâmica dos WSS[5, 6], com especial interesse na variação da polarização durante o tunelamento. Bastard et al.[7] mostraram ser possível haver absorção ou emissão de fótons entre WSS, provenientes de duas minibandas diferentes de uma superrede, desde que a transição não seja feita na frequência de Bloch. Khurgin et al[8] investigaram a possibilidade de se observar a transição entre estados localizados e estendidos de uma superrede, na presença de um campo elétrico alternado. Cai et al[9] e Rotvigi et al[10] apresentaram formulações

para acompanhar o transporte numa superrede submetida a um campo elétrico harmônico. Seus resultados indicam que a dinâmica dos WSS pode afetar significativamente a frequência de oscilação de Bloch, devido ao acréscimo de efeitos de tunelamento Zener, colapso de bandas, entre outros efeitos. Aplicações dos WSS a dispositivos têm sido propostas e implementadas, dentre elas o guiamento de onda através de uma superrede de InGaAs/InP[11], e moduladores ópticos operando a frequências de até 20GHz[12, 13].

#### 4.1 FORMAÇÃO DE ESTADOS DE WANNIER-STARK: MODELO DE UMA BANDA

Consideremos uma cadeia linear de átomos com período  $d$ , sujeita a um campo elétrico constante  $F$ . O hamiltoniano para este sistema é escrito como

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_n V(x - nd) + eFx, \quad (4-1)$$

onde  $V(x - nd)$  é o potencial periódico da estrutura.

Adicionalmente, restrinjamos nossa análise a uma única banda, descrita a campo nulo pela aproximação de elétrons fortemente ligados, com acoplamento somente entre primeiros vizinhos. Neste caso escrevemos a relação de dispersão na ausência de campo elétrico como:

$$E(k) = E_0 - 2\gamma \cos(kd), \quad (4-2)$$

onde  $\gamma$  é igual a um quarto da largura da banda, e está relacionado com o acoplamento entre os estados vizinhos e o potencial periódico.

Supondo que  $\psi_v(x)$  seja solução de (4-1), com  $H\psi_v(x) = \epsilon_0\psi_v(x)$ , e aplicando-se o operador translação  $\tau_d$  a  $\psi_v(x)$ , encontramos que

$$H\tau_d\psi_v(x) = (\epsilon_0 - eFd)\tau_d\psi_v(x). \quad (4-3)$$

Repetindo este processo através de sucessivas aplicações de  $\tau_d$ , encontramos o espectro eletrônico do sistema[14], dado através de uma "escada de níveis" descrita por

$$\epsilon_v = \epsilon_0 + veFd, \quad (4-4)$$

onde  $v$  é um número inteiro.

Empregando a base gerada pelas funções de Wannier  $a_v(x - nd)$ , relativas à banda de energia considerada, escrevemos a autofunção  $\psi_v(x)$ , como[15]

$$\psi_v(x) = \sum_n \phi_{n,v}(x) a_v(x - nd), \quad (4-5)$$

onde a soma sobre  $n$  inclui todos os sítios da cadeia linear, e os coeficientes  $\phi_{n,v}(x)$  modulam as funções de Wannier[16]. Considerando em (4-5) somente a interação entre os primeiros vizinhos, e lembrando que devido às condições de ortonormalização e à paridade das funções de Wannier[17] temos

$$\langle a_v(x - nd) | x | a_v(x - n'd) \rangle = nd\delta_{nn'}, \quad (4-6)$$

diagonalizamos (1), e chegamos à equação secular

$$\phi_{n,v}(x)(E_0 - \epsilon_v + eFnd) - \gamma(\phi_{n+1,v}(x) + \phi_{n-1,v}(x)) = 0, \quad (4-7)$$

que deve se reconhecer como a relação de recorrência para as funções de Bessel[18].

Com este resultado reescrevemos

$$\phi_{n,v}(x) = J_{v-n}\left(\frac{-2\gamma}{eFd}\right), \quad (4-8)$$

e

$$\varepsilon_v = E_0 + v e F d, \quad (4-9)$$

onde  $J_{v-n}\left(\frac{-2\gamma}{eFd}\right)$  são as funções de Bessel.

De acordo com (4-9), ou mesmo com (4-4), existirão tantos estados de Wannier-Stark, quantos forem os números de períodos da cadeia linear, e todos eles igualmente espaçados de  $eFd$ .

Inspecionando a Eq.(4-7), podemos analisar o comportamento espacial das funções de onda, em função da distância a um dos sítios da cadeia. Para

$(v-n) \times d \ll \frac{-2\gamma}{eFd} \times d$ , as amplitudes terão um comportamento oscilatório proporcional a[5]

$$\cos\left(\frac{-2\gamma}{eFd} - \frac{\pi}{4} - (v-n)\frac{\pi}{2}\right). \quad (4-10)$$

Contudo, para  $(v-n) \times d > \frac{-2\gamma}{eFd} \times d$  as funções de onda decairão exponencialmente com a distância, de acordo com[5]

$$\left[\frac{(v-n)eFd}{-2\gamma} - 1\right]^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{-2\gamma}{eFd} \times \frac{2^{\frac{3}{2}}}{3} \times \left\{\left[\frac{(v-n)eFd}{-2\gamma} - 1\right]^{\frac{3}{2}} + \dots\right\}\right\}. \quad (4-11)$$

Temos esquematicamente representados na Figura 4.2, a chamada "situação de banda inclinada", além dos resultados das Equações (4-10) e (4-11), onde vemos que a função de onda oscila no interior de uma região de extensão

$$L = 4\gamma / (eF), \tag{4-12}$$

delimitada pela inclinação da banda, ou seja, pela intensidade do campo elétrico, e decai exponencialmente fora dela[19].

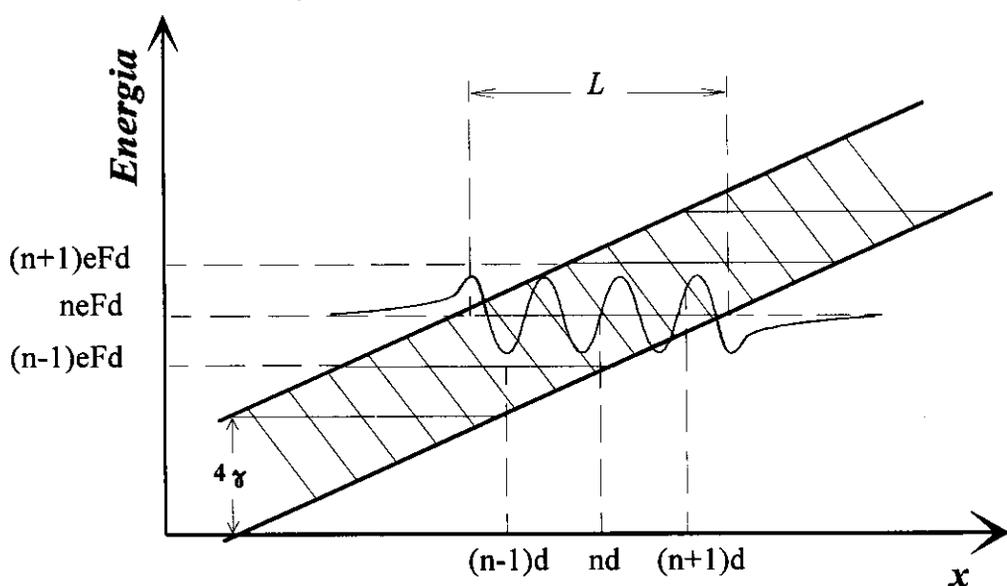


Figura 4.2: A "situação de banda inclinada" é representada de forma esquemática, juntamente com a formação dos estados de Wannier-Stark, separados em energia por  $eFd$ , e o comportamento da função de onda (cf. [4]).

Com os resultados obtidos, podemos estimar as condições necessárias para a observação dos WSS, e assim também entender porque a sua verificação experimental, teve que aguardar o advento das superredes de semicondutores[3, 4]. Para um cristal volumétrico, uma largura típica de banda é de  $2 eV$ , e a constante de rede é da ordem de  $3 \text{ \AA}$ . Por sua vez, os campos elétricos possíveis de serem obtidos

em laboratório, são da ordem de  $10^5$  V/cm, o que conduz a um comprimento de localização de  $2000 \text{ \AA}$ , não permitindo a observação da localização nestes sistemas. Por outro lado, a largura de banda de uma superrede situa-se em torno de  $70 \text{ meV}$ , e sua periodicidade da ordem de  $\text{\AA}$ , de forma que para as mesmas intensidades de campo ( $F=10^5$  V/cm) teríamos um comprimento de localização de  $70 \text{ \AA}$  que é da ordem da periodicidade e portanto modificando a estrutura eletrônica do sistema.

No **Capítulo 3** apresentamos a superrede de caixas quânticas abertas, discutindo suas propriedades eletrônicas através de um modelo de duas bandas, uma estreita (tipo cavidade) e a outra larga (tipo fio). Como ressaltamos anteriormente, esta descrição é qualitativa, mas fisicamente intuitiva e por isso continuaremos a utilizá-la. Antecipando de certa forma parte da discussão que faremos na **Secção 4.2**, retornemos nossa atenção para Eq.(4-12), que define o comprimento de localização  $L$ . Através dela devemos esperar que o efeito de localização seja mais intenso, quanto menor for a largura de banda  $\gamma$ , e vice-versa. Dentro deste raciocínio, é de se esperar que os estados que compõem a banda estreita, tornem-se localizados para intensidades de campo elétrico menores do que as necessárias para a banda larga. Isto nos trará uma situação interessante, particularmente nas bandas hibridizadas, pois teremos estados localizados (tipo cavidade) interagindo com estados estendidos (tipo fio), formando ressonâncias de Fano[20].

## **4.2 EFEITOS DE UM CAMPO ELÉTRICO LONGITUDINAL ÀS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UMA CAIXA QUÂNTICA ABERTA**

Consideremos uma estrutura de uma única caixa quântica, conectando dois reservatórios bidimensionais, de acordo com o perfil de potencial e as dimensões apresentados na Figura 4.3.

