Tunelamento Seqüencial Ressonante em Multi-Poços Quânticos sob Efeito de Campo Magnético

Weber Hanry Morais e Feu

Orientador: Prof. Dr. Paulo Sérgio Soares Guimarães

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Abril de 2003

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, a Deus e aos meus pais por terem me dado a vida, mostrado o caminho e me auxiliado a trilhá-lo. E, também, aos meus irmãos, Wadam e Lara, por conseguirem me suportar com paciência.

Aos professores que com muita dedicação, paciência e perseverança auxiliaram na minha formação não tanto acadêmica, mas também na formação de vida. Tenho uma fraternal consideração aos meus primeiros professores que me ensinaram o gosto pelo estudo.

Ao corpo técnico/administrativo deste Departamento.

Aos meus amigos do Centro Cultural Mangabeiras, em especial ao romano Hadrianus, Paulo Andery, Cláudio Rigo, Antônio das Neves, Alberto e a muitos outros. A amizade de vocês me manteve firme no meu grande propósito.

Aos amigos de curso pelas boas risadas e discussões que me ajudaram a encarar essa tarefa com mais facilidade. E aos amigos de laboratório, em especial ao Daniel, por me ajudarem no desenvolvimento desse trabalho. Não posso me esquecer do Marcelo "Telão" que sempre me lembrou que estava na hora do almoço ao chegar no laboratório com sua célebre pergunta: "E aí, vamos almoçar?".

À minha querida Ariane. Seu amor e carinho foram fundamentais nos momentos de alegria e de tristeza, de trabalho e de descanso.

Agradeço também à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) pelo suporte financeiro durante esse mestrado e também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) por manterem os laboratórios que utilizei.

Por fim, agradeço imensamente ao meu orientador Paulo Sérgio Soares Guimarães, que desde o início do curso tem me ajudado não só em questões acadêmicas, mas tem se mostrado um grande amigo com quem posso contar em todas as horas.

Para ser grande, sê inteiro: nada Teu exagera ou exclui. Sê todo em cada coisa. Põe quanto és No mínimo que fazes. Assim em cada lago a lua toda Brilha, porque alta vive.

Ricardo Reis (1933)

Dedico esse trabalho aos meus pais, Almeida e Conceição.

Resumo

Neste trabalho, apresentamos uma investigação experimental de tunelamento seqüencial em estruturas de multi-poços quânticos de GaAs/AlGaAs dopados uniformemente, na presença de campos magnéticos de até 15 T. As amostras foram crescidas por epitaxia por feixe molecular e processadas em mesas de 150 µm de diâmetro, utilizando técnicas padrão de processamento. Elas consistem em uma seqüência de multipoços quânticos crescidos de acordo com a série de Fibonacci, onde o termo de ordem n é a concatenação dos dois termos anteriores, dito $F_n = F_{n-2} + F_{n-1}$. Dessa forma, elas possuem 12 poços, de GaAs, de 6 nm de largura e 13 barreiras, de AlGaAs, sendo que a concentração de Al é de 30%, com larguras, ora de 10 nm, ora de 20 nm. Abaixo de 100 K, a curva característica corrente versus tensão, na ausência de campo magnético, apresenta uma sucessão de degraus e platôs característicos de tunelamento seqüencial ressonante em um sistema dopado. Para tensões fixas, correspondentes à situação na qual existem dois domínios de campo elétrico na estrutura, ou seja, para tensões no interior do platô, a aplicação de um campo magnético perpendicular à direção de crescimento da amostra leva ao rearranjo dos domínios de campo elétrico na estrutura. O rearranjo nos domínios de campo elétrico gera uma série de saltos e oscilações na corrente de tunelamento em baixos campos magnéticos. Para certas tensões, o rearranjo nos domínios de campo elétrico induzido pelo campo magnético permanece estável, mesmo depois de desligado o campo magnético.

Abstract

We present an experimental investigation of sequential tunneling in n-doped GaAs/AlGaAs multi-quantum well structures, in the presence of magnetic fields up to 15 T. The samples were grown by molecular beam epitaxy and processed into 150 µm diameter mesas using standard techniques. They consist of a multi-quantum well sequence grown in a Fibonacci way, i.e. the n^{th} term is the concatenation of the $(n-2)^{th}$ and the (n-1)th. In this way the sample has as building blocks an AlGaAs layer of 10 nm thickness and Al concentration of 30% (element A) and a GaAs layer of 6 nm thickness (element B). The subsequent layers follow the Fibonacci rule: A, BA, ABA, BAABA, ... Six iterations were grown. Below 100 K the current-voltage characteristic shows a succession of steps and plateaus emblematic of sequential resonant tunneling in a doped system. For a fixed bias inside the current plateau corresponding to the situation where we have two electric field domains, the application of a magnetic field perpendicular to the growth direction gives rise to a rearrangement of the electric field domains in the structure. The electric field domain rearrangement generates a series of jumps and oscillations in the tunneling current for low applied magnetic field. For a certain range of applied bias the magnetic fieldinduced change in the electric field domain arrangement remains stable, even after the magnetic field is switched off.

Índice

Agradecimentos	Ι
Resumo	II
Abstract	III
Índice	IV
01 – Introdução	1
02 – Descrição das Amostras	5
03 – Transporte Eletrônico na Ausência de Campo Magnético	10
3.1 – O Poço Duplo Simétrico	11
3.2 – Seqüencia de Multi-Poços Quânticos	13
3.3 – Efeitos de Auto-Similaridade	17
3.4 – Tunelamento Seqüencial Ressonante	21
04 – Transporte Eletrônico na Presença de Campo Magnético	29
4.1 – Campo Magnético Perpendicular à Direção de Crescimento	29
4.2 – Resultados Experimentais	33
05 – Conclusão	51
Bibliografia	53

Há duas formas de viver sua vida. Uma é pensando que não existem milagres. Outra é pensando que tudo é um milagre. Albert Einstein (1879 – 1955)

CAPÍTULO 01

INTRODUÇÃO

As super-redes cristalinas foram idealizadas por Esaki e Tsu (1970) num trabalho pioneiro que levou a vários desenvolvimentos na área de pesquisa básica e que, também, trouxe grandes avanços em aplicações tecnológicas. Essas estruturas são obtidas fazendose a deposição alternada de camadas de materiais diferentes, ou então através da variação periódica de um outro parâmetro, como a dopagem. Se as camadas desses materiais têm espessuras de poucas camadas atômicas (ou se a variação da dopagem ocorre sobre poucas camadas atômicas) obtem-se um potencial periódico superposto ao potencial criado pela rede cristalina. No caso em que a estrutura é construída por uma seqüência alternada de dois materiais como GaAs e AlGaAs, por exemplo, obtem-se uma seqüência de poços de potencial (camadas de GaAs) e de barreiras de potencial (camadas de AlGaAs) para os elétrons na banda de condução da estrutura [Choi *et al.* (1987)]. O termo super-rede é normalmente reservado para estruturas nas quais a interação entre as funções de onda de estados localizados em poços vizinhos é grande. Se a interação entre as funções de onda dos poços vizinhos é muito pequena, ou seja, as barreiras são largas, as estruturas são usualmente denominadas multi-poços quânticos.

Muito tem sido estudado nessa área, o que trouxe grandes avanços em pesquisa básica, como por exemplo, a descoberta de que tais estruturas se comportam como novos materiais, tornando possível a investigação de fenômenos quânticos que antes seriam possíveis só com o auxílio de altas fontes de energia e/ou altos campos magnéticos [Vieira *et al.* (1998) e Luo *et al.* (2000-a)]. E, também, avanços nas áreas tecnológicas, que consistem em desenvolver componentes eletrônicos como receptores ou emissores na faixa de terahertz [Faist *et al.* (1994), Dupont *et al.* (1998) e Wei *et al.* (2001)]. Porém, ainda

existem questões a serem respondidas, como, por exemplo, o comportamento das estruturas de multi-poços quânticos sob efeito de campo magnético.

Pretendemos, portanto, aprofundar a investigação do efeito do campo magnético, aplicado perpendicularmente à direção de crescimento, nos níveis de energia de estruturas do tipo multi-poços quânticos.

Este trabalho nasceu a partir do primeiro contato com um artigo que discutia a possibilidade de se poder observar um espectro de energia do tipo fractal em estruturas de super-redes semicondutoras quasi-periódicas [Maciá e Domínguez-Adame (1996)]. Nesse artigo teórico, os autores concluem que efeitos de auto-similaridade só podem ser observados abaixo de um certo comprimento crítico da amostra. Acima desse comprimento crítico, a desordem introduzida pelos inevitáveis desvios da homogeneidade inseridos na amostra no momento do crescimento levam à perda da coerência quântica e da localização eletrônica. No entanto, para amostras com tamanho inferior ao comprimento crítico, o qual depende do grau de desordem introduzido no momento do crescimento, podemos observar fenômenos de auto-similaridade nas propriedades de transporte.

Além do trabalho citado acima, podemos encontrar muitos outros artigos que investigaram teoricamente o efeito de auto-similaridade em amostras Fibonacci como Bruno-Alfonso *et al.* (1999) e Reyes-Gomez *et al.* (1998). Encontramos, também, alguns poucos trabalhos que tratam experimentalmente desse assunto. Merlin *et al.* (1985) e Lockwood *et al.* (1987), através de medidas de espalhamento Raman e de Raios-X, e Toet *et al.* (1991), utilizando espectroscopia de excitação de fotoluminescência sob campos magnéticos paralelo e perpendiculares à corrente aplicada na estrutura, observaram efeitos de quasi-periodicidade nos espectros de amostras crescidas segundo a série de Fibonacci.

O fato de encontrarmos tão poucos trabalhos experimentais sobre esse assunto nos incentivou a aprofundar nessa pesquisa. Para tanto, utilizamos uma técnica diferente da que já havia sido empregada nos outros trabalhos. A técnica utilizada foi o estudo do transporte eletrônico na direção de crescimento, a qual denominaremos a partir daqui como direção z, na presença e ausência de campo magnético.

A fórmula seguida para se produzir tais estruturas Fibonacci é bem simples: num primeiro passo definimos dois blocos iniciais, os quais chamaremos F_1 e F_2 , onde o número de poços e barreiras e suas respectivas larguras podem ser escolhidos livremente. Depois, usamos a fórmula de recorrência que gera o número de Fibonacci ($F_n = F_{n-2} + F_{n-1}$) para INTRODUÇÃO

gerar todos os outros termos e a amostra é crescida pela concatenação de todos os n termos.

Voltando à estrutura periódica, o transporte eletrônico na direção paralela à direção de crescimento das diferentes ligas semicondutoras de uma heteroestrutura, depositadas por epitaxia por feixe molecular, difere do transporte perpendicular à direção de crescimento, pois, o potencial "sentido" pelos elétrons, ao longo da direção de crescimento, tem a forma de uma seqüência de poços e barreiras de potencial. Esses poços e barreiras tem origem no desalinhamento das bandas de condução dos semicondutores que compõem a heteroestrutura.

A periodicidade imposta por esse novo potencial encontrado nos multi-poços quânticos se sobrepõe ao potencial da rede cristalina produzindo um novo "cristal" feito de camadas compostas por outros cristais e com uma nova estrutura de bandas [Maan (1987)]. Na curva característica corrente *versus* tensão, observamos degraus e platôs e nesses últimos existem saltos de condutividade diferencial negativa, indicativo de tunelamento seqüencial ressonante, que correspondem ao rearranjo do campo elétrico na estrutura [Choi *et al.* (1987)].

Sendo assim, podemos inferir que um arranjo de multi-poços quânticos quasiperiódicos não se comportam como um cristal, podendo revelar efeitos que não são observados em uma amostra periódica. Vem daí a importância de se estudar mais a fundo tais estruturas e conhecer seu comportamento comparativo com uma estrutura periódica.

Os semicondutores utilizados no crescimento das amostras estudadas são GaAs e a liga $Al_xGa_{1-x}As$, com a concentração de alumínio, coeficiente x, igual a 30 %. Dessa forma, a superposição de camadas alternadas dos diferentes materiais produz uma seqüência de poços e barreiras de potencial. O potencial confinante dos poços gera uma quantização na direção de crescimento, a qual denominaremos direção z, se a espessura desses poços for da ordem de grandeza do comprimento de onda de de Broglie dos elétrons. A energia dos elétrons ligada ao movimento na direção de crescimento passa a ter valores discretos, os quais dependem da altura e da largura dos poços e barreiras.

No caso deste trabalho, começamos por procurar a conhecer o espectro de energias para uma seqüência de multi-poços quânticos quasi-periódica, segundo a série de Fibonacci, e o comportamento da corrente de tunelamento nessas estruturas na presença e ausência de campo magnético. Porém, como veremos nos capítulos a seguir, a separação

3

em energia dos níveis auto-similares requer uma resolução experimental de alguns milielétrons-volts, o que não nos permite verificar os efeitos de auto-similaridade.

No entanto, as medidas com campo magnético aplicado perpendicularamente à direção de crescimento apresentaram fenômenos interessantes, que não precisam da quasiperiodicidade para serem explicados e podem ser interpretados com um modelo simples que desenvolvemos e será explicado no capítulo 04.

O capítulo 02 contém uma descrição da amostra, os detalhes do crescimento desta e uma descrição da montagem experimental e da técnica utilizada para fazer as medidas.

No capítulo 03, começaremos com uma descrição teórica do efeito de tunelamento, primeiro resolvendo a equação de Schrödinger para um potencial de poço duplo e depois para um potencial do tipo multi-poços quânticos infinito e periódico. Classificaremos os tipos possíveis de tunelamento em uma heteroestrutura com potencial contendo poços e barreiras. Explicaremos como, em heteroestruturas desse tipo, ocorre o aparecimento dos saltos de condutividade diferencial negativa e a formação dos domínios de campo elétrico alto e baixo. Prosseguiremos com a apresentação das medidas feitas de transporte eletrônico na ausência de campo magnético e por fim mostraremos os cálculos teóricos dos efeitos de auto-similaridade.

No capítulo 04, resolveremos a equação de Schrödinger para um material volumétrico, com elétrons livres, sob a ação de um campo magnético e ampliaremos essa solução para o caso de uma seqüência de multi-poços quânticos. A seguir, apresentaremos as medidas de transporte eletrônico na presença de campo magnético. Veremos que para uma tensão fixa correspondente à situação na qual temos dois domínios de campo elétrico coexistindo na estrutura a ação do campo magnético é a de gerar um rearranjo dos domínios de campo elétrico na estrutura. Esse rearranjo dos domínios de campo elétrico produz uma série de saltos e oscilações na corrente de tunelamento, a medida que o campo magnético aumenta. E, para alguns valores de tensão, a mudança nos domínios de campo elétrico, induzida pelo campo magnético, permanece estável mesmo depois de desligado o campo magnético.

No capítulo final serão apresentadas as conclusões de todo o trabalho com as perspectivas de trabalho futuro.

CAPÍTULO 02

DESCRIÇÃO DAS AMOSTRAS

No presente trabalho, foram feitos estudos de transporte eletrônico na presença e na ausência de campo magnético em amostras de multi-poços quânticos quasi-periódicas (segundo a série de Fibonacci). Neste capítulo, serão descritos os parâmetros utilizados no crescimento e na preparação das amostras estudadas.

Todas as amostras foram crescidas utilizando a técnica de epitaxia por feixe molecular, pelos professores Alfredo Gontijo de Oliveira, Marcus Vinícius Baeta Moreira e Wagner Nunes Rodrigues, todos do Departamento de Física da UFMG, sobre um substrato de GaAs crescido na direção (100) dopado com Si (n⁺) a 2 x 10¹⁸ cm⁻³. Sobre esse substrato, primeiramente, foi crescida uma camada "buffer" de GaAs de 1,47 μ m, com dopagem, também em Si, a n⁺ = 2 x 10¹⁸ cm⁻³, a fim de minimizar os defeitos cristalinos gerados por imperfeições e rugosidades no substrato. Logo em seguida, há uma camada de GaAs de 150 nm, com dopagem variando uniformemente de n⁺ = 2 x 10¹⁸ cm⁻³ para n = 1 x 10¹⁶ cm⁻³ e uma camada espaçadora, também de GaAs, de 26 nm de espessura e com dopagem de n = 1 x 10¹⁶ cm⁻³. Todas as dopagens do tipo n e n⁺ são realizadas com Si.

Acima dessas primeiras camadas que formam o contato elétrico do substrato, também conhecido como contato do emissor, cresceu-se a estrutura de multi-poços quânticos utilizando parâmetros que serão descritos logo a seguir. Finalmente, sobre essa estrutura existe uma camada espaçadora de 92 nm de espessura, com dopagem de $n = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; uma camada de GaAs de 150 nm, com dopagem indo de n para $n^+ = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e uma camada de GaAs de 500 nm, com dopagem (n⁺) de 2 x 10¹⁸ cm⁻³. Essas camadas cristalinas crescidas sobre a estrutura de multi-poços quânticos formam o

contato elétrico do topo, ou contato do coletor, da amostra e a dopagem foi toda feita utilizando Si. A Figura (2.1) mostra o diagrama da amostra onde podem ser vistas as camadas dos contatos do substrato e do topo.

Substrato GaAs(100) n+	GaAs Camada Buffer n+	GaAs n+ -> n	GaAs n	Multi-poços GaAs/AlGaAs n = 1 x 10 ¹⁶ cm ⁻³	GaAs n	GaAs n → n+	GaAs n+
	1500 nm	150 nm	26 nm		92 nm	150 nm	500 nm

Para ser observada a formação de domínios de campo elétrico no tunelamento seqüencial ressonante, que será visto com mais detalhes no capítulo seguinte, é necessário que exista uma concentração razoável de portadores de carga livres a fim de que, aplicado um campo elétrico na direção de crescimento da amostra, haja acúmulo de cargas nos poços. Para isso as estruturas de multi-poços quânticos foram dopadas com uma concentração uniforme de Si de 1 x 10^{16} cm⁻³. Os contatos devem ser bons condutores, por isso usamos uma dopagem de Si a 2 x 10^{18} cm⁻³. As camadas com dopagem variável e gradual de n⁺ = 2 x 10^{18} cm⁻³ para n = 1 x 10^{16} cm⁻³ servem para fazer uma transição mais suave entre o substrato altamente dopado e o nível de dopagem da amostra.

A amostra Fibonacci (denominada a partir de agora amostra BH 9916) é formada por camadas alternadas de GaAs e Al_xGa_{1-x}As, onde x = 0,3, superpostas seguindo a série de Fibonacci. Nessa série, temos que o termo de ordem n é definido como sendo $F_n = F_{n-2} + F_{n-1}$, ou seja, um termo da série é obtido pela justaposição dos dois termos precedentes. Os dois primeiros termos podem ser escolhidos de acordo com a conveniência do pesquisador. No presente caso, foram definidos como: $F_1 = A$ e $F_2 = BA$, onde o elemento A representa uma camada de $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ (barreira de potencial) de 10 nm de espessura enquanto que o elemento B indica uma camada de GaAs (poço de potencial) de 6 nm de espessura. Essa escolha inicial levou a uma amostra que possui todos os poços de potencial iguais, mas barreiras que variam sua espessura, ora possuindo largura A (10 nm), ora AA (20 nm).

Foram utilizadas as ligas de GaAs e AlGaAs pois esses dois semicondutores possuem parâmetro de rede praticamente iguais, diferindo um do outro em menos de 0,1 %. Dessa forma, eles permitem o crescimento de heteroestruturas sem grandes perturbações na rede cristalina.

O valor da faixa de energia proibida (ou *gap*) do GaAs [Henning *et al.* (1988)], a 4 K, é de 1,519 *e*V enquanto que o *gap* do Al_xGa_{1-x}As, para essa mesma temperatura, é uma função do valor da concentração do Al, dado por x. A expressão que dá o valor desse *gap* é [Henning *et al.* (1988)]:

$$E_g = 1,519 + 1,314x. \tag{2.1}$$

Portanto, para x = 0.3 ele vale $E_g = 1.913 eV$.

Os valores mais aceitos atualmente para os cálculos de descontinuidade de banda são 60:40, ou seja, 60 % da diferença entre o *gap* do AlGaAs e o *gap* do GaAs está acima do fundo da banda de condução do GaAs enquanto que 40 % da diferença entre os *gaps* está abaixo do topo da banda de valência do GaAs. Assim, subtraindo o valor da energia do *gap* do AlGaAs da energia do *gap* do GaAs, para a amostra considerada, encontramos que a altura das barreiras, na banda de condução, vale $V_b = 237 \text{ meV}$.

Foi crescida uma amostra com seis iterações, geradas a partir da seqüência mostrada na Tabela (2.1). Na Figura (2.2), vemos o gráfico (energia em função da direção de crescimento) do perfil do fundo da banda de condução da estrutura de multi-poços Fibonacci onde foram desconsiderados, por simplicidade de desenho, os efeitos do deslocamento dos portadores de carga, originados pela dopagem, para os poços de potencial. O acúmulo de cargas negativas nos poços faz com que o fundo destes tenha uma curvatura com concavidade negativa enquanto que nas barreiras a curvatura possui concavidade positiva, devido à presença dos doadores ionizados positivamente.

Devido à problemas no momento do crescimento, a amostra não é exatamente essa mostrada aqui. De fato, como veremos no capítulo seguinte, pelo menos duas barreiras de potencial não foram crescidas gerando dois poços de potencial de 22 nm de espessura.

Nº do período	Elementos do período
1 <u>°</u>	Α
2 <u>°</u>	BA
3 <u>°</u>	ABA
4 <u>°</u>	BAABA
5 <u>°</u>	ABABAABA
6 <u>°</u>	BAABAABABAABA

Tabela 2.1 – Elementos da amostra Fibonacci.



Figura 2.2 – Desenho esquemático do fundo da banda de condução da amostra Fibonacci com a separação dos seis períodos e seus termos (A → AlGaAs e B → GaAs).

Foram utilizadas técnicas padrão de fotolitografia na preparação da amostra, fabricando-se estruturas de medida em forma de *mesas* circulares de 150 µm de diâmetro. A metalização e difusão dos contatos deve ser precisa, pois a difusão do ouro e/ou dos outros elementos usados na metalização pode criar pequenos canais de condução, como filetes metálicos dentro da amostra. O tamanho desses aumentam com o tempo de permanência da amostra dentro do forno de difusão e um pequeno erro nesse momento pode levar à formação de filetes que atravessam a amostra de forma a curto-circuitar alguns ou até mesmo todos os poços de potencial. Na evaporação dos metais, na parte de metalização, foram utilizados os metais na proporção indicada por Heime *et al.* (1974), temperatura de 450 °C e tempo de 30 s para a difusão.

A amostra foi ligada a um circuito simples, que consiste essencialmente em uma fonte de tensão ligada à amostra com um amperímetro em série, como é mostrado no desenho esquemático da Figura (2.3). Foram feitos, basicamente, dois tipos de medidas: aplicou-se uma tensão variável na amostra, com e sem a presença de campo magnético, e mediu-se a corrente que passava por essa. No outro tipo de medida foi aplicada uma tensão fixa e mediu-se a variação da corrente devido à variação do campo magnético.



Figura 2.3 – Circuito montado para fazer as medidas.

A fonte utilizada foi uma *Keythley* modelo 230. Essa fonte permite a monitoração da tensão aplicada na amostra, de forma a eliminar a queda de tensão nos fios do circuito. Para tanto, liga-se o circuito nas saídas da fonte e faz-se uma ligação do circuito-sensor da fonte com a amostra. Esse circuito-sensor mede a tensão diretamente na amostra e a ajusta para que a tensão aplicada no circuito seja um pouco maior, de forma a eliminar a interferência do circuito na medida. O amperímetro utilizado também foi da marca *Keythley*, modelo 196. Todas as medidas foram realizadas utilizando o programa de aquisição de dados feito pelo Prof. Elmo S. Alves, do DF-UFMG.