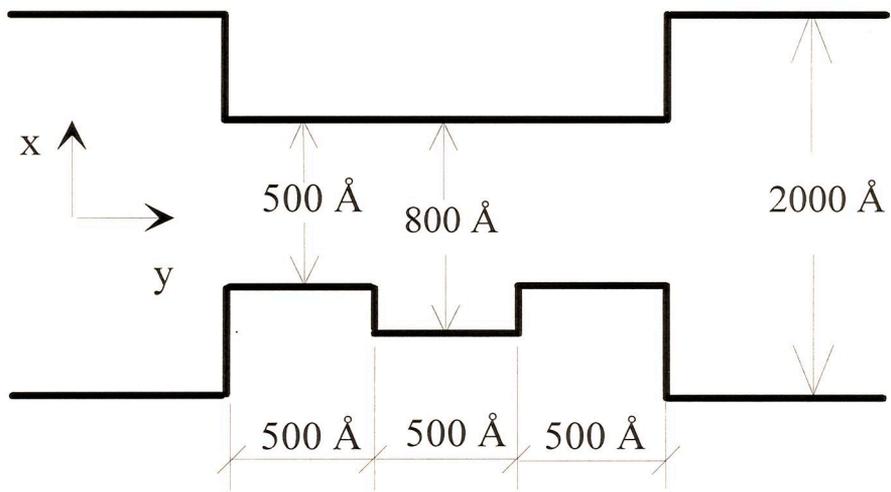


Figura 4.3: Uma caixa quântica conectando dois reservatórios bidimensionais. As dimensões do sistema são indicadas na figura.

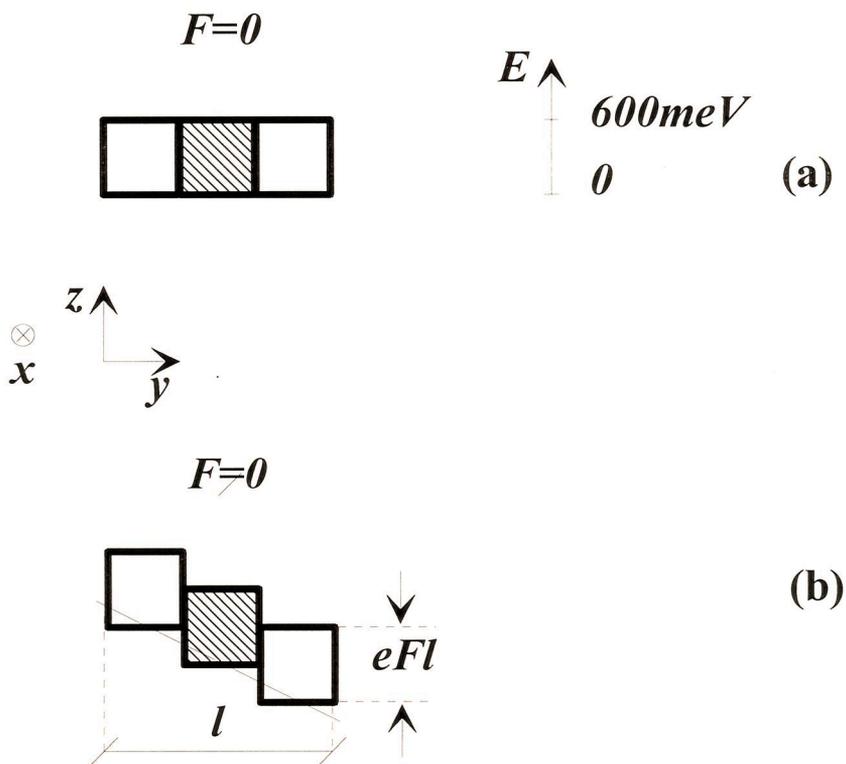


Figura 4.4: Vista em corte do potencial que define a caixa quântica, em situação de (a)  $F=0$  e (b)  $F \neq 0$ , mostrando nossa aproximação. A cor clara identifica as regiões de constrição estreita, enquanto a cor escura as constrições largas.

Aplicando-se um campo elétrico ao longo da direção  $y$ , alteramos a forma da estrutura, e com isso suas propriedades eletrônicas. Introduzimos este efeito em

ossos cálculos conforme descrevemos na **Secção 2.4**, ou seja, através de uma discretização do potencial elétrico, assumindo-o constante dentro das regiões definidas por um mesmo confinamento lateral (Figura 4.4).

Ao supormos que as camadas discretizadas são rigidamente deslocadas, estamos desprezando o Stark-shift ao longo delas (veja Figura 4.4). Contudo, esta contribuição que está sendo desprezada é pequena para as situações que analisaremos. Podemos estimá-la, por exemplo, para os estados *quase-0D* da estrutura. No regime de campos elétricos e energias considerados, ela é um efeito

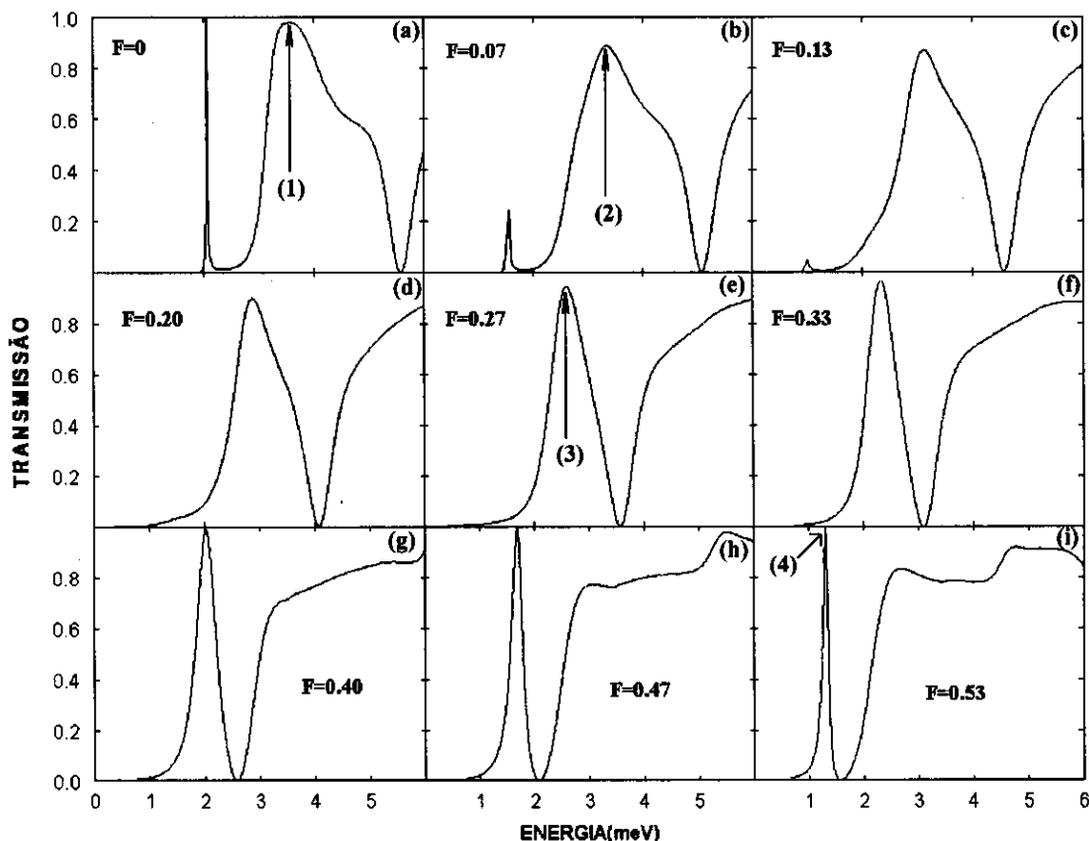


Figura 4.5: Evolução da probabilidade de transmissão através de uma estrutura de caixa quântica, para nove situações de campo elétrico  $F$ (kV/cm). As setas indicam as energias para as quais são apresentadas as densidades de probabilidade na Figura 4.6.

de segunda-ordem no campo elétrico[21], aproximadamente dado por  $\frac{e^2 F^2 d^4 m^*}{\hbar^2}$ . Isto conduz a correções da ordem de  $0.1 \text{ meV}$  para um campo elétrico da ordem de  $0.1 \text{ kV/cm}$ , considerando-se um poço de  $500 \text{ \AA}$  de largura.

De agora em diante, para uma maior facilidade, iremos sempre nos referir a um campo elétrico ao longo da direção  $y$ , como sendo um campo elétrico longitudinal, ou simplesmente campo elétrico, salvo em situações especificadas.

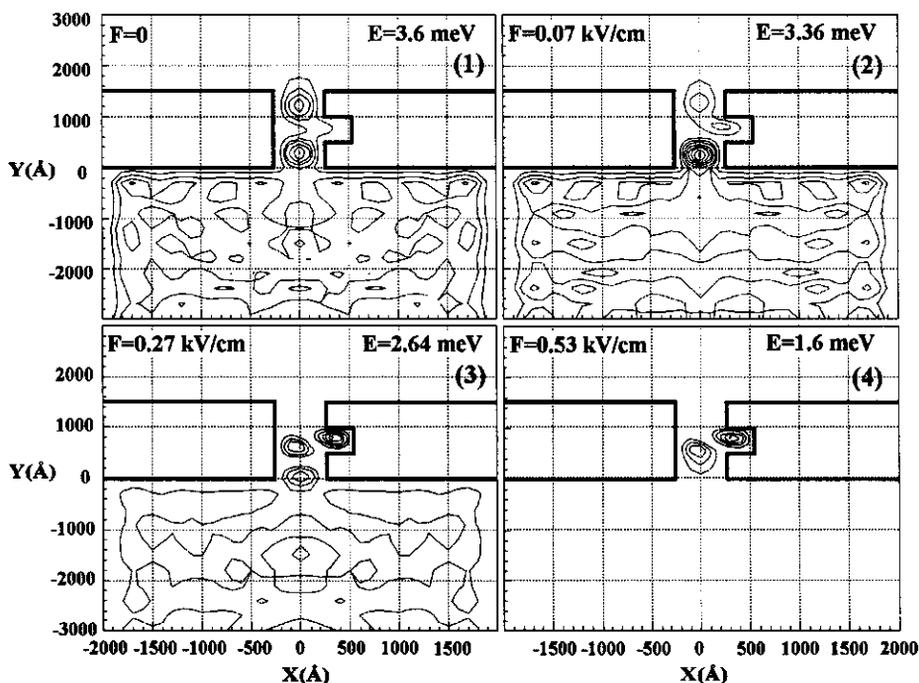


Figura 4.6: Densidade de probabilidade ao longo da estrutura de uma caixa quântica, mostrando a evolução dos estados 1D sob a ação do campo elétrico. (1)  $F=0$ ,  $E=3.6$  meV; (2)  $F=0.07$  kV/cm,  $E=3.36$  meV; (3)  $F=0.27$  kV/cm,  $E=2.64$  meV; (4)  $F=0.53$  kV/cm,  $E=1.6$  meV.

Na Figura 4.5 são mostradas as probabilidades de transmissão eletrônica, para nove situações de campo elétrico aplicadas à nanoestrutura. Para a primeira intensidade não nula, podemos notar uma redução na probabilidade de transmissão para todas as energias, notadamente para o estado fundamental de cavidade (Figura 4.5-b). Isto pode ser entendido, lembrando-se que este estado têm uma origem fortemente 0D, com maior probabilidade de presença na cavidade, embora estendido a  $F=0$ . Entretanto, devido à ação do campo elétrico, este estado localiza-se rapidamente na cavidade, e a transmissão passa a ser feita mediante tunelamento através de uma

estrutura assimetrizada. Nesta situação, os modos formados dentro da cavidade não mais permitirão uma transmissão unitária[22]. Atingida a intensidade de  $0.13 \text{ kV/cm}$  (Figura 4.5-c), o estado fundamental da cavidade estará próximo ao mínimo de energia do emissor bidimensional, de forma que ao aumentarmos um pouco mais o campo elétrico, cessará a transmissão através deste estado (Figura 4.5-d).

Na faixa de campos mais fracos ( $F \leq 0.13 \text{ kV/cm}$ ), também ocorre uma redução na probabilidade de transmissão através da banda mais larga (**1D**), acompanhada de uma mudança em seu formato. Ambos os efeitos são conseqüências diretas da localização dos estados junto as constrições estreitas (cf. Figura 4.6(2)). Contudo, como ainda existe um significativo acoplamento entre os estados das constrições estreitas, o efeito à transmissão é menos drástico do que no caso *quase-OD*.

Assim que começamos a aplicar campos elétricos mais intensos ( $F \geq 0.20 \text{ kV/cm}$ ), inicia-se uma recuperação da transmissão devido a um processo de hibridização, que torna estes estados mais estendidos (cf. Figura 4.6(3)), aumentando a probabilidade de transmissão quando do tunelamento. Continuando-se a aumentar o campo elétrico, o processo de hibridização prossegue, com o estado tornando-se mais concentrado na região da cavidade (cf. Figura 4.6(4)), de modo que para  $F=0.53 \text{ kV/cm}$ , a transmissão é praticamente unitária.

Devemos ainda notar na Figura 4.5, que pela ação do potencial elétrico, há um deslocamento do espectro de transmissão para energia mais baixas, caracterizando um Stark-shift[23] ao longo da estrutura total.

### 4.3 EFEITOS DE UM CAMPO ELÉTRICO LONGITUDINAL ÀS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UM SISTEMA DE CAIXAS QUÂNTICAS ABERTAS E CONECTADAS

Em continuidade à discussão da secção anterior, passaremos a considerar um sistema de três caixas quânticas abertas e conectadas, fazendo a comunicação entre dois reservatórios bidimensionais (Figura 4.7).

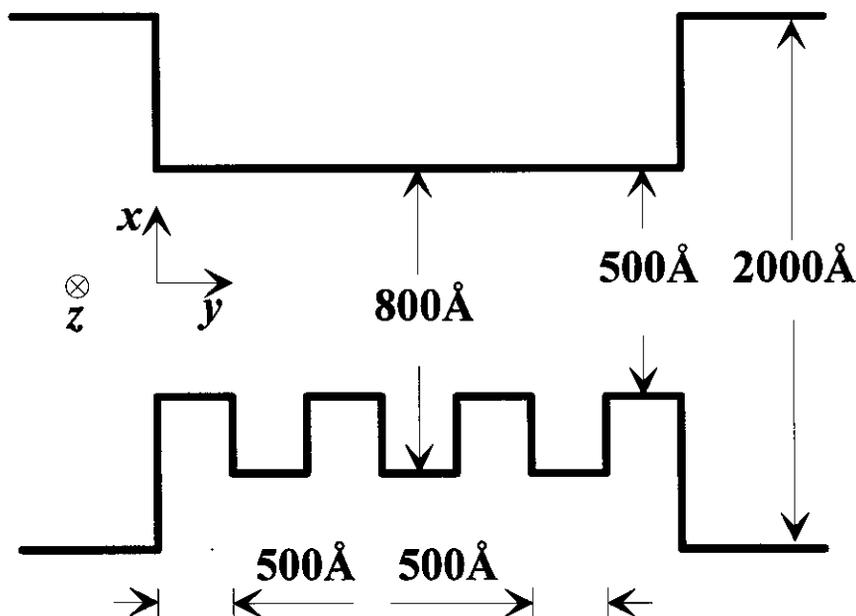


Figura 4.7: Sistema de três caixas quânticas abertas e conectadas, comunicando dois reservatórios bidimensionais.

Seguindo o procedimento anterior, vamos submeter este sistema a um campo elétrico longitudinal, introduzindo este efeito através de deslocamentos rígidos das camadas de potencial (Figura 4.8).

A evolução da probabilidade de transmissão através da estrutura, para intensidades crescentes de campo elétrico é mostrada na Figura 4.9 e na Figura 4.12. Comparando-se o potencial elétrico distribuído ao longo da estrutura, à largura da banda 1D de transmissão, podemos classificar as intensidades de campo elétrico como fracas (Figuras 4.9-a à 4.9-c), intermediárias (Figuras 4.9-d à 4.9-f), ou fortes (Figuras 4.9-g à 4.9-i).

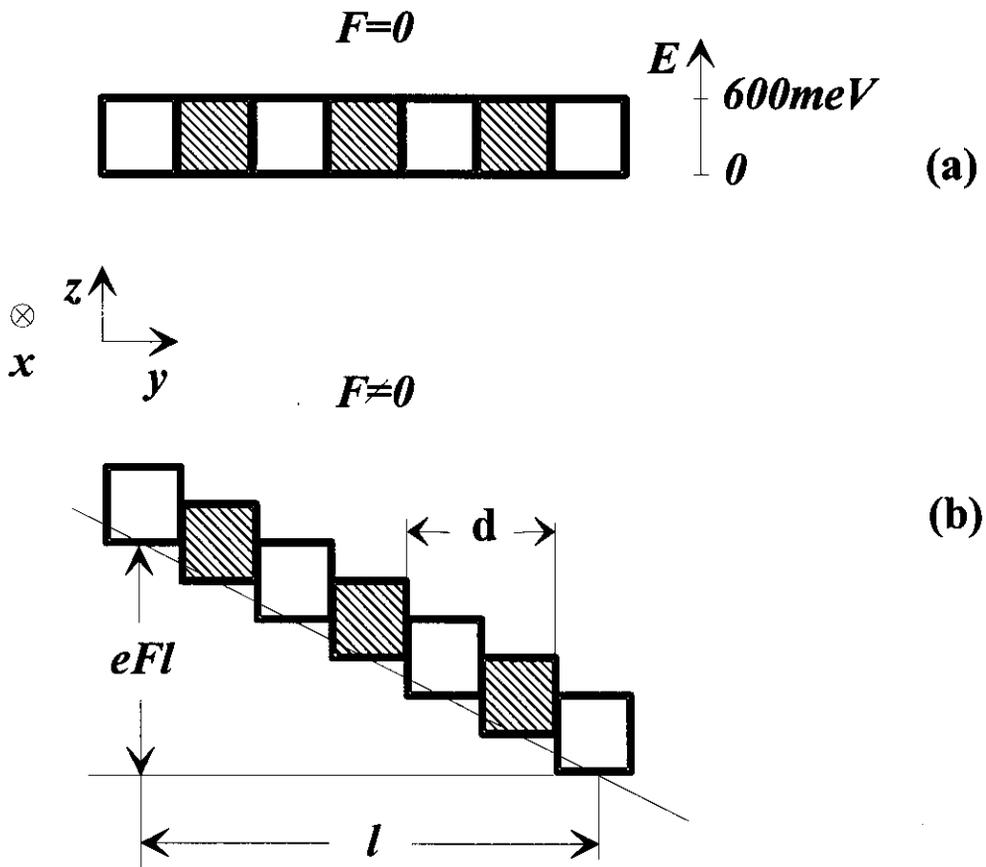


Figura 4.8: (a) Vista em corte da estrutura mostrada na Figura 4.5, com  $F=0$ . As regiões de mesmo confinamento lateral são identificadas pela mesma cor. (b) É aplicado um campo elétrico não nulo a estrutura, efeito que introduzimos em nossos cálculos através de um deslocamento rígido das camadas de potencial.

Enquanto a nanoestrutura está submetida a fracas intensidades de campo elétrico, poucas alterações podem ser notadas na transmissão através das bandas largas. Contudo, rapidamente nota-se sua supressão através da banda estreita, o que nos traz à mente a discussão feita na **secção 4.1**, a respeito da formação de **WSS**. De acordo com os resultados obtidos anteriormente, quanto menor a largura de uma banda, menores serão os campos elétricos necessários para a localização espacial dos seus estados, o que comprova-se diretamente na Figura 4.9. A banda *quase-0D* tem largura  $\sim 0.2\text{ meV}$  ( $F=0$ ), e devido isso a localização de seus estados é muito mais rápida do que para as bandas largas, que têm larguras  $\sim 1\text{ meV}$  ( $F=0$ ). Sendo assim,

logo sua transmissão passa a ocorrer através de tunelamento, numa estrutura assimetrizada pelo campo elétrico, uma situação que não permite uma transmissão unitária[22].