Foi utilizado um sistema da Oxford Instruments, UK, com bobina supercondutora capaz de atingir campos magnéticos de 15 T a 4 K e 17 T a 2 K. A temperatura da amostra pode ser controlada entre 1,5 K e 300 K através de um criostato de temperatura variável montado no interior da bobina supercondutora. Todas as medidas apresentadas neste trabalho foram realizadas em temperaturas baixas, abaixo de 20 K. Apesar de termos observado tunelamento seqüencial a 77 K, temperaturas abaixo de aproximadamente 40 K são necessárias para assegurar que a corrente de tunelamento seja dominante em relação a outros mecanismos de condução como, por exemplo, a emissão termiônica.

CAPÍTULO 03

TRANSPORTE ELETRÔNICO NA AUSÊNCIA DE CAMPO MAGNÉTICO

Neste capítulo, procuraremos entender o transporte eletrônico na direção de crescimento e a estrutura dos níveis quasi-ligados em multi-poços quânticos e super-redes semicondutoras periódicas e também em amostras do tipo Fibonacci. A seguir apresentaremos os resultados experimentais das medidas de transporte elétrico feitas na amostra BH 9916 na ausência de campo magnético.

Começaremos resolvendo a equação de Schrödinger nas seções 3.1 e 3.2, utilizando o desenvolvimento da teoria de acordo com Bastard (1992), para diferentes potenciais, tais como, poço duplo simétrico e multi-poços quânticos num arranjo periódico e infinito, para mostrar os mecanismos do transporte vertical na ausência de campo magnético.

As soluções dos problemas de poços duplos simétricos e de multi-poços quânticos se reduzem a um problema unidimensional, pois os movimentos dos elétrons na direção de crescimento (z) e no plano perpendicular a essa direção são desacoplados e as autoenergias podem ser escritas como:

$$\varepsilon_{\rm n}(z,\vec{k}_{\perp}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} + \varepsilon_{\rm n}(z), \qquad (3.1)$$

onde o termo $\varepsilon_n(z)$ corresponde à energia ligada ao movimento na direção z e k_{\perp}^2 o vetor de onda no plano (x,y).

3.1 - O POÇO DUPLO SIMÉTRICO

Veremos primeiramente o caso de tunelamento de um gás de elétrons, com massa efetiva m*, de um regime quase bi-dimensional para quase bi-dimensional em dois poços de potencial, como mostrado na Figura (3.1), de altura V_b e largura L, separados por uma distância h.



Figura 3.1 – Perfil do fundo da banda de condução da estrutura de poço duplo simétrico na ausência de campo elétrico.

No limite em que $h \rightarrow \infty$, cada poço de potencial possui n ($n \ge 1$) estados ligados duplamente degenerados e o problema se resume em encontrar a solução da equação de Schrödinger para um poço isolado. O número de estados ligados depende dos parâmetros da estrutura (h, L e V_b). As funções de onda que descrevem a partícula nesses estados ligados decaem exponencialmente fora dos poços.

Para h finito, começa a haver uma sobreposição das funções de onda de cada poço, de forma que os níveis de energia vão deixando de ser degenerados. Nesse caso, os autoestados são estados do Hamiltoniano do sistema acoplado e a equação de auto-valores não é mais satisfeita { $H \chi(z - z_2) \neq \epsilon \chi(z - z_2)$ }, onde H é o Hamiltoniano do sistema acoplado e $\chi(z - z_2)$ é auto-função do poço centrado em z_2 .

Para h não muito pequeno, podemos esperar que o acoplamento entre as funções de onda dos estados adjacentes não seja muito forte, de forma que consideraremos, como primeira aproximação [Bastard (1992)], que o Hamiltoniano do sistema seja:

$$H = p_{z}^{2}/2 m^{*} + V_{b}(z - z_{1}) + V_{b}(z - z_{2}), \qquad (3.2)$$

onde

$$V_{b}(z - z_{i}) = \begin{cases} 0 & \text{para} & |z - z_{i}| \ge L/2 \\ -V_{b} & \text{para} & |z - z_{i}| \le L/2 \end{cases} \quad i = 1, 2.$$
(3.3)

A solução exata da equação de Schrödinger para o Hamiltoniano dado por (3.2) pode ser escrita como uma combinação das autofunções dos poços isolados. Para o nível fundamental temos:

$$\Psi(z) = \alpha \chi_1(z - z_1) + \beta \chi_1(z - z_2). \tag{3.4}$$

Tomando o produto interno dessas autofunções e fazendo as substituições

$$r = \langle \chi_{1}(z - z_{1}) | \chi_{1}(z - z_{2}) \rangle$$

$$s = \langle \chi_{1}(z - z_{1}) | V_{b}(z - z_{2}) | \chi_{1}(z - z_{1}) \rangle$$

$$t = \langle \chi_{1}(z - z_{1}) | V_{b}(z - z_{1}) | \chi_{1}(z - z_{2}) \rangle,$$

(3.5)

obtemos a equação matricial:

$$\begin{bmatrix} E_1 + s - \varepsilon & (E_1 - \varepsilon)r + t \\ (E_1 - \varepsilon)r + t & E_1 + s - \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = 0, \qquad (3.6)$$

ou

$$\varepsilon = E_1 \mp t + s, \tag{3.7}$$

onde desconsideramos o termo r, também chamado de integral de superposição, para simplificar os cálculos. Mais tarde veremos que, no nosso caso, a desconsideração desse termo nos leva a uma boa aproximação. A grandeza E_1 é a energia do nível fundamental para o poço isolado e ϵ é a auto-energia do nível fundamental do poço duplo simétrico. Os termos t e s são chamados de integrais de transferência e deslocamento, respectivamente. A integral s representa o deslocamento que o nível sofre devido à presença do poço adjacente. Esse termo não levanta a dupla degenerescência que vemos no caso de h infinito. Como mostra a equação (3.7), o levantamento da degenerescência é devido à integral de transferência.

Para encontrarmos o nível fundamental do poço duplo, temos a combinação simétrica na equação (3.6) e $\alpha = \beta$, enquanto que no primeiro nível excitado temos a combinação anti-simétrica, $\alpha = -\beta$.

Chegamos então à solução do problema do poço duplo simétrico, onde as autoenergias são as soluções da equação:

 $\xi = \frac{k_b}{k_w}, \qquad k_b = \sqrt{\frac{-2m^*\varepsilon}{\hbar^2}} \qquad e \quad k_w = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(\varepsilon + V_b)}.$

$$2\cos(k_{w}L) + \left(\xi - \frac{1}{\xi}\right) \operatorname{sen}(k_{w}L) \pm \left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) e^{-k_{b}h} \operatorname{sen}(k_{w}L) = 0, \qquad (3.8)$$

onde

3.2 – Seqüencia de Multi-Poços Quânticos

Resolvido o problema para o poço duplo simétrico, vamos agora encontrar as autoenergias para uma seqüência de multi-poços quânticos periódicos com poços de largura L, barreiras de espessura h e, conseqüentemente, período d = L + h. O potencial dessa estrutura é da forma:

$$V_b(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_b(z - nd)$$
(3.10)

onde

$$V_{b}(z - nd) = \begin{cases} 0 & para \\ -V_{b} & para \end{cases} \begin{vmatrix} z - nd \end{vmatrix} > L/2 \\ |z - nd| \le L/2 \end{cases}.$$
(3.11)

Vamos, primeiro, procurar as soluções da equação de Schrödinger para energias positivas $\varepsilon > 0$, depois estenderemos a solução para o caso em que $\varepsilon < 0$. As soluções neste caso são bem conhecidas em cada camada e são dadas por:

$$\chi(z) = \alpha \exp[ik_w(z - nd)] + \beta \exp[-ik_w(z - nd)], \quad \text{no poço e}$$
(3.12)

$$\chi(z) = \gamma \exp[ik_b(z - nd - d/2)] + \delta \exp[-ik_b(z - nd - d/2)], \text{ na barreira,}$$
(3.13)

$$k_{b} = \sqrt{\frac{2m * \varepsilon}{\hbar^{2}}} \qquad e \quad k_{w} = \sqrt{\frac{2m *}{\hbar^{2}}(\varepsilon + V_{b})}.$$
(3.14)

onde

As funções $\chi_q(z)$ devem, também, obedecer o teorema de Bloch-Floquet:

(3.9)

e

$$T_{nd} \chi_q(z) = \chi_q(z + nd) = \exp[iqnd] \chi_q(z)$$
(3.15)

$$\chi_q(z) = u_q(z) \exp[iqz]; u_q(z+d) = u_q(z),$$
 (3.16)

onde T_d é o operador translação, $T_d f(z) = f(z + d)$.

Vamos trabalhar com um cristal de tamanho Nd, onde N é um número inteiro, e impor condições de contorno periódicas de tal forma que tenhamos $\chi_q(z + Nd) = \chi_q(z)$. Dessa forma, usando o teorema de Bloch, encontramos que qNd = $2\pi p$, com p inteiro. Ou seja, q é real e discreto, sendo $2\pi/Nd$ o espaçamento entre dois valores consecutivos. Fica assim definido o espaço dos vetores q, que é chamado *espaço recíproco*. O segmento [$-\pi/d$, π/d [, no espaço recíproco, é conhecido como *primeira zona de Brillouin*.

As funções χ_q devem ser contínuas, assim como a sua primeira derivada. Dessa forma, na interface entre um poço e uma barreira, temos:

$$\alpha \exp[ik_{\rm w}L/2] + \beta \exp[-ik_{\rm w}L/2] = \gamma \exp[-ik_{\rm b}h/2] + \delta \exp[ik_{\rm b}h/2]$$
(3.17a)

$$ik_{w}\{\alpha \exp[ik_{w}L/2] - \beta \exp[-ik_{w}L/2]\} = ik_{b}\{\gamma \exp[-ik_{b}h/2] - \delta \exp[ik_{b}h/2]\}$$
 (3.17b)

Na interface entre uma barreira e um poço, temos:

$$\chi_{q}[z = (n+1)d - L/2] = \gamma \exp[ik_{b}h/2] + \delta \exp[-ik_{b}h/2]$$
(3.18)

Usando novamente o teorema de Bloch podemos reescrever $\chi_q[z = (n + 1)d - L/2]$ como:

$$\chi_{q}[z = (n+1)d - L/2] = \exp[iqd] \chi_{q}[z = nd - L/2].$$
(3.19)

Prosseguindo com os cálculos para as derivadas, chegamos a um sistema de quatro equações e quatro incógnitas (α , β , γ , δ), que admite solução não trivial se a equação abaixo for satisfeita:

$$\cos(qd) = \cos(k_w L)\cos(k_b h) - \frac{1}{2} \left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) \sin(k_w L)\sin(k_b h)$$
(3.20)

onde

$$\xi = k_b / k_w. \tag{3.21}$$

Consideramos acima apenas a situação em que temos estados propagantes, com energias acima do topo da barreira ($\epsilon \ge 0$). Assim, a equação (3.20) nos fornece os níveis dos estados virtuais dessa heteroestrutura. Porém, os estados que nos interessam mais são os estados de partícula quase-ligada em que $-V_b \le \epsilon \le 0$. Nesse caso, as funções de onda são evanescentes na barreira e basta fazer as substituições:

$$k_b \rightarrow i\kappa_b$$
, $\operatorname{com} \kappa_b = \sqrt{\frac{-2m^*\varepsilon}{\hbar^2}}; \quad \xi \rightarrow i\zeta, \quad \operatorname{com} \zeta = \kappa_b/k_w$ (3.22)

na equação (3.20) e ela fica:

$$\cos(qd) = \cos(k_w L)\cosh(\kappa_b h) - \frac{1}{2} \left(\zeta + \frac{1}{\zeta}\right) \operatorname{sen}(k_w L)\operatorname{senh}(\kappa_b h).$$
(3.23)

Podemos notar que a equação (3.23) diverge de forma exponencial com o aumento de h $(e^{\kappa_b h})$. Para manter a convergência da solução, devemos ter que os coeficientes que multiplicam esses termos zerem, o que ocorre quando:

$$\cos(\mathbf{k}_{w}\mathbf{L}) - \frac{1}{2} \left[-\zeta + \frac{1}{\zeta} \right] \operatorname{sen}(\mathbf{k}_{w}\mathbf{L}) = 0.$$
(3.24)

A equação (3.24) é a mesma que nos dá os valores dos níveis de energia do poço simples quadrado. Assim, chegamos à conclusão que os níveis de energia da estrutura de multi-poços quânticos são uma hibridização dos níveis de energia do poço isolado. Esses níveis hibridizados formam minibandas de energia quando a superposição das funções de onda de cada poço através da barreira finita é muito grande.