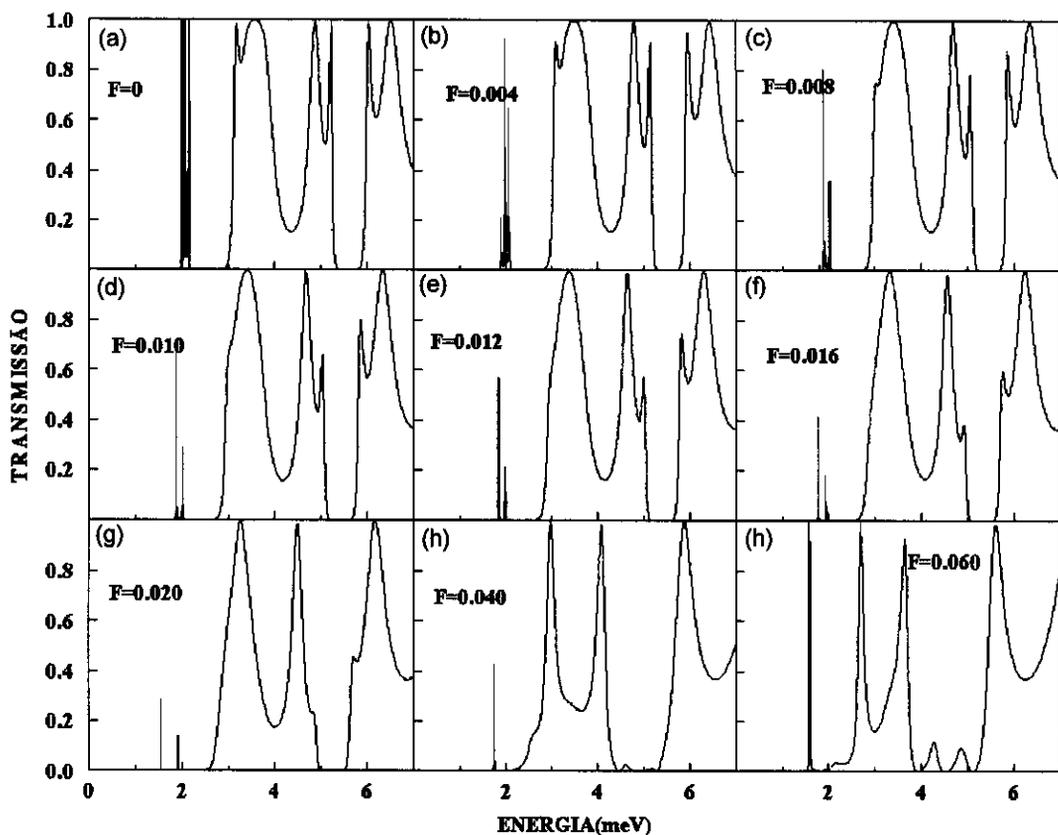


Figura 4.9: Evolução da Probabilidade de Transmissão através de uma estrutura de três caixas quânticas abertas e conectadas, devido à ação de um campo elétrico externo  $F$  (kV/cm).

Atingidas intensidades intermediárias de campo elétrico, têm início mudanças mais significativas nas bandas largas de transmissão. Pode-se principalmente notar uma diminuição em suas larguras, o que é um reflexo direto da localização de alguns dos estados tipo fio (1D). Paralelamente, o declínio da transmissão pela banda estreita acentua-se ainda mais com o aumento do campo.

Finalmente, quando temos fortes intensidades de campo elétrico aplicadas, encontramos mudanças marcantes na transmissão. O estreitamento das bandas largas torna-se bem definido, sendo que para a mais alta intensidade de campo elétrico apresentada, a transmissão não é mais unitária dentro da faixa de energia calculada.

Isto mostra que o comprimento de localização destes estados já é menor do que o comprimento da estrutura, o que implica que a transmissão passa a ser feita através de tunelamento. Na Figura 4.10 temos mapeado a distribuição espacial de um estado da banda larga 1D a  $F=0$  ( $E=3.7$  meV), e a sua evolução a  $F=0.06$  kV/cm ( $E=2.5$  meV), tornando bem caracterizada esta alteração dos estados.

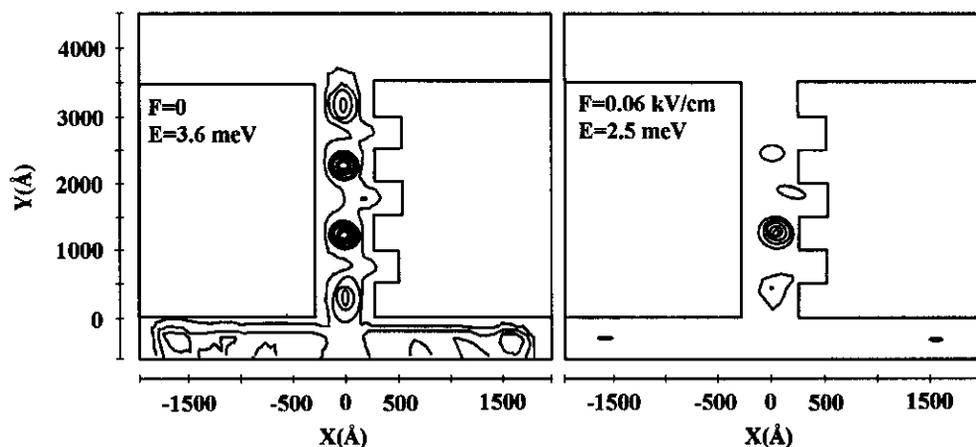


Figura 4.10: Evolução dos estados na banda larga.(a)  $F=0$ ,  $E=3.6$  meV, o estado é estendido e (b)  $F=0.06$  kV/cm,  $E=2.5$  meV, o estado localiza-se junto a uma das constrições estreitas, como efeito do campo elétrico.

A partir da intensidade de campo  $F=0.04$  kV/cm, temos uma recuperação na transmissão através de um estado de cavidade (remanescente da banda estreita), que acaba por quase atingir a unidade quando  $F=0.06$  kV/cm. Esta recuperação é resultado do reestabelecimento de uma simetria efetiva entre as barreiras na estrutura, envolvendo o estado formado na primeira cavidade. Podemos entender isto de forma qualitativa através da Figura 4.11.

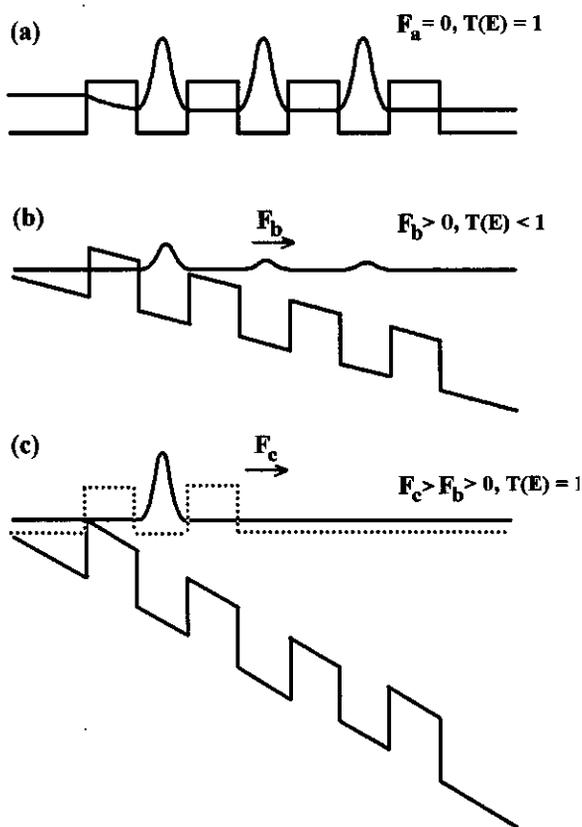


Figura 4.11: (a)  $F=0, T(E)=1$ , o acoplamento entre os estados dos poços é significativo e as barreiras que os envolvem são idênticas. (b)  $F_b \neq 0, T(E) < 1$ , é diminuído o acoplamento entre os estados e com a deformação da estrutura as barreiras envolvendo os estados tornam-se diferentes. (c)  $F_c > F_b > 0, T(E) = 1$ , apesar de um campo mais intenso o campo elétrico tornar menor o acoplamento entre os estados dos poços, acaba por ocorrer uma recuperação da simetria efetiva entre as barreiras de potencial que envolvem o estado formado no primeiro poço.

Na ausência de um campo elétrico, encontramos os estados dos poços acoplados e o potencial da estrutura tem simetria de inversão (Figura 4.11-a). Com a aplicação de um campo elétrico diminui-se este acoplamento, e é quebrada a simetria de inversão na estrutura (Figura 4.11-b), reduzindo a transmissão através destes estados. Continuando-se a aumentar o campo elétrico, o acoplamento entre os estados torna-se ainda menor, e acaba-se por criar uma condição na qual o estado formado no primeiro poço fica envolvido por barreiras de potencial equivalentes, recuperando-se deste modo a unitariedade da transmissão (Figura 4.11-c).

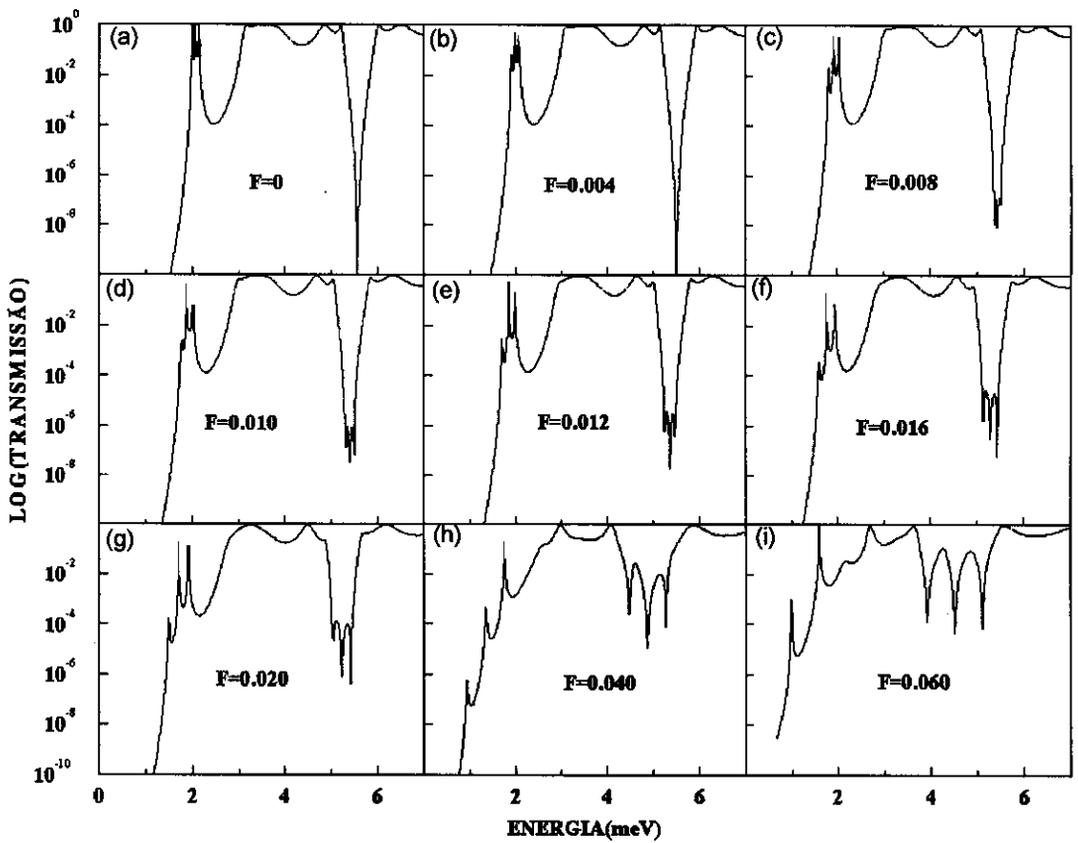
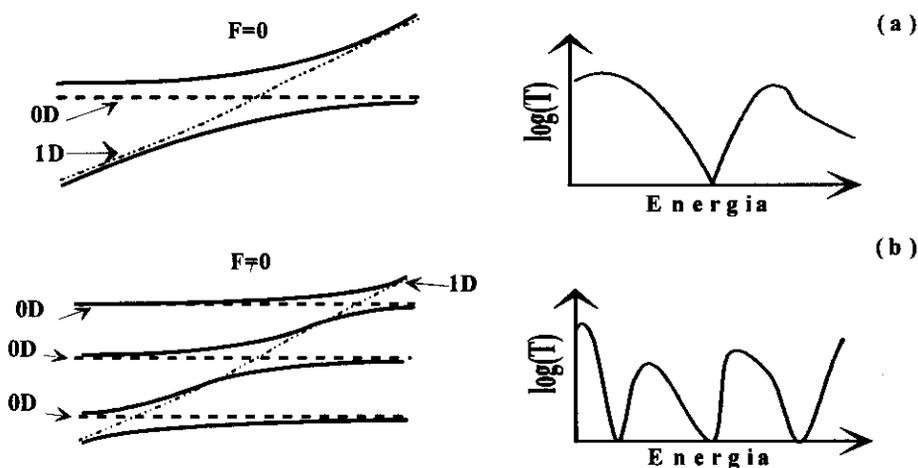


Figura 4.12: Evolução da Probabilidade de Transmissão através de uma estrutura de três caixas quânticas abertas e conectadas, devido à ação de um campo elétrico externo e longitudinal. Exceto pela utilização de escalas logarítmicas, o que evidencia a alteração dos gaps, esta figura é a mesma que a Figura 4.3. As legendas indicam as intensidades em kV/cm.

No que diz respeito aos gaps existentes na estrutura de transmissão, temos alterações em suas formas unicamente para as duas últimas, e mais fortes, intensidades de campo elétrico. Enquanto o gap de superrede deforma-se, devido à perda da periodicidade, o gap de interferência começa a apresentar estruturas de transmissão em seu interior (Figura 4.10-h e Figura 4.10-i). Utilizando de gráficos em escala logarítmica, evidencia-se um quadro interessante para esta mesma evolução da transmissão, caracterizando ainda mais o comportamento diferenciado dos gaps, mesmo a fracas intensidades de campo elétrico (Figura 4.12). Para entendermos isto, devemos lembrar que podemos entender o gap de interferência como sendo formado através do anticruzamento de duas minibandas de simetrias diferentes. Uma delas é

resultado do acoplamento entre os primeiros estados excitados das cavidades, e a outra vêm do acoplamento dos estados do canal. Esta situação, a campo nulo, é esquematizada na Figura 4.13-a, e reflete-se quando do cálculo da transmissão, na formação de um único centro de antiressonância. Contudo, como já notamos anteriormente, a minibanda originada pelos estados de cavidade tem largura muito menor do que a formada pelos estados de canal, e consecutivamente é mais sensível aos efeitos do campo elétrico.



**Figura 4.13:**(a) Formação do gap de interferência através do anticruzamento entre minibandas de diferente simetria, com correspondente espectro de transmissão ( $F=0$ ). (b) Aplicando-se um campo elétrico não nulo à estrutura, rapidamente a minibanda formada pelos estados de cavidade quebra-se, dando origem a estruturas dentro gap.

Desta forma, mesmo para os campos fracos, os estados da minibanda **0D** encontram-se localizados numa extensão menor do que o comprimento da estrutura. Por outro lado, a minibanda **1D** encontra-se estendida através da estrutura, praticamente para todas as intensidades de campo consideradas. Sendo assim, a  $F \neq 0$  o anticruzamento passa a ser entre uma minibanda larga formada por estados estendidos e três estados localizados, numa típica situação de ressonância de Fano[20]. Isto explica o aparecimento de estruturas dentro do gap de interferência, que vão tornando-se mais

claras conforme aumenta o campo elétrico (Fig 4.13-b), visto que a separação em energia dos WSS é de  $eFd$ .

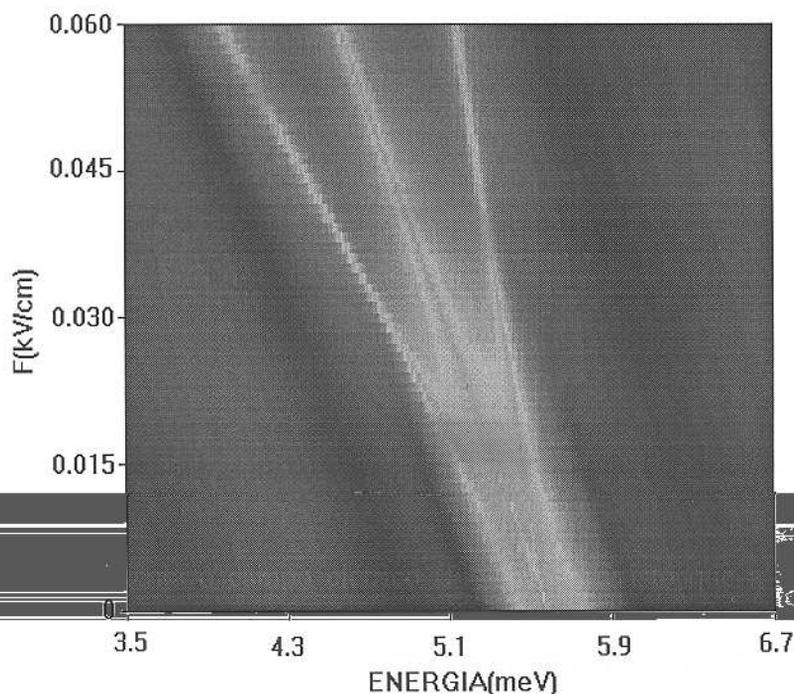


Figura 4.14: Topologia logarítmica mostrando a destruição do gap de interferência devido à formação de estados de Wannier-Stark. Quanto mais escura a cor, maior a probabilidade de transmissão.

Podemos acompanhar esta formação de WSS e a destruição do gap de interferência de uma forma mais contínua, através da topologia apresentada na Figura 4.14. Nela temos apresentado o logaritmo da transmissão como função da energia do elétron incidente, e da intensidade de campo elétrico. Quanto mais escura for a cor no gráfico, maior será a probabilidade de transmissão, e vice-versa.

Primeiramente, devemos notar que a estrutura de transmissão é linearmente deslocada para energias mais baixas, devido a ação do campo elétrico, caracterizando um Stark-shift[23]. Aproximadamente para  $F=0.015$  kV/cm, a separação entre os WSS ( $eFd$ ) já é suficiente para distinguirmos as três antiressonâncias dentro do gap, as quais vão se distanciando conforme aumenta o campo elétrico. Com o aumento da separação entre os WSS é possível haver transmissão nas regiões entre as

antioresonâncias, o que é indicado pelo surgimento de regiões escuras entre as antioresonâncias ( $F \approx 0.035 \text{ kV/cm}$ ).

#### 4.4 ANÁLISE DA EVOLUÇÃO DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS ATRAVÉS DA DENSIDADE ESPECTRAL

Enquanto tratávamos com um sistema periódico finito, podíamos fazer uma descrição das suas propriedades eletrônicas através de uma dispersão de minibandas (calculada para um sistema infinito). Contudo, ao aplicarmos a este sistema um campo elétrico, ele perde a sua periodicidade e como consequência temos a localização dos estados e a quebra das minibandas. Deste modo, a dispersão de minibanda a campo nulo não mais descreve as propriedades eletrônicas do sistema. É interessante, no entanto, termos uma informação nos moldes de uma dispersão para podermos melhor acompanhar o processo de localização dos estados. Tendo isto em vista, calculamos a densidade espectral, o que nos permite mapear os estados eletrônicos no espaço dos momentos (veja **secção 2.5**).

Até agora, para discutir os efeitos de campo elétrico, utilizamos uma estrutura de três caixas quânticas, pois ela era suficiente para descrever as características fundamentais de uma superrede, e evitava que lidássemos com sistemas maiores. No entanto, para podermos acompanhar a evolução dos estados a partir da dispersão de minibanda, torna-se necessário o uso de um sistema com uma "memória" mais forte de superrede, em outras palavras, um sistema maior. Sendo assim, escolhemos trabalhar com a estrutura de dezenove caixas quânticas, cujo espectro de transmissão já apresentamos na **secção 3.2** (Figura 3.13(b)).