A equação (3.23) fornece uma relação implícita entre os níveis de energia dos estados permitidos no poço e os parâmetros da amostra. No intervalo [-1,1], o lado direito dessa equação, $F(\varepsilon) = \cos(k_w L)\cosh(\kappa_b h) - \frac{1}{2}\left(\zeta + \frac{1}{\zeta}\right) \operatorname{sen}(k_w L)\operatorname{senh}(\kappa_b h)$, mostra os estados permitidos para a estrutura de multi-poços quânticos, pois é igual a $\cos(qd)$. As Figuras (3.2) e (3.3) mostram a função $F(\varepsilon)$ para uma estrutura com os seguintes parâmetros: largura da barreira, h = 5 nm; largura do poço, L = 15 nm; massa efetiva nas barreiras e nos poços iguais a m* = 0,067m_0; e altura da barreira, $V_b = 400 \text{ meV}$. A

Figura (3.2) mostra o gráfico da função $F(\varepsilon)$ em função da energia do elétron, ε , como um todo e a Figura (3.3) mostra o detalhe da mesma função no intervalo -1 < $F(\varepsilon)$ < 1.



Figura 3.2 – Gráfico do lado direito da equação (3.23) para barreiras de altura $V_b = 0,4 eV$, m* = 0,067m₀, L = 15 nm e h = 5 nm.



Figura 3.3 – Detalhe da Figura 3.2 mostrando os estados permitidos para a mesma super-rede.

Para a situação mostrada acima, Figuras (3.2) e (3.3) os poços da estrutura de multi-poços quânticos possuem quatro níveis de energia permitidos. A inclinação das curvas indica as larguras desses níveis de energia, pois delimitam uma faixa de energia permitida para o elétron na estrutura.

Na amostra estudada, onde $V_b = 237 \text{ meV}$, $m^*_b = 0,092 \text{ m}_0$, $m^*_p = 0,067 \text{ m}_0$, L = 6 nm e h = 16 nm (média da largura das barreiras na aproximação para uma estrutura periódica), o gráfico de $F(\varepsilon)$ como função da energia apresenta apenas dois níveis ligados, como pode ser visto na Figura (3.4).



Figura 3.4 - Gráfico de F(ɛ) para a estrutura estudada, numa aproximação de estrutura periódica.

3.3 - EFEITOS DE AUTO-SIMILARIDADE

A amostra BH9916, cuja curva característica corrente-tensão será analisada na seção seguinte, é uma estrutura de multi-poços quânticos crescida segundo uma seqüência de Fibonacci. No entanto, o comportamento elétrico dessa amostra, sob um campo elétrico aplicado na direção de crescimento da amostra, é exatamente o comportamento esperado de uma estrutura de multi-poços quânticos periódica. Conforme mostraremos a seguir, tal observação decorre do fato de não termos resolução experimental suficiente para observarmos efeitos de auto-similaridade.

A auto-similaridade pode ser entendida como uma similaridade das propriedades do sistema a diferentes escalas de comprimento [Toet *et al.* (1991)]. Ou seja, se fizermos uma ampliação em uma região onde observamos algumas propriedades, continuaremos a ver as mesmas propriedades de acordo com uma regra de escala.

Para verificar os possíveis efeitos de auto-similaridade em uma estrutura de multipoços quânticos quasi-periódica foi utilizado o programa em Fortran do Prof. Luiz A. Cury do Departamento de Física da UFMG. Esse programa utiliza o formalismo de matriz transferência para calcular os níveis de energia de uma estrutura de multi-poços quânticos na ausência e na presença de campo elétrico aplicado [Cury (1987)]. Para cada valor da energia do elétron incidente o programa calcula o coeficiente de transmissão. Quando essa energia corresponde à energia de um dos níveis quase-ligados o coeficiente de transmissão atinge um máximo.



Figura 3.5 – Gráfico do logaritmo natural do coeficiente de transmissão em função da energia, medida a partir do fundo da banda de condução, para a amostra nominal BH9916. No detalhe uma ampliação na região do primeiro nível excitado.

A Figura (3.5) mostra o logaritmo natural do coeficiente de transmissão por energia do elétron incidente. Os dois picos da curva mostrada correspondem aos níveis de estado quase-ligado da estrutura. Note que a diferença em energia entre o primeiro nível excitado e o nível fundamental vale $\Delta E = (140 \pm 5) \text{ meV}$, exatamente o mesmo valor que obtivemos anteriormente para o cálculo considerando a estrutura como periódica. Podemos notar que o segundo pico, equivalente ao primeiro nível excitado, está dividido em três pequenos picos. A diferença de energia entre esses três picos vale $\Delta E_p = (2,7 \pm 0,2) \text{ meV}$. Uma ampliação dessa região nos mostra que cada pequeno pico desses também está dividido em três outros picos, separados por uma energia ainda menor. Devido ao fato de que a amostra é finita, tem apenas seis iterações, chegamos a um limite de ampliação em que não observamos mais divisões de um pico em outros três picos. O número total de picos no coeficiente de transmissão para cada um dos níveis de energia quase-ligados, depois de chegado ao limite de ampliação, corresponde ao número total de poços. No limite em que temos uma amostra infinita, poderíamos ampliar quantas vezes quisermos que sempre encontraremos cada um dos picos no coeficiente de transmissão se dividindo em outros três picos. No caso do primeiro pico, não observamos nenhuma divisão, pois a largura deste é praticamente nula, já que a interação entre os poços de potencial da estrutura é muito pequena, e todos os picos estão sobrepostos.

O efeito de auto-similaridade seria observado no gráfico corrente por tensão de uma amostra de multi-poços quânticos com seqüência de poços e barreiras ordenada conforme uma seqüência Fibonacci, como a amostra BH9916, como outros saltos entre duas regiões de condutividade diferencial negativa. Aumentando-se a resolução, espera-se observar a sub-divisão desses três saltos em outros três saltos de corrente e assim por diante. No entanto, esse comportamento não é observado na amostra BH9916. Uma análise cuidadosa de cada uma das regiões entre dois saltos de condutividade diferencial negativa na região do platô de corrente não mostrou evidência inequívoca de comportamento de auto-similaridade na amostra BH9916. Esse resultado negativo pode ser explicado pelo pequeno espaçamento previsto teoricamente entre esses sub-níveis auto-similares e pela flutuação de ruído nas medidas. Para observar claramente esses sub-níveis de energia, a resolução necessária deveria ser melhor que 1 meV, exatamente o nosso limite experimental no momento e o sistema deveria ser perfeitamente aterrado, utilizando, inclusive, fonte de tensão contínua que não estivesse ligada à rede de energia para evitar os ruídos.

Para facilitar a observação de efeitos de auto-similaridade em amostras de multipoços quânticos tipo Fibonacci devemos ter uma amostra que maximize a distância entre os picos no gráfico do coeficiente de transmissão. Uma amostra desse tipo pode ser facilmente projetada utilizando o mesmo programa para o cálculo do coeficiente de transmissão mencionado acima.

A Figura (3.6) mostra o cálculo feito para construir tal amostra.



Figura 3.6 – Gráfico do logaritmo natural do coeficiente de transmissão por energia para uma amostra de multi-poços quânticos construída segundo a seqüência de Fibonacci, com unidade básica de barreira com largura de 5 nm e poços com largura de 7 nm.

A amostra da Figura (3.6) foi projetada com a restrição de que a largura mínima da barreira deveria ser de 5 nm, para garantir o regime de tunelamento seqüencial. O resultado é uma distância em energia entre os níveis auto-similares de (8 ± 2) meV, para uma amostra com unidade básica da barreira com largura nominal de 5 nm e poços com largura de 7 nm.

As medidas em amostras com essas características serão feitas *a posteriori*, numa seqüência deste trabalho. Serão preparadas, também, amostras periódicas e aperiódicas para comparação dos dados. Pretendemos, com isso, obter as informações sobre o comportamento auto-similar das amostras quase-periódicas tipo Fibonacci.

No próximo capítulo, analisaremos o tunelamento seqüencial ressonante sob a ação de um campo magnético perpendicular à corrente elétrica e veremos que os fenômenos observados podem ser explicados pelo rearranjo dos domínios de campo elétrico alto e baixo devido a ação do campo magnético nos níveis de energia dos poços de potencial.

Trataremos, agora, dos resultados das medidas de corrente versus tensão na ausência de campo magnético.

3.4 - TUNELAMENTO SEQÜENCIAL RESSONANTE

Quando as barreiras de uma super-rede são suficientemente estreitas, as funções de onda nos poços interagem de forma significativa, produzindo minibandas de energia que se estendem por toda a estrutura. Os estados eletrônicos são delocalizados e são os mesmos em todos os poços. Dessa forma, os elétrons podem atravessar toda a amostra com o mesmo vetor de onda. Esse caso é geralmente conhecido como *Tunelamento por Minibandas* ou *Tunelamento Coerente*.

No caso em que temos barreiras largas (que aceitamos como sendo ≥ 5 nm), de forma que podemos negligenciar a interação entre funções de ondas de poços adjacentes para níveis de menor energia, a probabilidade de espalhamento é grande em relação à probabilidade de tunelamento. O elétron sofre espalhamento durante o processo de tunelamento e este é dito incoerente ou seqüencial, nesse caso podemos ter duas situações:

- Condução Assistido por Fônons ou Tunelamento Seqüencial Não-Ressonante: Devido ao campo elétrico aplicado na estrutura, os níveis dos poços estão desacoplados e o elétron precisa absorver ou emitir um fônon para tunelar de um poço para o outro.
- II) Tunelamento Seqüencial Ressonante: O elétron tunela de um poço para o outro sem perda ou ganho de energia, sofrendo um espalhamento elástico durante o processo de tunelamento. Esse caso ocorre quando temos os níveis de energia dos poços vizinhos acoplados ressonantemente.

As estruturas com barreiras largas são conhecidas como *Estruturas de Multi-Poços Quânticos* (MPQ) e podem ser modeladas a partir de um poço quântico isolado.

Não existe um valor fixo de largura da barreira de forma que possamos dizer que esse é o limite em que passamos de um regime de tunelamento coerente para outro regime de tunelamento. Para se ter uma idéia, Maan (1987) sugere que uma barreira pode ser considerada fina quando o comprimento de penetração da função de onda do elétron nesta, estimado por $(2m*V_b/\hbar^2)^{1/2}$, é menor que o período da super-rede. Segundo esse critério, um período com comprimento menor que 10 nm já é suficiente para ser observado condução por minibandas. Já Grahn *et al.* (1991) observaram condução por tunelamento seqüencial em uma estrutura com barreiras de 4 nm enquanto que Aguado e Platero (1998) calcularam o tunelamento seqüencial em uma estrutura com espessura de barreiras iguais a 5 nm.

No entanto, mesmo em estruturas com barreiras finas podemos ter tunelamento seqüencial, incoerente, quando o campo elétrico aplicado na estrutura é forte o suficiente para desacoplar os níveis de energia de poços vizinhos. Nesse caso, as minibandas quase-tridimensionais se tornam sub-bandas bidimensionais localizadas nos poços de potencial.