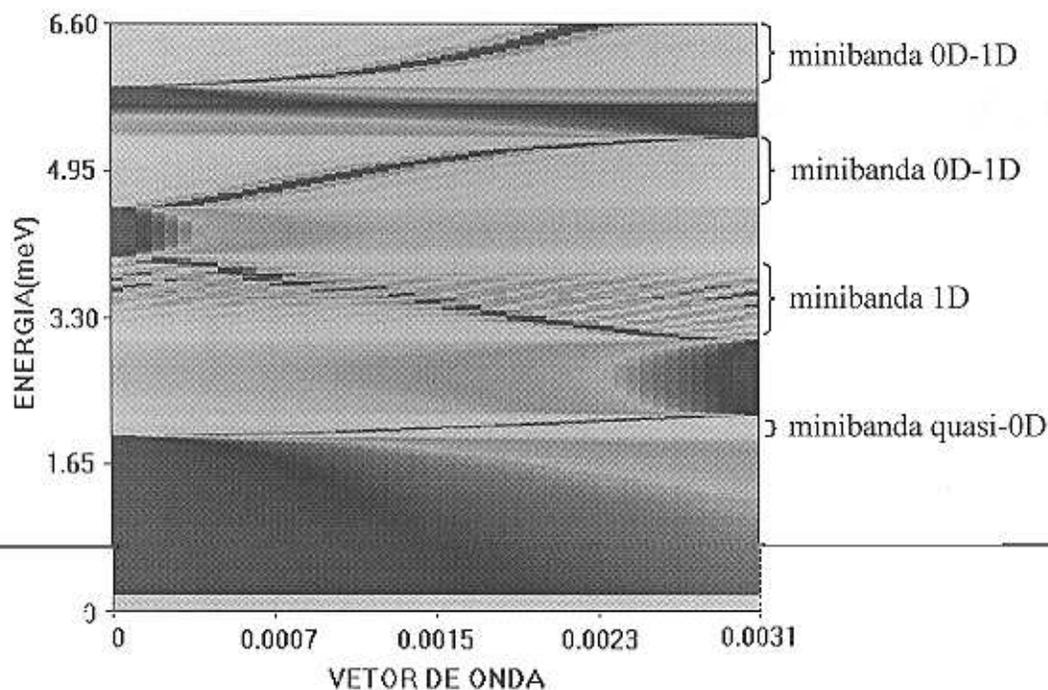


Figura 4.15: Topologia mostrando a densidade espectral para um sistema de dezenove caixas quânticas conectadas ( $F=0$ ). As legendas identificam as minibandas, e os tons de cinza indicam a intensidade relativa; quanto mais escura a cor maior a intensidade.

Primeiramente, a campo nulo, calculamos a densidade espectral em função da energia total do elétron incidente, e dos vetores de onda dentro da primeira Zona de Brillouin. Mais uma vez empregamos tons de cinza para indicar as intensidades na topologia, com a mesma seqüência; quanto mais escura a cor, maior a intensidade. O resultado é apresentado na Figura 4.15, sendo extremamente semelhante a dispersão de minibanda para uma superrede infinita[24] (Figura 3.11). Devemos reparar que todos os estados transmissíveis têm pequena extensão ao longo do espaço recíproco, ou seja, possuem um vetor de onda característico. Isto é esperado, pois equivale a dizer que estes estados estão descritos aproximadamente por uma onda plana, estendida sobre todo o espaço direto. Por outro lado, podemos notar que aparecem algumas estruturas dentro dos gaps, estruturas estas que encontram-se mais estendidas no espaço recíproco. Desta forma, estes estados são descritos por uma combinação de ondas planas, e quanto maior o número delas menos transmissível será o estado. Sendo assim, através da densidade espectral podemos obter o grau de

localização de um estado, sabendo que a sua extensão no espaço recíproco é inversamente proporcional ao seu comprimento de localização ( $L = 4\gamma/(eF)$ , Eq. (4.12)).

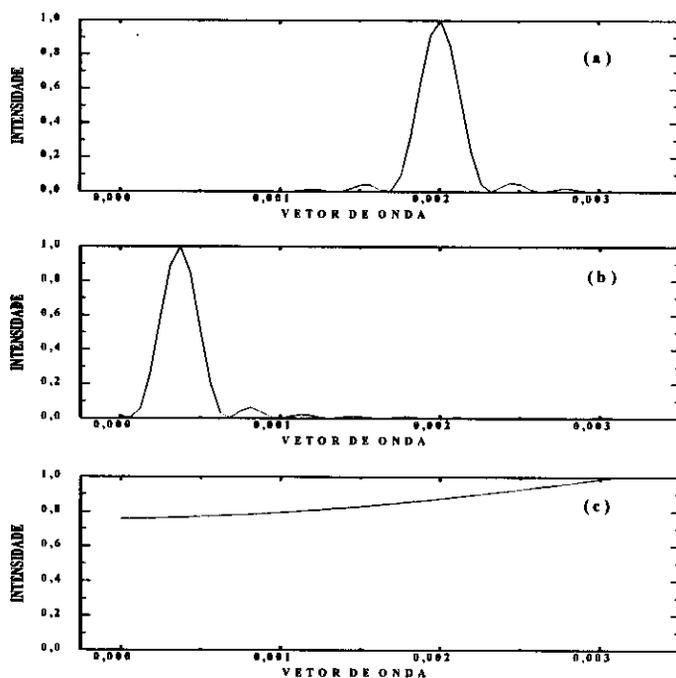


Figura 4.16: Densidade espectral para energias selecionadas, correspondendo a cortes na topologia apresentada na Figura 4.15. (a)  $E=2.1$  meV, (b)  $E=4.59$  meV, (c)  $E=5.61$  meV;  $F=0$ .

Observamos que as estruturas formadas dentro do gap de anticruzamento diferem totalmente daquelas encontradas nos dois outros gaps. Isto pode ser entendido, lembrando-se que este gap não é devido a periodicidade da estrutura, mas é decorrente de um acoplamento intrínseco dos estados do sistema. Portanto, como ele apresenta-se bem definido, a densidade espectral mostra uma estrutura estendida sobre toda a primeira zona de Brillouin, indicando a forte localização espacial para estes estados. Por outro lado, os dois outros gaps apesar de já aparecerem bem definidos no espectro de transmissão, não possuem uma localização espacial dos estados tão grande, visto que as estruturas formadas em seu interior ocupam uma pequena extensão no espaço recíproco. Comparando-se a Figura 4.15 com a Figura 3.12 vemos que na região dos gaps, a densidade espectral mostra uma alta intensidade para vetores de onda menores

do que o inverso do comprimento de localização dos gaps da nanoestrutura ( $L \sim 1/Im(q)$ ) na Figura 3.12). Esta nossa discussão pode ser ilustrada, fazendo-se vistas em cortes ao longo de algumas energias da topologia (Figura 4.16). Na Figura 4.16(a) temos um estado pertencente a primeira minibanda ( $E=2.1 \text{ meV}$ ), fortemente localizado em torno de um valor de vetor de onda, o mesmo acontecendo na Figura 4.16(b), desta vez para um estado na terceira minibanda ( $E=4.59 \text{ meV}$ ), o que os caracteriza como estados transmissíveis. Por sua vez, na Figura 4.16(c) encontramos um estado bem estendido no espaço dos momentos, o que corresponde a um estado localizado no espaço direto. Isto é de se esperar, uma vez que este estado encontra-se dentro do gap de interferência ( $E=5.61 \text{ meV}$ ). Finalmente, observamos que a ondulação envolvendo a minibanda 1D, deve ser reconhecida como um efeito de Fabry-Pérot, ocasionado pelas interfaces abruptas da estrutura.

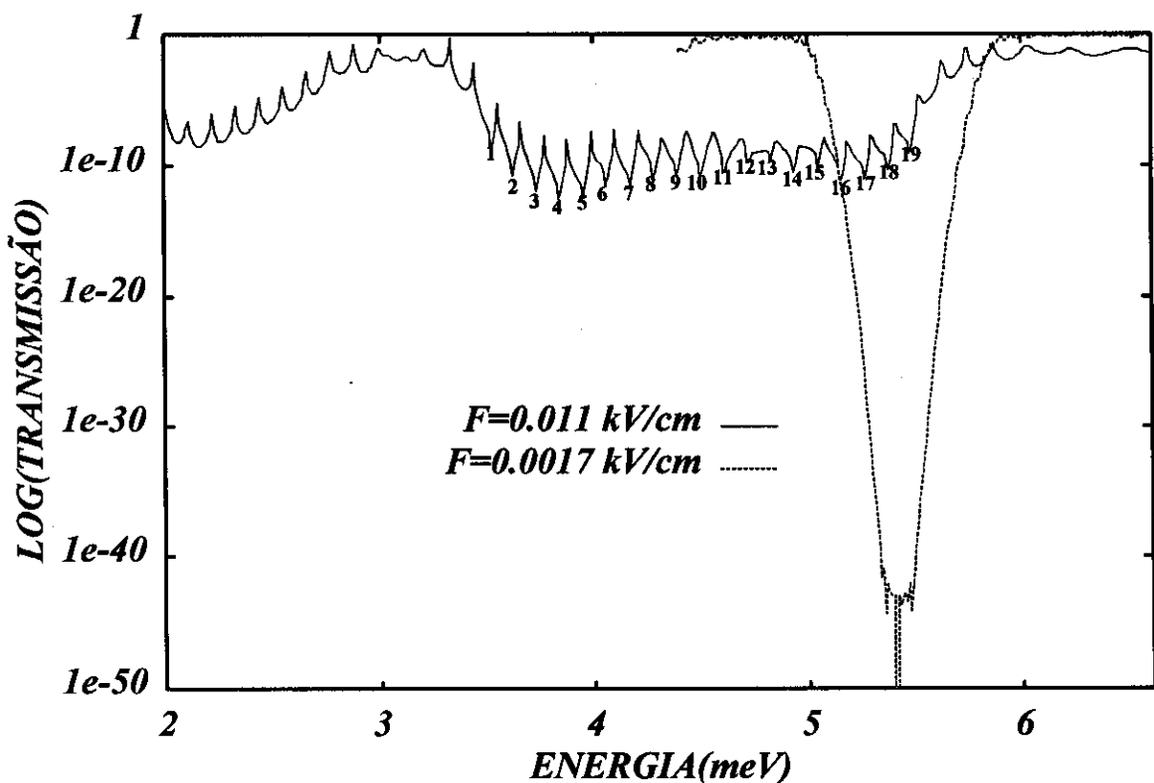


Figura 4.17: Espectro de transmissão de uma estrutura de dezenove caixas quânticas, nas proximidades do gap de anticruzamento, em duas situações de um campo elétrico  $F$ , aplicado à nanoestrutura.

Consideremos na seqüência, duas situações de campo elétrico aplicado à nanoestrutura, uma de campo elétrico fraco e a outra de campo elétrico forte, sendo que esta designação (fraco e forte) segue o mesmo critério anteriormente adotado. Na Figura 4.17 temos os espectros de transmissão para estes campos elétricos, calculados na região de energia das bandas híbridas (**0D-1D**). Pode-se notar que a campo fraco, o gap de interferência ainda é bem definido, mantendo-se uma forte supressão na transmissão. Contudo, o mesmo não ocorre a campo forte, quando é possível distinguirmos dezenove antiressonâncias dentro do gap. Isto, de acordo com a nossa interpretação de duas minibandas, mostra que a segunda minibanda *quase-0D* encontra-se quebrada, e as antiressonâncias são, portanto, o resultado do anticruzamento dos seus dezenove **WSS** com a minibanda **1D**.

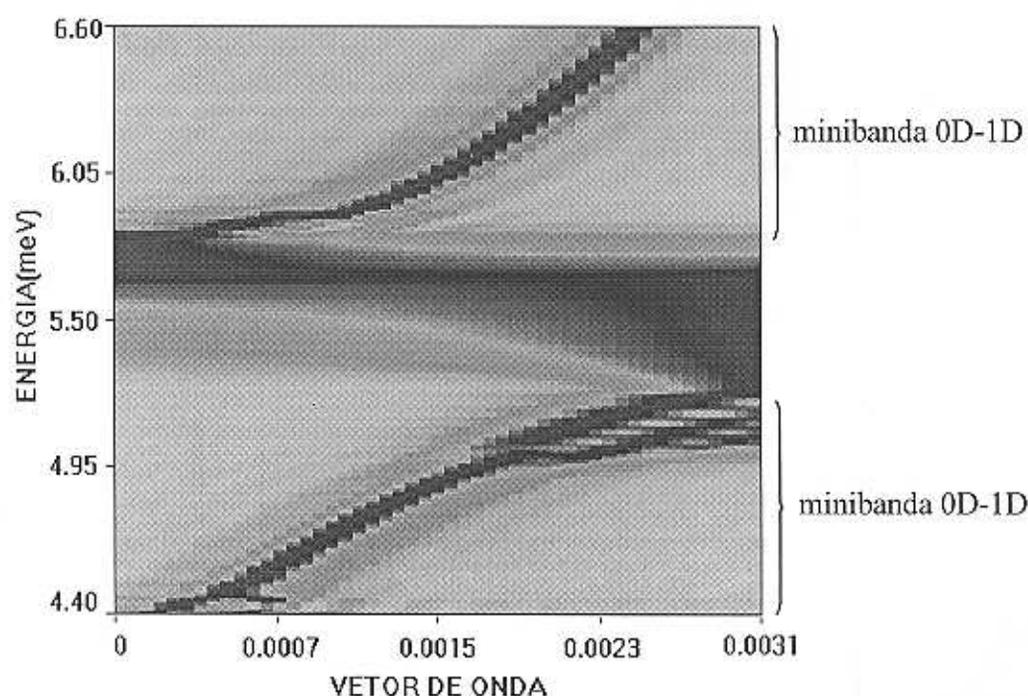


Figura 4.18: Topologia mostrando a densidade espectral para um sistema de dezenove caixas quânticas conectadas, submetido a um campo elétrico  $F=0.0017$  kV/cm. Os tons de cinza indicam a intensidade relativa; quanto mais escura a cor maior a intensidade.

Na Figura 4.18 temos o resultado do cálculo da densidade espectral, para os estados mostrados no espectro de transmissão, quando  $F=0.0017$  kV/cm. Basicamente o que se pode notar é um início de delocalização no espaço recíproco, mais caracterizado para estados nas bordas das minibandas, pois estes são os primeiros a serem localizados pelo campo elétrico. Em conformidade com o que aparece no espectro de transmissão, o gap de interferência ainda é bem definido, com os estados em seu interior estendidos sobre toda a Zona de Brillouin. Novamente, podemos apreciar melhor estes efeitos fazendo cortes na topologia ao longo de algumas energias (Figura 4.19). Na Figura 4.19(a) temos um estado no centro de uma minibanda ( $E=4.67$  meV), ainda bem descrito por um vetor de onda, embora já possamos notar um princípio de delocalização ao longo do espaço recíproco. No centro do gap ( $E=5.68$  meV), a transmissão continua bem reduzida, ou seja, o gap ainda é bem definido, não havendo localização em torno de nenhum vetor de onda (Figura 4.19(b)).

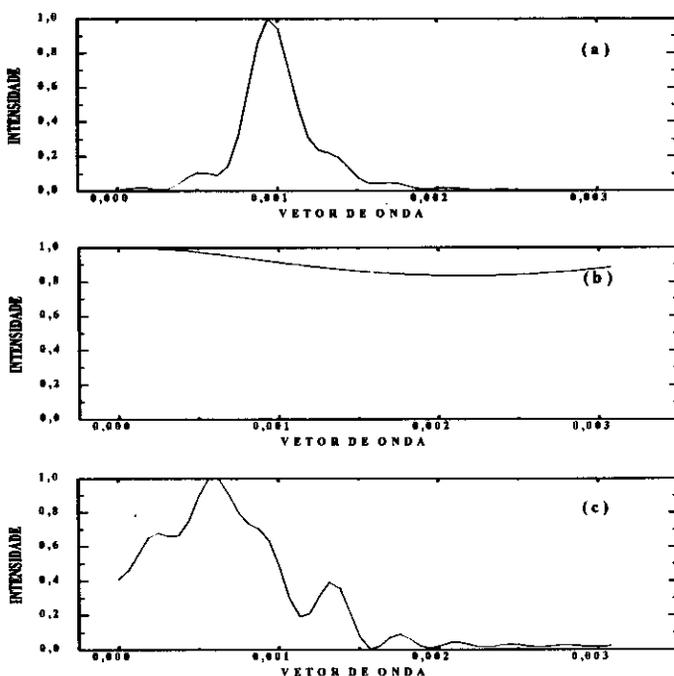


Figura 4.19: Densidade espectral para energias selecionadas, correspondendo a cortes na topologia apresentada na Figura 4.18. (a)  $E=4.67$  meV, (b)  $E=5.68$  meV, (c)  $E=5.86$  meV;  $F=0.0017$  kV/cm.

Na borda das minibandas, a delocalização ao longo da Zona de Brillouin começa a se tornar mais notável, e a transmissão através destes estados começa a decair, conforme podemos notar na Figura 4.17.

Ao calcularmos a densidade espectral a campo forte ( $F=0.011 \text{ kV/cm}$ ), Figura 4.20, encontramos os estados das minibandas híbridas bastante estendidos ao longo da Zona de Brillouin. O efeito é mais forte para a minibanda de mais baixa energia, e como conseqüência sua transmissão é mais afetada. Desviando a nossa atenção para o gap, constatamos a presença de estados localizados no espaço recíproco, que são os responsáveis pelo surgimento dos picos entre as dezenove antiressonâncias do espectro de transmissão.

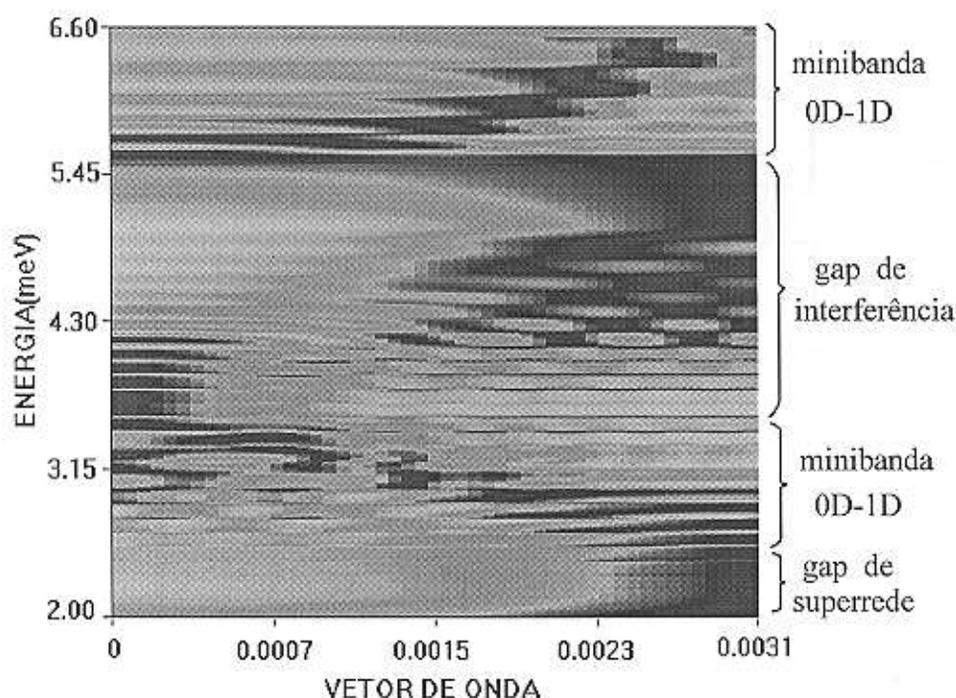


Figura 4.20: Topologia mostrando a densidade espectral para um sistema de dezenove caixas quânticas conectadas, submetido a um campo elétrico  $F=0.011 \text{ kV/cm}$ . Os tons de cinza indicam a intensidade relativa; quanto mais escura a cor, maior a intensidade.

De modo a tornar mais clara esta situação, apresentamos na Figura 4.21 a densidade espectral para três energias selecionadas ( $F=0.011 \text{ kV/cm}$ ). Na Figura 4.21(a), encontramos um estado na primeira minibanda híbrida ( $E=3.1 \text{ meV}$ ), e

verificamos que existem significativas contribuições de vários vetores de onda em sua formação. Desta forma, este estado encontra-se bastante estendido ao longo do espaço recíproco, sendo este o motivo para a pequena transmissão através dele. Por outro lado, na Figura 4.21(c) temos a densidade espectral para um estado na segunda minibanda híbrida ( $E=6.3 \text{ meV}$ ), que apesar de sofrer um princípio de delocalização ao longo da Zona de Brillouin, é ainda visivelmente localizado em torno de um vetor de onda. Finalmente, na Figura 4.21(b) apresentamos a densidade espectral para um estado dentro do gap de interferência, onde claramente observamos uma acumulação em torno de três vetores de onda, de modo que a probabilidade de transmissão através deste estado passa a se tornar mais significativa.