Quando a estrutura é dopada, a curva característica corrente-tensão de tunelamento seqüencial ressonante na ausência de campo magnético mostra uma seqüência de degraus e platôs. O surgimento desses degraus e platôs se deve à formação de domínios de campo elétrico na estrutura devido ao acúmulo de cargas, provenientes da dopagem e da tensão aplicada na amostra, nos poços de potencial. Nos platôs, observam-se saltos de condutividade diferencial negativa que correspondem ao rearranjo do campo elétrico na estrutura quando a tensão aplicada aumenta.

A Figura (3.7), retirada de Grahn (1991), mostra a curva característica corrente *versus* tensão de uma super-rede periódica. Na parte (a) dessa figura vemos a medida feita em uma super-rede não dopada e em (b) a medida feita em uma super-rede dopada com Si a 3×10^{17} cm⁻³. O suplemento da figura mostra o esquema da configuração do potencial da estrutura sob os regimes dos campos elétricos alto e baixo.



Figura 3.7 – Característica corrente-tensão de uma super-rede periódica de GaAs/AlAs (a) não dopada e (b) de uma super-rede periódica dopada com Si a 3 x 10¹⁷ cm⁻³ [Grahn (1991)].

Essa figura mostra que, na ausência de dopagem, o nível de Fermi se encontra muito abaixo do nível fundamental dos poços de potencial, dessa forma, o campo elétrico aplicado na amostra, necessário para que a estrutura comece a conduzir, deve ser alto o suficiente de forma que o nível de Fermi se iguale ao nível fundamental. Porém, quando esses dois níveis de energia se iqualam a estrutura de multi-poços quânticos já está toda no domínio de campo elétrico alto.

Para entendermos melhor esse gráfico, vamos utilizar o esquema da Figura (3.8). Esse desenho mostra uma sucessão de poços quânticos de largura L, igualmente espaçados por barreiras de largura h por simplicidade de desenho.

Cada um dos gráficos, de (a) até (e), da Figura (3.8) têm como eixo vertical a energia e como eixo horizontal a direção de crescimento.



Figura 3.8 – Desenho esquemático do rearranjo do campo elétrico numa super-rede periódica.

À medida que a tensão aplicada na super-rede aumenta a partir de zero (a), o potencial da estrutura passa a depender linearmente, em primeira aproximação, do campo elétrico e da coordenada z. O Hamiltoniano do sistema passa a ser escrito da forma: $H = H_0 + eFz$, onde H_0 é o Hamiltoniano do sistema na ausência de campo elétrico e F é o campo elétrico aplicado. Nesse momento, mostrado esquematicamente em (b), os elétrons começam a tunelar do nível fundamental de um poço para o nível fundamental do poço adjacente ficando um certo tempo em cada poço de forma que o vetor de onda do elétron não é mais o mesmo que ele possuía quando estava no poço anterior.

Eventualmente, essa corrente de tunelamento, do nível fundamental de um poço para o nível fundamental do poço vizinho, satura e inicia-se a formação de um domínio de campo elétrico alto, como mostrado em (c). Nos poços de potencial dentro do domínio de campo elétrico alto, a condução elétrica ocorre via tunelamento do nível fundamental de um poço para o primeiro nível excitado do poço seguinte relaxando a energia para o nível fundamental deste e seguindo em frente com o processo de tunelamento.

Quanto mais o campo elétrico aplicado aumenta, mais poços entram para o domínio de campo elétrico alto, como mostrado em (d) e (e). A corrente não aumenta, dando origem a um platô de corrente constante, porque o ponto onde ocorre a transição de região de campo elétrico baixo para a região de campo elétrico alto se comporta como uma barreira limitando a corrente máxima que percorre a estrutura [Grahn (1991)]. Cada poço que muda de regime provoca um salto de condutividade diferencial negativa no gráfico corrente *versus* tensão. Esses saltos de condutividade podem ser vistos claramente na Figura (3.7). Por fim, toda a super-rede está conduzindo no regime de campo elétrico alto e a corrente de tunelamento pode crescer novamente sem que haja saltos na corrente, até que o processo de tunelamento comece a envolver o segundo nível excitado de cada poço.

A Figura (3.9) mostra a curva característica para a amostra BH9916, descrita no capítulo 2, na qual a largura nominal dos poços é L = 6 nm, as barreiras têm unidade básica A de largura nominal igual a 10 nm, e concentração de alumínio é x = 0,3 no Al_xGa_{1-x}As.



Figura 3.9 – Característica corrente-tensão da amostra investigada neste trabalho.

Aumentando a resolução da medida de corrente e limitando a varredura da tensão, podemos observar claramente o platô de corrente e os saltos de condutividade diferencial negativa, como pode ser observado na Figura (3.10).



Figura 3.10 – Característica corrente-tensão da amostra de multi-poços quânticos de GaAs/AlGaAs investigada neste trabalho, mostrando o platô de corrente e os saltos de condutividade diferencial negativa.

No gráfico da Figura (3.10) a região (b) corresponde à região de tunelamento de nível fundamental para nível fundamental. No ponto (c) ocorre a primeira transição de um poço para domínio de campo elétrico alto.

Cada trecho entre dois saltos de condutividade diferencial negativa, vide Figura (3.7 e 3.10), corresponde a uma diferença de energia equivalente à diferença em energia do primeiro estado excitado com o nível fundamental. No nosso caso, esse valor é de $\Delta E = (137 \pm 8) \text{ meV}$ e foi determinado a partir dos dados apresentados na Figura (3.10), ou seja, pela distância, em tensão, entre dois saltos de condutividade diferencial negativa. O cálculo teórico para a aproximação de estrutura periódica, realizado conforme descrito na seção 3.2 para uma estrutura tipo multi-poços quânticos infinita, nos dá um valor de $\Delta E = (140 \pm 5) \text{ meV}$. Para esse cálculo, consideramos uma estrutura com largura nominal dos poços igual a 6 nm e largura nominal das barreiras igual a 16 nm, que é uma média ponderada da largura das barreiras da amostra BH9916. A pequena diferença entre o valor calculado e o valor experimental pode ser atribuída à incerteza nos parâmetros de crescimento da amostra.

Os dois saltos de condutividade diferencial negativa indicados pelas setas verticais (1) e (2) na Figura (3.10) destoam dos outros saltos de corrente da curva característica da amostra, devido aos seus tamanhos diminutos. Esses dois saltos correspondem a uma diferença de energia de, aproximadamente, (30 ± 5) meV ao invés de um valor em torno de 140 meV. A princípio, esses saltos de pequena energia poderiam ser atribuídos a tunelamento assistido por fônons ópticos, cujas energias, são 35 meV para o GaAs e 40 meV para o AlGaAs, conforme Adachi (1985). Porém, devido à repetição desses saltos de pequena energia sempre, e apenas, nos mesmos valores de tensão, conforme mostra a Figura (3.11), podemos supor que, na verdade, se tratam de dois poços com espessura maior que a espessura nominal.



Figura 3.11 – Característica corrente-tensão da amostra investigada mostrando a ocorrência dos saltos equivalentes a dois poços de 22 nm, indicados pelas setas. Os gráficos estão deslocados de 50 e 100 nA, respectivamente, para melhor visualização.

De acordo com o relato de Rodrigues (2003), na ocasião do crescimento da amostra BH9916, o obturador do forno de alumínio do equipamento de MBE utilizado, em alguns momentos não abria. Caso isso tenha acontecido realmente em algum momento durante o crescimento da amostra BH9916, uma barreira deixaria de ser crescida entre dois poços, gerando em conseqüência um único poço com 22 nm de largura, ao invés de dois poços de 6 nm de largura cada um separados por uma barreira de 10 nm de largura.

A Figura (3.12) mostra o gráfico para o cálculo dos níveis de energia de um poço com 22 nm de largura. A diferença de energia do primeiro estado excitado para o nível fundamental é nesse caso é de 30 m*e*V, em excelente concordância com as medidas experimentais. Nossa hipótese é, portanto, que a amostra BH9916 possui dois poços de potencial com largura de 22 nm, devido aos problemas ocorridos durante o seu crescimento.



Figura 3.12 – Gráfico da equação 3.23 para uma estrutura de multi-poços quânticos periódica com largura dos poços de 22 nm.

CAPÍTULO 04

TRANSPORTE ELETRÔNICO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO

4.1 – CAMPO MAGNÉTICO PERPENDICULAR À DIREÇÃO DE CRESCIMENTO

Veremos agora a solução da equação de Schrödinger em um material volumétrico na presença de um campo magnético e estenderemos esse resultado para o caso do campo aplicado em uma seqüência de multi-poços quânticos. Essa será a base teórica necessária para construirmos a explicação das medidas com campo magnético aplicado na direção perpendicular à direção de crescimento da amostra.

Vamos, primeiramente, considerar o campo magnético aplicado na direção z de um cristal volumétrico como, por exemplo, GaAs. Assim, ele pode ser escrito na forma: $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. O potencial vetor, $\mathbf{A} = \nabla \mathbf{x} \mathbf{B}$, pode ser escolhido para ser da forma: $\mathbf{A} = (-\mathbf{y}\mathbf{B}, 0, 0)$. Na aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano em tal situação fica:

$$H = (\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 / 2m^* = [(P_x + yeB)^2 + P_y^2 + P_z^2] / 2m^*$$
(4.1)

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}^*} \nabla^2 + \frac{(e\mathbf{y}\mathbf{B})^2}{2\mathbf{m}^*} - \frac{ie\hbar\mathbf{y}\mathbf{B}}{\mathbf{m}^*} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \qquad (4.2)$$

que é o Hamiltoniano do elétron livre sob influência de um campo magnético.

Partindo da expressão (4.1) podemos mostrar que P_x e P_z comutam com H. Dessa forma podemos construir um conjunto completo de autovetores comuns a H, P_x e P_z [Ballentine (2000)]. Assim podemos escrever a equação de autovalor $H\Psi = E\Psi$, onde a autofunção $\Psi(x, y, z)$ é também autofunção de P_x e P_z e é da forma:

ou

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \exp[i(\mathbf{k}_{\mathbf{x}}\mathbf{x} + \mathbf{k}_{\mathbf{z}}\mathbf{z})]\phi(\mathbf{y}). \tag{4.3}$$

Substituindo a expressão (4.3) na equação de autovalor, obtemos uma equação diferencial para $\phi(y)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + \frac{\hbar eBk_x}{m^*}y\varphi(y) + \left[\frac{e^2B^2}{2m^*}y^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_z^2) - E\right]\varphi(y) = 0.$$
(4.4)

Fazendo uma translação em y' = y + y₀, onde y₀ = $-\hbar k_x/eB$, chegamos a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\varphi(y')}{dy^2} + \frac{m^*\omega_c^2}{2}y'^2\,\varphi(y') = E'\varphi(y')\,,\tag{4.5}$$

onde chamamos $\omega_c = eB/m^*$, a freqüência de cíclotron, e E' = E - $\hbar^2 k_z/2m^*$.

A equação (4.5) é a equação para o oscilador harmônico [Cohen-Tannoudji (1977)] cujas autoenergias são dadas por E' = $(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$. Dessa forma, as energias permitidas para o elétron sob a ação de um campo magnético são:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + (n + 1/2)\hbar\omega_c.$$
(4.6)

e as autofunções são dadas por [Neves (1996)]:

$$\Psi(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = e^{i(\mathbf{k}_{\mathbf{x}}\mathbf{x}+\mathbf{k}_{\mathbf{z}}\mathbf{z})} \sqrt[4]{\frac{eB}{\hbar}} \frac{e^{\frac{-eB}{2\hbar}\mathbf{y}^{2}}}{\sqrt{2^{n}n!\sqrt{\pi}}} H_{n}\left(\sqrt{\frac{eB}{\hbar}}\mathbf{y}'\right), \tag{4.7}$$

onde H_n (x) são os polinômios de Hermite dados por:

$$H_{n}(x) = (-1)^{x} e^{x^{2}} \frac{d^{n} e^{x^{2}}}{dx^{n}}$$
(4.8)

e centrados em $y_0 = -\hbar k_x/eB$.