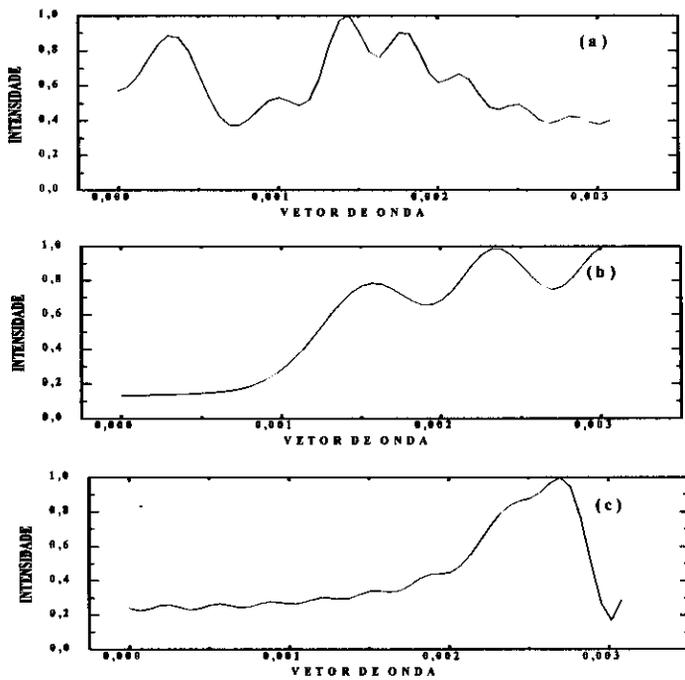


Figura 4.21: Densidade espectral para energias selecionadas, correspondendo a cortes na topologia apresentada na Figura 4.20. (a)  $E=3.1 \text{ meV}$ , (b)  $E=4.3 \text{ meV}$ , (c)  $E=6.3 \text{ meV}$ ;  $F=0.011 \text{ kV/cm}$ .

## REFERÊNCIAS

[1] G. H. Wannier, "Elements of Solid State Theory", Cambridge Univ. Press (1959).

- [2] J. Zach, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1477 (1968); E. E. Mendez, G. Bastard, L. L. Chang, L. Esaki, H. Morkoc, and R. Fisher, *Physica B* **117**, 711 (1983); G. Nenciu, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 91 (1991), e referências contidas.
- [3] E. E. Mendez, F. Agullo-Rueda and J. M. Hong, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2426 (1988).
- [4] P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Allibert and A. Regrény, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1639 (1989).
- [5] H. G. Roskos, M. C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D. A. B. Miller, A. M. Fox, S. Schimitt-Rink, and K. Köhler, *Phys. Rev Lett.* **68**, 2216 (1992).
- [6] G. Von Plessen and P. Thomas, *Phys. Rev B* **45**, 9185 (1992).
- [7] G. Bastard, R. Ferreira, S. Chelles, and, P. Voisin, *Phys. Rev* **50**, 4445 (1994).
- [8] J. B. Kurgin, S. J. Lee, and N. M. Lawandy, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 3275 (1994).
- [9] D. Cai, A. R. Bishop, and N. Grøbench-Jensen, *Phys. Rev Lett.* **74**, 1186 (1995).
- [10] J. Rotvgi, A. Jauho, and H. Smith, *Phys. Rev Lett.* **74**, 1831 (1995).
- [11] K. Tominaga, M. Hosoda, K. Kawashima, and T. Watanabe, and K. Fujiwara, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 141 (1994).
- [12] H. C. Neitzert, D. Campi, C. Cacciato, C. Rigo, A. Stano, and C. Coriasso, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 2645 (1994).
- [13] F. Devaux, E. Bigan, M. Allovon, J. C. Harmand, F. Huet, M. Carre, and J. Landreau, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 2773 (1992).
- [14] G. Bastard, J. A. Brum and R. Ferreira, *"Solid State Physics"* **44**, 284 (1991).
- [15] J. C. Slater, *Phys. Rev* **76**, 1592 (1949).
- [16] G. H. Wannier, *Phys. Rev* **52**, 191 (1937).
- [17] K. Hacker and G. Obermair, *Z. Physik* **234**, 1 (1970).
- [18] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *"Handbook of Mathematical Functions"*, Ed. Dover (1965).
- [19] P. Feuer, *Phys. Rev. B* **88**, 92 (1952).
- [20] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [21] G. Bastard in *"Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures"*, page 310, Les Éditions de Physique.
- [22] B. Ricco e M. Ya Azbel, *Phys. Rev. B* **29**, 1970 (1984).
- [23] E. Merzbacher in *"Quantum Mechanics"*, page 421, 2nd ed., John Wiley & Sons (1971).
- [24] J. A. Brum, *Phys. Rev. B*, **43**, 12082 (1991).

# Capítulo 5

## Conclusão

No decorrer deste trabalho estudamos a evolução das propriedades eletrônicas em sistemas de fios quânticos corrugados submetidos a um campo elétrico longitudinal. A utilização dos resultados do modelo apresentado na **secção 4.1**, em forma conjunta com a nossa descrição de duas minibandas, mostrou-se bem sucedida para explicar a formação de WSS nestes sistemas. O mapeamento da evolução da estrutura eletrônica em função do campo elétrico, por meio da análise das densidades espectrais, mostrou-se bastante útil para evidenciarmos a crescente localização dos estados concomitantemente à quebra das minibandas eletrônicas.

Encontramos como o resultado mais significativo, a previsão de que os dois tipos de gap formados nestas estruturas possuem um comportamento diferente sob o efeito do campo elétrico. O gap de superrede simplesmente deforma-se devido à quebra das minibandas, causada pela localização espacial dos estados. Por outro lado, o gap de interferência é destruído por transmissões que surgem em seu interior, pois o campo elétrico muda o acoplamento intrínseco entre os dois tipos de estados existentes na estrutura.

Mais uma vez reforçamos a nossa expectativa, que estes efeitos apareçam refletidos nas propriedades de transportes destes sistemas. Contudo, de acordo com o que já afirmamos anteriormente, no atual estado de fabricação das amostras, os efeitos de carga predominam sobre os de quantização. Isto, associado às dificuldades na interpretação das medidas de condutância, eventualmente podem frustrar a observação de nossas previsões. A fórmula de Landauer-Bütiker[1] é normalmente utilizada com esta finalidade, entretanto, conforme entendemos, existe uma dificuldade formal em sua aplicação. Esta fórmula conecta uma grandeza macroscópica, a condutância, a uma grandeza microscópica, a transmissão, que não pode estar relacionada aos

processos de dissipação existentes nos contatos das amostras. Em outras palavras a transição entre um objeto clássico, representado pelos contactos, e um objeto quântico, a nanoestrutura, não é levada em conta neste modelo. Desta forma, a comparação direta com os resultados experimentais não é evidente.

Uma possível continuação do nosso trabalho pode ser o estudo de uma nanoestrutura periódica com gás unidimensional de buracos (**1DHG**). Como sabemos, os compostos volumétricos do grupo **III-V** têm as bandas de buraco leve e buraco pesado acopladas para  $k \neq 0$  e degeneradas em  $k=0$ , o que deve acrescentar aspectos interessantes às propriedades eletrônicas desta nanoestrutura.

A grande quantidade de trabalhos encontrados na literatura recente, tanto de carácter experimental como teórico, testemunham os grandes esforços que vêm sendo feitos para compreensão e a aplicação de sistemas de baixa dimensionalidade. As nanoestruturas trouxeram com elas perspectivas de se estudar sistemas com altas concentrações de portadores e mobilidades, situações impensáveis em sistemas de semicondutores **3D**. Isto tornou-se possível graças a separação espacial entre as impurezas ionizadas e os portadores de carga nas nanoestruturas. Nos sistemas **3D** o aumento da densidade de portadores, no intuito de se aumentar a mobilidade, é sempre comprometido pelo espalhamento causado pelas impurezas ionizadas, ou por fônons.

O tunelamento ressonante em nanoestruturas apresenta um potencial promissor para aplicação em dispositivos de alta-velocidade de chaveamento e de ganho não linear, com baixo consumo de potência. Várias propostas de transistores com transcondutância negativa, utilizando deste mecanismo têm sido apresentadas e implementadas[2]. Lasers de semicondutor construídos a partir de estruturas de poços quânticos constituem uma peça indispensável dos sistemas de comunicação óptica de alta eficiência. Dispositivos beneficiando-se do efeito Stark são vistos como extremamente promissores para moduladores ópticos de alta velocidade, além de uma nova geração de circuitos lógicos[3].

No contexto deste trabalho, recentemente[4], uma memória de um único elétron foi construída utilizando de uma nanoestrutura de confinamento lateral, e do efeito de bloqueio de Coulomb[5]. Contudo, a viabilização destes dispositivos, a excessão dos lasers de poço quântico, dependem ainda de um avanço significativo da sua tecnologia de construção. Isto quer dizer que para os "dispositivos de um elétron" poderem ser realmente chamados por este nome, suas dimensões devem ainda ser reduzidas, além de uma necessária reprodutibilidade dos processos de fabricação.

## **REFERÊNCIAS**

- [1]M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas, *Phys. Rev. B* **31** 6207 (1985).
- [2]Y. Ohno, M. Tsuchiya, and H. Sakaki, *Electronics Letters* **29**, 375 (1993), e referências contidas.
- [3]"*Physics and Technology of Semiconductor Quantum Devices*", K. H. Ploog and L. Tapfer Eds., Springer Verlag (1994).
- [4]K. Nakazato, R. J. Blaikie, J. R. A. Cleaver, and Ahmed, *Electronics Letters* **29**, 384 (1993).
- [5]J. C. Gorter, *Physica* **17**, 777 (1951). K. K. Likarev, *IEEE Transactions on Magnetism* **23**, 1142 (1987).