Podemos ver através de (4.6) que o campo magnético quantiza o movimento do elétron no plano perpendicular à direção em que está sendo aplicado, enquanto que nesta direção o elétron se comporta como um elétron livre. Classicamente falando, o elétron descreve órbitas circulares no plano xy. Para entendermos a visão quântica do fenômeno vamos utilizar os operadores das coordenadas do centro das órbitas, que podem ser escritas em termos dos operadores *posição do centro da órbita* e *velocidade*, como [Ballentine (2000)]:

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{Q}_{\mathrm{x}} + \mathbf{V}_{\mathrm{y}}/\omega_{\mathrm{c}} \quad \mathbf{e} \quad \mathbf{Y}_0 = \mathbf{Q}_{\mathrm{y}} - \mathbf{V}_{\mathrm{x}}/\omega_{\mathrm{c}}. \tag{4.9}$$

Podemos verificar, utilizando a relação de comutação entre os operadores posição e velocidade, $[Q_{\alpha}, V_{\beta}] = \delta_{\alpha\beta} i\hbar/m^*$, e a relação de comutação entre os operadores velocidade, $[V_{\alpha}, V_{\beta}] = 0$, que o comutador dos operadores (4.9) com o Hamiltoniano (4.2) é igual a zero, enquanto que os operadores X_0 e Y_0 não comutam entre si. Ou seja, só podemos construir autofunções que definam os centros das órbitas apenas para uma das coordenadas.

Estendendo esse resultado para o caso em que o elétron está sob a ação de um potencial confinante V(z), do tipo de multi-poços quânticos dado por (3.10), as autoenergias passam a ser dadas por:

$$E_{i,N} = \varepsilon_i + (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$$
, com $N = 0, 1, 2,$ (4.10)

onde ε_i são os níveis quase-ligados dados pela solução de (3.23). Nesse caso o movimento do elétron é totalmente quantizado. Na direção z, pelo potencial V(z), e no plano xy, pelo campo magnético aplicado.

Para o caso de uma estrutura de multi-poços quânticos descrita pelo potencial V(z) da equação (3.10), sob a ação de um campo magnético aplicado perpendicular à direção de crescimento da amostra, ou seja, a direção do campo magnético é paralela ao plano dos poços de potencial, direção x por exemplo, a equação de Schrödinger não possui solução analítica. Podemos usar uma aproximação de campo magnético pequeno e resolver o problema tratando o campo magnético como uma perturbação em cada poço isoladamente. Essa aproximação é válida quando a energia de confinamento do elétron é muito maior que a energia de cíclotron. Ando (1975) e Beinvogl *et al.* (1976), usando esse formalismo, encontraram os valores para as autoenergias, em primeira ordem. Considerando o campo magnético ao longo da direção x, $\mathbf{B} = (\mathbf{B}, 0, 0)$, com o potencial vetor no calibre de Landau, $\mathbf{A} = (0, -z\mathbf{B}, 0)$ e chamando o potencial dos poços quânticos V(z), as autoenergias do Hamiltoniano H = $(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2/2\mathbf{m}^* + \mathbf{V}(z)$ são

$$E_{i}(B) = \varepsilon_{i}(0) + \frac{e^{2}B^{2}}{2m^{*}} \left(\left\langle z^{2} \right\rangle_{i} - \left\langle z \right\rangle_{i}^{2} \right) + \frac{1}{2m^{*}} \left(\hbar k_{y} + eB \left\langle z \right\rangle_{i}^{2} \right)^{2} + \frac{\hbar^{2}k_{x}^{2}}{2m^{*}}, \qquad (4.11)$$

onde $\langle z^2 \rangle_i$ é o valor médio de z^2 e $\langle z \rangle_i$ o valor médio de z para a função de onda não perturbada da i-ésima subbanda dos poços. Dessa forma, o campo magnético, que está na direção x, afeta os níveis de energia gerados pelo potencial confinante V(z). O primeiro termo do lado direito da equação (4.11) é o nível de energia ε_i devido ao confinamento das barreiras de potencial. O segundo termo, chamado usualmente de desvio diamagnético, desvia cada nível de energia, no eixo da energia, por um fator proporcional a B² e a $\langle \Delta z^2 \rangle_{i, n} = \langle z^2 \rangle_{i, n} - \langle z \rangle_{i, n}^2$. O terceiro termo introduz uma dependência parabólica em k_y, com o centro das parábolas deslocadas por $-eB \langle z_i \rangle /\hbar$ na direção de k_y.



Figura 4.1 – Relação de dispersão dos dois primeiros níveis de energia na ausência de campo magnético (pontilhado) e com um campo magnético aplicado na direção x (linhas sólidas). Repare no deslocamento em k_y devido à presença do campo magnético. A energia de Fermi está indicada por E_r. Figura baseada em Beinvogl *et al.* (1974).

A Figura (4.1) mostra o deslocamento com o campo magnético do nível fundamental de um poço em relação ao primeiro nível excitado do mesmo ou de outro poço, de acordo com a equação (4.11).

4.2 – Resultados Experimentais

Agora que vimos na teoria o comportamento da estrutura de multi-poços sob a ação do campo magnético, vamos partir para os resultados experimentais. Na Figura (4.2) vemos as medidas de corrente de tunelamento para o campo magnético de intensidade de 5 T, aplicado perpendicularmente à direção de crescimento, através da estrutura de multi-poços quânticos estudada neste trabalho.



Figura 4.2 – Corrente de tunelamento *versus* tensão aplicada para a amostra BH9916, na ausência de campo magnético e com um campo de 5 T perpendicular à direção de crescimento.

Podemos ver na Figura (4.2) a ação do campo magnético no sentido de aumentar a corrente máxima antes que cada poço de potencial entre no regime de campo elétrico alto e de deslocar cada salto de condutividade diferencial negativa para tensões mais altas.

Como indicado na equação (4.11), o campo magnético desloca os níveis de energia. A Figura (4.3) pode nos mostrar melhor o que ocorre na estrutura de multi-poços quânticos na presença do campo magnético. O campo magnético na direção x introduz a regra de seleção que, no processo de tunelamento, o elétron deve conservar o momento linear $\hbar k_x$. Dessa forma, os elétrons tunelam com momento na direção y dado por $\hbar(k_y + \Delta k_\perp)$, onde $\Delta k_\perp = eBd/\hbar$ e d é o período da estrutura de multi-poços quânticos.



Figura 4.3 – Relação de dispersão dos níveis fundamentais dos poços vizinhos A e B, respectivamente.
Em (a) sem campo magnético e em (b), (c) e (d) com um campo magnético na direção x, constante. Em (a) e (b) temos um mesmo potencial elétrico aplicado, o qual é responsável pela diferença de energia entre os níveis i=1 dos poços A e B. Em (c) o potencial elétrico é maior, levando à ressonância entre os dois níveis de energia. Em (d) o potencial elétrico aumentou ainda mais, tirando novamente os níveis de energia da condição de ressonância. Detalhe retirado de Neves (1996).

De acordo com a equação (4.11), na presença do campo magnético o nível fundamental de um poço está deslocado de Δk_{\perp} do nível fundamental do poço anterior, como mostrado na Figura (4.3 b), comparado com a situação em que não temos campo magnético, Figura (4.3 a). O aumento da tensão aplicada na amostra faz com que a parábola que representa o nível fundamental do poço B se aproxime da parábola que representa o nível fundamental do poço A. Conforme a Figura (4.3 c) a superposição entre os parabolóides é pequena implicando em um menor número de elétrons participando do tunelamento. Por isso, a corrente inicial, na Figura (4.2), é menor do que no caso em que não temos campo magnético aplicado, onde a superposição dos parabolóides é máxima. Porém, a superposição entre eles permanece por valores de tensão maiores, fazendo com que a tensão e a corrente máximas em que ocorrem as transições de campo elétrico baixo para alto sejam superiores às tensões e correntes máximas observadas na ausência de campo magnético.

Aumentando ainda mais o campo magnético aplicado verificamos outro tipo de comportamento na curva característica corrente *versus* tensão, como pode ser visto na Figura (4.4).



Figura 4.4 – Corrente de tunelamento *versus* tensão aplicada para a amostra BH9916, com campos magnéticos perpendiculares à direção de crescimento de até 15 T.

Podemos ver claramente que, para campos magnéticos elevados, o deslocamento Δk_{\perp} dos níveis de energia em poços vizinhos, como representado na Figura (4.3), se torna tão grande que só ocorrerá superposição apreciável dos parabolóides de energia, em energias abaixo do nível de Fermi, e portanto, uma corrente de tunelamento significativa, para valores de tensão elevados. A estrutura de platôs e saltos de condutividade diferencial negativa é assim eventualmente destruída pelo campo magnético.

Uma outra maneira simplificada de se explicar a destruição dos saltos e platô de corrente com o aumento do campo magnético é considerar o efeito de confinamento magnético, que prevalece na estrutura para campos magnéticos elevados. Para se ter uma idéia da ordem de grandeza do campo magnético no qual o confinamento magnético deve se tornar importante, podemos utilizar a fórmula para o cálculo dos raios das órbitas de cíclotron:

$$R_{\rm N}^2 = \frac{(2N+1)\hbar}{eB}, \qquad (4.12)$$

onde N = 0, 1, 2, ... é o número quântico dos níveis de Landau. Ou seja, para que os elétrons descrevam uma "órbita" com um raio de 22 nm, de forma que a primeira órbita de cíclotron esteja confinada em um período da amostra BH9916, precisamos de um campo magnético de 6 T.

Dessa forma, quando aplicamos campos magnéticos muito intensos, o elétron fica localizado por esse campo nos poços de potencial, diminuindo a probabilidade de tunelamento para o poço seguinte e, conseqüentemente, diminuindo o valor da corrente de tunelamento.

As medidas mostradas nas Figuras (4.2 e 4.4) são difíceis de serem analisadas pois foram feitas variando a tensão e o camo magnético aplicados. Para visualizarmos melhor os fenômenos que ocorrem na amostra quando aplicamos um campo magnético perpendicular à direção de crescimento da amostra, fizemos medidas de corrente *versus* campo magnético com tensão aplicada constante.



Figura 4.5 – Corrente de tunelamento *versus* campo magnético para três valores fixos de polarização elétrica na amostra BH9916. Todos os três valores de potencial elétrico apresentados estão na região precedente ao platô da curva corrente *versus* tensão, Figura (3.10).

A Figura (4.5) mostra a curva de corrente *versus* campo magnético na região de tensão em que a estrutura conduz apenas de nível fundamental para nível fundamental dos poços quânticos e não há domínio de campo elétrico alto, ou seja, estamos abaixo da região do platô de corrente. Podemos observar a ação do campo magnético levando a corrente de tunelamento a zero devido ao aumento do confinamento magnético.

Por outro lado, quando fazemos as medidas com tensões no interior do platô, podemos observar um regime de instabilidade da corrente, como mostra a Figura (4.7).



Figura 4.6 – Corrente de tunelamento versus campo magnético para tensões na região no interior do platô da curva corrente versus tensão, Figura (3.10).



Figura 4.7 – Corrente de tunelamento *versus* campo magnético para dois valores de tensão no interior do platô e um valor de tensão depois do platô da curva corrente *versus* tensão, Figura (3.10).

A Figura (4.7) apresenta um gráfico com três curvas de corrente *versus* campo magnético, sendo dois deles na região do interior do platô da curva corrente *versus* tensão, Figura (3.10) e um terceiro depois de terminado o platô.

O gráfico da Figura (4.6) pode ser dividido em duas partes. Para os campos magnéticos mais baixos, vemos a corrente subindo, com saltos para certos valores de campo magnético. Na região de campos magnéticos mais altos, a corrente decresce sem a ocorrência de saltos. Esses saltos na corrente de tunelamento ocorrem apenas no interior da região do platô na curva da Figura (3.10).

Para entender o aumento da corrente elétrica na região de campo magnético baixo, vamos voltar à equação (4.11). Nessa equação, podemos observar que o termo de dispersão diamagnética depende do valor médio da coordenada z no estado quântico i, $\langle z \rangle_i$, do valor médio do quadrado de z no estado quântico i, $\langle z^2 \rangle_i$ e do quadrado do campo magnético, B². Dessa forma, a perturbação no sistema causada pelo campo magnético é um deslocamento dos níveis de energia do poço para uma energia maior, a medida que o campo magnético cresce. Como o valor da dispersão ($\langle z^2 \rangle_2 - \langle z \rangle_2^2$) para o primeiro nível

excitado de um poço no regime de campo elétrico alto é maior que a dispersão $(\langle z^2 \rangle_1 - \langle z \rangle_1^2)$ para o nível fundamental de um poço no regime de campo elétrico baixo, o nível (2) sofre um deslocamento para energias mais altas maior que o nível (1) com o aumento do campo magnético aplicado perpendicular à direção de crescimento.

Ao aplicarmos uma tensão na amostra a ponto de gerarmos domínios de campo elétrico alto e baixo e observarmos a região limite onde ocorre a mudança nos regimes de campo elétrico, veremos que os níveis de energia do último poço no domínio de campo elétrico baixo e do primeiro poço no domínio de campo elétrico alto estão desacoplados. A aplicação de um campo magnético perpendicular à direção de crescimento da amostra desloca esses níveis de energia até que eles acoplem novamente. Essa região limite entre os dois domínios de campo elétrico se comporta como uma barreira onde ocorre tunelamento seqüencial não-ressonante e é o que limita a corrente no platô [Grahn (1991) e Luo (2000-b)].



Figura 4.8 – Desenho esquemático do fundo da banda de condução na região limite entre os dois domínios de campo elétrico. O valor ∆V indica o desacoplamento entre o nível fundamental do último poço no regime de campo elétrico baixo e o primeiro nível excitado do primeiro poço no regime de campo elétrico alto.

A Figura (4.8) mostra a região limite entre o domínio de campo elétrico alto e baixo, sob uma tensão aplicada V. O valor $e\Delta V$ indicado na figura é a diferença entre o centro do nível fundamental do poço no regime de campo elétrico baixo (poço A) e o centro do primeiro nível excitado do poço no regime de campo elétrico alto (poço B).

Na ausência de campo magnético, temos:

$$e\Delta V = eV' - [\varepsilon_2(0) - \varepsilon_1(0)],$$
 (4.13)

onde V' é a queda de tensão entre esses dois poços e $\varepsilon_2(0)$ e $\varepsilon_1(0)$ as energias do primeiro nível excitado e do nível fundamental respectivamente, ambas a campo magnético zero.

As equações que regem as posições dos níveis de energia na presença de um campo magnético paralelo aos poços quânticos podem ser encontradas utilizando a equação (4.11):

$$E^{B}_{2} = \varepsilon_{2}(0) + C_{2}B^{2} - eV'$$
(4.14)

$$E^{A}_{\ 1} = \varepsilon_1(0) + C_1 B^2 \tag{4.15}$$

onde $E_2^B e E_1^A$ correspondem ao primeiro nível excitado do poço B e ao nível fundamental do poço A, respectivamente, na presença do campo magnético B, e C₂ e C₁ são duas constantes que dependem do valor médio desvio quadrático das funções de onda no centro dos poços.

A diferença entre $E_2^B e E_1^A e$ dada por:

$$E_{2}^{B} - E_{1}^{A} = [\varepsilon_{2}(0) - \varepsilon_{1}(0)] + (C_{2} - C_{1})B^{2} - eV'.$$
(4.16)

Quando $E_2^B - E_1^A = 0$, o primeiro estado excitado do poço B e o nível fundamental do poço A estão em ressonância. O tunelamento passa a ser ressonante e a partir desse ponto, o aumento de B fará com que a corrente comece a diminuir na curva da corrente em função do campo magnético, para uma dada tensão fixa. Ou seja, a corrente mudará de direção nas curvas corrente *versus* campo magnético para os campos B_{max} dados por

$$eV' = [\varepsilon_2(0) - \varepsilon_1(0)] + (C_2 - C_1)B^2_{max}.$$
(4.17)

Porém, não sabemos a parcela V' da tensão total aplicada na amostra que está distribuída na região da fronteira entre os domínios de campo elétrico alto e baixo, mas é razoável supor que V' é proporcional à tensão total V_t aplicada na estrutura. Dessa forma, podemos escrever V' = ρ V_t, onde ρ é a constante de proporcionalidade. Em termos da tensão total a equação (4.17) toma a forma:

$$V_{t} = \frac{\varepsilon_{2}(0) - \varepsilon_{1}(0)}{e\rho} + \frac{C_{2} - C_{1}}{e\rho} B_{\max}^{2}.$$
(4.18)

A equação (4.18) nos fornece uma relação quadrática entre a tensão total aplicada na amostra e o campo magnético onde a inclinação da corrente muda de sentido.



Figura 4.9 – Relação entre a tensão total aplicada na amostra BH9916 e o campo magnético, perpendicular à direção de crescimento, onde a curva corrente *versus* campo magnético, para cada valor fixo de tensão, muda a inclinação.

A Figura (4.9) mostra a relação entre a tensão aplicada na amostra e o valor quadrático do campo magnético no qual a inclinação da curva corrente-campo magnético muda de direção. Esse gráfico está em boa concordância com o modelo proposto para a explicação da curva corrente-campo magnético. O ponto fora da curva, que corresponde à medida feita a V = 0,07 V, não segue o mesmo comportamento dos outros pontos, pois o máximo da curva corrente-campo magnético ocorre quando temos condução somente de nível fundamental para nível fundamental.

Comparando os valores obtidos pela regressão linear do gráfico da Figura (4.9) com as equações (4.18 e 4.11), observamos que o termo do valor médio do desvio quadrático das funções de onda para o primeiro nível excitado (C_2) é maior que o termo do valor médio do desvio quadrático das funções de onda para o nível fundamental (C_1),

sendo esta a causa do deslocamento do primeiro nível excitado ser maior que o deslocamento do nível fundamental quando em presença do campo magnético.

Em resumo, ao aplicarmos uma tensão na amostra, os níveis, inicialmente, se desacoplam, sendo que, na região de campo elétrico alto, o nível fundamental está numa energia maior que o primeiro nível excitado do poço seguinte. Porém, o campo magnético atua nos níveis de energia levando-os para energias mais altas. Como a dispersão é maior para o primeiro nível excitado, comparado com o nível fundamental, o deslocamento em energia do primeiro estado excitado com o campo magnético. Portanto, a ação do campo magnético leva ao acoplamento dos níveis de energia e a corrente de tunelamento cresce com o campo magnético até um valor máximo. Daí o sentido ascendente da curva corrente *versus* campo magnético em campos magnéticos baixos. Continuando a aumentar o campo magnético após a condição de ressonância, a diferença entre as taxas de crescimento com o campo das energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado leva, novamente, ao desacoplamento entre esses níveis de energia (o primeiro nível excitado de um poço ultrapassa o nível fundamental do poço anterior) e a corrente elétrica diminui com o campo magnético.

É importante notar que a aplicação da equação (4.11) para campos magnéticos elevados deve ser feita com cuidado, já que essa equação deriva do cálculo de perturbação, onde se supõe que os efeitos de campo magnético são pequenos se comparados com os efeitos devidos a outros campos. Nossos resultados indicam que a teoria de perturbação funciona bem para estruturas de multi-poços quânticos como a que estudamos, até campos magnéticos da ordem de 10 T.

Para valores de tensão no platô de corrente, ou seja, na situação em que existem dois domínios de campo elétrico co-existindo na amostra, observa-se uma metaestabilidade no gráfico corrente *versus* campo magnético, caracterizada por saltos no valor da corrente, na região de campo onde a corrente cresce com o campo magnético (Figuras 4.6, 4.7 e 4.10). Esses saltos, de condutividade elétrica com a variação do campo magnético, só são observados para valores de tensão dentro do platô de corrente.



Figura 4.10 – Corrente de tunelamento *versus* campo magnético para duas tensões na região no interior do platô da curva corrente *versus* tensão, Figura (3.7).

Essa meta-estabilidade na corrente é devida à não-estabilidade no dimensionamento dos domínios de campo elétrico alto e baixo sob a ação de um campo magnético aplicado. Ou seja, ao ser aplicado um campo elétrico \mathbf{F} na direção de crescimento da amostra o potencial sofre uma inclinação dada por *e*Fz e dentro desse valor podemos ter outras configurações possíveis de regimes de campo elétrico alto e baixo dependendo do campo magnético aplicado. Por exemplo, se a amostra possui cinco poços de potencial dentro do regime de campo elétrico alto e quatro dentro do regime de campo elétrico baixo num valor de campo magnético, essa configuração pode passar para quatro poços no regime de campo elétrico alto e cinco no regime de campo elétrico baixo em outro valor de campo magnético maior.

Podemos entender melhor essa instabilidade na configuração de campo elétrico baixo e alto voltando à curva característica corrente *versus* tensão.



Figura 4.11 – Comparação do gráfico da corrente *versus* tensão em campo zero e com o campo magnético de 6 T aplicado paralelo à corrente. As três retas traçadas no gráfico indicam as tensões iguais a 0,19 V, 0,32 V e 0,58 V respectivamente.

O valor da corrente, quando não aplicamos campo magnético, nas três tensões indicadas, na Figura 4.11 (0,19 V; 0,32 V e 0,58 V), pelas retas no gráfico, fica em torno de 35 a 45 nA. Porém, quando aplicamos o campo magnético de 6 T, a corrente pula para um valor entre 90 e 110 nA nesses mesmos valores de tensão.

Sabendo que cada salto de condutividade diferencial negativa corresponde à transição de um poço do regime de campo elétrico baixo para o regime de campo elétrico alto, podemos ver, por exemplo, que no caso de V = 0,19 V a estrutura deixa de ter dois poços conduzindo no regime de campo elétrico alto, na ausência de campo magnético, e passa a conduzir com todos os poços no regime baixo, quando estamos com campo magnético aplicado de 6 T. Essa transição corresponde a dois saltos na curva corrente *versus* campo magnético. Após isso ter acontecido, não existe mais a possibilidade de haver transição entre regimes de campo elétrico alto e baixo e os saltos cessam na curva corrente *versus* campo magnético.

O mesmo acontece nos outros valores de tensão na região do interior do platô na curva característica corrente *versus* tensão. Entretanto, para valores de tensão no início do platô a transição de poços no regime de campo elétrico alto para o regime de campo elétrico baixo ocorre de forma que, para um campo magnético suficientemente alto, podemos ter todos os poços conduzindo no regime de campo elétrico baixo e o número de saltos na curva corrente *versus* campo magnético é igual ao número de saltos de condutividade diferencial negativa (CDN), na curva corrente *versus* tensão, até aquele valor de tensão. Sendo que o número de saltos na curva corrente *versus* tensão corresponde ao número de poços da estrutura no regime de campo elétrico alto.

Por isso o ponto fora da curva, na Figura (4.9), se comporta diferentemente dos outros pontos, pois ele corresponde à medida feita em V = 0,07 V e nesse valor de tensão a corrente máxima ocorre para um campo magnético no qual todos os poços conduzem no regime de campo elétrico baixo. Como o modelo simples que desenvolvemos acima (equação 4.18) supunha que existisse dois domínios de campo elétrico para o campo magnético onde a corrente é máxima, a expressão (4.18) não pode ser aplicada para a tensão de 0,07 V.

Quando observamos o comportamento da corrente em função do campo magnético, em valores de tensão próximos do final do platô de corrente, podemos notar que o número de saltos na curva corrente *versus* campo magnético é menor que o número de poços no regime de campo elétrico alto. Isso acontece porque o valor de tensão nesses casos é muito alto e a queda do potencial da amostra não permite que todos os poços sofram a transição para regime de campo elétrico baixo, ou seja, não é possível manter essa diferença de potencial alta sem ter ao menos alguns poços no regime de campo elétrico alto.

Retornando à equação (4.11) e à Figura (4.8), podemos ver, como já foi discutido antes, que o termo de desvio diamagnético depende do valor médio do quadrado do centro do poço e do índice (i) do nível de energia. Portanto, o deslocamento do primeiro nível excitado de energia é diferente do deslocamento do nível fundamental, assim como o deslocamento dos níveis de energia de um poço no regime de campo elétrico alto é diferente do deslocamento dos níveis de energia de um poço no regime de campo elétrico baixo. Sendo assim, o deslocamento dos níveis de energia dentro do poços desacopla os níveis fundamental do poço A e excitado do poço B, chegando a uma situação em que é energeticamente mais favorável alinhar o nível fundamental de A com o fundamental de B, redistribuindo a queda de potencial nos domínios de campo elétrico alto e baixo. Pois, de outra forma a estrutura deixaria de conduzir e a corrente de tunelamento iria a zero.

Outro fato curioso no que concerne o rearranjo de domínios de campo elétrico alto e baixo é o fato de que a configuração de domínios induzida pelo campo magnético pode permanecer estável mesmo depois do campo magnético retornar a zero. Ao elevarmos o campo magnético até 15 T e retornarmos a 0 T novamente a corrente se estabiliza no penúltimo degrau da curva de corrente *versus* tensão, como pode ser observado nas Figuras (4.12), (4.13) e (4.14) que são mostradas a seguir.



Figura 4.12 – Gráfico da corrente *versus* campo magnético aplicado numa tensão igual a 0,3 V. O gráfico cheio corresponde à situação em que o campo magnético varia de 0 T a 15 T e o gráfico vazio corresponde à situação em que o campo magnético varia de 15 T a 0 T.



Figura 4.13 – Gráfico da corrente *versus* campo magnético aplicado numa tensão igual a 0,32 V. O gráfico cheio corresponde à situação em que o campo magnético varia de 0 T a 15 T e o gráfico vazio corresponde à situação em que o campo magnético varia de 15 T a 0 T.



Figura 4.14 – Gráfico da corrente *versus* campo magnético aplicado numa tensão igual a 0,58 V. O gráfico cheio corresponde à situação em que o campo magnético varia de 0 T a 15 T e o gráfico vazio corresponde à situação em que o campo magnético varia de 15 T a 0 T.

Mesmo em medidas de corrente *versus* campo magnético, com este aplicado paralelamente à direção de crescimento, podemos observar a meta-estabilidade no arranjo de domínios de campo elétrico. As medidas com o campo magnético paralelo à direção de crescimento não serão discutidas em detalhe neste trabalho e serão deixadas para um trabalho posterior. Os dois gráficos expostos a seguir são apenas para mostrar o comportamento oscilatório da corrente e a sua instabilidade.



Figura 4.15 – Gráfico da corrente *versus* campo magnético aplicado paralelo à corrente a uma tensão de 0,24 V.

A medida mostrada no gráfico da Figura (4.15) foi feita aplicando-se uma tensão igual a 0,24 V, ou seja, numa região entre dois saltos de condutividade diferencial negativa perto do centro do platô. Ela mostra que existem pelo menos duas configurações possíveis de energia para a condução eletrônica na estrutura. Esse mesmo tipo de comportamento é observado em qualquer valor de tensão desde que estejamos na região dentro do platô apesar de gráficos sem a bi-estabilidade terem sido observados. Para valores de tensão abaixo ou acima do platô de corrente não observamos esse comportamento oscilatório da corrente. O valor de campo magnético, onde ocorrem os saltos de corrente não é sempre o mesmo, podendo ocorrer mais de um salto, como mostrado na Figura (4.15).

A Figura (4.16) mostra outro exemplo da bi-estabilidade da corrente no platô, desta vez numa tensão aplicada de 0,32 V, mostrando apenas dois saltos de corrente no intervalo em que o campo magnético saiu de 0 T, foi até 15 T e retornou a 0 T novamente.



Figura 4.16 – Gráfico da corrente *versus* campo magnético aplicado paralelo à corrente a uma tensão de 0,32 V.

CONCLUSÃO

Da descrição dos detalhes da amostra estudada, vide Capítulo 02, e dos resultados experimentais de medidas da corrente de tunelamento na presença e ausência de campo magnético, apresentados nos Capítulos 03 e 04, podemos classificar os fenômenos que ocorrem nessa estrutura como sendo os mesmos de uma estrutura periódica, apesar da estrutura estudada ser quasi-periódica, não sendo, portanto, possível verificar os efeitos de quasi-periodicidade.

De fato, os efeitos de auto-similaridade da amostra estudada requeriam uma resolução experimental de cerca de 1 meV. Isso se devia, principalmente, ao fato de termos a quasi-periodicidade nas barreiras e não nos poços e de que a largura dessas possuia comprimento nominal mínimo de 10 nm, fazendo com que a interação entre os poços fosse muito pequena e a largura dos níveis de energia quasi-periódicos fosse muito pequena.

Porém, dos resultados apresentados aqui, alguns ainda não haviam sido completamente explicados na literatura, em particular, o comportamento da estrutura na presença de um campo magnético perpendicular à direção de crescimento da amostra.

As medidas da corrente de tunelamento como função do campo magnético revelou um gráfico com sentido crescente e saltos de corrente para valores de campo magnético baixos e sentido monotonicamente decrescente para campos magnéticos altos.

Resolvendo a equação de Schrödinger para um sistema de multi-poços quânticos sob a ação de um campo magnético perpendicular à direção de crescimento da amostra, levando em conta o campo magnético como uma perturbação, obtivemos os valores das autoenergias do poço simples adicionado a um termo proporcional ao quadrado do campo magnético e ao valor médio do desvio quadrático da coordenada do eixo de crescimento da amostra. Esse resultado nos mostra que os níveis de energia quasi-ligados se deslocam para valores mais altos em energia com o aumento do campo magnético e que o deslocamento do primeiro nível excitado é maior que o do nível fundamental.

É esse deslocamento dos níveis de energia causado pelo campo magnético que produz os fenômenos observados no gráfico corrente de tunelamento *versus* campo magnético. O aumento progressivo do campo magnético faz com que os níveis de energia, que em campo magnético nulo estão ligeiramente desacoplados devido ao campo elétrico, voltem a se acoplar, levando a um aumento no valor da corrente. Depois que a corrente atinge um máximo, o aumento no valor do campo magnético leva ao novo desacoplamento dos níveis de energia e conseqüentemente à diminuição da corrente de tunelamento.

Para determinados valores de campo magnético, o desacoplamento entre os níveis de energia de dois poços vizinhos na interface das regiões de domínios de campo elétrico baixo e alto se torna tão elevado que a situação energéticamente mais favorável é que um poço no regime de campo elétrico alto passe para o regime de campo elétrico baixo e a tensão aplicada na amostra se redistribua em toda a estrutura. Essa transição de um poço no regime de campo elétrico alto para o regime de campo elétrico baixo e a consequente redistribuição do campo elétrico na estrutura origina os saltos observados no gráfico corrente *versus* campo magnético.

Como proposta para trabalhos futuros, pretendemos fazer novas medidas visando a observação de efeitos de quasi-periodicidade. Utilizando o programa feito pelo Prof. L. A. Cury, que calcula os níveis de energia em uma estrutura de multi-poços quânticos utilizando o formalismo de matriz transferência, determinamos que em uma estrutura crescida de acordo com a série Fibonacci com poços de 7 nm de espessura e barreiras com unidade básica de 5 nm de espessura o levantamento da degenerescência dos níveis de energia devido à quasi-periodicidade será da ordem de 8 meV. Amostras com esses parâmetros estão sendo preparadas no Departamento de Física da UFMG. Estão sendo também crescidas outras duas amostras, uma periódica e outra não-periódica, porém com os mesmos parâmetros de crescimento (concentração de alumínio, espessuras de poços e barreiras) da amostra quasi-periódica otimizada. Essas duas amostras servirão de referência e controle para as medidas.

BIBLIOGRAFIA

ADACHI, S., Journal of Applied Physics, <u>58</u>, R1 (1985).

AGUADO, R. e PLATERO, G., Physica B, 256 - 258, 233 (1998).

ANDO, T., Journal of the Physics Society of Japan, <u>39</u>, 411 (1975).

- BALLENTINE, L. E., *Quantum Mechanics: A Modern Development*, World Scientific, (Londres) 2000.
- BASTARD, G., *Wave Mechanics Applied to Semicondutor Heterostructures*, Les Éditions de Physique, (Paris) 1992.
- BEINVOGL, W., KAMGAR, A. e KOCH, J. F., *Physical Review B*, <u>14</u>, 4274 (1976).
- BRUNO-ALFONSO, A., RIBEIRO, F. J., LATGÉ, A. e OLIVEIRA, L. E., *Physical Review B*, <u>59</u>, 2057 (1999).
- COHEN-TANNOUDJI, C., DIU, B., LALOË, F., *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, (Paris) 1977.
- CHOI, K. K., LEVINE, B. F., MALIK, R. J., WALKER, J. e BETHEA, C. G., *Physical Review B*, <u>35</u>, 4172 (1987).
- CURY, L. A., Tese de Mestrado, USP, São Carlos (1987).
- DUPONT, E., McCAFFREY, J. P., LIU, H. C., BUCHANAN, M., YANG, R. Q., LIN, C.-H., ZHANG, D. e PEI, S. S., *Applied Physics Letters*, <u>72</u>, 1495 (1998).
- ESAKI, L. e TSU, R., IBM Journal of Research & Devices, 14, 61 (1970).
- FAIST, J., CAPASSO, F., SIVCO, D. L., SIRTORI, C., HUTCHINSON, A. L., CHO, A. Y., Science, <u>264</u>, 553 (1994).

- GRAHN, H. T., HAUG, R. J., MÜLLER, W. e PLOOG, K., *Physical Review Letters*, <u>67</u>, 1618 (1991).
- HEIME, K., KÖNIG, U., KOHN, E. e WORTMANN, A., Solid-State Electronics, <u>17</u>, 835 (1974).
- HENNING, J. C. M., ANSEMS, J. P. M. e ROCKSNOER, P. J., Semiconductor Science and Technology, <u>3</u>, 361 (1988).
- LOCKWOOD, D. J., MACDONALD, A. H., AERS, G. C., DHARMA-WARDANA, M. W. C., DEVINE, R. L. S. e MOORE, W. T., *Physical Review B*, <u>36</u>, 9286 (1987).
- LUO, K. J., FRIEDLAND, K.-J., GRAHN, H. T. e PLOOG, K. H., Applied Physics Letters, <u>76</u>, 2913 (2000-a).
- LUO, K. J., FRIEDLAND, K.-J., GRAHN, H. T. e PLOOG, K. H., *Physical Review B*, <u>61</u>, 4477 (2000-b).
- MAAN, J. K., Festköperprobleme, 27, 137 (1987).
- MACIÁ, E. e DOMÍNGUEZ-ADAME, F., Semiconductor Science and Technology, <u>11</u>, 1041 (1996).
- MERLIN, R., BAJEMA, K., CLARKE, R., JUANG, F.-Y. e BHATTACHARYA, P. K., *Physical Review Letters*, <u>55</u>, 1768 (1985).
- NEVES, B. R. A., Tese de Doutorado, UFMG, Belo Horizonte (1996).
- REYES-GOMEZ, E., PERDOMO-LEIVA, C. A., OLIVEIRA, L. E. e DE DIOS-LEYVA, M., Journal of Physics-Condensed Matter, <u>10</u>, 3557 (1998).
- RODRIGUES, W. N., Comunicação Pessoal, (2003).
- TOET, D., POTEMSKI, M., WANG, Y. Y., MAAN, J. C., TAPFER, L. e PLOOG, K., Physical Review Letters, <u>66</u>, 2128 (1991).
- VIEIRA, G. S., GUIMARÃES, P. S. S., ALVES, E. S., ALLEN, S. J., CAMPMAN, K. L., GOSSARD, A. C., *Physica B*, <u>256 258</u>, 527 (1998).

WEI, J. H., XIE, S. J. e HONG, J. B., *Physica Status Solidi B*, <u>225</u>, 193 (2001).